ОБЩЕСТВЕННО-НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ВЕСТНИК РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Издается с 2001 г.
Выходит 4 раза в год

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор
Алексеев А.С.

Заместитель главного редактора –
Глазко В.И.

Ответственный секретарь –
Поротникова М.В.

Алексеев В.Н.
Антонов А.В.
Аренс В.Ж.
Батлер Р. (США)
Бобров А.В.
Бурак П.И.
Волков Ю.Г.
Грибов Л.А.
Епифанцев С.Н.
Жданов М.С. (США)
Золотарев В.А.
Иваницкая Л.В.
Казарян С.Б. (США)
Магомедов Ш.М.
Панин А.Н.
Письменский Г.И.
Савельев В.Н.
Смирнов А.И.
Таганов А.В.
Терехин М.Т.
Утямышев И.Р.
Хачатрян К.Г. (США)
Чень Цзяньпин (Китай)
Черешкин Д.С.
Чжао Пенда (Китай)
Шахвердиев А.Х.
Шевченко Ю.Л.
Якушина О.А.
Яннакопулос П. (Греция)

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Председатель –
Кузнецов О.Л.

Гейхман И.Л.
Кервалишвили П.Д. (Грузия)
Козловский Е.А.
Мелуа А.И.
Никитин А.Н.
Новиков В.С.
Рахманин Ю.А.
Степашин С.В.
Тыминский В.Г. (ФРГ)
Фурсей Г.Н.
Чилингар Дж. (США)

Зав. редакцией –
Алексеев П.А.

Журнал зарегистрирован в Министерстве по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций РФ.
Рег. свид. ПИ № 77-11708

Все права защищены. Никакая часть этого издания не может быть репродуцирована в какой-либо форме без письменного разрешения издателя.
Редакция не несет ответственности за содержание рекламных материалов.
© РАЕН 2020 г.

119002, Москва,
пер. Сивцев Вражек, 29/16
тел./факс (495) 954-7305
Тираж 500 экз.
Отпечатано в издательстве «Маска»
Москва, ул. Малая Юшуньская, д. 1, корп. 1

Содержание

ХИМИЯ

НОВАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ТВЕРДЫМИ КОММУНАЛЬНЫМИ ОТХОДАМИ В РФ В СВЕТЕ АНАЛИЗА ИХ ЖИЗНЕННЫХ ЦИКЛОВ И «ЭТАЖЕРОК»
В.С. Петросян, А.Е. Шипелов 3

ДОСТИЖЕНИЯ ИНВЕРСИОННОГО ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА С ПРИМЕНЕНИЕМ СИСТЕМ ЗАМЕНЫ РАСТВОРА ЭЛЕКТРОЛИТА
Л.Ю. Мартынов, Н.К. Зайцев, В.Д. Поклоннов 6

МЕТАЛЛОПРОМОТИРУЕМОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ АТОМОВ ВОДОРОДА В ДЕКАГИДРО-КЛОЗО-ДЕКАБОРАТНОМ АНИОНЕ С ОБРАЗОВАНИЕМ МОНО- И ДИЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ
В.В. Авдеева, Е.А. Малинина, Н.Т. Кузнецов 12

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРА ФЛОРИ-ХАГГИНСА И ВЗАИМОСВЯЗИ МЕЖДУ ЕГО ЭНТАЛЬПИЙНОЙ И ЭНТРОПИЙНОЙ СОСТАВЛЯЮЩИМИ
А.Е. Чалых, В.К. Герасимов, У.В. Никулова 19

ТЕХНОЛОГИИ

НЕЙРО-НЕЧЕТКИЕ МЕТОДЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ НЕФТЕНОСНЫХ ЗОН ПО КОМПЛЕКСНЫМ ГЕОФИЗИЧЕСКИМ, ГЕОХИМИЧЕСКИМ ДАННЫМ
С.В. Горбачев, В.Ф. Кузин, Ц. Цао, С. Бхаттачарья 27

Научные статьи по итогам молодежного конкурса «Технические и инженерные науки» на соискание премии имени академика А.И. Берга:

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС АНАЛИЗА СИГНАЛОВ И ПОСТАНОВКИ ПОМЕХ
Н.А. Бочаров, М.И. Вернигор, П.В. Еремеев, Д.О. Мельников 33

СОЗДАНИЕ ДВУХДИАПАЗОННОГО РАДИОЛОКАТОРА
А.О. Славянский 38

НЕЙРОСЕТЕВАЯ МОДЕЛЬ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ УСТРОЙСТВ С НИЗКОРАЗМЕРНЫМ КАНАЛОМ
К.П. Пчелинцев, Н.А. Ветрова, В.Д. Шашурин 43

РАСЧЕТ ЭПР ВЫПУКЛОГО ПРОВОДЯЩЕГО ТЕЛА ВРАЩЕНИЯ С ТОНКИМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЛОЕМ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТОДАМИ ФИЗИЧЕСКОЙ ОПТИКИ
Н.А. Кривошеин 48

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ СТЕНД ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ АНТЕНН В ШИРОКОЙ ПОЛОСЕ ЧАСТОТ
Р.Р. Алимирзоев, А.М. Ермолаев, И.О. Порохов 53

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДЕМПФИРОВАНИЯ КОЛЕБАНИЙ ДАВЛЕНИЯ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ И ГАЗОГЕНЕРАТОРАХ ЖИДКОСТНЫХ РАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ
Р.А. Царапкин 58

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ АЛМАЗНЫХ ТЕПЛООТВОДОВ В МОЩНЫХ GaN МОДУЛЯХ СВЧ
П.Н. Астахов, А.А. Калинин, Б.В. Крылов 66

ОБРАЗОВАНИЕ

РОЛЬ И МЕСТО ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ В СОВРЕМЕННОМ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ
Л.Д. Шалыгин, О.И. Шалыгина 73

МЕДИЦИНА

ЭКОЛОГИЯ И ЗДОРОВЬЕ ЧЕЛОВЕКА – ПРОГРАММА, ПОЗВОЛЯЮЩАЯ УЛУЧШИТЬ ЗДОРОВЬЕ ЖЕНЩИН
Л.Н. Фишер, О.А. Фишер 77

НАУКИ О ЗЕМЛЕ

ПЕРСПЕКТИВЫ ОСВОЕНИЯ НЕТРАДИЦИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ГАЗА – ГАЗОГИДРАТОВ В РАЙОНАХ РАСПРОСТРАНЕНИЯ МНОГОЛЕТНЕМЕРЗЛЫХ ПОРОД
З.А. Васильева 81

ФИЗИКА

КОЛЕБАНИЯ И ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ВИРУСОВ И ДРУГИХ ПАТОГЕННЫХ БИОСТРУКТУР
П.Дж. Кервалишвили 88

Хроника 100

Contents

CHEMISTRY

CYCLES AND «ETAGERES» IN NEW SYSTEM OF MUNICIPAL SOLID WASTE MANAGEMENT IN RUSSIAN FEDERATION
V.S. Petrosyan, A.E. Shipelov 3

DEVELOPMENTS IN STRIPPING VOLTAMMETRIC ANALYSIS WITH APPLICATION OF SYSTEMS FOR EXCHANGE OF ELECTROLYTE SOLUTION
L.Yu. Martynov, N.K. Zaitsev, V.D. Poklonnov 6

METAL-PROMOTED SUBSTITUTION OF HYDROGEN ATOMS IN THE DECAHYDRO-CLOSO-DECABORATE ANION RESULTING IN MONO- AND DISUBSTITUTED DERIVATIVES
V.V. Avdeeva, E.A. Malinina, N.T. Kuznetsov 12

TEMPERATURE DEPENDENCE OF FLORY-HAGGINS PARAMETER AND THE RELATIONSHIP BETWEEN ITS ENTHALPY AND ENTROPY CONSTITUENTS
A.E. Chalykh, V.K. Gerasimov, U.V. Nikulova 19

TECHNOLOGIES

NEURO-FUZZY METHODS FOR FORECASTING OF OIL-BEARING ZONES BASED ON COMPLEX GEOPHYSICAL AND GEOCHEMICAL DATA
S.V. Gorbachev, V.F. Kuzin, J. Cao, S. Bhattacharyya 27

HARDWARE AND SOFTWARE COMPLEX FOR SIGNAL ANALYSIS AND JAMMING
N.F. Bocharov, M.I. Vernigor, P.V. Eremeev, D.O. Melnikov 33

DEVELOPMENT OF A DUAL-BAND RADAR
A. O. Slavyansky 38

NEURAL NETWORK MODEL FOR PREDICTING THE ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF SEMICONDUCTOR DEVICES WITH A LOW-DIMENSIONAL CHANNEL
K.P. Pchelintsev, N.A. Vetrova, V.D. Shashurin 43

RADAR CROSS-SECTION COMPUTATION FOR CONVEX SOLID OF REVOLUTION WITH A THIN DIELECTRIC LAYER ON THE SURFACE BY PHYSICAL OPTICS METHOD
N.A. Krivoshein 48

AN AUTOMATED STAND FOR MEASURING ANTENNA PARAMETERS IN A WIDE FREQUENCY BAND
R.R. Alimirzoev, A.M. Ermolaev, I.O. Porokhov 53

EXPERIMENTAL DETERMINATION OF DAMPING DECREMENT ACOUSTIC VIBRATIONS IN COMBUSTION CHAMBERS OF LIQUID ROCKET ENGINES
R.A. Tsarapkin 58

STUDY OF THE EFFICIENCY OF USING DIAMOND HEAT SINKS IN HIGH-POWER GAN MICROWAVE MODULES
P.N. Astakhov, A.A. Kalinin, B.V. Krylov..... 66

EDUCATION

ROLE AND PLACE OF DISTANCE LEARNING IN THE MODERN EDUCATIONAL PROCESS
L.D. Shalygin, O.I. Shalygina 73

MEDICINE

ECOLOGY AND HEALTH OF MAN – THE PROGRAM, WHO CAN IMPROVE THE HEALTH OF WOMEN
L.N. Fisher, O.A. Fisher 77

EARTH SCIENCES

PROSPECTS FOR THE DEVELOPMENT OF NON-CONVENTIONAL GAS SOURCES – GAS HYDRATES IN THE AREAS OF DISTRIBUTION PERMAFROST ROCKS
Z.A. Vasilyeva 81

PHYSICS

VIBRATION AND OPTICAL SPECTROSCOPY OF VIRUSES AND OTHER PATHOGENIC BIOSTRUCTURES
P.J. Kervalishvili 88

CURRENT EVENTS 100

SCIENTIFIC & PUBLIC JOURNAL

BULLETIN OF RUSSIAN ACADEMY OF NATURAL SCIENCES

Published since 2001
4 issues per year

EDITORIAL BOARD

Editor-in-Chief –
A.S. Alekseev

Deputy Editor-in-Chief –
V.I. Glazko

Executive Secretary –
M.V. Porotnikova

V.N. Alekseev
A.V. Antonov
V.Zh. Arens
R. Butler (USA)
A.V. Bobrov
P.I. Burak
Y.G. Volkov
L.A. Gribov
S.N. Epifantsev
M.S. Zhdanov (USA)
V.A. Zolotarev
L.V. Ivanitskaya
S.B. Kazarian (USA)
Sh.M. Magomedov
A.N. Panin
G.I. Pismensky
V.N. Savelyev
A.I. Smirnov
A.V. Taganov
M.T. Terehin
I.R. Utjamyshev
K.G. Khachatryan (USA)
Chen Jianping (China)
D.S. Chereshkin
Zhao Pengda (China)
A.H. Shahverdiev
Yu.L. Shevchenko
O.A. Yakushina
P. Yannakopoulos (Greece)

EDITORIAL COUNCIL

Chairman –
O.L. Kuznetsov

I.L. Geykhman
P.D. Kervalishvili (Georgia)
E.A. Kozlovsky
A.I. Melua
A.N. Nikitin
V.S. Novikov
Yu.A. Rakhmanin
C.V. Stepashin
V.G. Tyminsky (germany)
G.N. Fursey
J. Chilingar (USA)

Editorial Director –
P.A. Alekseev

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced in any form or by any means without permission in writing from the publisher.

© RANS 2020

iSSN 1682–1696

Editorial Board Address
29/16, Sivcev Vrazhek, 119002,
Moscow, Russia, tel./fax +7 (495) 954-7305

УДК: 628.4.03

НОВАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ТВЕРДЫМИ КОММУНАЛЬНЫМИ ОТХОДАМИ В РФ В СВЕТЕ АНАЛИЗА ИХ ЖИЗНЕННЫХ ЦИКЛОВ И «ЭТАЖЕРОК»

В.С. Петросян[1], А.Е. Шипелов[2]
[1] Московский государственный университит имени М.В. Ломоносова
[2] Акционерное общество «РТ-Инвест»

Показано, что предложенная концепция жизненных циклов и «этажерок» в новой системе управления ТКО в РФ позволяет оптимизировать практические шаги, направленные на реализацию принципа нулевого захоронения «Нет свалок – нет отходов». При этом, благодаря раздельному сбору ТКО, их досортировке и использованию комплекса современных технологий обеспечивается экологическая безопасность населения и реализуются принципы самоподдерживаемой циклической экономики.

Ключевые слова: *новая система управления ТКО, первичный и вторичный материальные ресурсы, циклы, «этажерки», раздельный сбор, сортировка, комплексные технологии.*

CYCLES AND «ETAGERES» IN NEW SYSTEM OF MUNICIPAL SOLID WASTE MANAGEMENT IN RUSSIAN FEDERATION

V.S. Petrosyan[1], A.E. Shipelov[2]
[1] Moscow State University named after M.V. Lomonosov
[2] JSC «RT-Invest»

It has been shown that the proposed concept of the life cycles and «etageres» (whatnots) in the new system of management of MSW in RF does allow to optimize the practical steps, directed to realization of the zero landfilling «No landfills – no waste» principle. By this, due to the separate collecting of MSW, their additional sorting and using the modern technologies complex one can secure environmental safety of population and realize the principles of sustainable cyclic (circular) economy.

Key words: *new system of SMW management, primary and secondary material resources, cycles, «etageres», separate collecting, sorting, complex technologies.*

Новая система управления ТКО в России [1] должна состоять из нескольких обязательных этапов, которые кратко обсуждены в данной работе:

1. Раздельный сбор неорганических (стекло, металлы), органических (бумага/картон и полимеры, включая пластики) и биоорганических (пищевые и растительные) ТКО должен осуществляться жителями России, генерирующими эти отходы в процессе своей жизнедеятельности. Отдельно необходимо осуществлять сбор опасных ТКО (ртутьсодержащие приборы и батарейки, медицинские отходы), а также КГО (крупногабаритные отходы, включая мебель, домашнее и офисное электрическое и электронное оборудование, детали и корпуса автомобилей);

2. Раздельный вывоз (логистика) собранных населением ТКО в комплексы переработки отходов (КПО) для их профессиональной досортировки специально обученными рабочими с помощью различных роботизированных устройств (механических, магнитных и оптических), а также первичной переработки должен осуществляться региональными экологическими операторами и связанными с ними предприятиями, утвержденными властями регионов;

3. Вывоз окончательно отсортированных в КПО твердых коммунальных отходов на предприятия по их переработке во вторичные материальные ресурсы (ВМР), компост и энергию (тепловую и электрическую) может осуществляться как региональными операторами, так и связанными с ними перерабатывающими предприятиями; опасные отходы необходимо обезвреживать отдельно.

Анализ вышеприведенных этапов новой системы управления ТКО в России показывает, что сортировка, раздельный сбор ТКО населением и их досортировка профессиональными рабочими являются действительно ключевыми стадиями в новой системе управления ТКО в Российской Федерации. Это абсолютно необходимое условие особо отмечается и в решении Научного совета РАН по глобальным экологическим проблемам, принятом в марте 2020 года, в котором, в частности, специально подчеркнуто, что термическая переработка несортированных отходов, как это следует из опыта, накопленного во многих странах, приводит к образованию значительных количеств золы и шлаков, требующих дальнейшей специальной переработки.

Рассмотрение ключевых этапов (1–3) с использованием положений об анализе жизненных циклов для природных ресурсов и товарных продуктов [2] показывает, что для основных видов ТКО из неорганического сырья (стекло, металлы), а также для некоторых отходов продуктов из органического и биоорганического сырья (бумага, картон, дифференцируемые полимеры, пища и растения) реализуются классические жизненные циклы (рис. 1–4). В то же время, для других видов отходов продуктов из природного органического и биоорганического сырья (недифференцируемые полимеры, а также пищевые и растительные отходы) реализуются не циклы, а этажерки (рис. 4, 5).

Начнем обсуждение с жизненного цикла отходов стекла (рис. 1), из которого следует, что используемый для получения товарных продуктов из стекла исходный природный ресурс (песок), после его специальной обработки превращается в первичный материальный ресурс (ПМР), из которого изготавливают различные стеклянные предметы потребления (посуда, оконное стекло, транспортные стекла, оптические стекла, зеркала и т.д.), которые, после некоторого периода их использования, превращаются в стеклянные отходы. Тщательный раздельный сбор, логистика и переработка этих отходов приводят к получению ВМР (стекла), идентичного ПМР данного жизненного цикла. Из этого, уже вторичного стекла, практически ничем не отличающегося от первичного стекла, снова приготавливают различные стеклянные предметы и этот цикл, позволяющий экономить природный ресурс (песок), можно воспроизводить весьма большое число раз.

Аналогичное рассмотрение справедливо и для отходов различных металлов (рис. 2). Разница заключается, естественно, в том, что в жизненных циклах металлов исходным природным ресурсом является не песок, а металлические руды, которые могут представлять собой не только оксиды, но и соли, а также другие производные металлов. Их специальная переработка приводит к получению чистых индивидуальных металлов, выступающих уже в роли ПМР, из которых изготавливаются различные предметы для использования их человеком (домашние и офисные гаджеты, электронная и электрическая аппаратура, кухонная посуда, столовые предметы и т.д.), которые со временем превращаются в металлические отходы.

Как и в случае жизненного цикла стекла, мы видим, что и в случае с металлами имеет место значительная экономия природных ресурсов соединений металлов с большой экономической и финансовой выгодой.

При переходе к рассмотрению органических отходов бумаги и картона (рис. 3) мы видим, что и в данном случае ситуация абсолютна аналогична тем, которые имеют место в случаях неорганических отходов стекла и металлов. Здесь, однако, в качестве исходного природного ресурса выступает древесина, которую с помощью использования специальных технологий сначала превращают в целлюлозу, являющуюся органическим ПМР для получения бумаги и картона.

Полученные бумага и картон используются для самых разнообразных нужд (книги, газеты, журналы, альбомы, блокноты, писчая бумага, плакаты, коробки, упаковки и т.д.). Все эти предметы рано или поздно превращаются в отходы бумаги и картона, которые специальными технологиями перерабатывают снова в целлюлозу как ВМР.

При переходе к полимерным отходам (рис. 4.), ввиду большого разнообразия используемых человеком полимеров, включая пластики (как минимум десять: полиэтилентерефталат, полиэтилен (низкой и высокой плотности), полипропилен, полистирол, поливинилхлорид, поликарбонаты, поликарбоксилаты и др.), мы имеем дело с более сложной ситуацией (рис. 4).

Во-первых, используя в качестве природного ресурса нефть, на нефтехимических заводах путем высокоэффективных технологий получают все необходимые ПМР (полимеры), из которых изготавливают различные полимерные предметы (пленки, упаковки, бутылки для напитков, контейнеры для пищи, детали для различного оборудования и т.д.).

РИС. 1.
Жизненный цикл стекла

РИС. 2.
Жизненный цикл металлов

РИС. 3.
Жизненный цикл целлюлозы

Во-вторых, после того, как данные предметы превращаются в отходы, которые жители не могут дома или в офисах подвергнуть тщательной сортировке и выносят все пластики вместе в контейнер для сбора сухих отходов, то в этом случае особую роль играют вышеупомянутые КПО, на которых профессиональные рабочие и роботизированные устройства выделяют из смеси полимерных отходов, по крайней мере, четыре вида отходов: полиэтилентерефталата, полиэтилена низкой и высокой плотности и полипропилена. Следовательно, и на раздельную переработку поступает четыре вида отходов полимеров, которые замыкают циклы и образуются соответствующие ВМР, как показано на рис. 4.

В-третьих, полимерные отходы, которые пока не удается дифференцировать, чтобы получать ВМР в виде индивидуальных полимеров, вывозят на специализированные предприятия по термической переработке в тепловую и электрическую энергию, как показано с помощью этажерки на рис. 4. Подробный анализ этой ситуации показывает, что это абсолютно необходимо делать, чтобы не оставлять недифференцируемые полимерные отходы на свалках, т.к. в них кроме углеводородных полимеров (полистирол, поликарбонаты, поликарбоксилаты и др.), которые при горении и дымлении свалок дают канцерогенные полиядерные ароматические углеводороды (ПАУ), содержится также и поливинилхлорид (ПВХ), дающий в этих условиях супертоксичные полихлорированные дибензодиоксины и дибензофураны.

Анализ ситуации в случае биоорганических отходов, к которым относятся образующиеся при жизнедеятельности человека в значительных количествах пищевые и растительные отходы (рис. 5), показывает, что в данном случае ситуация развивается сразу не в замкнутом цикле, а на «этажерке», т.к. образующийся из исходного природного ресурса (домашние и дикие растения и животные) ПМР (продукты питания и растениеводства) со временем превращаются в пищевые и растительные отходы, которые нельзя превратить в

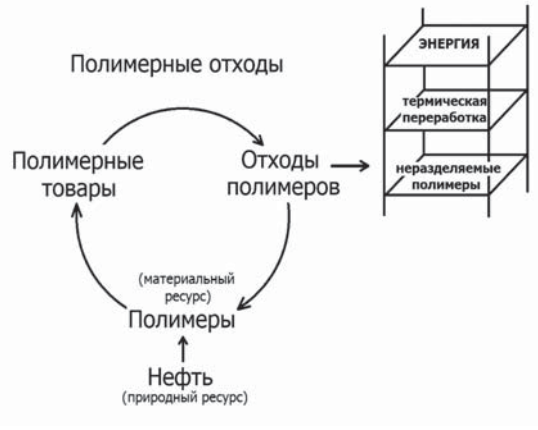


РИС. 4.
Жизненные циклы и этажерки полимеров

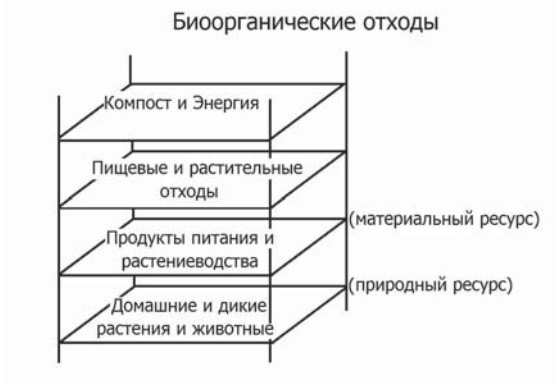


РИС. 5.
Жизненные «этажерки» пищевых и растительных отходов

ВМР, но они могут быть превращены в два товарных продукта: компост (органические удобрения) и энергию (тепловую и электрическую). При этом опять же большую роль играет досортировка этих отходов в КПО, т.к. необходимо очищать их от отходов стекла и металлов, с тем, чтобы при термической переработке минимизировать образование золы и шлаков.

Ранее предложенная технология превращения пищевых и растительных отходов в метан с помощью метансинтезирующих бактерий оказалась, как продемонстрировал опыт специально созданных для этих целей окультуренных полигонов, неэффективной с точки зрения скорости утилизации и экономически не рентабельной.

Таким образом, рассмотренная концепция жизненных циклов и «этажерок» в новой системе управления ТКО в Российской Федерации позволяет оптимизировать все практические шаги, направленные на реализацию принципа «Нет свалок – нет отходов». Благодаря раздельному сбору ТКО, их досортировке и использованию комплекса современных технологий обеспечивается экологическая безопасность населения и реализуются принципы самоподдерживаемой циклической экономики.

Литература

1. **Петросян В.С., Шипелов А.Е.** Жизненные циклы и этажерки в новой системе управления ТКО в России Экология и промышленность России. 2020. Т. 24. № 5. С. 58–63.
2. **Соснина Т.Н.** Продукт: полный цикл (методологическое исследование). Самара: Изд-во Самарского научного центра РАН. 2018. 396 с.

Петросян Валерий Самсонович, д.х.н., профессор Химического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова,
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1. стр. 3,
119991, Moscow, Leninskie gory, 1, p. 3,
тел.: +7 (925) 517-64-66, e-mail: valpetros@mail.ru
Шипелов Андрей Евгеньевич, генеральный директор АО "РТ-Инвест",
119180, Москва, ул. Малая Якиманка, д.10,
119180, Moscow, st. Malaya Yakimanka, 10,
тел.: +7 (495) 374-80-54, e-mail: ashiipelov@rt-invest.com

УДК 543.55.054.1

ДОСТИЖЕНИЯ ИНВЕРСИОННОГО ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА С ПРИМЕНЕНИЕМ СИСТЕМ ЗАМЕНЫ РАСТВОРА ЭЛЕКТРОЛИТА

Л.Ю. Мартынов, Н.К. Зайцев, В.Д. Поклоннов
Российский технологический университет РТУ МИРЭА,
Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

Рассмотрены современные электроаналитические варианты инверсионной вольтамперометрии и инверсионной хроноамперометрии, позволяющие осуществлять замену фонового раствора в процессе анализа без размыкания электрохимической цепи. Описаны схемы и подходы для создания электрохимических систем для проведения инверсионных измерений с заменой фонового электролита. Обсуждаются экспериментальные методы и преимущества замены фонового раствора в инверсионном вольтамперометрическом анализе.

Ключевые слова: *инверсионная вольтамперометрия, замена фонового раствора, электрохимический анализ.*

DEVELOPMENTS IN STRIPPING VOLTAMMETRIC ANALYSIS WITH APPLICATION OF SYSTEMS FOR EXCHANGE OF ELECTROLYTE SOLUTION

L.Yu. Martynov, N.K. Zaitsev, V.D. Poklonnov
MIREA – Russian Technological, University (M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies

Modern methods of stripping voltammetry are considered, which allow the exchange of the background solution during the analysis. Schemes and approaches for creating electrochemical systems for stripping measurements with the exchang of the background electrolyte are described. The advantages of replacing the background solution in an stripping voltammetric analysis are discussed.

Keywords: *stripping voltammetry, background solution exchange, electrochemical analysis.*

Среди химико-аналитических методов, систематически развивающихся с участием советских и российских ученых, особый интерес представляют электроаналитические методы, в частности, инверсионная вольтамперометрия (ИВА) и инверсионная хроноамперометрия (ИХА) – высокочувствительные методы определения многих неорганических и органических соединений в объектах окружающей среды. Одной из традиционных областей применения ИВА является контроль содержания тяжелых металлов в различных по природе материалах [2]. Вариант проведения инверсионной вольтамперометрии на углеродных электродах был разработан советскими электроаналитиками Нейманом и Ройзенблаттом [3]. ИВА при этом имеет определенные преимущества перед оптическими методами – атомной абсорбции (ААС) и спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (ИСП): относительно низкую стоимость как самого оборудования, так и эксплуатационных расходов, а также высокую мобильность, что позволяет проводить анализ в полевых условиях. Электроаналитические методы существенно дополняют методы ААС и ИСП и часто позволяют определить валентное состояние того или иного элемента, что невозможно сделать методами ААС и ИСП.

Существует, однако, ряд проблем, затрудняющих анализ методом ИВА. Регистрируемые сигналы чувствительны к солевому составу проб и к наличию в них органических компонентов. Органические примеси (комплексообразующие реагенты, полимеры, ПАВ и др.) как правило, ухудшают воспроизводимость результатов анализа, поэтому обычно пробу предварительно минерализуют кислотным или термическим озолением. Дополнительная стадия пробоподготовки увеличивает время анализа и в ряде случаев ухудшает его метрологические характеристики.

Одним из перспективных способов преодоления указанных трудностей может быть использование электродных систем, позволяющих варьировать состав фонового раствора на отдельных стадиях инверсионного цикла без размыкания электрохимической цепи. Принцип такого подхода заключается в том,

чтобы после стадии накопления раствор фонового электролита тем или иным образом заменить на другой вспомогательный электролит, который бы обеспечивал на стадии инверсионной развертки разделение сигналов анализируемых веществ и их отделение от сигналов матрицы анализируемого образца [9].

Для проведения такого варианта ИВ были предложены различные специальные ячейки: 1) со сменой электролита по окончании предэлектролиза, что позволяет проводить растворение концентрата в чистом фоновом электролите любого состава; 2) предусматривающие перемещение электродной системы из одного фонового раствора в другой с сохранением поляризации за счет механического удерживания капли электролита на поверхности; 3) с использованием химически модифицированных электродов или специальных электродов из сетчатого стеклоуглерода, допускающих полунепрерывное измерение в проточных системах, позволяющими достичь практически 100-процентного превращения вещества на стадии накопления, тогда как в обычном варианте ИВ истощение раствора по определяемому компоненту за время предэлектролиза пренебрежимо мало.

Вариант инверсионной вольтамперометрии с «ручной» заменой раствора – когда исходный раствор выливается из электролитической ячейки, а вместо него заливается другой – использовался достаточно давно. В простейшем случае замена фонового раствора осуществляется за счет быстрой (менее 5 с) смены одного электролизера после стадии накопления на другой, с другим раствором, из которого предварительно удален кислород. Этот процесс не только сложен для исполнения, но также может привести к неправильным результатам. Ошибки в основном обусловлены быстрым окислением амальгамы (например, амальгамы цинка), которое происходит даже при кратковременном соприкосновении амальгамы с кислородом воздуха при смене раствора. При этом изменяются как состав амальгамы, так и измеряемый сигнал.

В работе [17] описана система, которая позволила снизить погрешность измерений с помощью ячейки, состоящей из двух электролизеров и резервуара с фоновым электролитом, соединенных друг с другом вместе в один корпус. Конструкция этой ячейки приведена на рис. 1.

Ячейка устроена следующим образом. В электролизере I, наполненном исходным раствором электролита, проводится очистка рабочего электрода и накопление анализируемого вещества. В резервуаре II содержится второй фоновый раствор, содержащий к примеру, маскирующий (хелатирующий) агент. Растворы в обоих сосудах продуваются N_2 через систему кранов. После проведения накопления, одновременно открываются краны 1 и 2. Так как трубка 2, через которую подается раствор маскирующего агента, имеет чуть больший диаметр, чем диаметр слива 1, обеспечивается наполненность сосуда I, что не дает ртутному электроду выйти из строя от потери контакта с раствором. Избыток раствора маскирующего раствора выходит через сифон 5 – это позволяет поддерживать постоянный объем раствора в ячейке. Экспериментально, с помощью опытов с окрашенной жидкостью, было показано, что объем раствора с маскирующим веществом в сосуде II должен быть в 4 раза больше, чем исходный объем раствора в сосуде I.

Для сравнения эффективности данной системы было проведено определение Tl^+ в различных концентрациях (5×10^{-7} – 5×10^{-6} М) в классической ячейке, ячейке с «ручной» заменой раствора и ячейке с совмещенными резервуарами. Результаты измерений показали, что измерения с «ручной» заменой раствора электролита демонстрируют наилучшую воспроизводимость, однако ячейка с совмещенными резервуарами демонстрирует практически такие же результаты. Тем не менее, такая ячейка лишь условно пригодна для рутинных анализов, так как ее производительность из-за длительных по времени процессов промывки ячейки и удаления кислорода в растворе слишком мала.

Одними из первых работ, посвященных решению проблемы замены фонового раствора за счет механического удерживания электролита на поверхности рабочего электрода с сохранением поляризующего потенциала, являются работы Ягнера и Вэнга [13–15]. В них предложена конструкция электрохимической ячейки в виде единого корпуса, в которой рабочий электрод и один конец электролитического ключа, ведущего к камере со вспомогательным электродом и электродом сравнения, находятся в одной плоскости, рис. 2.

Рабочим электродом в указанной ячейке служит электрод из стеклоуглеродного стержня диаметром 3 мм, в качестве вспомогательного и электрода сравнения использовались платиновая проволока и насыщенный каломельный электрод, соответственно. Все три электрода размещены в едином неразборном корпусе из полиэтиленовой трубки и выходят из него к торцевой поверхности. Такая конструкция позволяет измерять более широкий круг веществ за счет применения разных материалов электродов и имеет воспроизводимые гидродинамические характеристики из-за центрально-симметричной конфигурации рабочего торца.

Позже данная конструкция электродной ячейки была усовершенствована за счет совмещения электродного узла с камерой, содержащей анализируемый раствор, в единый корпус со встроенным электродвигателем, который обеспечивает вращение камеры со скоростью 750–2600 об/мин. За счет вращения в процессе измерений достигаются воспроизводимые гидродинамические условия, такие же, как и при использовании вращающегося дискового электрода, благодаря чему удается повысить чувствительность

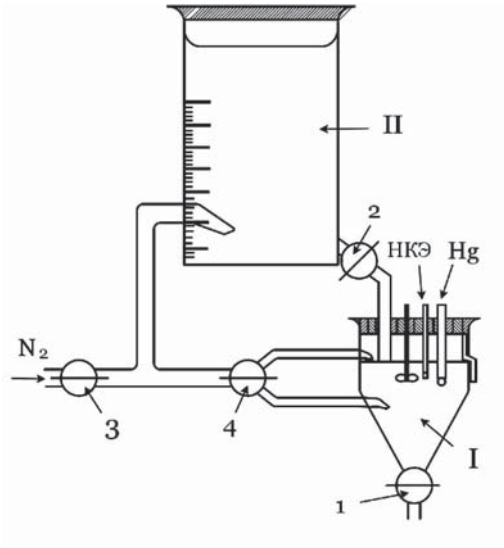


РИС. 1.

Схема электролитической ячейки с проточной схемой замены раствора: I – электролитическая ячейка; II – резервуар со сменяющим электролитом; 1, 2, 3 – одноходовой кран; 4 – двухходовой кран

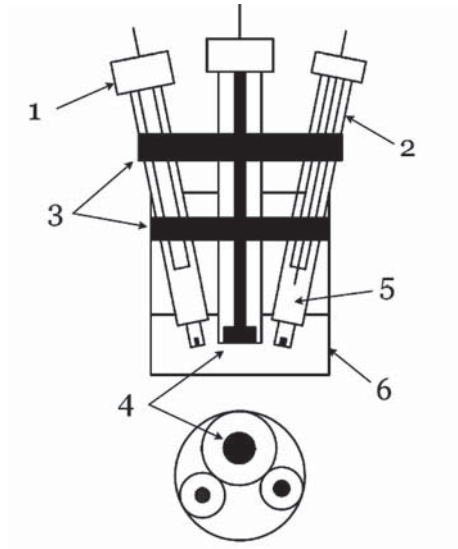


РИС. 2.

Схема комбинированной трехэлектродной ячейки, предложенной Ягнером и Вэнгом для проведения инверсионных измерений с сохранением потенциала на рабочем электроде: 1 – насыщенный каломельный электрод, 2 – платиновый вспомогательный электрод, 3 – резиновое кольцо, 4 – рабочий электрод из стеклоуглерода, 5 – внутренний раствор электролита, 6 – полиэтиленовый корпус

и воспроизводимость метода. В литературе описаны инверсионный потенциометрический и инверсионно-дифференциальный потенциометрический способы определения с использованием описанной электродной ячейки таких веществ как: свинец, кадмий, а в некоторых случаях медь и цинк в природных водах и стоках, в моче, в различных биологических материалах, в крови, молоке, а также в пиве и вине; предел обнаружения этих металлов составил 0,04–0,2 мкг/л, относительная погрешность анализа не превышает 8% [16].

Однако, как оказалось, подобная конструкция имеет низкую стабильность работы при измерениях в режиме переменнотоковой инверсионной ВА, т.к. при контакте с различными растворами, в которые погружается датчик в процессе измерения, происходит неконтролируемое изменение электрохимического потенциала электрода сравнения. Кроме того, указанная электродная система не позволяет заменять растворы непосредственно в процессе эксперимента с сохранением работоспособности рабочего электрода, т.к. при этом на рабочем электроде возникает неконтролируемый спонтанный потенциал, вызывающий нежелательные процессы, например, окисление кислородом воздуха анализируемых элементов, нанесенных на электрод в процессе электролиза.

Для преодоления указанных недостатков Н.К. Зайцевым и соавт. [8] была предложена конструкция датчика «три в одном», в котором не только рабочий, но и вспомогательный электрод выведены на рабочую поверхность и контактируют с внешним раствором, рис. 3.

Электрод «3 в 1» представляет собой электрохимическую ячейку, в которой индикаторный электрод (центральный диск диаметром 3 мм) изготовлен из углеситалла, роль вспомогательного электрода выполняет кольцо из пирографита, электродом сравнения служит хлорид-серебряный электрод. Электрический контакт электрода сравнения с исследуемым раствором осуществляется через шлиф, заполненный 1 М раствором KCl. При переносе электрода из одного фонового раствора в другой, на его торце за счет поверхностного натяжения сохраняется капля анализируемого раствора с сохранением потенциала на поверхности рабочего электрода. За счет этого перенесение накопленных в амальгаме элементов производится при том же потенциале, что и их накопление, вследствие чего накопленные анализируемые элементы не окисляются и состав амальгамы не изменяется.

Для проведения инверсионных вольтамперометрических измерений с использованием датчика «3 в 1» разработан приборно-методический комплекс, включающий вольтамперометрические анализаторы «Экотест-ВА» и «Экотест-ВА 4» с пакетом программного обеспечения. Для автоматизации экспериментов датчик «3 в 1» может быть совмещен с автосамплером, позволяющим автоматически производить высокоэффективную замену растворов на разных стадиях вольтамперометрического цикла без размыкания электрохимической цепи [4].

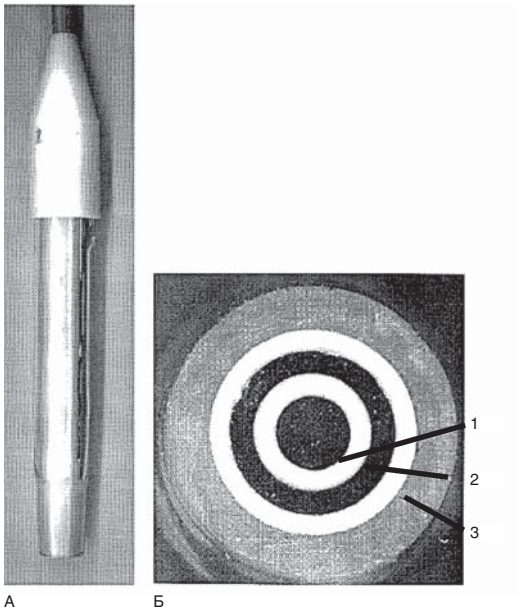


РИС. 3.

Общий вид датчика «3 в 1» (А) и вид его рабочей поверхности (Б). 1 – рабочий электрод (центральный диск, D=3 мм, выполнен из углеситалла); 2 – вспомогательный электрод (кольцо, $D_{внутр}$=5 мм, $D_{внешн}$=7 мм, выполнено из пирографита); 3 – шлиф, соединяющий электрод сравнения с внешним раствором

Разработанный электрод «3 в 1» был использован для инверсионного определения свинца, цинка и кадмия в модальных растворах и различных по матричному составу природных и сточных водах с заменой фонового раствора [5]. Для предварительного накопления ртутной пленки на поверхности рабочего электрода использовался раствор $Hg(NO_3)_2 \times H_2O$ на фоне 0,1М HNO_3 с концентрацией ионов Hg^{2+} 100 мг/л. Регистрацию вольтамперограмм проводили в 0.01М растворе HNO_3 в режиме переменнотоковой вольтамперометрии. Полученные результаты сравнивали с результатами анализа без замены растворителя с использованием классической трехэлектродной ячейкой с рабочим углеситалловым электродом. Установлено, что в случае традиционной системы из трех различных электродов, сигналы практически полностью исчезают. При перенесении электрода из раствора, где происходит накопление, в раствор для измерения с разомкнутой цепью на рабочем электроде устанавливается спонтанный потенциал. В случае электрода «3 в 1», когда перенесение накопленных элементов производится при том же потенциале, что и их накопление – 1300 мВ – этого не происходит. Таким образом, необходимость добавлять к образцу ртутные соли отпадает: при формировании ртутной пленки раствор нитрата ртути может быть использован многократно, поскольку в данном процессе из раствора выносится лишь незначительная часть присутствующей в растворе ртутной соли.

Еще одно преимущество, которое дает электрод «3 в 1», заключается в уменьшении влияния солевой матрицы на результаты анализа. Независимо от того, какая матрица содержится в пробе, регистрация вольтамперограмм происходит в стандартном растворе требуемого состава, не содержащем нежелательных примесей. К примеру, при определении цинка и меди в насыщенном растворе KCl из-за высокой концентрации ионов Cl– в растворе, и связанных с этим процессом комплексообразования, сигналы металлов сильно смещены в катодную область, что может затруднить их идентификацию. Если же применять схему анализа с заменой растворителя, то регистрация вольтамперных кривых происходит в растворе известного состава, который можно регулировать, подбирая оптимальные условия. При этом существенно уменьшается уровень шумов, токовые пики электрорастворения анализируемых элементов имеют стабильный потенциал, характерный для раствора, в котором производится электрорастворение, повышается воспроизводимость анализа.

Были разработаны методики определения элементов в образцах со сложной матрицей с использованием электрода «3 в 1». Полученные результаты использованы при анализе образцов вин и растительных масел без предварительной минерализации пробы (определяемые элементы – кадмий, свинец, медь), бензина (свинец), пищевых продуктов (хлеба и молочных продуктов; иодид), морской воды (селен), морской соли (иодид, иодат при совместном присутствии) [1, 6, 7].

С целью автоматизации и упрощения процедуры замены электролита в процессе инверсионных измерений используются также различные проточные вольтамперометрические ячейки [10]. Ячейки для проточной инверсионной вольтамперометрии обычно конструируют с рабочим электродом из стеклоуглерода или стационарными ртутными электродами. На рис. 4 приведен поперченный разрез проточной ячейки с тремя электродами, где в качестве рабочего электрода используется электрод с висящей ртутной каплей (ВРКЭ).

Проточные ячейка состоит из двух пластмассовых пластин, которые скреплены между собой винтами. На верхней пластине установлены электроды сравнения, рабочий и вспомогательный электроды, на нижней – находятся полукруглый и эллиптический проточный канал, в центр которого помещен ВРКЭ.

Анализируемое вещество концентрируется с помощью электролиза или с помощью адсорбции из поступающего к рабочему электроду раствора пробы. Для перекачивания пробы по каналам обычно применяются пневматические насосы с малым биением. Наряду с пневматическими насосами могут быть также использованы автоматизированные бюретки, обеспечивающие скорость потока вплоть до 33 мл/мин. Длительность процедуры концентрирования может

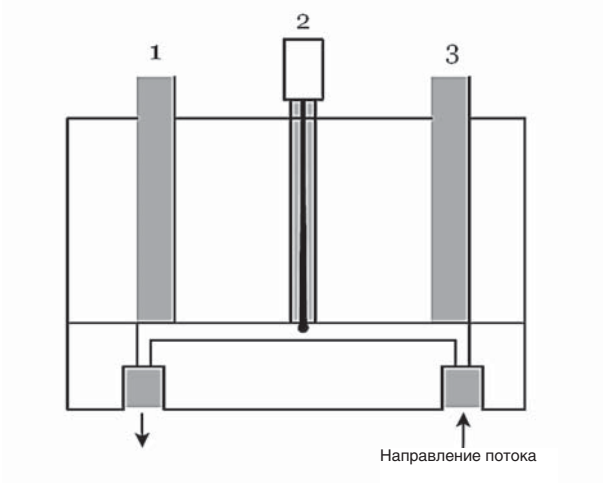


РИС. 4.

Схема ячейки для проточной инверсионной вольтамперометрии: 1 – вспомогательный электрод, 2 – рабочий электрод (ВРКЭ), 3 – электрод сравнения

определяться и контролироваться скоростью потока, объемом пробы и повторяющимися сменами раствора пробы в ячейке. По окончании накопления проводят замену раствора пробы раствором фона и без перемешивания регистрируют инверсионные вольтамперограммы.

Определение в проточных ячейках, как правило, повышает чувствительность измерений, так как в проточных каналах достигается существенно более высокая скорость потока и следовательно большие скорости извлечения, чем в обычных ячейках. Преимущество проточной инверсионной вольтамперометрии состоит в том, для улучшения чувствительности и селективности определения накопление и определение можно проводить в разных фоновых электролитах. Если на инверсионной вольтамперограмме наблюдается высокий остаточный ток или наложение пиков, необходимо после стадии накопления заменить фоновый раствор на другой (с другим pH или лигандом). Примером такого улучшения является проточно-инверсионное определение таллия в присутствии свинца или олова [12]: за счет смены солянокислого фонового раствора, из которого проводится концентрирование элементов, на фоновый раствор, содержащий комплексообразующее вещество (например, раствор этилендиамина, ЭДТА или тартрата), удается получить раздельные сигналы элементов. Наряду с разделением сигналов, можно также уменьшить влияние матрицы, например, при определении селена методом катодной ИВ в потоке, а также снизить остаточный ток [11].

Интересно применение инверсионной проточной вольтамперометрии для изучения механизма процессов при адсорбционной инверсионной вольтамперометрии. Все стадии – комплексообразование, адсорбционное концентрирование и последующее растворение концентрата – протекает в одной и той же ячейке и при работе в потоке можно наблюдать отдельные стадии. Таким образом получают информацию о том, образуется ли комплекс определяемого вещества уже в растворе пробы или адсорбируется лиганд, и комплексообразование происходит на поверхности электрода.

Непрерывное изменение состава раствора в вольтамперометрической проточной ячейке по сравнению с обычной практикой, когда проводят замену ячейки, приводит к меньшим ошибкам анализа и делает метод пригодным для рутинных анализов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Инверсионные электроаналитические методы с заменой раствора без размыкания электрохимической цепи предоставляют возможность накопить осадок на электроде в растворе, содержащем значительные количества растворенных солей или органических веществ, мешающих определению, в других методах, промыть электрод под напряжением без потери осадка, перенести в чистый стандартный раствор, не содержащий ни солевой матрицы, ни мешающей органики, и провести таким образом измерение в стандартных условиях. Эти методы позволяют организовать ртутно-пленочный анализ с многократным накоплением ртутной пленки из одного и того же раствора ртутной соли с последующим перенесением датчика в исследуемый раствор. С помощью этого приема удается избежать добавления ртутной соли к каждому из исследуемых образцов, что является одним из неприятных условий получения ртутной пленки в других методах.

Таким образом, методы ИВА и ИХА с заменой раствора без размыкания электрохимической цепи представляют собой перспективное и развивающееся направление как в методических исследованиях, так и в практической аналитической химии. В настоящей обзорной статье рассмотрены основные экспериментальные подходы к реализации ИВА и ИХА с заменой раствора без размыкания электрохимической цепи.

Литература

1. **Бакун В.А., Федулов Д.М., Осипова Е.А., Зайцев Н.К., Ловчиновский И.Ю.** О механизме влияния алифатических спиртов на инверсионно-вольтамперометрическое поведение свинца и кадмия // Вестник МИТХТ им. М.В. Ломоносова. 2009. Т. 4. № 3. С. 75–79.
2. **Брайнина Х.З., Нейман Е.Я., Слепушкин В.В.** Инверсионные электроаналитические методы. М.: Химия, 1988. 240 с.
3. **Будников Г.К., Вяселев М.Р., Майстренко В.Н.** Основы современного электрохимического анализа. М.: Мир. 2003. 592 с.

4. **Дедов А.Г., Зайцев Н.К., Шорин С.В., Юрицын В.В.** Приборно-программный комплекс для исследования ионного состава различных объектов // Партнеры и конкуренты. 2002. № 10. С. 30–36.
5. **Зайцев Н.К., Осипова Е.А., Свидерский Е.Б.** Возможности повышения эффективности анодной инверсионной вольтамперометрии при использовании систем с заменой раствора без размыкания цепи // Журн. аналит. химии. 2004. Т. 59. № 7. С. 731–735.
6. **Зайцев Н.К., Осипова Е.А., Федулов Д.М., Дедов А.Г.** Электрохимическое концентрирование иодида и его определение методом катодной инверсионной вальтамперометрии // Журн. аналит. химии. 2004. Т. 59. № 5. С. 534–540.
7. **Зайцев Н.К., Осипова Е.А., Федулов Д.М., Еременко Е.А., Дедов А.Г.** Инверсионно-вольтамперометрическое определение селена // Пищевая промышленность. 2004. № 11. С. 74–76.
8. **Зайцев Н.К., Свидерский Е.Б., Юрицын В.В.** Патент на изобретение РФ № 2239825 C1, 10.11.2004. Электрохимический датчик // Патент России № 2239825. 2004. Бюл. № 11.
9. **Плэмбек Дж.** Электрохимические методы анализа: пер. с англ. Дж Плэмбек. М.: Мир. 1985. 496 с.
10. **Хенце Г.** Полярография и вольтамперометрия. Теоретические основы и аналитическая практика. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 284 с.
11. **de Charvalho L.M, Schwedt G., Henze G., Sander S.** Redoxspeciation of selenium in water samples by cathodic stripping voltammetry using an automated flow system // Analyst. 1999. V. 124, № 12. P. 1803–1809.
12. **Frank T, Neeb R.** Die selektive invers-voltammetrische Bestimmung des Antimons in salzsauren Loesungen nach Loesungswechsel in einer einfachen Durchflusszelle // Fresenius J Anal Chem. 1987. V. 327, P. 670–673.
13. **Jagner D., Renman L., Wang Y.** A novel batch electrode design for use in stripping potentiometry facilitating medium exchange // Electroanalysis. 1992. V. 4. № 3. P. 267–273.
14. **Jagner D., Renman L., Wang Y.** Determination of lead in microliter amounts of whole blood by stripping potentiometry // Electroanalysis. 1994. V. 6. № 4. P. 285–291.
15. **Jagner D., Sahlin E., Axellson B.** Rapid methods for the determination of copper (II) and lead (II) in tap water using a portable potentiometric stripping analyser // Anal. Chim. Acta, 1993, №2. V. 278, P. 237–242.
16. **Jagner D., Wang Y.** Coulometric stripping potentiometry // Elecrroanolysis. 1995, V. 7. N. 7. P. 614–618.
17. **Zieglerova L., Ŝtulik K., Doležal J.** A contribution to the use of chelating agents in anodic stripping voltammetry // Talanta. 1971. № 6. V. 18. P. 603–613.

Мартынов Леонид Юрьевич,
к.х.н., ассистент кафедры аналитической химии им. И.П. Аллимарина Российского технологического университета РТУ МИРЭА Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

тел.: +7 (916) 163-40-35, e-mail: martynov_leonid@mail.ru

Поклоннов Владислав Дмитриевич,
инженер кафедры аналитической химии им. И.П. Алимарина Российского технологического университета РТУ МИРЭА Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

тел.: +7 (906) 731-10-70, e-mail: vladpoklonnov@yandex.ru

Зайцев Николай Конкордиевич,
д.х.н., профессор, зав. кафедрой Энергетических технологий, систем и установок Российского технологического университета РТУ МИРЭА Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова,

119454, г. Москва, Проспект Вернадского, д. 78,
119454, Moscow, Vernadsky prospect, 78,
тел.: +7 (495) 246-05-55 доб. 845,
e-mail: nk_zaytsev@mail.ru

УДК 546.271

МЕТАЛЛОПРОМОТИРУЕМОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ АТОМОВ ВОДОРОДА В ДЕКАГИДРО-КЛОЗО-ДЕКАБОРАТНОМ АНИОНЕ С ОБРАЗОВАНИЕМ МОНО- И ДИЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

В.В. Авдеева, Е.А. Малинина, Н.Т. Кузнецов
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова

В работе описаны процессы комплексообразования и сопутствующие реакции замещения экзо-полиэдрических атомов водорода в декагидро-клозо-декаборатном анионе. Описаны условия, при которых процесс замещения является основным и превалирует над процессами комплексообразования. Рассмотрены способы получения моно- и дизамещенных производных клозо-декаборатного аниона в ходе реакций с металлами, а также строение полученных соединений.
Ключевые слова: *комплексообразование, замещение, кластерные анионы бора.*

METAL-PROMOTED SUBSTITUTION OF HYDROGEN ATOMS IN THE DECAHYDRO-CLOSO-DECABORATE ANION RESULTING IN MONO- AND DISUBSTITUTED DERIVATIVES

V.V. Avdeeva, E.A. Malinina, N.T. Kuznetsov
Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry

The complexation and the accompanying substitution reactions of exo-polyhedral hydrogen atoms in the decahydro-closo-decaborate anion are considered. The conditions are determined under which the accompanying processes are basic and prevail over the complexation processes. Methods for the preparation of mono- and disubstituted derivatives of the closo-decaborate anion during reactions with metals and their structures are described.
Keywords: *complexation, substitution, boron cluster anions.*

ВВЕДЕНИЕ

Кластерные анионы бора $[B_nH_n]^{2-}$ (n = 6–12) образуют уникальный класс объектов в химии координационных соединений, неорганической и элементоорганической химии. Они характеризуются наличием электрон-дефицитных трехцентровых двухэлектронных связей и избыточной делокализованной электронной плотностью, обладают пространственной ароматичностью. Геометрическое и электронное строение кластерных анионов бора определяет необычность их свойств: они могут присоединять к себе нуклеофилы, образуя огромное число разнообразных замещенных производных [15, 22, 23, 26, 29], и выступать в роли внутрисферных лигандов [8, 16], образуя различные связи между кластерным анионом бора и металлом (двухцентровая двухэлектронная связь металл-бор M–B, трехцентровая двухэлектронная связь (MHB), трехцентровая двухэлектронная связь M–H–B через мостиковый атом водорода, их комбинации). Будучи двухзарядными анионами, кластерные анионы бора могут играть роль противоионов и стабилизировать катионные комплексы металлов, участвуя в специфических взаимодействиях [17, 28] с молекулами органических лигандов, растворителей или органическими катионами.

Кластерные анионы бора обладают восстановительной активностью и могут участвовать в окислительно-восстановительных реакциях в качестве восстановителей, окисляясь до борной кислоты и ее производных [6]. С солями металлов в присутствии органических лигандов помимо реакций комплексообразования могут протекать окислительно-восстановительные взаимодействия, при этом может наблюдаться восстановление металлов до нулевого состояния. Результатом протекающих окислительно-восстановительных реакций (ОВР) в случае металлов, имеющих несколько устойчивых степеней окисления, могут быть комплексы металлов в низких степенях окисления, в том числе гетеровалентные соединения (в частности, соединения меди(I)/меди(II)) [7].

Интересное свойство кластерных анионов бора $[B_nH_n]^{2-}$ – это их способность участвовать в реакциях замещения экзо-полиэдрических атомов водорода с образованием замещенных производных. В реакциях комплексообразования, которые сопровождаются окислительно-восстановительными превращениями, обнаружена возможность образования замещенных производных *клозо*-декаборатного аниона с экзо-полиэдрическими связями B–X, где в качестве заместителя X могут выступать молекулы используемых лигандов L или конкурентоспособных нуклеофилов.

Наиболее изучаемыми направлениями использования кластерных анионов бора и их производных традиционно считались области науки, которые были связаны с высокой энергоемкостью гидридных соединений бора. Позднее интерес к боргидридам вырос вследствие обнаруженной высокой нейтронопоглощающей способности атома бора. В связи с этим *клозо*-бороводородные анионы было предложено использовать для создания термостойких полимерных нейтронозащитных покрытий, обладающих хорошей адгезией к различным материалам, нейтронозащитных тканей и материалов [5, 14, 20] и контрастных агентов для МРТ диагностики [13]. Помимо этого, комплексные соединения металлов с кластерными анионами бора могут быть использованы в качестве экстрагентов тяжелых металлов, координационных полимеров, прекурсоров металлоборидных соединений сложного состава, соединений с высокой энергоемкостью и т.д. [19, 21, 27].

К наиболее актуальным направлениям использования замещенных производных кластерных анионов бора относится создание на их основе веществ и материалов, перспективных для целей борнейтронозахватной терапии (БНЗТ). В основе БНЗТ лежит ядерная реакция стабильного изотопа бора–10 с тепловыми нейтронами. Ядра гелия (альфа-частицы) и ядра отдачи лития-7, которые образуются в результате реакции $^{10}B\ (n^{th} \mid \alpha, \gamma)\ ^{7}Li$, обладают высокой линейной потерей энергии в тканях (200 и 350 кэВ/мкм соответственно) и небольшим суммарным пробегом (~14 мкм), соизмеримым с диаметром клетки. В случае селективного накопления изотопа бора-10 в опухолевых клетках может быть достигнут избирательный радиационный эффект на клеточном уровне. В идеале разрушаются клетки опухоли, включая сколь угодно мелкие метастазы, при этом нормальные ткани в облучаемом объеме не повреждаются [12]. Ключевой остается задача создания таких борсодержащих препаратов, которые способны избирательно доставлять в клетки злокачественных опухолей терапевтическое количество соединений бора-10, обеспечивать его оптимальное микрораспределение и оставаться в клетках в течение необходимого для облучения периода времени.

В связи с вышеизложенным, определение новых путей получения замещенных производных кластерных анионов бора является актуальной задачей современной неорганической и элементоорганической химии. В настоящем обзоре обсуждаются условия протекания реакций, сопутствующих или превалирующих над реакциями комплексообразования, которые приводят к получению замещенных производных *клозо*-декаборатного аниона.

I. ОБРАЗОВАНИЕ ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КЛОЗО-ДЕКАБОРАТНОГО АНИОНА В ПРИСУТСТВИИ СОЛЕЙ МЕДИ(II)

Монозамещенные производные *клозо*-декаборатного аниона получены в ходе реакций комплексообразования меди(I) на воздухе в условиях протекания ОВР. Комплекс меди(I) с монозамещенным производным $[B_{10}H_9Bipy]$– выделен при взаимодействии $[Cu_2[B_{10}H_{10}]]$ с 2,2'-бипиридилом (Bipy) при проведении реакции комплексообразования меди(I) в ацетонитриле на воздухе при комнатной температуре [2] (рис. 1).

Установлено, что замещенный анион $[2\text{-}B_{10}H_9Bipy]$ – в комплексе $[CuI(NCCH_3)_2\text{-}[2\text{-}B_{10}H_9Bipy]]$ представляет собой бидентатно координированный лиганд (рис. 2). Тетраэдрическое окружение атома Cu(I) образуют два атома азота молекул ацетонитрила (Cu–N(3,4) 1.995(3) и 1.976(3) Å), атом азота N(2) заместителя Bipy (Cu–N(2) 2.028(2) Å) и апикальная группа B(1)–H(1) кластерного аниона. Замещенный анион $[2\text{-}B_{10}H_9Bipy]$– координирован атомом меди(I) группой B(1)–H(1) апикальной вершины полиэдра за счет образования трехцентровой связи CuHB (Cu–B(H) 2.601(3), Cu–H(B) 1.85(3)Å, угол CuHB составляет 123(2)°). В ^{11}B ЯМР спектре соединения присутствуют сигналы, соответствующие монозамещенному производному *клозо*-декаборатного аниона с заместителем в положении 2 борного кластера.

Комплекс меди(II) с замещенным производным $[B_{10}H_9BPA]$– получен при проведении реакции комплексообразования $[Cu_2[B_{10}H_{10}]]$ с 2,2'-бипиридиламином (BPA) в боксе в атмосфере азота при температуре близкой к нулевой, а также на воздухе при проведении реакции на холоде (при –20° С) [22] (рис. 3).

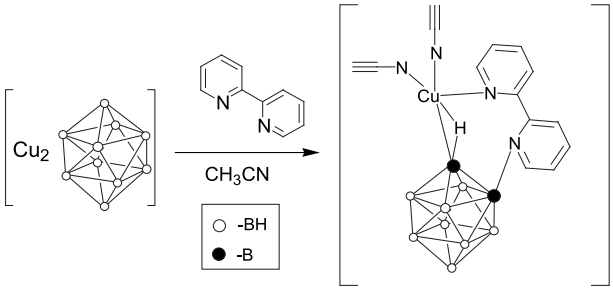


РИС. 1.
Синтез комплекса $[Cu^{I}(NCCH_3)_2[2\text{-}B_{10}H_9Bipy]]$

Установлено, что комплекс $[Cu^{II}(BPA)_2(NCCH_3)_2][2\text{-}B_{10}H_9BPA]_2 \cdot 2H_2O$ построен из комплексного катиона $[Cu^{II}(BPA)_2(NCCH_3)_2]^{2+}$ и однозарядного замещенного производного *клозо*-декаборатного аниона $[2\text{-}B_{10}H_9BPA]^-$, который выступает в качестве противоиона; в кластерном анионе бора в положении B2 в качестве заместителя находится молекула BPA. Строение комплекса представлено на рис. 4. В ^{11}B ЯМР спектре реакционного раствора присутствуют сигналы, соответствующие «классическому» монозамещенному производному *клозо*-декаборатного аниона с заместителем в положении 2.

II. ОБРАЗОВАНИЕ ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КЛОЗО-ДЕКАБОРАТНОГО АНИОНА В ПРИСУТСТВИИ СОЛЕЙ КОБАЛЬТА(II)

При изучении реакции комплексообразования кобальта(II) с солями декагидро-*клозо*-декаборатного аниона в присутствии 1,10-фенантролина (Phen) установлено, что реакция комплексообразования зависит от соотношения исходных реагентов и растворителя. При двукратном избытке лиганда Phen по отношению к металлу в случае проведения реакции в ацетонитриле [11] образуется нейтральное замещенное производное $[1,2\text{-}B_{10}H_8Phen]$:

$$CoCl_2 + 2\,Phen + [B_{10}H_{10}]^{2-} \rightarrow [Co(Phen)_3][B_{10}H_{10}] + [1,2\text{-}B_{10}H_8Phen].$$

В ходе реакции из реакционного раствора выделено два продукта: комплекс кобальта(II) $[Co(Phen)_3][B_{10}H_{10}]$ (1 фракция) и нейтральное замещенное производное $[1,2\text{-}B_{10}H_8Phen]$ (2 фракция) [4, 11]. При этом выход замещенного производного *клозо*-декаборатного аниона не превышает 30%.

При эквимолярном соотношении реагентов и проведении реакции в N,N-диметилформамиде наблюдается селективное образование дизамещенного производного $[1,2\text{-}B_{10}H_8Phen]$ (рис. 5), при этом вы-

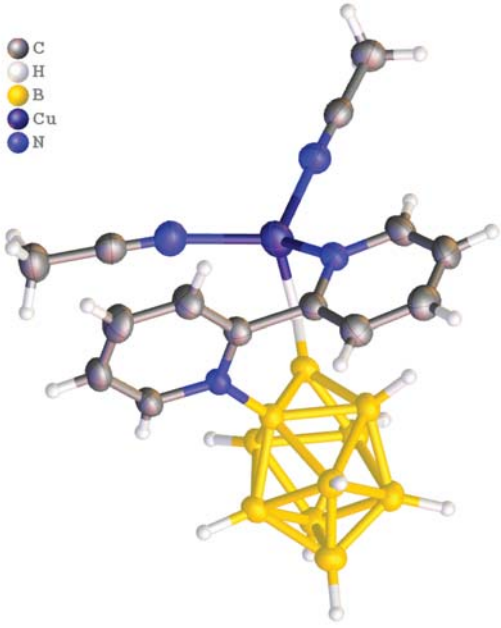


РИС. 2.
Строение комплекса $[Cu^{I}(NCCH_3)_2[2\text{-}B_{10}H_9Bipy]]$

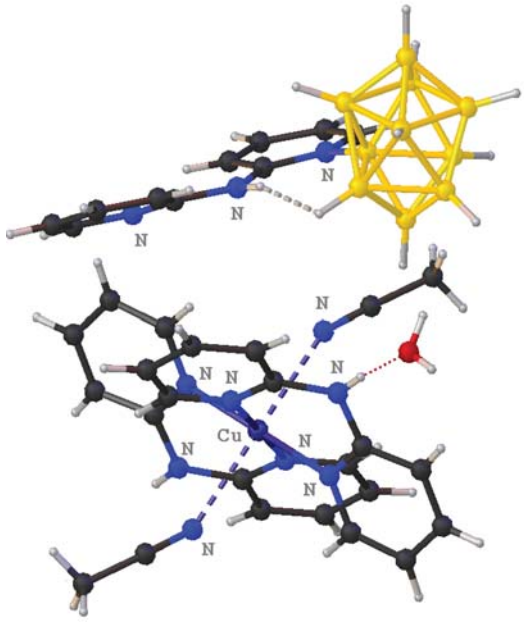


РИС. 4.
Строение $[CuII(BPA)_2(NCCH_3)_2][2\text{-}B_{10}H_9BPA]2 \cdot 2H_2O$

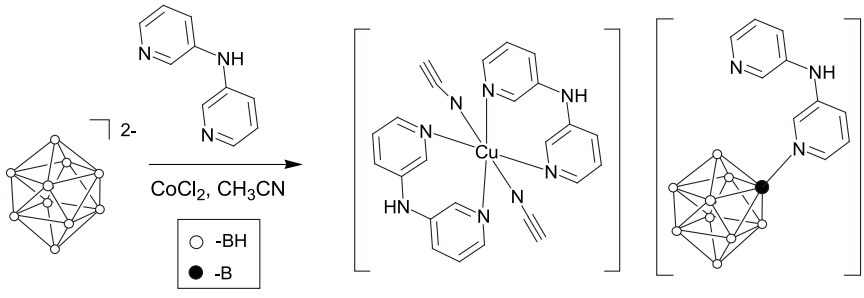


РИС. 3.
Синтез комплекса $[Cu^{II}(BPA)_2(NCCH_3)_2][2\text{-}B_{10}H_9BPA]_2$

ход продукта составляет около 80% [4]. В этом случае выделение комплекса [Co(Phen)3][$B_{10}H_{10}$] из реакционного раствора не наблюдается.

Согласно данным РСА [9], соединение [1,2-$B_{10}H_8$Phen] представляет собой нейтральное замещенное производное *клозо*-декаборатного аниона с молекулой Phen в качестве заместителя, которая бидентатно присоединена к кластеру бора в положениях B(1) и B(2) борного полиэдра (рис. 6). Отметим, что получение замещенного производного [1,2-$B_{10}H_8$Phen] наблюдается только при проведении реакции на воздухе, тогда как проведение реакции в атмосфере азота приводит к выделению вышеописанного комплекса [$Co(Phen)_3$][$B_{10}H_{10}$] в качестве основного продукта реакции, и получение искомого замещенного производного не наблюдается.

Изучение реакций комплексообразования в других растворителях показало, что молекула ДМФА сама может быть источником заместителя в борном кластере. Монозамещенное производное *клозо*-декаборатного аниона [2-$B_{10}H_9OC(H)O]^{2-}$, содержащего экзо-полиэдрическую группу –OC(H)O в качестве заместителя, получено при взаимодействии $(Et_3NH)_2$[$B_{10}H_{10}$] и $CoCl_2$ в ДМФА при нагревании [9]. При добавлении трехкратного избытка 1,10-фенантролина к реакционной смеси замещенный анион выделяется в виде комплексного соединения кобальта(II) [$Co(Phen)_3$] [2-$B_{10}H_9OC(H)O$] × 3DMF (рис. 7).

Комплекс [$Co(Phen)_3$][2-$B_{10}H_9OC(H)O$] × 3DMF содержит два кристаллографически независимых катиона $[Co(Phen)_3]^{2+}$, два монозамещенных *клозо*-декаборатных аниона [2-$B_{10}H_9OC(H)O]^{2-}$ и молекулы растворителя ДМФА. Вид аниона [2-$B_{10}H_9OC(H)O]^{2-}$ показан на рис. 8. Длина связи C=O короче, чем расстояние C–O(B) (1.198(5) и 1.273(5) Å соответственно), а расстояние B–O составляет 1.459(5) Å. Последнее значение несколько короче, чем расстояние B–O, которое наблюдается для того же аниона в соединении $(Ph_4P)_2$[2-$B_{10}H_9OC(H)O$] [10], которое было получено по реакции кислотно-катализируемого нуклеофильного замещения при взаимодействии *клозо*-декаборатного аниона с муравьиной кислотой [10].

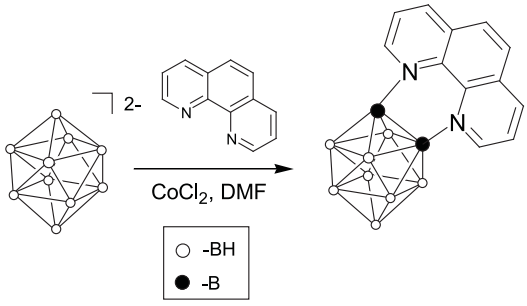


РИС. 5.
Синтез соединения [1,2-$B_{10}H_8$Phen]

Таким образом, в главах I и II рассмотрено образование новых моно- и дизамещенных производных *клозо*-декаборатного аниона [2-$B_{10}H_9L$]– и [1,2-$B_{10}H_8L_2$], а также получение известного аниона [2-$B_{10}H_9OC(H)O]^{2-}$ в ходе реакций в присутствии металлов (меди и кобальта). Отметим, что получение соединений [2-$B_{10}H_9L$]– и [1,2-$B_{10}H_8L_2$] по механизму кислотно-катализируемого нуклеофильного замещения невозможно ввиду протонирования лигандов L в кислотных условиях и образования соответствующих солей протонированных линадов LH+ или LH_2^+.

III. ОБРАЗОВАНИЕ ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КЛОЗО-ДЕКАБОРАТНОГО АНИОНА В ПРИСУТСТВИИ СОЛЕЙ ЗОЛОТА(I), ОЛОВА(II), НИКЕЛЯ(II)

Соединения, рассмотренные в настоящей главе, отличаются от комплексных соединений, описанных в главах I и II. В рассмотренных далее соединениях атом металла фактически является заместителем в *клозо*-декаборатном анионе и связан с борным остовом двухцентровой двухэлектронной экзо-полиэдрической связью металл-бор. Соединения этой группы легко идентифицируются по данным ^{11}B ЯМР-спектроскопии: ЯМР-спектры продуктов имеют вид спектров «классических» монозамещенных производных кластерных анионов бора.

При взаимодействии пентаборана-9 с $NiCl_2$ в газовой фазе при высокой температуре получено соединение никеля с дизамещенным производным *клозо*-декаборатного аниона [$B_{10}H_8Ni_2Cl_2$] [25]. По данным ЯМР-спектроскопии авторы предполагают, что в полученном соединении частицы NiCl замещают экзо-полиэдрические атомы водорода в *клозо*-декаборатном анионе в двух экваториальных поясах кластера у противоположных атомов бора.

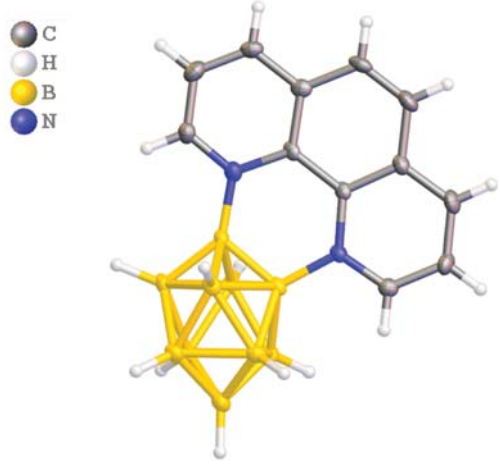


РИС. 6.
Структура соединения 1,2-[$B_{10}H_8$Phen]

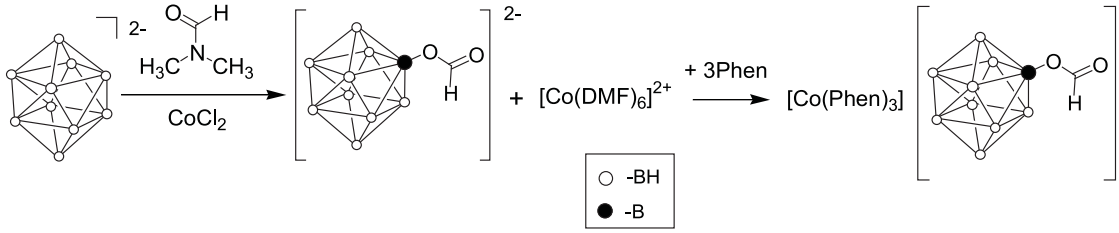


РИС. 7.
Синтез комплекса $[Co(Phen)_3][2\text{-}B_{10}H_9OC(H)O]$.

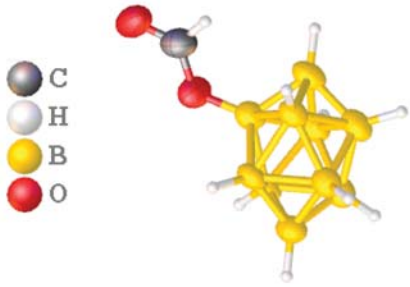


РИС. 8.
Строение аниона $[B_{10}H_9OCOH]^{2-}$ в комплексе $[Co(Phen)_3]$ $[2\text{-}B_{10}H_9OC(H)O] \times 3DMF$

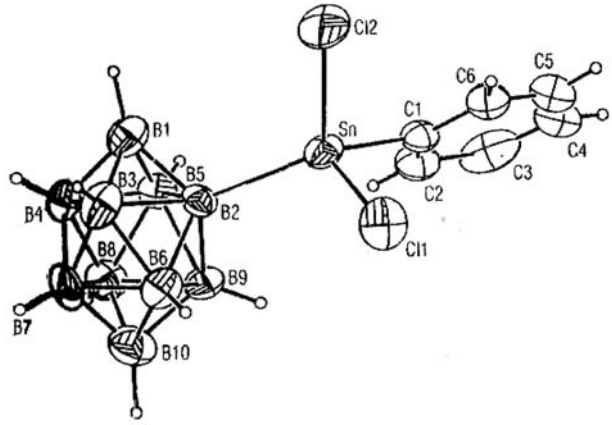


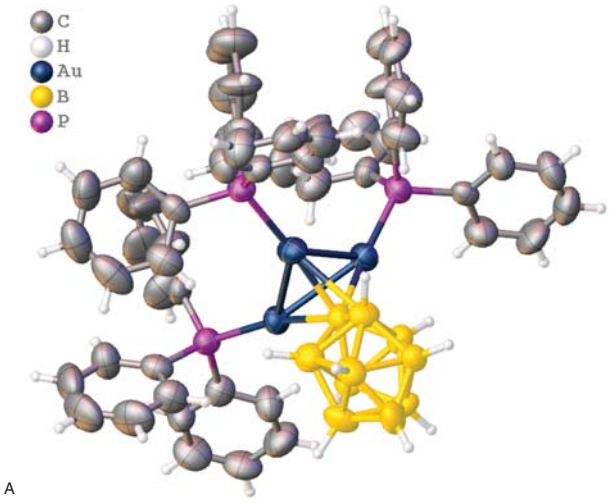
РИС. 9.
Строение аниона $[2\text{-}SnCl_2PhB_{10}H_9]^{2-}$ в соединении $(Ph_4P)_2[2\text{-}SnCl_2PhB_{10}H_9]$

При взаимодействии $(Bu_4N)_2[B_{10}H_{10}]$ с $Sn(Ph)_2Cl_2$ в ацетонитриле при 80° С было получено соединение $(Ph_4P)_2[2\text{-}SnCl_2PhB_{10}H_9]$ [18], которое выделено на ион-обменной колонке с использованием DEAE-целлюлозы. Методом РСА определено строение соединения $(Ph_4P)_2[2\text{-}SnCl_2PhB_{10}H_9]$ (рис. 9). В соединении в положении 2 кластерного аниона бора находится группа $SnCl_2Ph$. Расстояние Sn–B(2) составляет 2.182(6) Å.

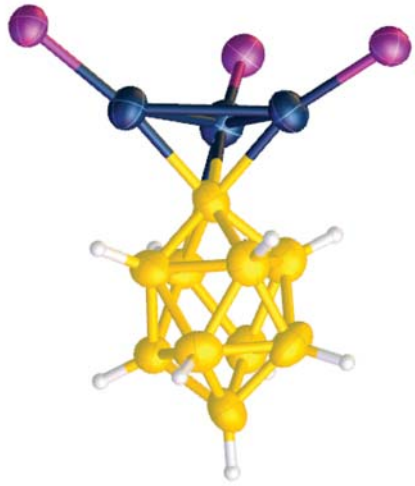
К комплексам с прямой связью металл-бор относится соединение золота $[1\text{-}[Au_3(Ph_3P)_3][B_{10}H_9]]$ [3]. Данное соединение получено при взаимодействии комплекса золота(I) $[Au(Ph_3P)Cl]$ с комплексом серебра(I) $[Ag_2[B_{10}H_{10}]]$ в смеси ацетонитрил/бензол. Соединение содержит трехъядерный комплекс золота Au_3. Каждый атом золота в металла-кластере связан с соседними атомами Au, атомом фосфора молекулы Ph_3P и апикальным атомом B(1) полиэдрического аниона $[B_{10}H_9]$– (рис. 10). Длины связей составляют: Au–Au 2.7946–2.8504(9), Au–P 2.253-2.281(3), Au–B(1) 2.235-2.262(14) Å. Расстояние от апикального атома бора до плоскости трехъядерного кластера золота B(1)–Au_3 составляет 1.548 Å. Один из атомов золота в комплексе образует дополнительную трехцентровую двухэлектронную связь с атомами B(2) и H(2): Au(3)–B(2) 2.718(14), Au(3)–H(2) 2.52 Å, угол B(2)H(2)Au(3) 88°. Возможность образования связи AuHB объясняется относительным расположением трехъядерного кластера Au_3 над квадратом, образованным экваториальными атомами бора, при котором только один из атомов золота оказывается приближенным к экваториальному атому бора. Таким образом, в соединении $[1\text{-}[Au_3(Ph_3P)_3][B_{10}H_9]]$ связь металла с кластером бора осуществляется в результате η^3-связывания апикального атома бора с тремя атомами золота трехъядерного кластера.

ВЫВОДЫ

Данные, полученные в ходе изучения процессов комплексообразования металлов, показывают, что реакции замещения в декагидро-*клозо*-декаборатном анионе происходят во внутренней координационной сфере металлов, при этом зачастую реакции протекают в условиях протекания окислительно-восстановительных взаимодействий. Образование монозамещенного производного $[2\text{-}B_{10}H_9L]$– наблюдается в присутствии Bipy и BPA; для фенантролина ввиду его большей жесткости получено нейтральное дизамещенное производное $[1,2\text{-}B_{10}H_8L_2]$. Проведение реакций в присутствии олова и золота привело к получению замещенных производных *клозо*-декаборатного аниона с положением металлов в качестве заместителей при экваториальном или апикальном атоме бора полиэдра, соответственно. Замещенные производные,



А



Б

РИС. 10.
Строение [1-[$Au_3(Ph_3P)_3$][$B_{10}H_9$]] (А) и фрагмент структуры (Б)

полученные в ходе реакций комплексообразования, могут быть использованы для дальнейшей функционализации борных кластеров для получения соединений, перспективных для целей борнейтронозахватной терапии.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований.

Литература

1. **Авдеева В.В., Дзиова А.Э., Полякова И.Н., Гоева Л.В., Малинина Е.А. и др.** Реакции окисления-восстановления, комплексообразования и замещения в системе [$Cu_2B_{10}H_{10}$] / 2,2′-бипиридиламин // Журн. неорган. химии, 2013. Т. 58. № 7. С. 746–753.
2. **Дзиова А.Э., Авдеева В.В., Полякова И.Н., Белоусова О.Н., Малинина Е.А. и др.** Экзополиэдрическое замещение в анионе $B_{10}H_{10}^2$, инициируемое окислительно-восстановительными реакциями в системе Cu^I-$B_{10}H_{10}^{2-}$- L (L = bipy, bpa) // Докл. АН, 2011. Т. 440. №3. С. 351–354.
3. **Малинина Е.А., Дроздова В.В., Быков А.Ю., Белоусова О.Н., Полякова И.Н. и др.** Комплексные соединения кластеров золота с ***клозо***-бороводородными анионами $B_{10}H_{10}^{2-}$ и $B_{12}H_{12}^{2-}$ // Докл. АН, 2007. Т. 414. № 4. С. 484–486.
4. **Сафронова Е.Ф., Полякова И.Н., Вологжанина А.В., Гоева Л.В., Малинина Е.А. и др.** Синтез и строение дизамещенных производных ***клозо***-декаборатного аниона $Ph_4P(2,6\text{-}B_{10}H_8O_2CCH_3)$ и 1,2-$B_{10}H_8$Phen с бифункциональными O,O'- и N,N'-заместителями // ДАН. 2013. Т. 453. № 1. С. 235-239.
5. **Скачкова В.К., Грачев А.В., Гоева Л.В. и др.** Пат. RU 2550156 C1 Борсодержащий нейтронозащитный материал (10.05.2015).
6. **Avdeeva V.V., Malinina E.A., Vologzhanina A.V., Sivaev I. B., Kuznetsov N. T.** Formation of oxidopolyborates in destruction of the [$B_{11}H_{14}$]– anion promoted by transition metals // Inorg. Chim. Acta 509. 2020. 119693.
7. **Avdeeva V.V., Malinina E.A., Kuznetsov N.T.** Coordination Chemistry of Iron Triad Metals with Organic N-Donor Ligands and Boron Cluster Anions [$B_{10}H_{10}$]$^{2-}$, [$B_{12}H_{12}$]$^{2-}$, and [$B_{10}Cl_{10}$]$^{2-}$: Complexation and Accompanying Processes // Russ. J. Inorg. Chem., 2017. Vol. 62. N 13. P. 1673–1702.
8. **Avdeeva V.V., Malinina E.A., Sivaev I.B. et al.** Silver and Copper Complexes with closo-Polyhedral Borane, Carborane and Metallacarborane Anions: Synthesis and X-ray Structure // Crystals 6, 60 (2016); doi:10.3390/cryst6050060.
9. **Avdeeva V.V., Polyakova I.N., Churakov A.V., Vologzhanina A.V., Malinina E. A. et al.** Complexation and exopolyhedral substitution of the terminal hydrogen atoms in the decahydro-closo-decaborate anion in the presence of cobalt(II) // Polyhedron 162. 2019. P. 65–70.
10. **Avdeeva V.V., Polyakova I.N., Goeva L.V., Malinina E.A., Kuznetsov N.T.** [2,6(9)-$B_{10}H_8$>$(O)_2CCH_3$]– and [2,7(8)-$B_{10}H_8(OC(O)CH_3)_2$]$^{2-}$ derivatives in synthesis of position isomers of the [$B_{10}H_8(OC(O)CH_3)(OH)$]$^{2-}$ anion with the 2,6(9)- and 2,7(8)-arrangement of functional groups // Russ. J. Inorg. Chem. 59. 2014. P. 1247–1258.
11. **Avdeeva V.V., Vologzhanina A.V., Goeva L.V., et al.** Reactivity of boron cluster anions [$B_{10}H_{10}$]$^{2-}$,

$[B_{10}Cl_{10}]^{2-}$ and $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ in cobalt(II)/cobalt(III) complexation with 1,10-phenanthroline // Inorg. Chim. Acta 428. 2015. P. 154–162.

12. **Brill T.B.** Frequency shifts in nuclear quadrupole resonance resulting from interactions in the van der Waals domain // J. Chem. Phys. 1974. V. 61. P. 424.
13. **Goswami L.N., Ma L., Chakravarty Sh. et al.** Discrete Nanomolecular Polyhedral Borane Scaffold Supporting Multiple Gadolinium(III) Complexes as a High Performance MRI Contrast Agent // Inorg. Chem. 2013. V. 52. P. 1694–1700.
14. **Knoth W.H.** Polyamides and Polyesters of Polyhedral Boron Compounds. Pat. 3354121 (USA).
15. **Kuznetsov N.T.** Reactivity of polyhedral cluster anions $B_nH_n^{2-}$ (n = 10, 12) as spatial aromatic systems // Russ. J. Inorg. Chem. 2002. 47. P. 68.
16. **Malinina E. A., Avdeeva V.V., Goeva L.V., Kuznetsov N.T.** Coordination Compounds of Electron_ Deficient Boron Cluster Anions $B_nH_n^{2-}$ (n = 6, 10, 12) // Russ. J. Inorg. Chem. 2010. 55. P. 2148.
17. **Malinina E.A., Avdeeva V.V., Goeva L.V., et al.** Specific interactions in metal salts and complexes with cluster boron anions $B_nH^{2-}n$ (n = 6, 10, 12) Russ. J. Inorg. Chem., 2011. 56. P. 687.
18. **Nachtigal C., Preetz W.** Darstellung und Kristallstruktur von $[P(C_6H_5)_4]_2[2\text{-}SnCl_2(C_6H_5)B_{10}H_9]$ / Synthesis and Crystal Structure of $[P(C_6H_5)_4[2\text{-}SnCl_2(C_6H_5)B_{10}H_9]$ // Z. Naturforsch., Teil B. 1997. V. 52. P. 975.
19. **Plesek J.** Potential applications of the boron cluster compounds // Chem. Reviews. 1992. V. 92. P. 269.
20. **Sivaev I.B.** Nitrogen heterocyclic salts of polyhedral borane anions: from ionic liquids to energetic materials // Chem. Heterocycl. Comp. 2017. V. 53. P. 638–658.
21. **Sivaev I.B., Bregadze V.I.** Polyhedral boranes for medical applications: Current status and perspectives // Eur. J. Inorg. Chem. 2009. 1433.
22. **Sivaev I.B.** Chemistry of 11-Vertex Polyhedral Boron Hydrides (Review) // Russ. J. Inorg. Chem. 2019. V. 64. P. 955–976.
23. **Sivaev I.B., Prikaznov A.V., Naoufal D.** Fifty years of the closo-decaborate anion chemistry // Coll. Czech. Chem. Commun. 2010. 75, 1149.
24. **Sivaev I.B., Bregadze V.I., Kuznetsov N.T.** Derivatives of the closo-dodecaborate anion and their application in medicine. // Russ. Chem. Bull., 2002. 51, P. 1362–74.
25. **Tan Y., Kher S.S., Spencer J.T.** Program and Abstracts of the Eighth International Meeting on Boron Chemistry. 1993. P. 102.
26. **Teixidor F., Viñas C., Demonceau A., Núñez R.** Boron clusters: Do they receive the deserved interest? // Pure Appl. Chem. 2003. 75. P. 1305–1313.
27. **Teixidor F., Núñez R., I. Romero, Viñas C.** Icosahedral boron clusters: a perfect tool for the enhancement of polymer features // Chem. Soc. Rev. 2016. 45. P. 5147–5173.
28. **Virovets A.V., Vakulenko N.N., Volkov V.V., Podberezskaya N.V.** Crystal structure of di (1-n-dodecylpyridine) decahydro-closo-decaborate (2-) $(C_5H_5N\text{-}C_{12}H_{25})_2[B_{10}H_{10}]$ // Russ. J. Struct. Chem. 1994. 35,339.
29. **Zhizhin K.Yu., Zhdanov A.P., Kuznetsov N.T.** Derivatives ofcloso-decaborate anion $[B_{10}H_{10}]^{2-}$ withexo-polyhedral substituents // Russ. J. Inorg. Chem. 2010. 55. P. 2089.

Авдеева Варвара Владимировна,
д.х.н., в.н.с. Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,

тел.: +7 (495) 955-48-42, e-mail: avdeeva.varvara@mail.ru

Малинина Елена Анатольевна,
д.х.н., гл.н.с. Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,

тел.: +7 (495) 955-48-42,

Кузнецов Николай Тимофеевич,
академик РАН, зав. лаб. Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,

119991, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 31,
119991, Moscow, Leninsky prospect, 31
тел.: +7 (495) 952-39-22

УДК 620.181

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРА ФЛОРИ-ХАГГИНСА И ВЗАИМОСВЯЗИ МЕЖДУ ЕГО ЭНТАЛЬПИЙНОЙ И ЭНТРОПИЙНОЙ СОСТАВЛЯЮЩИМИ

А.Е. Чалых[1], В.К. Герасимов[1,2], У.В. Никулова[1]
[1] Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
[2] Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова

Рассмотрены и проанализированы температурные зависимости параметра Флори-Хаггинса для многочисленных систем полимер-полимер и полимер-растворитель. Получены численные значения энтальпийной и энтропийной составляющих. Выявлено наличие связи между этими величинами. Предложено уравнение, связывающее комбинаториальную и некомбинаториальную энтропию и параметры критической точки, которое может быть использовано при расчетах параметров критического состояния по фрагментам бинодальных кривых.

Ключевые слова: *смеси полимеров, растворы полимеров, диаграммы фазового состояния, термодинамика смешения, парные параметры взаимодействия, энтальпийная и энтропийная составляющая.*

TEMPERATURE DEPENDENCE OF FLORY-HAGGINS PARAMETER AND THE RELATIONSHIP BETWEEN ITS ENTHALPY AND ENTROPY CONSTITUENTS

A.E. Chalykh[1], V.K. Gerasimov[1,2], U.V. Nikulova[1]
[1] Institute of Physical Chemistry and electrochemistry. A.N. Frumkin RAS
[2] Russian economic University named after G.V. Plekhanov

The temperature dependences of the Flory-Huggins parameter for numerous polymer-polymer and polymer-solvent systems are considered and analyzed. Numerical values of enthalpy and entropy components are obtained. A connection between these values has been revealed. The equation linking combinatorial and non-combinatorial entropy and critical point parameters is proposed. It can be used to calculate critical state parameters from binodal curve fragments.

Keywords: *polymer blends, polymer solutions, phase state diagrams, mixing thermodynamics, pair interaction parameters, enthalpy and entropy components.*

Принято считать, что классическая теория Флори-Хаггинса [40, 45] верно предсказывает эволюцию растворимости компонентов с изменением температуры и их степени полимеризации. Она отличается простотой исходных посылок и аналитических выражений свободной энергии смешения Гиббса, уравнения спинодали, параметров критической точки:

$$\frac{\Delta G_m}{RT} = \frac{\varphi_1 \ln(\varphi_1)}{r_1} + \frac{\varphi_2 \ln(\varphi_2)}{r_2} + \chi\varphi_1\varphi_2 \qquad (1)$$

$$\frac{1}{r_1\varphi_1} + \frac{1}{r_2\varphi_2} - 2\chi = 0 \qquad (2)$$

$$\varphi_{1,крит} = \frac{\sqrt{r_2}}{\sqrt{r_1}+\sqrt{r_2}} \qquad (3)$$

$$\chi_{крит} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{r_1}} + \frac{1}{\sqrt{r_2}}\right)^2 \qquad (4)$$

где ΔG_m – свободная энергия смешения, R – универсальная газовая постоянная, T – температура, r – степень полимеризации полимера (в случае растворителя r_1=1), φ – объемная доля полимера в смеси, χ – парный параметр взаимодействия (параметр Флори-Хаггинса), $\varphi_{крит}$ и $\chi_{крит}$ – параметры, характеризующие критическую точку.

Впоследствии были предприняты многочисленные попытки более точно и полно сформулировать термодинамические закономерности смешения полимеров, реализовавшиеся в т.н. «новых теориях полимерных растворов» – новой теории Флори [41], новой теории Хаггинса [46], теории Пригожина-Паттерсона [17], теория Санчеса-Лакомба [54]. Наиболее полно эти работы были обобщены в [15, 16]. Скотт [72] и Томпа [77] распространили логику теории полимерных растворов Флори-Хаггинса на смеси полимеров и многокомпонентные полимерные системы. В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением только бинарных растворов или смесей полимеров.

Интересно, что в новых теориях были попытки ввести коэффициент *B*, характеризующий избыточную свободную энергию, в которой объединены теплоты смешения и другие некомбинаториальные эффекты (4). Но по сути подобный параметр эквивалентен χ (5):

$$\Delta G_{mix} = B\varphi_1\varphi_2 + RT\left[\frac{\rho_1\varphi_1\ln(\varphi_1)}{M_1} + \frac{\rho_2\varphi_2\ln(\varphi_2)}{M_2}\right] \quad (4)$$

$$\chi = \frac{BV_{\text{ref}}}{RT} \quad (5)$$

где *B* – плотность энергии бинарного взаимодействия, ρ, φ и *M* – плотность, объемная доля и молекулярный вес компонента, V_{ref} – объем давления, за который обычно принимается молярный объем одной повторяющейся единицы в системе (расчетах традиционно используют объем сравнения, равный 100 см^3/моль).

Анализ применения этих теорий к описанию фазовых равновесий в полимер-полимерных системах показал, что описательная и предсказательная сила новых теорий растворов полимеров не всегда превосходит первую сформулированную термодинамическую теорию растворов [16]. В настоящее время теория полимерных растворов Флори-Хаггинса сохраняет свою актуальность. Подтверждением этого является мнение И. Санчеса (автора одной из новых теорий полимерных растворов), высказанное в книге [15]: «Означает ли это, что последние достижения сместили модель ФХ с ее пьедестала в термодинамике полимерных растворов. Похоже, что ответом будет – нет. Модель ФХ не только упрочила свое положение, но можно думать, что она будет превалирующей в обозримом будущем».

Основой классической теории Флори-Хаггинса является параметр χ, который имеет принципиальное значение и определяет термодинамику смешения компонентов. Так, взаимодействие между сегментом полимера и молекулой растворителя, определяющее энтальпийную составляющую свободной энергии смешения, определяется как:

$$\chi = \frac{V}{RT}(\delta_1 - \delta_2)^2, \quad (6)$$

где δ – параметр растворимости компонента, который выражается через энергию испарения и мольный объем компонентов $\delta_i = \left(\frac{\Delta E_i}{V_i}\right)^{1/2}$ [8, 53].

Энергия испарения и мольный объем растворителей – величины экспериментально определяемые, тогда как для полимеров – расчетные, так как определить энергию испарения полимера экспериментально практически невозможно. Из такого представления параметра Флори-Хаггинса очевидно, что его температурная зависимость линейна относительно обратной температуры 1/T (K^{-1}) и исходит из начала координат.

В дальнейшем, совершенствуя теорию полимерных растворов, [42] парный параметр взаимодействия разделили на энтальпийную (χ_H) и энтропийную (χ_S) составляющие (7), связав их с избыточной энтальпией и энтропией смешения соответственно. При этом χ_H линейно зависит от обратной температуры, а χ_S постоянна [28].

$$\chi = \chi_H + \chi_S \text{ или } \chi = \frac{k_H}{T} + \chi_S. \quad (7)$$

Из литературы [49] известно и более сложное выражение для температурной зависимости параметра взаимодействия χ, который в теориях второго приближения обозначается как *g*:

$$g = g_{01} + \frac{g_{02}}{T} + g_{03}T + g_{04}\ln T. \quad (8)$$

где *g* – коэффициенты разложения, каждый из которых оказывает различное влияние. Так, например, g_{04} не очень чувствителен к температуре, а g_{03} связано с теплоемкостью и может играть заметную роль при приближении к критической точке жидкость-пар [11]. Коэффициенты g_{01} и g_{02} по физическому смыслу соответствуют χ_S и χ_H уравнения (7).

Критическую температуру ($T_{крит}$), также термодинамическую характеристику бинарной полимерной смеси можно получить, зная температурную зависимость χ или определить экспериментально, исследуя взаимную совместимость полимерных компонентов между собой или с растворителями.

В литературе не обсуждается вопрос о возможной взаимосвязи между энтальпийной и энтропийной составляющими параметра Флори-Хаггинса. Нам представлялось интересным прояснить этот вопрос.

СИСТЕМЫ ПОЛИМЕР-ПОЛИМЕР

В работе [7] был проведен термодинамический анализ аморфного расслоения бинарных полимер-полимерных систем (табл. 1) и получены температурные зависимости[1] параметра Флори-Хаггинса. Было показано, что в подавляющем большинстве случаев температурная зависимость χ имеет вид слабо выпуклой по отношению к оси температур кривой. Нелинейная зависимость парного параметра взаимодействия от обратной температуры позволяет получить температурные зависимости энтальпийной и энтропийной составляющих параметра Флори-Хаггинса. Численные значения χ_H и χ_S определяли численным дифференцированием зависимости $\chi\left(\frac{1}{T}\right)$ в каждой точке

[1] Здесь и далее под температурной зависимостью будем понимать зависимость от обратной абсолютной температуры, если иное не оговорено специально.

$$\left(\chi_H = \frac{\Delta\chi}{\Delta\left(1/T\right)} \times \frac{1}{T} = k_H \times \frac{1}{T} \text{ и } \chi_S = \chi - \chi_H\right).$$

В качестве примера на рис. 1 показана типичная температурная зависимость параметра Флори-Хаггинса системы ППГ – ПЭГ и его составляющих. Видно, что с увеличением температуры (приближение к критической точке) значения χ уменьшаются. Энтропийная составляющая не постоянна, а изменяется при изменении температуры, причем χ_H и χ_S ведут себя антибатно – χ_H растет, а χ_S падает.

Аналогичные зависимости были получены для полимер-полимерных систем, опубликованных в [1, 2, 3, 10, 12, 13, 18, 19, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 33, 34, 35, 38, 43, 44, 48, 55, 56, 57, 64, 65, 67, 70, 71].

Поскольку представленные на рис. 1 данные типичны, во всех исследованных случаях наблюдается антибатность изменения χ_H и χ_S с изменением температуры, следует сделать вывод о том, что энтальпийная и энтропийная составляющие параметра Флори-Хаггинса взаимозависимы. Построение зависимости $\chi_S - k_H$ (рис. 2) показывает хорошую линейную корреляцию. Этот эффект выявлен впервые для всех исследованных систем.

СИСТЕМЫ ПОЛИМЕР-РАСТВОРИТЕЛЬ

Аналогичному термодинамическому анализу подверглись системы полимер-растворитель, диаграммы для которых были заимствованы из работ [4, 5, 6, 9, 20, 21, 29, 30, 31, 32, 36, 37, 39, 47, 50, 51, 52, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 66, 68, 69, 73, 74, 75, 76, 78], опубликованных в [14] (табл. 2). Методика термодинамического анализа бинодальных кривых описана в [7].

Так же как для систем полимер-полимер, температурные зависимости параметра Флори-Хаггинса систем полимер-растворитель в подавляющем большинстве представляют собой слабо выпуклые кривые по отношению к температурной оси. Так же как и для систем полимер-полимер соблюдается линейная зависимость между k_H и χ_S. Т.е. выявленная взаимосвязь между энтропийной и энтальпийной составляющими χ является общей для всех бинарных полимерных систем.

Таким образом, для дальнейшего рассмотрения запишем линейную зависимость между k_H и χ_S в виде

$$\chi_S = A_1 k_H + A_0 \text{ или } \chi_S = A_1 \frac{\Delta\chi}{\Delta\left(1/T\right)} + A_0, \quad (9)$$

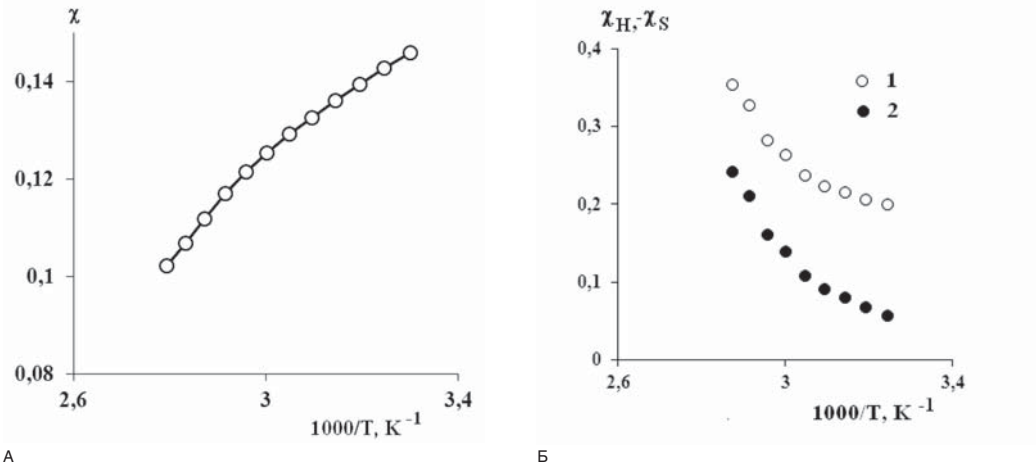
где A_0, A_1 – константы линейного уравнения.

Анализ полученного массива данных параметров A_0 и A_1 позволил найти корреляции между этими параметрами и термодинамическими характеристиками исследованных систем – параметрами критической точки.

На рис. 3, 4 показаны результаты сопоставления параметра A_1 уравнения (9) с критической температурой смешения для систем полимер-растворитель и полимер-полимер. Каждая точка на рисунках соответствует своей бинодальной кривой. Видно, что для систем полимер-растворитель наблюдается очень хорошая корреляция, для систем полимер-полимер корреляция несколько хуже, но тоже очевидна. Вероятно, это связано с тем, что критическую точку для полимер-полимерных систем экспериментально определить значительно сложнее.

С учетом показанных на рис. 3, 4 корреляций можно записать:

$$A_1 \approx -\frac{1}{T_{крит}}. \quad (10)$$



А Б

РИС. 1.

Температурная зависимость параметра Флори-Хаггинса (А) и его составляющих χ_H (1б) и χ_S (2б) для системы ППГ (1,025 кДа) – ПЭГ (1 кДа)

ТАБЛИЦА 1.

Исследованные системы полимер – полимер

№	Система (количество диаграмм)	Источник	№	Система (количество диаграмм)	Источник
1	Полистирол – полибутадиен (8)	[24, 67]	2	Поливинилметиловый эфир – полистирол (32)	[10, 33, 34, 35, 38, 43, 44, 48, 55, 56, 57, 64, 65, 70, 71]
3	Полипропиленгликоль – полиэтиленгликоль (6)	[24]	4	Полиметилметакрилат – полиэтиленгликоль (7)	[3, 19, 26]
5	Бутадиен-стирольный каучук – полистирол (10)	[24, 67]	6	Полистирол – полиметилметакрилат (4)	[1, 24]
7	Полиметилметакрилат – поливинилхлорид (5)	[27]	8	Полиэтилен – полидиметилсилоксан (3)	[2]
9	Полидиметилсилоксан – полидиэтилсилоксан (7)	[23, 18, 22]	10	Полиметилметакрилат – полипропиленгликоль (4)	[25]
11	Полибутен – полипропиленгликоль (10)	[13]	12	Полиэтиленгликоль – гидроксипропилцеллюлоза (5)	[12]
13	Сополимеры этилена с винилацетатом – полиэтилен (10)	[24]	14	Поливинилхлорид – сополимер этилена с винилацетатом (3)	[24]
15	Бутадиен-нитрильный каучук – поливинилхлорид (6)	[24, 2]	16	Сополимеры этилена с винилацетатом (7)	[24]
17	Бутадиен-стирольные каучуки (4)	[24]			

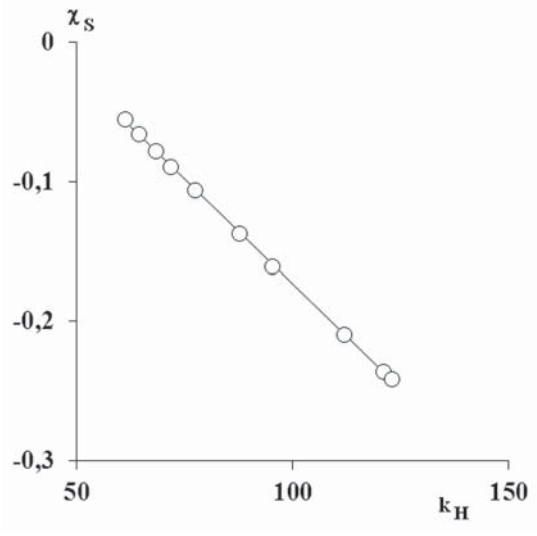


РИС. 2.

Зависимость χ_S от k_H для системы ППГ(1,025 кДа) – ПЭГ (1 кДа)

На рис. 5, 6 показаны результаты сопоставления параметра A_0 уравнения (9) и критического параметра Флори-Хаггинса. Видно, что и для систем полимер-растворитель, и для систем полимер-полимер наблюдается достаточно хорошая корреляция между этими параметрами.

Учитывая экспериментальные и расчетные ошибки, можно определить A_0 как:

$$A_0 \approx \chi_{крит}. \qquad (11)$$

С учетом уравнений (10) и (11) уравнение (9) можно выразить в виде:

$$\chi_S \approx -\frac{1}{T_{крит}} \times \frac{\Delta\chi}{\Delta(1/T)} + \chi_{крит}, \qquad (12)$$

а уравнение (7) в виде:

$$\chi \approx \frac{1}{T} \times \frac{\Delta\chi}{\Delta(1/T)} - \frac{1}{T_{крит}} \times \frac{\Delta\chi}{\Delta(1/T)} + \chi_{крит} \qquad (13)$$

или

$$\chi \approx \frac{\Delta\chi}{\Delta(1/T)}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{крит}}\right) + \chi_{крит} \qquad (14)$$

или

$$\left(\chi - \chi_{крит}\right) \approx \frac{\Delta\chi}{\Delta(1/T)}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{крит}}\right). \qquad (15)$$

Таким образом, в результате термодинамического анализа температурных зависимостей параметров Флори-Хаггинса различных систем полимер – растворитель и полимер – полимер можно сделать следующий выводы.

1. Взаимосвязь между энтальпийной и энтропийной составляющими параметра Флори-Хаггинса есть.

2. Температурная зависимость парного параметра взаимодействия несет в себе информацию о параметрах критической точки ($T_{крит}$, $\chi_{крит}$).

3. Линейная зависимость между температурным коэффициентом энтальпийной и энтропийной составляющими параметра Флори-Хаггинса позволяет

ТАБЛИЦА 2.

Исследованные системы полимер – растворитель[2]

№	Система (количество диаграмм)	Источник	№	Система (количество диаграмм)	Источник
1	Полихлорстирол – изопропилбензол (1)	[20]	2	Полихлорстирол – толуол (1)	[20]
3	Полихлорстирол – третбутилацетат (4)	[47]	4	Полихлорстирол – бутилкарбитол (2)	[47]
5	Полихлорстирол – изопропилацетат (4)	[47]	6	Полихлорстирол – изопропилбензоат (5)	[47]
7	Полихлорстирол – изопропилхлорацетат (3)	[47]	8	Полихлорстирол – метилхлорацетат (3)	[47]
9	Полихлорстирол – тетрахлорэтилен (3)	[47]	10	Полихлорстирол – тетрахлорметан (3)	[47]
11	Полихлорстирол – этилбензол (3)	[47]	12	Полихлорстирол – этилкарбитол (3)	[47]
13	Полихлорстирол – этилхлорацетат (3)	[47]	14	Полипропиленгликоль – вода (22)	[20, 5]
15	Полипропиленгликоль – гексан (4)	[6]	16	Полистирол – циклогексан (8)	[75, 76]
17	Полистирол – метилэтилкетон (10)	[30, 62]	18	Полистирол – этилциклогексан (2)	[51]
19	Полистирол – этилацетат (2)	[4]	20	Полистирол – циклопентан (9)	[29, 31]
21	Полистирол – метилацетат (1)	[52]	22	Полистирол – циклогексанол (4)	[75]
23	Полистирол – метилциклогексан (13)	[69, 73]	24	Полистирол – декалин (3)	[78]
25	Полистирол – октадекан (1)	[50]	26	Полистирол – пропилацетат (8)	[68]
27	Полистирол – изопропилацетат (10)	[68]	28	Полистирол – толуол (4)	[69]
29	Полистирол – гексан (4)	[76]	30	Полистирол – метилциклопентан (8)	[37]
31	Полистирол – диметилциклопентан (8)	[37]	32	Полистирол – бензол (2)	[31]
33	Полистирол – диэтиловый эфир (1)	[76]	34	Полиэтилен – октанол (5)	[60]
35	Полиэтилен - деканол (5)	[60]	36	Полиэтилен – додеканол (4)	[60]
37	Полиэтилен – третамилфенол (5)	[60]	38	Полиэтилен – анизол (5)	[60]
39	Полиэтилен – дифениловый эфир (16)	[60, 61, 63]	40	Полиэтилен – нонанол (1)	[60]
41	Полиэтилен – гексанол (1)	[60]	42	Полиэтилен – дифенил (5)	[60, 61]
43	Полиэтилен – бензил-фениловый эфир (1)	[60]	44	Полиэтилен – дифенилметан (7)	[60, 61]
45	Полиэтилен – третбутилфенол (1)	[60]	46	Полиэтилен – метоксинафталин (1)	[66]
47	Полиэтилен – бензилацетат (1)	[60]	48	Полиэтилен – бензилпропионат (1)	[60]
49	Полиэтилен – изоамилацетат (1)	[60]	50	Полиэтилен – циклогексанон (1)	[60]
51	Полиоксетан – циклогексан (4)	[36]	52	Полипентен – анизол (4)	[58]
53	Полипентен – дифенилметан (4)	[58]	54	Полипентен – дифениловый эфир (4)	[58]
55	Полиметоксистирол – третбутилбензол (4)	[66]	56	Полиизобутилен – диизобутилкетон (3)	[74]
57	Поливинилацетат – метанол (2)	[21]	58	Полибутен – анизол (4)	[59]
59	Полибутен – фенетол (3)	[59]	60	Полибутен – дифениловый эфир (8)	[59]
61	Полибутадиен – гептан (3)	[39]	62	Полибутадиен – гексан (4)	[39]
63	Полибутадиен – октан (3)	[39]	64	Полибутадиен – триметилбутан (1)	[39]
65	Полиакриловая кислота – диоксан (1)	[32]	66	Диацетат целлюлозы – тетрагидрофуран (4)	[9]
67	Триацетат целлюлозы – метиленхлорид (4)	[9]			

[2] Из термодинамического анализа исключали те диаграммы, температурная область которых располагалась выше температуры кипения растворителя и ниже температуры кристаллизации частично кристаллических полимеров.

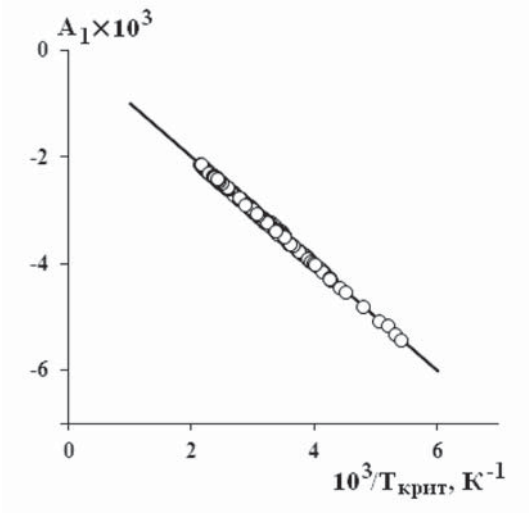


РИС. 3.

Зависимость параметра A_1 уравнения (9) от обратной критической температуры для всех исследованных систем полимер-растворитель. Угол наклона линии -1

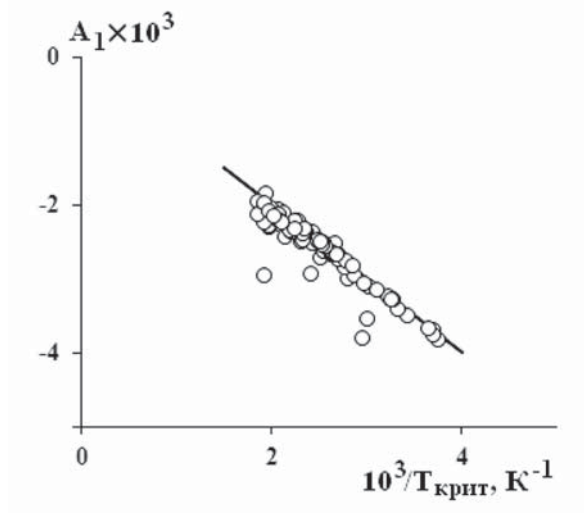


РИС. 4.

Зависимость параметра A_1 уравнения (9) от обратной критической температуры для всех исследованных систем полимер-полимер. Угол наклона линии -1

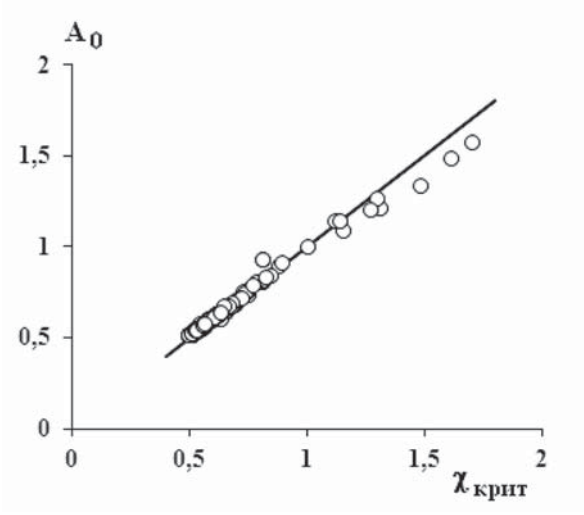


РИС. 5.

Зависимость параметра A_0 уравнения (9) от обратной критической температуры для всех исследованных систем полимер-растворитель. Угол наклона линии 1

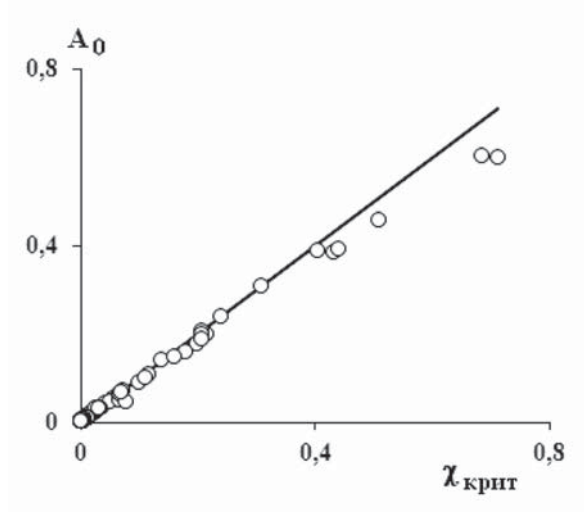


РИС. 6.

Зависимость параметра А0 уравнения (9) от обратной критической температуры для всех исследованных систем полимер-полимер. Угол наклона линии 1

получить эти параметры, что открывает возможность уточнения положения критической точки в температурно-концентрационном поле диаграммы фазового состояния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта №17-03-00197).

Литература

1. **Авгонов А., Чалых А.Е., Герасимов В.К.** Сб. статей «Структура и динамика молекулярных систем». Йошкар-Ола. 1998. Т. 1. С. 43–47.
2. **Авдеев Н.Н.** Дис...канд. хим. наук. М.: ИФХ АН СССР, 1990.
3. **Бурдин А.А., Тагер А.А.** Высокомолек. соед. Б, 1995. Т. 37. № 5. С. 850.
4. **Вшивков С.А., Комолова Н.А.** Высокомолек. соед. А. 1981. Т. 23. № 12. С. 2780–2787.

5. **Вшивков С.А., Тагер А.А.** Высокомолек. соед. 1980. Т. 22. № 2. С. 110–112.
6. **Вшивков С.А., Тагер А.А., Гайфуллина Н.Б.** Высокомолек. соед. 1976. Т. 18. № 1. С. 25–28.
7. **Герасимов В.К.** Дисс... докт. хим. наук. ИФХЭ РАН. М.: 2012.
8. **Гильдебранд Д.** Растворимость неэлектролитов. М.: ГОНТИ, 1938.
9. **Голобородько В.И., Ташмухамедов С.А., Усманов Х.У.** Высокомолек. соед. 1978. Т. 20. № 6. С. 1251–1258.
10. **Квей Т., Уэнг Т.** Полимерные смеси. Т. 1 Пол Д., Ньюмен С. ред. М.: Мир, 1981. С. 172.
11. **Кленин В.И.** Термодинамика систем с гибкоцепными полимерами. Саратов: Изд-во СГУ. 1995.
12. **Макарова В.В, Герасимов В.К., Терешин А.К., Чалых А.Е., Куличихин В.Г.** Высокомолек. соед. А. 2007. Т. 49. № 4. С. 663–-673.
13. **Нестеров А.Е.** Свойства растворов и смесей полимеров. Киев: Наукова думка, 1984. Т. 1.
14. **Нестеров А.Е.** Свойства растворов и смесей полимеров. Т. 1. Киев: Наукова думка, 1984.
15. Полимерные смеси. / Пер. с англ. под ред. В.Н. Кулезнева. СПб.: Научные основы и технологии, 2009.
16. Полимерные смеси / Пер. с англ. под ред. Ю.К. Годовского, А.П. Коробко. М.: Мир, 1981.
17. **Пригожин И.Р.** Молекулярная теория растворов. М.: Металлургия, 1990, 360 с.
18. **Раджабов Т.М.** Дис....канд. физ.-мат наук. М.: НИФХИ им. Л. Я. Карпова, 1990.
19. **Суворова А.И., Тюкова И.С., Хасанова А.Х., Надольский А.Л.** Высокомолек. соед. А. 2000. Т. 42. № 1. С. 35.
20. **Тагер А.А., Адамова Л.В., Вшивков С.А. и др.** Высокомолек. соед. 1982. Т. 24. № 10. С. 731–735.
21. **Тагер А.А., Аникеева А.А., Андреева В.М., Вшивков С.А.** Высокомолек. соед. Б. 1972. Т. 14. № 3. С. 231–235.
22. **Чайка Е.М., Чалых А.Е., Герасимов В.К., Дубовик И.И., Рабкина А.Ю., Завин Б.Г., Папков В.С.** Высокомолек. соед. А. 2005. Т. 47. № 2. С. 270–284.
23. **Чайка Е.М., Чалых А.Е., Герасимов В.К., Папков В.С.** Известия Академии наук. Серия химическая. 2003. № 6. С. 1268–1274.
24. **Чалых А.Е.** Диаграммы фазовых состояний полимерных систем. М.: Препринт ИФХ РАН. 1995. 76 с.
25. **Чалых А.Е., Герасимов В.К., Дементьева О.В.** Высокомолек. соед. 2002. Т. 44. № 3. С. 452–456.
26. **Чалых А.Е., Дементьева О.В., Герасимов В.К.** Высокомолек. соед. А. 1998. Т. 40. № 5. С. 815.
27. **Шамбилова Г.К.** Дисс... канд. хим. наук. М.: 1992. МИТХТ.
28. Энциклопедия полимеров. Т. 3. М.: Сов. энциклопедия, 1977. 1150 С.
29. **Allen G., Baker C.H.** Polymer. 1965. V. 6. № 4. P. 181–191.
30. **Baba Y., Fujita Y., Kagemoto A.** Macromol. Chem. 1973. B. 164. P. 349–351.
31. **Barrales-Rienda J.M., Galicia C.R., Freire J.J., Horta A.** Macromolecules. 1983. V. 16. № 11. P. 1707–1714.
32. **Barrales-Rienda J.M., Pepper D.C.** Polymer. 1967. V. 8. № 7. P. 337–349.
33. **Binder K.** Adv. in Polym. Sci.1994. V. 112. P. 181.
34. **Cheikh-Larbi F.B., Malone M.F., Winter H.H.** Macromolecules. 1988. V. 21. P. 3532.
35. **Chien Y.Y., Pearce E.M., Kwei T.K.** Macromolecules. 1988. V. 21. № 6. P. 1616.
36. **Chiu D.S., Takahashi Y., Mark J.E.** Polymer. 1976. V. 17. № 8. P. 670–672.
37. **Cowie J.M.G., McEwen I.J.** Polymer. 1984. V. 25. № 8. P. 1107–1111.
38. **Cowie J.M.G., Saeki S.** Polymer Bulletin. 1981. V. 6. P. 75.
39. **Delmag G., Saint-Romain P. de** Eur. Polym. J. 1974. V. 10. № 12. P. 1133–1140.
40. **Flory P.J.** Thermodynamics of High Polymer Solutions/ J. Chem. Phys. 1941. V. 9. № 3. P. 660.
41. **Flory P.J.** Principles of polymer chemistry. New-York: Cornell. univ. press. 1953. 594 p.
42. **Flory P.J.** Statistical mechanics of dilute polymer solutions // J. Chem. Phys. 1949. V. 17. № 7. P. 1347.
43. **Gelles R., Frank C.W.** Macromolecules, 1982, V. 15. P. 1486.
44. **Halary J.L, Ubrich J.M., Nunzi J.M., Monnerie L., Stein R.S.** Polymer. 1984. V. 25. P. 956.
45. **Huggins M.L.** Solutions of Long Chain Compounds/ J. Chem. Phys., 1941. V. 9. № 5. P. 440.
46. **Huggins M.L.** Physical chemistry of polymers. New-York: Interscience, 1958, 175 p.
47. **Izumi Y., Miyake Y.** Polym. J. 1972. V. 3. № 6. P. 647–662.
48. **Katsaros J.D., Malone M.F., Winter H.H.** Polym. Eng. and Sci. 1989. V. 29. № 20. P. 1434.
49. **Koningsveld R.** Adv. Col. Int. Sci. 1968. V. 2. P. 151.
50. **Koningsveld R.** Brit. Polym. J. 1975. V. 7. № 6. P. 435–466.
51. **Kratochvil J., Sedlacek B.** Brit. Polym. J. 1977. V. 9. № 3. P. 206–211.
52. **Kubota K. Abley K., Chu B.** Macromolecules. № 1. P. 137–143.
53. **Laar J.J. Van, Lorenz R.** Theorie der galvanischen Stromerzeugung kondensierter Systeme/ Z. anorg. und allg. Chem. 1925. B. 146. S. 42.
54. **Lacombe R.H., Sanchez I.C.** An elementary molecular theory of classical fluids. Pure fluids/ J. Phys Chem.,1976. V. 80. P. 2568.
55. **Mani S., Malone M.F., Winter H.H.** Macromole-

cules. 1992. V. 25. № 21. P. 5671.
56. **Mazich K.A., Carr S.H.** J. Appl. Phys. 1983. V. 54. № 10. P. 5511.
57. **McMaster L.P.** Macromolecules, 1973, V. 6. № 5. P. 760.
58. **Moraglio G., Gianotti G.** Eur. Polym. J. 1969. V. 5. № 6. P. 781–793.
59. **Moraglio G., Gianotti G., Zoppi F., Bonicelli U.** Eur. Polym. J. 1971. V. 7. № 4. P. 303–316.
60. **Nakajima A., Fujizawa H., Hamada F.** J. Polym. Sci. A-2. 1966. V. 4. № 3. 507–518.
61. **Nakajima A., Hamada F., Hayashi S.** J. Polym. Sci. C. 1966. № 15. P. 285–294.
62. **Nakajima A., Hamada F., Yasue K. et al.** Macromol. Chem. 1974. V. 175. № 1. P. 197–208.
63. **Nakano S.** J. Polym. Sci.: Polym. Phys. Ed. 1974. V. 12. № 7. P. 1499–1508.
64. **Nishi T., Kwei T.K.** Polymer. 1975. V. 16. P. 285.
65. **Nishi T., Wang T.T., Kwei T.K.** Macromolecules. 1975. V. 8. № 2. P. 227.
66. **Pizzoli M., Stea G., Ceccorulli G., Gechelle G.B.** Eur. Polym. J. 1970. V. 6. № 9. P. 1219–1225.
67. **Roe R.-J., Zin W.Ch.** Macromolecules, 1984, V. 17, № 2. P. 189.
68. **Saeki S., Konno S., Kuwahara N. et al.** Macromolecules. 1974. V. 7. № 4. P. 521–526.
69. **Saeki S., Kuwahara N., Konno S., Kaneko M.** Macromolecules. 1973. V. 6. № 2. P. 246–250.
70. **Santore M.M., Han C.C., McKenna G.B.** Macromolecules. 1992. V. 25. P. 3416.
71. **Sato T., Han C.C.** J. Chem. Phys. 1988. V. 88. № 3. P. 2057.
72. **Scott R.L.** The Thermodynamics of High Polymer Solutions. V. Phase Equilibria in the Ternary System: Polymer 1-Polymer 2-Solvent/ J. Chem. Phys. 1949. V. 17. № 2. P. 268.
73. **Shinozaki K., Van Tan T., Saito Y., Nose T.** Polymer. 1982. V. 23. № 5. P. 728–734.
74. **Shultz A.R., Flory P.J.** J. Amer. Chem. Soc. 1952. V. 74. № 17. P. 4760–4767.
75. **Shultz A.R., Flory P.J.** J. Amer. Chem. Soc. 1953. V. 75. № 13. P. 3888–3892.
76. **Slow K.S., Delmag G., Patterson D.** Macromolecules. 1972. V. 5. № 1. P. 29–34.
77. **Tompa H.** Polymer solutions. London: Butterworths, 1956. 325 p.
78. **Wolf B.A., Blaum G.** J. Polym. Sci.: Polym. Symp. 1977. № 61. P. 251–270.

Чалых Анатолий Евгеньевич,
д.х.н., профессор, г.н.с. Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,

Герасимов Владимир Константинович,
д.х.н., доцент, в.н.с. Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, в.н.с. Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова

Никулова Ульяна Владимировна,
к.х.н., с.н.с. Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,

119071, г. Москва, Ленинский пр., 31, к. 4.
119071, Moscow, Leninsky pr., 31, building 4.
e-mail: ulianan@rambler.ru

УДК 004.85

НЕЙРО-НЕЧЕТКИЕ МЕТОДЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ НЕФТЕНОСНЫХ ЗОН ПО КОМПЛЕКСНЫМ ГЕОФИЗИЧЕСКИМ, ГЕОХИМИЧЕСКИМ ДАННЫМ

С.В. Горбачев[1], В.Ф. Кузин[2], Ц. Цао[3], С. Бхаттачарья[4]

[1] Научно-исследовательский институт многопроцессорных вычислительных систем, Южный федеральный университет, Таганрог, Россия
[2] Российская инженерная академия, Москва, Россия
[3] Юго-Восточный университет, Нанкин, Китай
[4] Университет Христа, Бангалор, Индия

Представлены комплексные нейро-нечеткие методы обработки и анализа многомерной геологической информации, обеспечивающие интерактивную интерпретационную обработку сейсмического материала, а также комплексную его интерпретацию с другими геофизическими, геохимическими методами в ИКС «ИнформГео» в целях увеличения точности прогноза залежей нефти, газа.

Ключевые слова: *геофизические, геохимические данные, нефтяные месторождения, нейро-нечеткий анализ, прогноз.*

NEURO-FUZZY METHODS FOR FORECASTING OF OIL-BEARING ZONES BASED ON COMPLEX GEOPHYSICAL AND GEOCHEMICAL DATA

S.V. Gorbachev[1], V.F. Kuzin[2], J. Cao[3], S. Bhattacharyya[4]

[1] Research Institute of Multiprocessor Computing Systems, Southern Federal University, Taganrog, Russia
[2] Russian Academy of natural Sciences, Moscow, Russia
[3] Southeast University, Nanjing, China
[4] CHRIST University, Bengaluru, India

Complex neuro-fuzzy methods for processing and analyzing multidimensional geological information are presented, which provide interactive interpretation of seismic material and its complex interpretation with other geophysical and geochemical methods in the ICS «Informgeo» in order to increase the accuracy of forecasting oil and gas deposits.

Keywords: *geophysical, geochemical data, oil fields, neuro-fuzzy analysis, forecast.*

ВВЕДЕНИЕ

По мнению ведущих мировых экспертов, в настоящее время большое значение придается эффективной эксплуатации существующих месторождений, обеспеченной качественной интерпретацией нового и переинтерпретацией старого геологоразведочного материала. Любой геологический объект, начиная с нефтегазоносной провинции и кончая образцом породы, является сложно организованной системой. Такая система описывается большим числом характеристик, имеющих разную физическую природу и находящихся в сложных взаимосвязях друг с другом. Горные породы в зависимости от условий их образования и распространения обладают различным присущим только им минеральным составом, а также структурными и текстурными признаками. Породы характеризуются определенным комплексом физических свойств, изучение которых путем отбора керна возможно не во всех скважинах. В большинстве случаев керн отбирается не по всему интересующему нас интервалу, что обусловлено ограниченностью применения бурения с отбором керна в силу его высокой стоимости и трудозатрат, а также неполным выносом керна на поверхность. В тоже время, как правило, структурные особенности месторождений охарактеризованы сейсмической разведкой, а весь разрез продуктивных отложений данными геофизических исследований скважин (ГИС). Поэтому прогнозирование коллектора и типов пород по комплексу данных ГИС с дальнейшим комплексированием с данными сейсморазведки для построения согласованной геолого-геофизической модели месторождения, особенно важно для скважин, где отсутствует отбор керна или его вынос мал и непредставителен. На сегодняшний день такие прогнозные модели строятся опытными геофизиками-экспертами в результате комплексной интерпретации и

анализа различных полей параметров (геофизических, геохимических), их трансформант, структурного и сейсмического материала, комплекса данных геофизических исследований скважин и т.д. Модели строятся на основе математического и физического моделирования изучаемых процессов (решение прямых задач геофизики), методов статистического (корреляционного и дискриминантного) анализа, решения систем линейных петрофизических уравнений при интерпретации данных ГИС (обратная задача геофизики), анализа атрибутов сейсмического волнового поля и некоторых других линейно-статистических методов с учетом всего накопленного в этой области потенциала знаний [1]. Таких специалистов, как правило, немного, а построение моделей требует больших трудозатрат или не имеет корректного решения в случае наличия сложных нелинейных связей, не поддающихся строгой алгоритмизации. Чаще всего аналитик сталкивается с ситуацией, когда трудно сделать какие-либо четкие предположения относительно исследуемой задачи. Модель не известна и единственным источником сведений для ее построения является таблица экспериментальных данных типа "вход – выход", каждая строка которой содержит значения входных характеристик объекта и соответствующие им значения выходных характеристик. В результате интерпретаторы вынуждены использовать всякого рода эвристические или экспертные предположения и о выборе информативных признаков, и о классе моделей, и о параметрах выбранной модели, что не всегда приемлемо, особенно при моделировании сложно построенных коллекторов. В связи с чем, актуальным является автоматизация расчета комплексных прогнозных параметров в интеллектуальной картографической системе на основе методов, обладающих свойством адаптивности, обобщения, извлечения знаний и моделирования сложных нелинейных зависимостей в массивах данных [2].

МЕТОДЫ DATA MINING

В настоящее время компьютерные технологии автоматического интеллектуального, анализа данных переживают бурный расцвет. Это связано, главным образом, с потоком новых идей, исходящих из области компьютерных наук, образовавшихся на пересечении искусственного интеллекта, прикладной статистики и теории баз данных и обозначаемых как Data Mining (обнаружение знаний в базах данных). Этим термином сегодня обозначают процесс получения из "сырых" данных новой, потенциально полезной информации о предметной области. Появившийся термин Data Mining, введенный в 1989 году Григорием Пятецким-Шапиро, оказался удачным и приобрел в настоящее время высокую популярность. Доступность методов записи и хранения данных привели к бурному росту объемов хранимых данных. Объемы данных настолько внушительны, что человеку просто не по силам проанализировать их. Хотя необходимость проведения такого анализа вполне очевидна, ведь в этих "сырых данных" заключены знания, которые могут быть использованы при принятии решений. Алгоритмы, используемые в Data Mining, требуют большого количества вычислений. Раньше это являлось сдерживающим фактором широкого практического применения Data Mining, однако сегодняшний рост производительности современных процессоров снял остроту этой проблемы. Теперь за приемлемое время можно провести качественный анализ сотен тысяч и миллионов записей. Информация, найденная в процессе применения методов Data Mining, обычно нетривиальна и ранее неизвестна. Знания описывают новые связи между свойствами, предсказывают значения одних признаков на основе других и т.д. Найденные знания применимы и на новых данных с некоторой степенью достоверности. Полезность заключается в том, чтобы эти знания могли принести определенную выгоду при их применении. Процесс извлечения знаний из данных происходит по той же схеме, что и установление физических законов: сбор экспериментальных данных, организация их в виде таблиц и поиск такой схемы рассуждений, которая делает полученные результаты очевидными и дает возможность предсказать новые факты. При этом имеется ясное понимание того, что наши знания об анализируемом процессе, как и любом физическом явлении – это в какой то степени приближение. Фактически, термин Data Mining – это попытка узаконить физический подход, в отличие от математического, к решению задач анализа данных. Под понятием «физический подход» подразумевается такой подход, при котором аналитик готов к тому, что анализируемый процесс может оказаться трудно интерпретируемым и не поддающимся точному анализу с помощью строгих аналитических методов. Но можно все же получить хорошее представление о его поведении в различных обстоятельствах, подходя к задаче с различных точек зрения, руководствуясь знанием предметной области, опытом, интуицией и используя различные эвристические подходы. При этом аналитик движется от грубой модели ко все более точным представлениям об анализируемом процессе [3].

Методами Data Mining решаются задачи классификации, кластеризации, прогнозирования и т.д. Для решения данных задач используются различные методы и алгоритмы Data Mining. Ввиду того, что Data Mining развивалась и развивается на стыке таких дисциплин, как математическая статистика, теория информации, машинное обучение, теория баз данных, искусственный интеллект, вполне закономерно, что большинство алгоритмов и методов Data Mining были разработаны на основе различных методов из этих дисциплин. Большую популярность получили следующие методы Data Mining: нейронные сети, деревья решений, алгоритмы кластеризации, в том числе, и масштабируемые,

алгоритмы обнаружения ассоциативных связей между событиями и т.д. [4].

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ГЕОЛОГОРАЗВЕДКЕ

Применительно к геологоразведке углеводородов, основной целью которой является построение согласованной геолого-геофизической модели месторождения, дающей ясное представление о физических свойствах пласта-коллектора и вероятности наличия нефти (газа) в данной точке месторождения, С.В. Горбачев разработал в ИКС «ИнформГео» адаптивную нейросетевую методику расчета нелинейных зависимостей между входными (независимыми) и выходными (зависимыми) [5]. Как и биологический прототип, ИНС обладает следующим свойствами:

– адаптивное обучение;
– самоорганизация;
– вычисления в реальном времени;
– устойчивость к сбоям.

Таким образом, можно выделить ряд преимуществ использования нейронных сетей:

– возможно построение удовлетворительной модели на нейронных сетях даже в условиях неполноты данных;
– искусственные нейронные сети легко работают в распределенных системах с большой параллелизацией в силу своей природы;
– поскольку искусственные нейронные сети подстраивают свои весовые коэффициенты, основываясь на исходных данных, это помогает сделать выбор значимых входных параметров менее субъективным.

Одной из наиболее часто встречающихся проблем, встающих перед учеными различных специальностей при комплексной интерпретации разнородных данных, является проблема построения новых объектов – зон до того на карте или разрезе не существовавших, т.е. участков территорий, однородных в смысле некоторого критерия или группы критериев. В этом смысле задача сводится к проблеме классификации, которая заключается в разбиении многомерного признакового пространства переменных на классы принадлежности или подобия тому или другому эталону и нахождении, таким образом, зависимости между признаковым пространством переменных, описывающих поведение объекта (класса), и самим объектом (классом). Применение методов интеллектуального анализа данных, в частности нейронных сетей, для решения задачи классификации позволит, во-первых учитывать первичные полевые данные, которые могут быть статистически непредставительны, во-вторых, автоматизировать процесс расчета комплексного прогнозного параметра путем обучения искусственной нейронной сети на основе околоскважинной (разведочной) информации, и, в-третьих, решить обратную задачу – ранжировать применяемые геофизические методы по уровню значимости, что в конечном итоге должно привести к сокращению временных и материальных затрат на интерпретацию полевых данных. Другими словами, появляется возможность проводить быстрый эмпирически обоснованный экспресс-анализ каротажных данных по новым скважинам и выявлению аномальных зон в сейсмическом разрезе и потенциальных полях.

НЕЙРО-НЕЧЕТКИЕ МЕТОДЫ

Для решения задачи кластеризации в разработанной нейросетевой методике используются самоорганизующиеся сети Кохонена на основе неконтролируемого обучения (рис. 1).

При таком обучении обучающее множество состоит лишь из значений входных переменных, в процессе обучения нет сравнивания выходов нейронов с эталонными значениями. Можно сказать, что такая сеть учится понимать структуру данных.

Для повышения точности и надежности кластеризации в случае сложных пересекающихся кластеров в данной методике используются принципы совмещения нейросетевого обучения с нечеткими методами.

Архитектура адаптивной нечеткой кластеризующей сети Кохонена (АНКСК) приведена на рис. 2 и содержит два слоя: слой Кохонена, в котором определяются центры кластеров и слой вычисления принадлежностей.

Следует отметить, что выходной слой подключается к уже обученной нейронной сети Кохонена и используется непосредственно в обработке входных примеров. Таким образом, данная нейросеть может работать в режиме как четкой, так и нечеткой кластеризации – в зависимости от характера обрабатываемых данных.

Наборы входных данных $x(k) = (x_1(k), ..., x_n(k))$, (здесь k=1,..., N имеет смысл номера точки на обрабатываемом месторождении) с рецепторного (нулевого) слоя последовательно подаются на нейроны слоя Кохонена N_j^k, имеющего топологию кристаллической

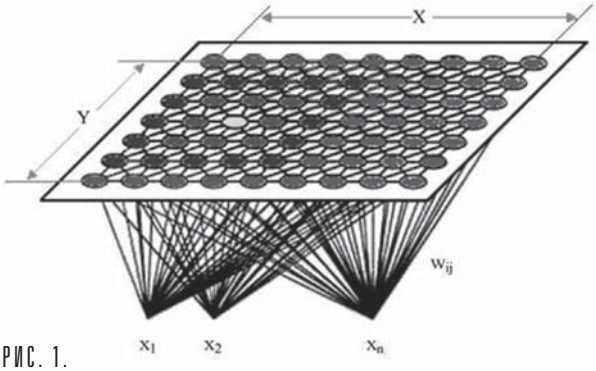


РИС. 1.
Топология двумерной карты Кохонена

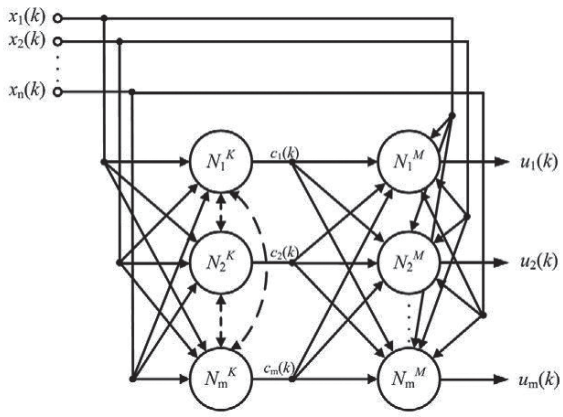


РИС.2.
Архитектура адаптивной нечеткой кластеризующей сети Кохонена

решетки. Настраиваемые синаптические веса $c_{ji}(k)$, j=1,..., m; i=1,..., n определяют центроиды m пересекающихся кластеров $c_j(k) = (\ c_{j1}(k),..., c_{ji}(k),..., c_{jn}(k)\ )$, соответствующие m "лучшим" центрам кластеров.

При отсутствии четко выраженной границы между соседними кластерами использование нечеткой кластеризации представляется более предпочтительным. Поэтому, добавив к слою Кохонена выходной слой нечеткой кластеризации, нейроны которого N_j^M вычисляют уровни принадлежности $u(k) = (\ u_1(k), ..., u_n(k)\ )$ текущего примера к j-му кластеру, и отключив латеральные связи в слое Кохонена (на рис. 2 показаны пунктиром), получим архитектуру адаптивной нечеткой кластеризующей сети Кохонена.

АЛГОРИТМ ОБУЧЕНИЯ СЛОЯ КОХОНЕНА В РЕЖИМЕ ЧЕТКОЙ КЛАСТЕРИЗАЦИИ

В режиме четкой кластеризации нейроны на входных примерах учатся их распределению и топологии. Первоначально нейроны занимают свое физическое положение на двумерной решетке согласно определенной топологии, которая фиксирует, какие из нейронов являются соседями нейрона-победителя.

Функция окрестности может принимать различные формы, такие как квадрат или шестиугольник. Во время обучения и нейрон-победитель, и все нейроны в пределах указанной окрестности обновляются по правилу Кохонена, которое изменяет веса таких нейронов ближе к входному вектору:

$$w_{ij}(k+1) = w_{ij}(k) + \alpha(\mathrm{k})\,\mathrm{f}_{ij}(k)(x(k) - w_{ij}(k)),$$

где $\alpha(\mathrm{k}) \in (0,1)$ – изменяющийся во времени коэффициент усиления, называемый скоростью обучения (обычно выбирают α = 1 на первой итерации, постепенно уменьшая в процессе обучения до нуля); $f_{ij}(k)$ – монотонно убывающая функция расстояния ("соседства") между i-м и j-м нейронами с местоположениями r_i и r_j соответственно:

$$f_{ij}(k) = f(\|r_i - r_j\|, k) = \mathrm{f(d,k)} = \mathrm{f(d,}\sigma),$$

где r_i и r_j – векторы, определяющие положение нейронов i и j в решетке.

При принятой метрике $\mathrm{d} = \| r_i - r_j \|$ функция $f_{ij}(\mathrm{k})$ с ростом времени k стремится к нулю. На практике вместо параметра времени k используют параметр расстояния σ, задающий величину области «соседства» и уменьшающийся с течением времени до нуля. Выбор функции $f_{ij}(k)$ также влияет на величины весов всех нейронов в слое. Очевидно, что для нейрона-победителя с:

$$f_c(\|r_i - r_j\|) = \mathrm{f}_c(0) = 1.$$

Можно отметить два последовательных и различных этапа обучения.

Первый этап обучения – этап упорядочения, который наносит на карту векторы весов так, чтобы произвольным образом представить поверхность распределения во входном пространстве: цель состоит в том, чтобы аппроксимировать форму изображения, предварительно обработанную функциями фильтрации. Карта весов, первоначально характеризуемая однородным распределением, в конце этапа упорядочения деформируется вследствие различий в геолого-геофизических данных (рис. 3).

Заключительный этап обучения – этап точной настройки, во время которого окрестность каждого нейрона включает только самого себя: практически, каждый входной вектор вызывает обновление только весов нейрона-победителя, при этом используется медленное уменьшение скорости обучения, без изме-

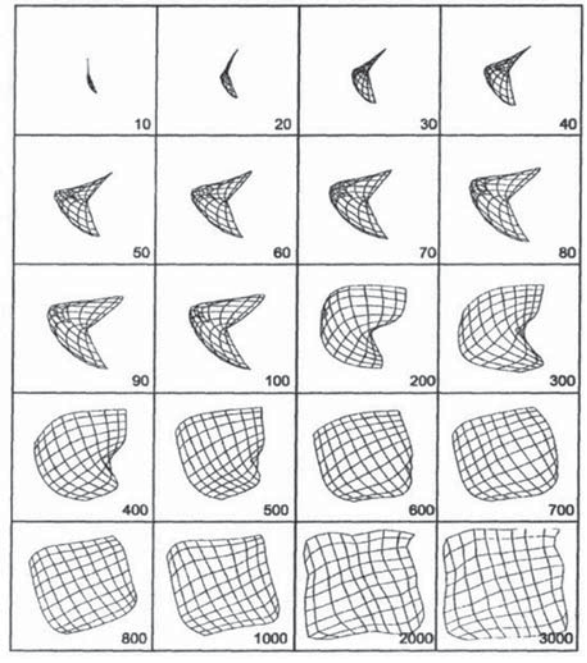


РИС. 3.
Этап упорядочения карты Кохонена

нения упорядоченной структуры сетки, достигнутой на предыдущем этапе.

АЛГОРИТМ ОБУЧЕНИЯ СЛОЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПРИНАДЛЕЖНОСТЕЙ В РЕЖИМЕ НЕЧЕТКОЙ КЛАСТЕРИЗАЦИИ

В классе процедур нечеткой кластеризации наиболее строгими с математической точки зрения являются алгоритмы, основанные на целевых функциях и решающие задачу их оптимизации при тех или иных априорных предположениях. Наиболее распространенным здесь является вероятностный подход, основанный на минимизации критерия (целевой функции):

$$E(u_j, w_j) = \sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{m} u_j^{\beta} \left\| x(k) - w_j \right\|^2 \qquad (1)$$

при ограничениях:

$$\sum_{j=1}^{m} u_j(k) = 1, 0 \le \sum_{k=1}^{N} u_j(k) \le N, \qquad (2)$$

где $u_j(k)$.; ∈ (0,1); β – неотрицательный параметр фаззикации (фаззификатор), определяющий размытость границ между кластерами; w_j – вектор весов слоя Кохонена; k=1,..., N.

Результатом кластеризации является ($N x m$) – матрица $U = \{u_j(k)\}$, называемая матрицей нечеткого разбиения. Заметим, что поскольку элементы матрицы U могут рассматриваться как вероятности гипотез принадлежности векторов данных определенным кластерам, то процедуры, порождаемые минимизацией (1) при ограничениях (2), называются вероятностными алгоритмами нечеткой кластеризации.

Вводя функцию Лагранжа:

$$L(u_j(k), w_j, \lambda(k)) = \sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{m} u_j^{\beta}(k) \left\| x(k) - w_j \right\|^2 +,$$
$$+ \sum_{k=1}^{N} \lambda(k)\left(\sum_{j=1}^{m} u_j(k) - 1\right))$$

(здесь $\{\lambda(k)\}_{k=1}^{N}$ – вектор-функция Лагранжа, зависящая от массива переменных) и решая систему уравнений Каруша – Куна – Таккера, несложно получить искомое решение в виде:

$$u_j(k) = \frac{\left(\left\| x(k) - w_j \right\|^2\right)^{\frac{1}{1-\beta}}}{\sum_{l=1}^{m}\left(\left\| x(k) - w_l \right\|^2\right)^{\frac{1}{1-\beta}}}, \; w_j =$$
$$= \frac{\sum_{k=1}^{N} u_j^{\beta}(k) x(k)}{\sum_{k=1}^{N} u_j^{\beta}(k)}, \lambda(k) =$$
$$= -\left(\left(\sum_{l=1}^{m} \beta \left\| x(k) - w_l \right\|^2\right)^{\frac{1}{1-\beta}}\right)^{1-\beta}$$

совпадающее при β=2 с алгоритмом нечетких С – средних Бездека:

$$u_j(k) = \frac{\left\| x(k) - w_j \right\|^{-2}}{\sum_{l=1}^{m}\left\| x(k) - w_l \right\|^{-2}}, \; w_j = \frac{\sum_{k=1}^{N} u_j^2(k) x(k)}{\sum_{k=1}^{N} u_j^2(k)}$$

Использование полученных формул подразумевает, что вся выборка, подлежащая кластеризации и содержащая N наблюдений, задана заранее и не может изменяться в процессе обработки.

РАСПОЗНАВАНИЕ НЕФТЕНОСНЫХ ЗОН В ИКС «ИНФОРМГЕО»

Многие отечественные геофизики уже оценили высокую эффективность применения интеллектуальных алгоритмов анализа данных. Например, С.В. Горбачев разработал и применил нейро-нечеткую методику для распознавания нефтеносных и «пустых» зон по комплексу геофизических и геохимических параметров в ИКС «ИнформГео» [5]. Результаты исследований показывают, что даже простейший многослойный персептрон с одним скрытым слоем обеспечивает корректное решение поставленной задачи с вероятностью в 2 раза, превышающей традиционные в геофизике методы линейно-статистического анализа с помощью дискриминантных функций. По этой методике проведены исследования по комплексированию геофизических и геохимических полей с прогнозом нефтеносности на Южно-Черемшанском нефтяном месторождении. Достоверность полученных научных прогнозов подтверждена бурением скважин №№ 105, 106, 107, 112, 225, 232, давших промышленные притоки нефти, а также на Олимпийском куполовидном поднятии и южной периклинали Болтной структуры. Прогнозные зоны нефтеносности, рассчитанные в ИКС «ИнформГео», согласуются с экспертными заключениями, а также коррелируют с прогнозными зонами, полученными независимо в системах «Интерсейс» на основе спектрально-энергетического анализа временного разреза и «Геосейс» на основе фазочастотного анализа сейсмических сигналов [6]. По полученному прогнозу были разработаны рекомендации к планированию глубокого бурения скважин на Олимпийском куполовидном поднятии (рис. 4).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для повышения точности и геологической эффективности прогноза залежей нефти в ИКС «ИнформГео» разработаны комплексные нейро-нечеткие методы обработки и анализа многомерной геологической информации. Использование данных программных средств обеспечивает интерактивную интерпретационную обработку сейсмического материала, а также комплексную его интерпретацию с другими геофи-

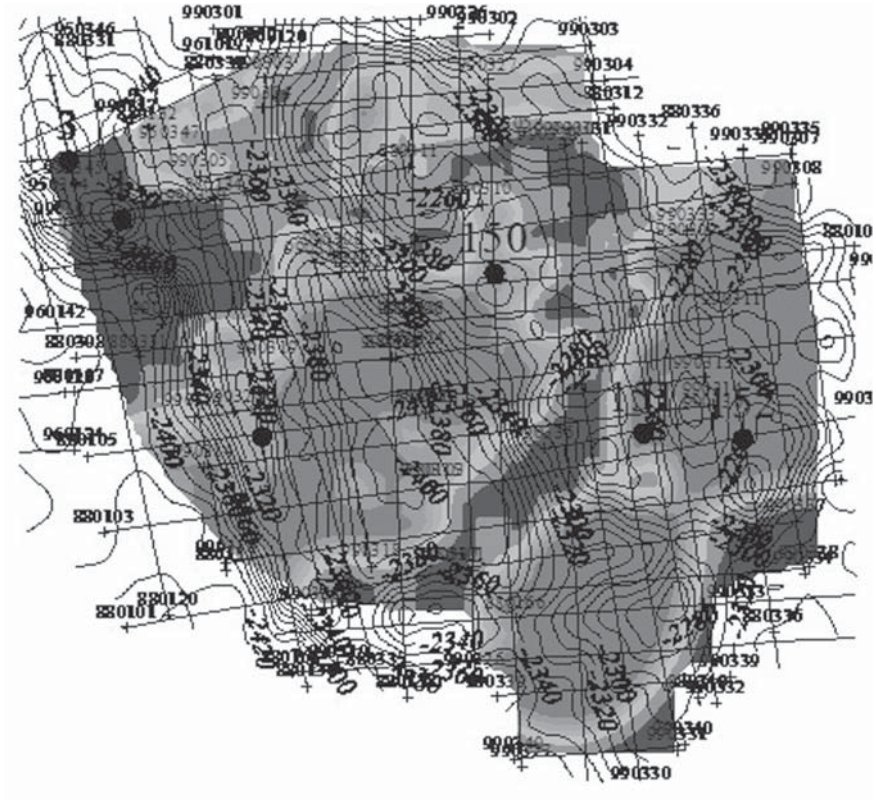


РИС.4.
Карта комплексного прогнозного параметра Олимпийского куполовидного поднятия и южной периклинали Болтной структуры

зическими, геохимическими методами на ПЭВМ, оформление отчетного картографического материала в соответствии с принятыми стандартами. Предложенные методы не только рассчитывают параметры центров и ширины функций принадлежности, но и автоматически решают вопрос о виде выходных функций принадлежности, используемых при нечеткой классификации объектов.

Продолжением работ может стать решение задачи получения знаний о причинно-следственных соотношениях между входными и выходными переменными, что позволит объяснить механизм получения прогнозных зон нефтеносности в явном виде и является в настоящее время очень актуальным.

Литература

1. **Алексеев Ф.Н., Ростовцев В.Н., Паровинчак М.С.** Новые возможности повышения эффективности геологоразведочных работ на нефть и газ. Томск: Изд-во ТГУ, 1997. 300 с.
2. **Горбачев С.В., Сырямкин В.И., Рудаков И.Б.** Распознавание сложнопостроенных залежей нефти, газа на основе нейро-нечетких портретов. Saarbrucken: LAMBERT Academic Publishing, 2013, 183 с.
3. **Горбачев С.В., Рудаков И.Б.** Нейросетевые технологии поиска полезных ископаемых // Журнал «Известия высших учебных заведений. Физика». 2013. №10/2. С. 16–17.
4. **Гилев С.Е., Коченов Д.А., Миркес Е.М., Россиев Д.А.** Контрастирование. Оценка значимости параметров, оптимизация их значений и их интерпретация в нейронных сетях // Нейроинформатика и ее приложения: Материалы III Всеросийского семинара. КГТУ. Красноярск, 1995. С. 124–129.
5. **Горбачев С.В., Гафуров О.М.** Интеллектуальная картографическая система «ИнформГео»: опыт использования нейроинформационных технологий // Материалы VIII Всероссийского семинара «Нейроинформатика и ее приложения». КГТУ. Красноярск, 2000. С. 146–148.
6. **Соболев И.С., Рихванов Л.П.** Прогнозирование и поиски месторождений нефти и газа радиогеохимическими методами // Геология нефти и газа. 1999. № 3. С. 18–27.

Горбачев Сергей Викторович,
к.т.н., с.н.с. НИИ МВС, Южный федеральный университет,

347928, г.Таганрог, Ростовская обл., ул.Чехова, 2
Chekhov Street, 2, Taganrog, Russia
тел.: +7(8634) 315-941, e-mail: spp03@sibmail.com

Кузин Виктор Федорович,
д.т.н., профессор, д. чл. РИА, МАМР, МАН ВШ

115093, г.Москва, ул.Люсиновская, 36/50,
Lusinovskaya st., 36/50, Moscow, Russia
тел.: +7(495) 954-26-11, e-mail: vfkuzin@mail.ru

Цзиньде Цао,
доктор наук, Заслуженный профессор, декан математической школы Юго-Восточного университета Китая, директор Лаборатории сетевого коллективного интеллекта провинции Цзянсу, Китай,

№ 2, SEU Road, Jiangning District, Nanjing 211189, China
тел.: +86-25-52090588 (O), e-mail: jdcao@seu.edu.cn

Сиддхарта Бхаттачарья
доктор наук, профессор, департамент компьютерных наук и инженерии, Университет Христа, Бангалор, Индия

Block IV, Room No. 487, Hosur Rd Nagar, S. G. Palya, Ben galuru Karnataka 560 029, India
тел.: (91) 9830354195,
e-mail: dr.siddhartha.bhattacharyya@gmail.com

*Научные статьи по итогам молодежного конкурса «**Технические и инженерные науки**» на соискание премии имени академика А.И. Берга:*

УДК 621.396.664

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС АНАЛИЗА СИГНАЛОВ И ПОСТАНОВКИ ПОМЕХ

Н.А. Бочаров, М.И. Вернигор, П.В. Еремеев, Д.О. Мельников
АО «Центральный научно-исследовательский радиотехнический институт имени академика А.И. Берга»

В данной статье рассматривается построение и реализация радиотехнического комплекса, предназначенного для проверки функционирования и оценки помехозащищенности радиолокационных комплексов с целью повышения их эффективности. Приведен состав и принцип работы комплекса.

Ключевые слова: *радиолокационные комплексы, РЛС, помехозащищенность, помехи.*

HARDWARE AND SOFTWARE COMPLEX FOR SIGNAL ANALYSIS AND JAMMING

N.F. Bocharov, M.I. Vernigor, P.V. Eremeev, D.O. Melnikov
«Central Scientific-Research Radio Engineering Institute named after academic A. I. Berg»

This article discusses the construction and implementation of a radio-technical complex designed to test the functioning and assess the noise immunity of radar systems in order to increase their efficiency. The composition and operating principle of the complex are presented.

Keywords: *radar systems, radar, noise immunity, interference.*

ВВЕДЕНИЕ

Развитие авиации, наземных средств обеспечения полетов и систем противовоздушной обороны предъявляет все более высокие требования к объему, качеству и своевременности их информационного обеспечения, наиболее важную роль в котором играют радиолокационные комплексы (далее – РЛК) различного назначения, в частности, РЛС обнаружения и сопровождения воздушных целей.

Одной из важнейших характеристик эффективности современных РЛК является их помехозащищенность. Вопросы, связанные с помехозащищенностью РЛК, рассматриваются в современной радиолокации как одни из наиболее актуальных и перспективных [2–5]. При решении задач помехозащищенности РЛК важное значение имеют вопросы анализа надежности функционирования РЛК в условиях действия различных помех как техногенного, так и антропогенного характера. Результаты оценки помехоустойчивости могут использоваться как база для определения опасных видов помех, их параметров, а также способов и приемов создания. С другой стороны, результаты этих исследований необходимы при разработке мер помехозащищенности РЛС. Таким образом, вопросы анализа помехоустойчивости РЛС имеют ключевое значение с точки зрения разработки как мер помехозащищенности, так и мер помехового подавления РЛК.

Потребности практики испытаний на эффективность и помехозащищенность РЛК обусловливают необходимость разработки специализированного аппаратного и программного обеспечения. Для решения задачи был разработан программно-аппаратный комплекс анализа сигналов и постановки помех (далее – комплекс ПАКАСиПП), принцип построения и описание которого представлены в данной статье.

КОМПЛЕКС ПАКАСиПП

Комплекс ПАКАСиПП конструктивно выполнен в виде двух блоков под 19” стойку, компоновка блоков выполнена по модульной структуре, присоединительные разъемы расположены на лицевой панели, разъемы электропитания расположены на задней панели, предусмотрена система принудительного охлаждения. Токопотребление комплекса осуществляется от источника постоянного тока 5В, 35А. Диапазон мощности входных сигналов от минус 40 дБмВт до 0 дБмВт. Мощность выходного сигнала регулируется в диапазоне от минус 30 дБмВт до 0 дБмВт.

Комплекс ПАКАСиПП предназначен для:

– создания сложной помеховой обстановки РЛК без применения реальных боевых постановщиков помех;

– обеспечения испытаний любых РЛК на помехозащищенность в рабочем диапазоне частот комплекса ПАКАСиПП;

– подготовки расчета РЛК к ведению боевой работы в условиях воздействия преднамеренных помех, создаваемых комплексом ПАКАСиПП.

Структурная схема комплекса ПАКАСиПП представлена на рис. 1.

В состав комплекса ПАКАСиПП входят следующие устройства:

– входное и выходное устройства автоматической регулировки усиления (далее – АРУ), предназначенные для регулировки уровней сигналов.

– приемное устройство, предназначенное для преобразования СВЧ сигнала, принятого в диапазоне рабочих частот, в сигнал промежуточной частоты (далее – ПЧ);

– передающее устройство, предназначенное для преобразования СВЧ сигнала ПЧ в СВЧ сигнал диапазона рабочих частот;

– устройство анализа сигналов и формирования помех (далее – устройство АСиФП), предназначенное для цифровой обработки сигналов, а также управления комплексом ПАКАСиПП;

– автоматизированное рабочее место (далее – АРМ), предназначенное для осуществления работ с комплексом ПАКАСиПП;

– устройство внешнего управления (далее – устройство ВУ), предназначенное для сопряжения комплекса ПАКАСиПП с АРМ;

Подключение комплекса ПАКАСиПП к РЛК осуществляется по коаксиальному кабелю СВЧ.

Преимущества комплекса ПАКАСиПП:

– создание сложной помеховой обстановки;

– гибкое моделирование помеховой обстановки;

– возможность обработки восьми сигналов одновременно;

– мгновенная полоса обработки сигнала до 2 ГГц;

– высокая точность проведения анализа сигналов.

РАБОТА ПРИЕМНЫХ И ПЕРЕДАЮЩИХ УСТРОЙСТВ

Обработка сигналов, принятых в рабочем диапазоне частот, проводится по принципу двойного преобразования частоты [1]. В приемном тракте входной СВЧ сигнал поступает на преселектор, который отсекает вторые и последующие гармоники входного сигнала, после чего производится первое преобразование с переносом на первую ПЧ. Сигналом гетеродина первого преобразования является синтезатор, построенный на комбинации четырех опорных частот. Далее с помощью двух частот гетеродина происходит второе преобразование с переносом на вторую ПЧ, после чего сигнал усиливается, фильтруется и поступает в устройство АСиФП на цифровую обработку.

В передающем тракте второй промежуточный сигнал, после цифровой обработки, фильтруется и преобразуется в первую ПЧ. Последующим преобразованием первая ПЧ преобразуется в выходной СВЧ сигнал, который фильтруется выходным преселектором и усиливается.

УСТРОЙСТВО АСиФП

Цифровую обработку сигналов осуществляет устройство АСиФП, в состав которого входят устройство центрального процессора (далее – устройство ЦП), обеспечивающее управление работой комплекса ПАКАСиПП, и устройство цифровой радиочастотной памяти (далее – устройство УЦРЧП), в основе которого лежит микросхема СБИС 1879ВМ3 [6] – быстродействующий программируемый контрол-

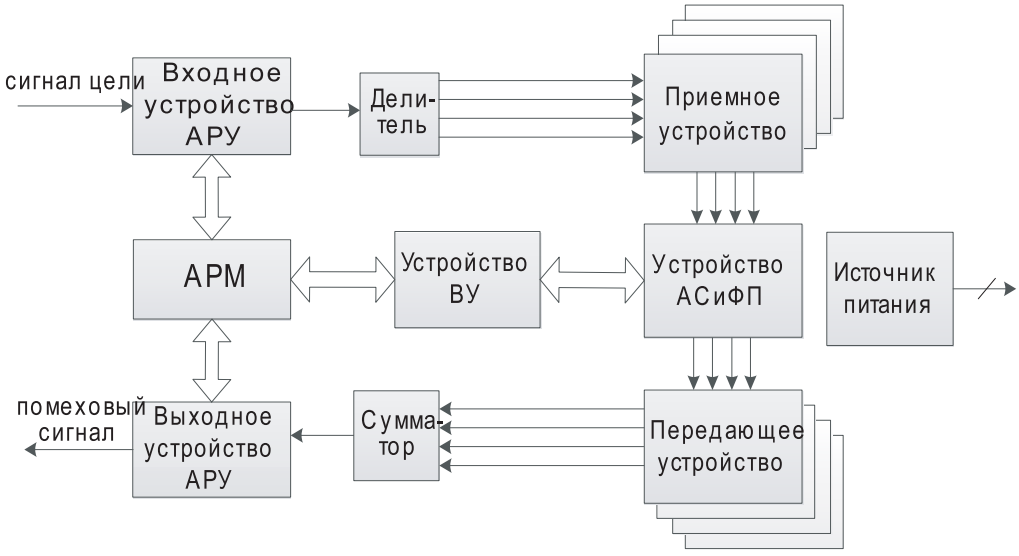


РИС. 1.
Структурная схема комплекса ПАКАСиПП

лер со встроенными аналого-цифровыми и цифро-аналоговыми преобразователями. Структурная схема устройства представлена на рис. 2.

Устройство АСиФП проводит анализ по каждому принятому сигналу, измеряет параметры и выдает информацию о параметрах (частота, длительность, период следования, амплитуда, время прихода сигнала), создает и сохраняет цифровые копии квадратурных составляющих принятых сигналов, из которых формирует помеховый сигнал требуемого вида для автоматического выбора оптимальных ответных сигналов, проводит выработку решения на исполнение алгоритма работы комплекса ПАКАСиПП. После того, как произошло обнаружение сигнала и его анализ, принимается решение на создание помехи, после чего происходит генерация помехи, осуществляется цифровая запись принимаемого сигнала и воспроизведение его фрагментов. Воспроизведение записанного фрагмента сигнала, например, отдельного его импульса, может повторяться многократно. Именно таким образом реализуется создание имитационных помех по скорости и дальности. Параллельно с записью копии может осуществляться анализ других поступающих на вход комплекса ПАКАСиПП сигналов, что позволяет адаптироваться к сигнальной ситуации.

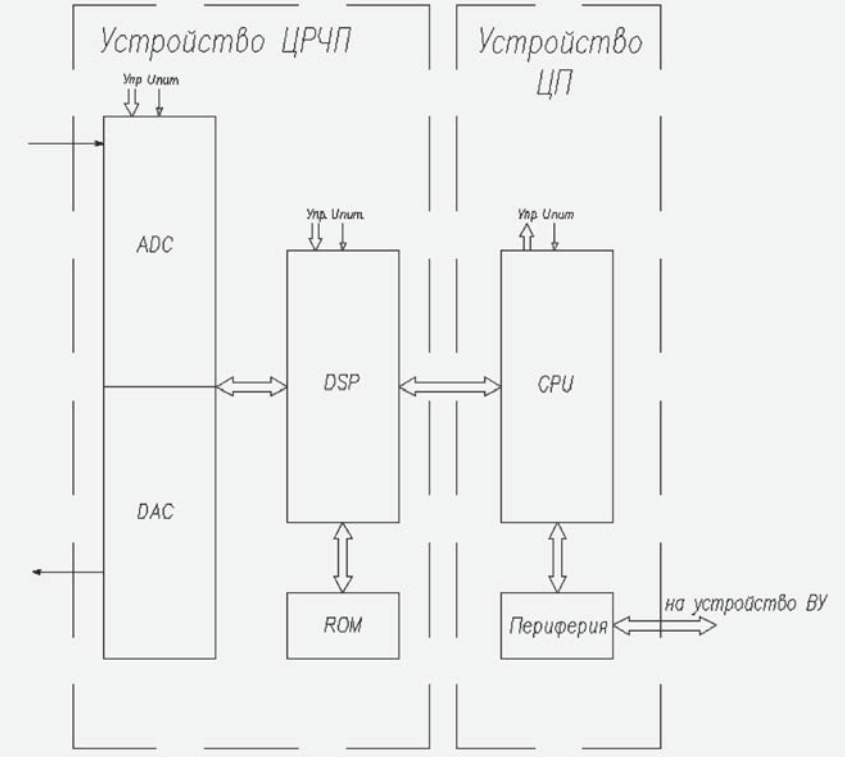


РИС. 2.
Структурная схема устройства АСиФП

АРМ и СПО

Для реализации всех функций комплекса ПАКАСиПП предназначено АРМ, в состав которого входят ПЭВМ и специализированное программное обеспечение (далее – СПО). АРМ функционально связано со всеми устройствами комплекса ПАКАСиПП через устройство ВУ, преобразующее последовательный интерфейс в параллельный дискретный, необходимый для высокоскоростного обмена информацией.

Для обеспечения работы комплекса ПАКАСиПП и управления режимами его работы используется СПО. С помощью СПО проводится анализ сигналов и формирование помех, определяется очередность обслуживания наиболее опасных сигналов.

В СПО предусмотрены несколько режимов работы:

– режим «Анализ», предназначен для работы в полном объеме в соответствии с реальными входными сигнальными данными, см. рис. 3;

– режим «Генерация сигналов», предназначен для работы со сценарием сигнальной обстановки, сформированным программой, см. рис. 4.

– режим «Журнал работы», предназначен для просмотра результатов работы.

В верхней части основного окна программы расположен диагностический индикатор «ПАКАСиПП», сообщающий о состоянии подключения комплекса ПАКАСиПП к АРМ. Если комплекс не подключен, индикатор серый, подключен – зеленый. Под полем диагностического индикатора расположены регуляторы управления устройствами АРУ («Вх. АРУ, дБ», «Вых. АРУ, дБ»). Под регуляторами расположены вкладки со встроенными режимами работы комплекса ПАКАСиПП: «Анализ», «Генерация сигналов», «Журнал работы».

Для работы в режиме «Анализ» необходимо получить параметры входного сигнала нажатием кнопки «Анализ», расположенной в нижней части основного окна программы. Данные анализа будут появляться в центральной части основного окна программы. Для завершения анализа необходимо нажать кнопку «Стоп», расположенную в нижней части окна программы, и перейти к настройке выходного сигнала. Для этого необходимо выбрать строку, соответствующую входному сигналу, и в открывшейся вкладке с параметрами выходного сигнала

установить переключатель «Включить ответный сигнал». После установки данного переключателя строка, соответствующая принятому сигналу, изменит свой цвет на зеленый. Одновременно можно выбрать не более восьми входных сигналов.

После этого необходимо выбрать тип выходного сигнала в разделе «Тип помехи» с помощью переключателей. На третьем этапе в разделе «Параметры помехи» необходимо установить численные значения параметров выходного сигнала, при этом набор параметров изменяется в зависимости от выбранного типа выходного сигнала. После выбора параметров выходного сигнала для излучения его в эфир необходимо нажать кнопку «Старт» в нижней части экранной формы. Излучение будет продолжаться до тех пор, пока не будет нажата кнопка «Стоп».

Комплекс ПАКАСиПП формирует следующие типы помех:

– гребенка из пяти случайных доплеровских частот;

– увод по скорости гребенки из пяти доплеровских частот;

– медленно изменяющаяся хаотическая импульсная помеха;

– быстро изменяющаяся хаотическая импульсная помеха;

– быстро изменяющаяся хаотическая ответная импульсная помеха с сопряженным уводом по дальности и скорости;

– ответная импульсная многократная;

– ответная шумовая высокочастотная;

– ответная прицельная шумовая помеха, сопряженная с уводом по дальности;

– ложные метки, уводящие по дальности.

Отличие режима «Генерация сигналов» от режима «Автопоиск» состоит в том, что не нужно проводить анализ сигнальной обстановки в эфире, можно сразу запустить излучение выходного сигнала, заранее настроив его параметры. Для настройки параметров выходного сигнала в режиме «Генерация сигналов» необходимо выбрать тип сигнала в разделе «Тип сигнала» и установить численные значения параметров сигнала в разделе «Параметры сигнала», при этом набор параметров изменяется в зависимости от выбранного типа выходного сигнала. После выбора параметров выходного сигнала для излучения его в эфир необходимо нажать кнопку «Старт» в нижней части экранной формы. Излучение будет продолжаться, пока не будет нажата кнопка «Стоп».

Режим «Журнал работы» предназначен для просмотра результатов работы, содержит все данные о входных сигналах и ответных помехах.

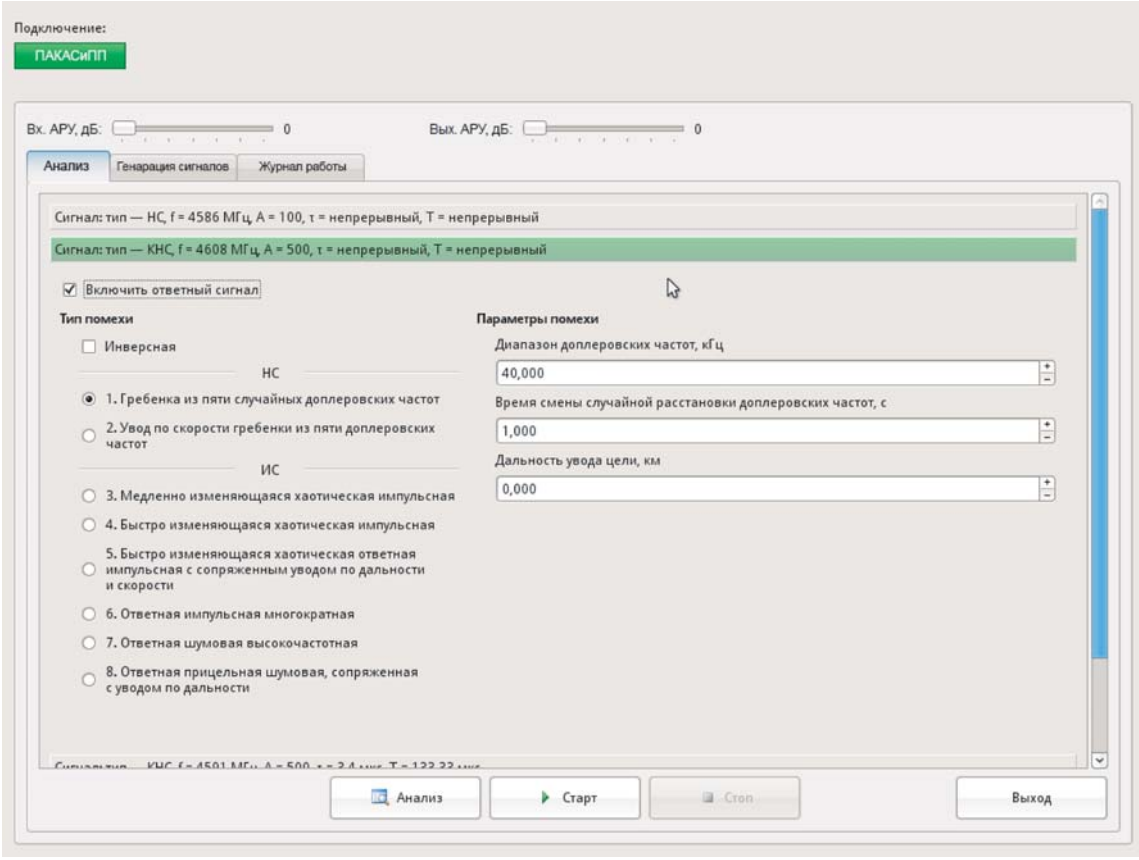


РИС. 3.
Форма главного окна программы в режиме «Анализ»

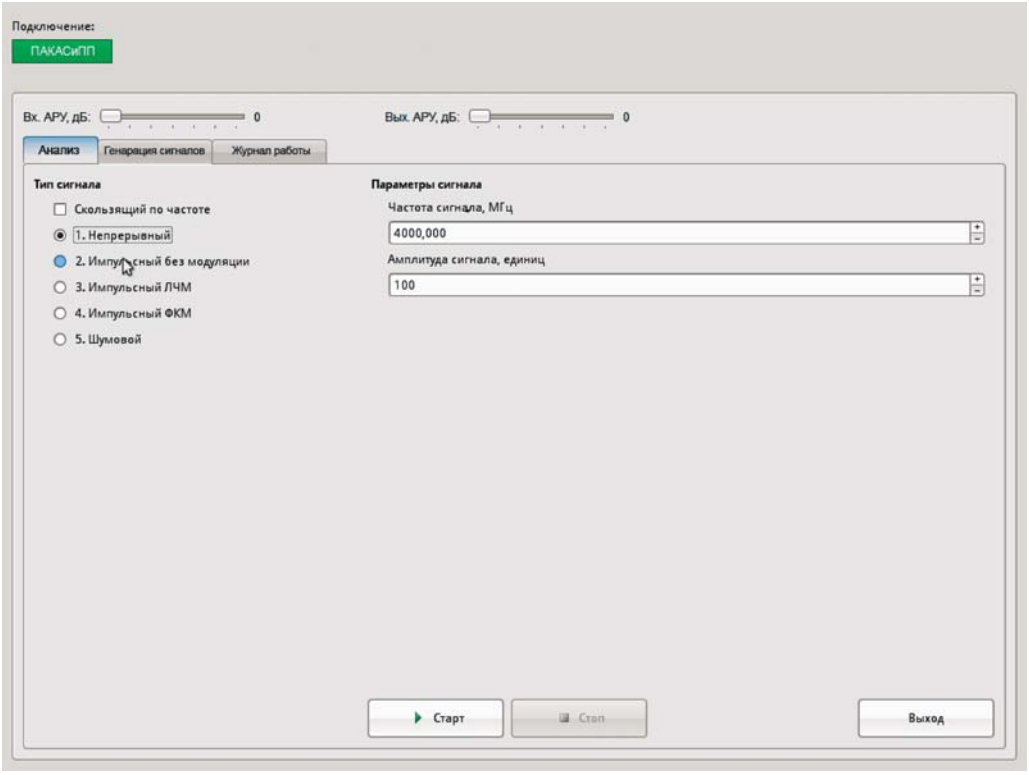


РИС. 4.
Форма главного окна программы в режиме «Анализ»

ВЫВОДЫ

Разработанный программно-аппаратный комплекс анализа сигналов и постановки помех является широкофункциональным, адаптивным и экономически выгодным средством повышения помехозащищенности РЛК. Эффективность и работоспособность комплекса подтверждена экспериментальной работой с модернизированным бортовым радиолокатором.

Благодаря выбранной модульной конструкции комплекс может быть быстро модернизирован под требования Заказчика, такие как увеличение частотного и динамического диапазонов, повышения выходной мощности, расширения мгновенной полосы обработки сигналов, введения дополнительной цифровой фильтрации и формирования новых помех.

Литература

1. **Бакулев П.А.** Радиолокационные системы. Учебник для вузов. М.: Радиотехника, 2004.
2. **Ворошилов В.А., Лянин И.С.** Защита радиолокационных станций от преднамеренных помех // Зарубежная радиоэлектроника. 1990. № 4. С. 3–22.
3. **Канащенков А.И., Меркулов В.И., Самарин О.Ф.** Облик перспективных бортовых радиолокационных систем. Возможности и ограничения. М.: ИПРЖР, 2002.
4. **Меркулов В.И., Чернов В.С. и др.** Защита радиолокационных систем от помех. Состояние и тенденции развития / под ред. Канащенкова А.И., Меркулова В.И. М.: Радиотехника, 2003.
5. URL: http://www.sciteclibrary.ru./rus/catalog/paaes/604.
6. Микросхема интегральная 1879ВМ3 (DSM) техническое описание. ЮФКВ 431268 001 ТО1 К. М.: НТЦ «Модуль», 2003.

Бочаров Николай Александрович,
аспирант, инженер 3 категории АО «ЦНИРТИ им. академика А. И. Берга»
e-mail: bocharov_1941@mail.ru

Вернигор Мария Игоревна,
специалист, ведущий инженер.АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»,

Еремеев Павел Владимирович,
аспирант, заместитель начальника отдела АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»

Мельников Денис Олегович,
специалист, инженер 3 категории АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга», E-mail: d89686106775@gmail.com

107078, г. Москва, ул. Новая Басманная, д. 20, стр. 9
107078, Moscow, st. Novaya Basmannaya, 20, bldg. 9
e-mail: d89686106775@gmail.com

УДК 528.8.044.2

СОЗДАНИЕ ДВУХДИАПАЗОННОГО РАДИОЛОКАТОРА

А.О. Славянский
АО «Научный центр прикладной электродинамики»

Целью проекта являлось создание бортового многофункционального двухдиапазонного радиолокатора для дистанционного зондирования и получения радиолокационных изображений подстилающей поверхности с различных видов летательных аппаратов.
По результатам были разработаны, изготовлены и испытаны макетные образцы радиолокационной станции с синтезированной апертурой (РСА) различных диапазонов частот. Разработано программно-алгоритмическое обеспечение обработки и построения РЛИ, в том числе с возможностью реализации в режиме реального времени на борту носителя. Создан опытный образец двухдиапазонного бортового радиолокатора.
Ключевые слова: *радиолокация, радиолокационное изображение, алгоритм цифровой обработки сигнала, радиолокационная станция с синтезированной апертурой.*

DEVELOPMENT OF A DUAL-BAND RADAR

A. O. Slavyansky
JSC «Scientific center of applied electrodynamics»

The aim of the project was to create onboard equipment for a dual-band radar for remote sensing and obtaining a radar underlying surface from various types of aircraft.
Based on the results, samples were developed, samples of a synthetic aperture radar (SAR) of various frequency ranges were manufactured and tested. The software and algorithmic support for processing and constructing radar images has been developed, including with the implementation in real time on board. A prototype of a dual-band airborne radar has been created.
Keywords: *radar, radar image, digital signal processing algorithm, synthetic-aperture radar.*

ВВЕДЕНИЕ

Технология радиолокации синтезированной апертуры (РСА) широко применяется для получения изображений поверхности Земли с использованием летательных аппаратов (ЛА) разного типа. Основным достоинством перед оптическими методами съемки является всепогодность и круглосуточность наблюдения. Недостатками этой технологии являются относительная сложность и дороговизна аппаратуры и алгоритмов.

В настоящее время многочисленные специалисты разных стран [1] ведут постоянные работы по улучшению как разрешающей способности РСА, так и методов обработки радиолокационных изображений (РЛИ) для их представления оператору. Современным перспективным и практически важным направлением являются системы РСА авиационного базирования с возможностью одновременной работы в нескольких диапазонах и с сигналами с различной поляризацией.

Предлагаемая работа посвящена описанию разработанного программно-алгоритмического обеспечения, а также изготовленных и испытанных прототипов и опытного образца бортового многофункционального двухдиапазонного радиолокатора.

АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ РЛИ НА БОРТУ ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА

Широко известны способы построения радиолокационного изображения по информации, накапливаемой на борту носителя РСА. При этом на борту производится запись, обнаружение, первичная обработка информации, сжатие и передача данных на базовую станцию для последующего построения РЛИ. Известны способы построения РЛИ и на борту РСА, но в режиме буферизации коротких сигналов-откликов зондирующих импульсов без реализации потоковой временной обработки в режиме реального времени.

Целью разработки встроенных алгоритмов обработки являлось обеспечение возможности получения РЛИ, в отличие от аналогов, в режиме жесткого реального времени с требуемым разрешением на борту атмосферных и внеатмосферных летательных аппаратов.

Указанная цель в ходе проведенных исследований была достигнута за счет того, что обработка откликов зондирующих линейно частотно-модулированных (ЛЧМ) сигналов от объектов производится во временной области на высокой (до 100 МГц) скорости с применением программируемых логических интегральных схем (ПЛИС) в составе систем-на-кристалле аппаратного блока.

Обнаружение сигнала-отклика от объекта производится по результатам расчета в ПЛИС автокорреляционной функции, где в качестве опорной функции используется представление зондирующего импульса во временной области. Использование ПЛИС позволяет обеспечить распараллеливание вычислительных процессов, возможность работы со сверхвысокочастотными сигналами (частота дискретизации ЦАП – 2,2 ГГц, АЦП – 1,1ГГц) и, как следствие, получения РЛИ с разрешением до 0,5 м в X-диапазоне частот, до 2 м – в L-диапазоне.

Конвейерная обработка, реализованная в ПЛИС и включающая в себя сжатие по дальности t и сжатие по азимуту циклов зондирования n, позволяет обеспечить работу системы в режиме жесткого реального времени и высокую (до 30 Мб/с) скорость передачи выходных данных – строк радиолокационного изображения для последующей визуализации.

Разработанный алгоритм является гибко настраиваемым за счет возможности реконфигурации реализующего его встроенного программного обеспечения как до запуска, так и во время работы устройства, что обеспечивает возможность применения устройства при зондировании земной поверхности с атмосферных и внеатмосферных летательных аппаратов на различных дистанциях зондирования для частотно-модулированных и частотно-манипулированных сигналов.

В случае применения радиолокатора в качестве устройства для излучения и регистрации отраженного зондирующего импульса с последующей передачей записанных радиоголограмм в комплекс вторичной обработки разработано программно-алгоритмическое обеспечение (схема алгоритма представлена на рис. 1), применяющее фильтровый подход, в рамках которого используются современные и достаточно эффективные модификации алгоритмов частотного масштабирования и дальность-Доплер. Для повышения разрешающей способности по координатам азимут-дальность используется расширение спектра сигнала за счет доплеровского набега фазы (частоты) в сечении сигнала по азимутальной координате движения ЛА и за счет ЛЧМ зондирующих сигналов в сечении по наклонной дальности. Корреляционная (согласованная) обработка комплексной огибающей принимаемого сигнала в этих сечениях обеспечивает сжатие сигналов от элементарных отражателей поверхности по обеим координатам. При этом предполагается, что траектория движения носителя линейна и постоянна скорость движения. Однако на интервале синтезирования апертуры антенны имеются отклонения по высоте и скорости, обусловленные турбулентностью атмосферы. Такие смещения вносят искажения в фазовый портрет и значения времени задержки сигнала от целей, что, в конечном счете, искажает РЛИ. Если параметры движения носителя известны, целесообразно их использовать для коррекции РЛИ.

ОПИСАНИЕ ПРОТОТИПОВ УСТРОЙСТВА

В ходе работы были разработаны макетные образцы радиолокационной станции с синтезированной апертурой (РСА) X- и L-диапазонов, предназначенные для дистанционного зондирования и получения радиолокационных изображений подстилающей поверхности непосредственно на борту носителя РСА.

РСА реализует следующие функции:

- формирование зондирующих сигналов в X- и L-диапазонах частот;
- прием, оцифровка и запоминание отраженных от подстилающей поверхности сигналов;
- обработка сигналов на борту [2]: сжатие по дальности и азимуту во временной области, построение радиолокационных изображений местности;
- передача всех видов данных, полученных на борту, на внешний энергонезависимый накопитель со скоростью до 30 Мб/с.

В состав РСА входит аппаратный блок и программное обеспечение РСА.

Аппаратный блок предназначен для формирования зондирующих сигналов в X- и L-диапазоне частот, приема, оцифровки и запоминания отраженных от подстилающей поверхности сигналов.

Работа РСА обеспечивается встроенным ПО РСА, в состав которого входят:

- процессорная система-на-кристалле (СнК). На ней реализована ассиметричная мультипроцессорность (AMP):
  - CPU0 – ПО, работающее в операционной системе Linux;
  - CPU1 – ПО, работающее без операционной системы (bare-metal);
- программируемая логика (ПЛИС, FPGA) – ПО встроенной ПЛИС СнК Zynq ;
- ПО контроллера USB CYUSB3014;
- специальная клиентская программа для управления работой блока со стороны персонального компьютера (ПК) во время испытаний.

Процесс сбора и обработки данных для формирования радиолокационного изображения включает следующие уровни:

- цикл наблюдения – последовательность из генерации зондирующего импульса, сбора оцифрованных замеров сигнала-отклика и обработки полученных сигналов;
- сеанс наблюдения – последовательность заданного количества циклов наблюдения с одинаковыми параметрами;
- программа наблюдения – последовательность сеансов наблюдения с заданными для каждого индивидуальными параметрами.

Параметры уровней сбора и обработки данных могут быть заданы из пользовательской программы или записаны в конфигурационные файлы, которые могут быть изменены в текстовом редакторе, что обе-

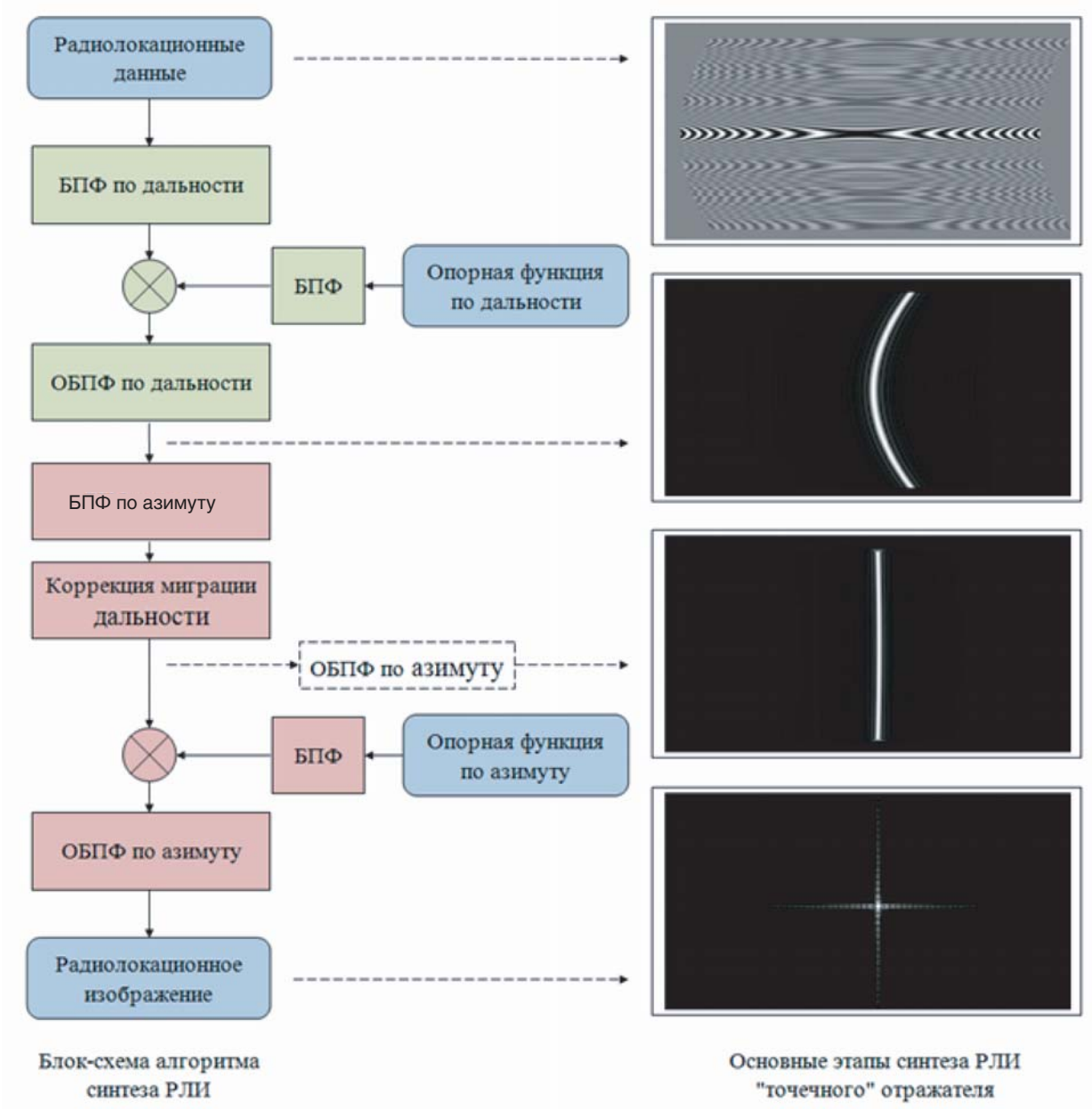


РИС. 1.
Схема алгоритма построения РЛИ с помощью комплекса вторичной обработки

спечивает возможность оперативного изменения режимов работы РСА.

В рамках цикла наблюдения производится:

– генерация кодовых последовательностей зондирующих импульсов с ЛЧМ и передача этих последовательностей на ЦАП для формирования аналоговых ЛЧМ-импульсов напряжения;
– считывание первичных данных – оцифрованных отраженных сигналов с выхода АЦП;
– сжатие по дальности первичных данных – обработка записанных отраженных сигналов корреляционными методами анализа во временной области;
– сжатие по азимуту – получение радиолокационного изображения;
– сохранение результатов во встроенной памяти СнК для последующей передачи на внешнее запоминающее устройство.

Указанные операции производятся во встроенных модулях обработки информации, реализованных на ПЛИС, с тактовой частотой обработки от 100 МГц.

ОПИСАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИСПЫТАНИЙ ПРОТОТИПОВ

Разработанные макетные образцы РСА X- и L-диа-

пазонов были испытаны в натурных условиях с целью подтверждения заявленных характеристик и отработки программно-алгоритмического обеспечения.

Так совместно с представителями Тихоокеанского флота ВМФ РФ были проведены испытания бортовой радиолокационной станции с синтезированной апертурой РСА-L на борту малогабаритного БПЛА «Археон» производства АО «НЦ ПЭ» для определения координат и идентификации кораблей различных типов в сложных метеоусловиях в зоне от бухты Патрокл до бухты Аякс г. Владивостока.

По результатам испытаний была подтверждена практическая возможность идентификации кораблей и определения уровня волнения морской поверхности на получаемых РЛИ (рис. 2).

Совместно с представителями ФГУП «ЦЭНКИ» был проведен эксперимент по проверке возможностей радиолокационной станции с синтезированной апертурой РСА-L и РСА-X для определения координат точек падения отделяющихся частей ракет космического назначения (ОЧ РКН) «Союз-2» в районе падения № 981 с применением вертолета Ми-8Т при запуске КА «Метеор-М» № 2-2 с космодрома «Восточный».

В результате летных испытаний по поиску фрагментов ОЧ РКН с использованием аппаратуры РСА-X были получены более детальные в сравнении с РСА-L радиолокационные изображения (рисунок 3), позволяющие выполнить обнаружение фрагментов ОЧ РКН только на открытых участках местности.

Использование же аппаратуры РСА-L с обработкой сигналов различных типов поляризации позволило рекогносцировать фрагменты ОЧ РКН внутри очага пожара. На рис. 4 представлены результаты комбинированной двухполяризационной съемки, по результатам которой получены РЛИ с разрешаемыми фрагментами ОЧ РКН.

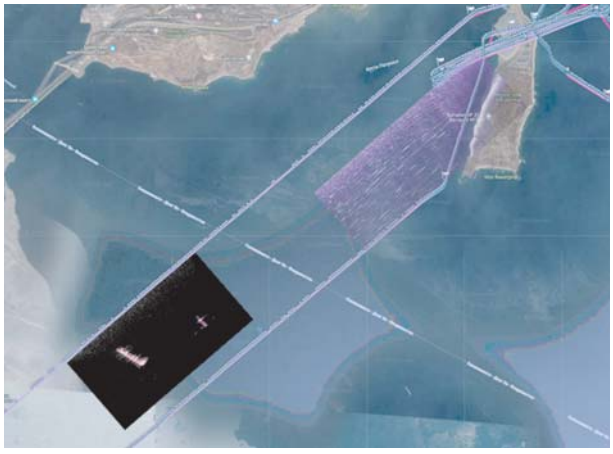


РИС. 2.

Идентификации кораблей и определения уровня волнения морской поверхности

Описание бортового многофункционального двухдиапазонного радиолокатора

По результатам изготовления и испытаний макетных образцов РСА X- и L-диапазонов было принято решение о создании бортового многофункционального двухдиапазонного радиолокатора, в состав которого должны входить:

- антенная система в виде двух фазированных антенных решеток;
- аппаратный блок, состоящий из:
  - корпуса,
  - двух приемо-передающих плат X-диапазона,
  - двух приемо-передающих плат L-диапазона,
  - платы блока цифровой обработки,
  - платы вторичного источника питания,
  - накопителя,
  - комплекта соединительных кабелей.
- плата БЦО, состоящая из:
  - аналого-цифровых преобразователей,
  - цифро-аналоговых преобразователей,
  - системы-на-кристалле,
  - микроконтроллеров обмена информацией с накопителем, бортовым оборудованием и бортовой аппаратурой передачи информации.

На данный момент создан и проходит отладку опытный двухканальный радиолокатор со следующими характеристиками:

- диапазоны частот
  - L: 1215 - 1290 МГц;
  - X: 9,3-9,45 ГГц
- высота полета – 300–5000 м;
- разрешающая способность радиолокационных изображений:
  - L: 2 м × 2 м,
  - X: 1 м × 1 м;
- диапазон градаций яркости изображения – не менее 30 дБ;
- радиометрическая чувствительность по фону – не хуже минус 20 дБ;
- тип антенны: синфазная двухполяризационная антенная решетка;

РИС. 3.

Радиолокационное изображение участка местности вблизи аэропорта г. Зея, полученное с РСА X-диапазона

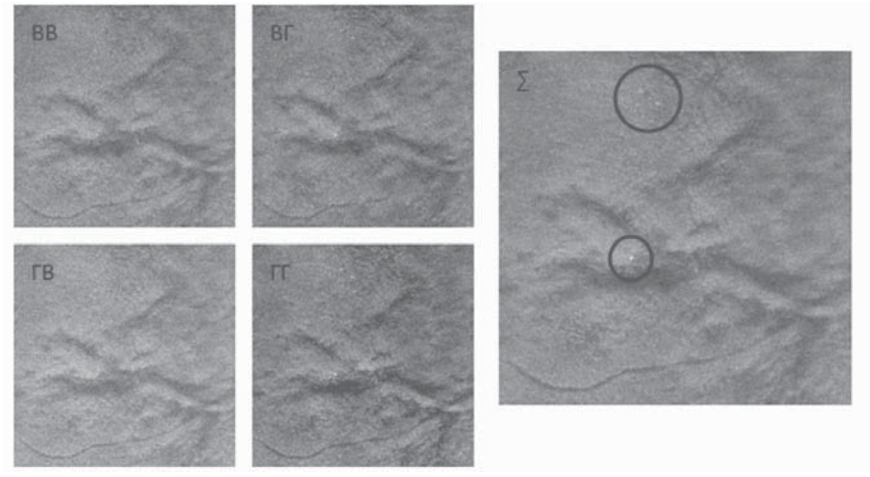


РИС. 4.
Идентификация фрагментов ОЧ РКН на двухполяризационном изображении в L-диапазоне

– габариты антенны:
  – L: не более 1000×200×40 мм,
  – X: не более 400×50×20 мм;
– масса антенн – не более 2 кг;
– габариты аппаратного блока – не более 250 × 100 × 80 мм;
– масса аппаратного блока – не более 3 кг;
– поляризационные режимы – Г(ГиВ), В(ГиВ), круговая – ГиВ;
– сектор обзора подстилающей поверхности:
  – L: от 30 до 70 градусов;
  – X: от 30 до 45 градусов;
–время накопления информации в маршрутном режиме – до 11 часов;
– напряжение питания – 12–16 В;
– максимальное энергопотребление – не более 50 Вт.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам были разработаны, изготовлены и испытаны макетные образцы радиолокационной станции с синтезированной апертурой (РСА) различных диапазонов частот. Разработано программно-алгоритмическое обеспечение обработки и построения РЛИ, в том числе, с возможностью реализации в режиме реального времени на борту носителя. Создан опытный образец двухдиапазонного бортового радиолокатора.

В дальнейшем планируется отработка созданного двухдиапазонного бортового радиолокатора и его интеграция в единую бортовую сеть питания и единую бортовую систему времени носителя – беспилотного летательного аппарата, в целях создания многофункционального беспилотного авиационного комплекса радиолокационного наблюдения.

Литература

1. **Конратенков Г.С., Петров А.Ю.** Радиовидение. Радиолокационные системы зондирования Земли. М.: Радиотехника, 2005. 368 с.
2. **David G.** Long A New Factorized Backprojection Algorithm for Stripmap Synthetic Aperture Radar // Positioning. 2013. № 4. P. 42–56.

Славянский Андрей Олегович
главный конструктор бортовых радиоэлектронных специальных средств АО «Научный центр прикладной электродинамики»

197229, г. Санкт-Петербург, Юнтоловский пр-т, 53 к.3 лит. А, 52, тел.: +7 (911) 139-74-53,
197229, St. Petersburg, Yuntolovsky pr-t, 53 building 3 lit. A, 52
e-mail: andrey.slavyanskiy@scaegroup.com

УДК 538.91,004.94

НЕЙРОСЕТЕВАЯ МОДЕЛЬ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ УСТРОЙСТВ С НИЗКОРАЗМЕРНЫМ КАНАЛОМ

К.П. Пчелинцев, Н.А. Ветрова, В.Д. Шашурин
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

В работе представлены результаты проведения фундаментальных исследований по поиску принципиально новых подходов к моделированию токопереноса в полупроводниковых устройствах с низкоразмерным каналом с точностью и быстродействием, приемлемым для решения задачи обеспечения надежности наноэлектронных приборов и систем на их основе, в том числе, в условиях повышенного действия дестабилизирующих внешних факторов при эксплуатации (в условиях экстремальных температур, ионизирующего воздействия и др.). В качестве предиктора использована обученная искусственная нейронная сеть. Обучающая выборка сформирована из данных, полученных квантовомеханической моделью на основе метода неравновесных функций Грина.

Ключевые слова: *гетероструктуры, наноэлектроника, математическое моделирование, исскуственные нейронные сети.*

NEURAL NETWORK MODEL FOR PREDICTING THE ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF SEMICONDUCTOR DEVICES WITH A LOW-DIMENSIONAL CHANNEL

K.P. Pchelintsev, N.A. Vetrova, V.D. Shashurin
Bauman Moscow State Technical University

The paper presents the results of fundamental research to find fundamentally new approaches to modeling current carrying capacity in semiconductor devices with a low-dimensional channel with accuracy and speed acceptable for the task of ensuring the reliability of nanoelectronic devices and systems based on them, including conditions with increased action of destabilizing external factors during operation (at extreme temperatures, ionising radiation, etc.). A trained artificial neural network has been used as a predictor. The training sample is formed from data obtained by a quantum mechanical model based on the method of nonequilibrium Green functions.

Keywords: *Heterostructures, nanoelectronics, mathematical modelling, artificial neural networks.*

ВВЕДЕНИЕ

Стремительное развитие возможностей полупроводниковых технологий позволило за счет применения низкоразмерных гетероструктур добиться увеличения диапазона рабочих частот современных приборов [3]. Обеспечение требуемого уровня надежности подобных устройств является важной задачей, решаемой при проектировании современных радиоэлектронных систем. В рамках решения задачи оценки надежности устройств на базе низкоразмерных структур ключевым является прогнозирование электрических параметров и моделирование их геронтологических изменений. Другими словами, необходимо определить плотность тока моделируемой структуры на основе топологии гетероструктуры, с учетом технологических погрешностей, возникающих при производстве, а также осуществить оценку кинетики рабочей точки, вызванную деградационными процессами, протекающими с течением времени.

Для решения задачи синтеза оптимальной топологии структуры, обеспечивающей требуемый уровень надежности, помимо точности использованных моделей важную роль играет эффективное использование вычислительных ресурсов при расчетах, так как численные методы решения данной оптимизационной задачи требуют многократного их повторения [7, 8]. Широко применяемые в настоящее время системы автоматизированного проектирования в большинстве случаев построены на основе полуклассических моделей токопереноса [2, 4]. Подобный подход обусловлен тем, что полуклассические модели являются более эффективными с точки зрения использования компьютерных ресурсов, по сравнению с квантовомеханическими. Однако из-за допущений, на основе которых они построены, полуклассические модели с меньшей точностью и большим числом так называемых «поправочных», а по сути подгоночных коэффициентов, моделируют электрические параметры нано-

электронных устройств [9]. Что делает существующие модели токопереноса практически неприменимыми для решения задачи обеспечения надежности полупроводниковых устройств с низкоразмерным каналом. По вышеприведенным причинам актуальной является задача проведения фундаментальных исследований по поиску принципиально новых подходов к моделированию токопереноса в полупроводниковых устройствах с низкоразмерным каналом с точностью и быстродействием приемлемым для решения задачи обеспечения надежности наноэлектронных приборов и систем на их основе, в том числе, в условиях повышенного действия дестабилизирующих внешних факторов при эксплуатации (в условиях экстремальных температур, ионизирующего воздействия и др.).

Для решения этой актуальной задачи в данной работе автором рассмотрена возможность использования современных нейросетевых подходов, хорошо себя зарекомендовавших в решении различных практикоориентированных инженерных задач, однако, в проектировании наноэлектронных устройств в силу требований к междисциплинарному квалификационному уровню исследователя на сегодняшний день не применяющейся. Впервые предложена эффективная нейросетевая модель, для обучения которой использованы квантовомеханические модели токопереноса [1] а также экспериментальные данные, традиционно используемые лишь для валидации моделей и оценки поправочных коэффициентов.

НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ – ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ПАРАМЕТРЫ

Искусственные нейронные сети (ИНС) широко применяются в различных областях науки и техники для решения различных прикладных задач, в том числе, для аппроксимации сложных функциональных зависимостей [10]. Известно, что любая непрерывная функция многих переменных может быть аппроксимирована с помощью нейронной сети [5]. Важнейшей свойством ИНС является обобщающая способность, свойство модели отражать исходные данные в искомые результаты на всем множестве исходных данных.

В общем случае искусственная нейронная сеть представляет собой систему, состоящую из связанных между собой вычислительных элементов, каждый из которых называется нейрон. На вход каждого нейрона подаются данные, которые могут быть либо полученными извне, либо сигналами на выходах других нейронов. Каждый нейрон связан с другими с помощью синаптических связей. Для того чтобы определить сигнал на выходе каждого нейрона необходимо определить взвешенную сумму с учетом весовых коэффициентов всех входных синаптических связей. После чего выполнить нелинейное преобразование полученной суммы, для чего используются функции специального вида, функция активации. Подобный принцип передачи сигнала от входов к выходам называют прямым распространением сигнала.

В нейронной сети нейроны структурно сгруппированы в слои таким образом, что данные на входы всех нейронов из слоя подаются одновременно. Выделяют входной слой, получающий все признаки описываемой модели, выходной слой, осуществляющий вывод результатов моделирования, и скрытые слои, находящиеся между ними. Число нейронов входного слоя определяется числом независимых переменных моделируемой функции, число нейронов выходного слоя равно числу выходных переменных. Число скрытых слоев и количество нейронов в них определяется при разработке структуры нейронной сети в зависимости от решаемой задачи. Конфигурация нейронной сети оказывает существенное влияние на ее обобщающую способность. Использование чрезмерно сложной модели приведет к возникновению модели, которая выдает точные результаты только для данных, использованных при обучении, так называемая проблема переобучения.

Нейронная сеть должна быть обучена для корректного выполнения требуемых задач. В основе обучения нейронных сетей лежит принцип обратного распространения ошибки. Идея принципа состоит в распространении сигнала ошибки от выхода нейронной сети к входу. Другими словами, в процессе обучения необходимо осуществить решение оптимизационной задачи поиска весовых коэффициентов синаптических связей нейронов, при которых ошибка прогнозирования будет минимальна.

НЕЙРОСЕТЕВАЯ МОДЕЛЬ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПЛОТНОСТИ ТОКА

При разработке нейронной сети для прогнозирования плотности тока использована структура сети прямого распространения (многослойный персептрон). В качестве исходных данных для моделирования использованы конструкторско-технологические параметры структуры (толщины и химический состав гетерослоев с учетом технологических погрешностей, возникающих на этапе производства) и значения приложенного напряжения. В рамках данной статьи рассмотрено решение стационарной задачи, представлена нейросетевая модель, позволяющая оценить плотность тока низкоразмерных структур с учетом технологических погрешностей, возникающих при производстве. Однако, предложенный подход является масштабируемым, и может быть применен также для решения нестационарных задач.

В работе определена оптимальная структура сети, использован один скрытый слой. Количество нейронов в скрытом слое определено эмпирическим путем в результате сравнения эффективности обучения разрабатываемой сети на тестовых выборках. Для решения проблемы «переобучения» в работе использован ал-

горитм байесовской регуляризации. В качестве функции активации нейрона автором с целью снижения вычислительных затрат использована функция активации «softplus» [6].

Для обучения нейронной сети в работе использован метод обучения с учителем. В рамках этого подхода на основе конечного набора прецедентов, осуществляется корректировка весов с целью минимизации ошибки между результатами на выходе нейронной сети и обучающими данными. В рамках решаемой задачи обучающая выборка представляет собой известный набор конструкторско-технологических параметров и приложенных напряжений, и соответствующие им значения электрических характеристик. Идеальным вариантом является использование набора экспериментальных данных для этих целей. Однако изготовление необходимого числа низкоразмерных полупроводниковых структур потребует значительных финансовых затрат, что для задач проектирования наноэлектронных устройств не представляется возможным. Предложено использовать данные, полученные в результате численного моделирования, в качестве основного объема обучающей выборки, экспериментальные данные использованы для уточнения и дополнения выборки.

В основе квантовомеханической модели, использованной для генерации обучающей выборки, лежит идея использования функции Грина, описывающей отклик квантовой системы на внешнее возмущение, для расчета плотности тока в низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах. В общем случае плотность тока может быть определена следующим образом:

$$J = \int TD(E)dE \qquad (1)$$

где $D(E)$ – функция снабжения, $T = \sum_{j}^{N} \Gamma_{jj}^{L} G_{jj} \Gamma_{jj}^{R} G_{jj}^{+}$ – прозрачность моделируемой структуры,

$\Gamma^{L(\mathrm{R})} = i\left[\Sigma_{L(\mathrm{R}} - \Sigma_{L(\mathrm{R})}^{+}\right]$ – матрица, характеризующая уширение энергетических уровней на границе левый (правый) контакт-канал, $G = \left[H - EI + \Sigma_L + \Sigma_R\right]^{-1}$ – неравновесная функция Грина, в матричной форме. H – оператор Гамильтона в матричном виде, описывающий поведение электрона в активной области, Σ – оператор в матричном виде, описывающий отток электронов из активной области (в левый и правый резервуар соответственно), N – число узлов координатной сетки.

Следует отметить, что с учетом особенностей алгоритмов и моделей, используемых в нейронных сетях набор, обучающих данных, должен быть нормализован. Данная процедура выполняется с целью нивелирования влияния размерности различных физических величин, входящих в состав обучающей выборки.

В рамках обучения ИНС для поиска весовых коэффициентов, минимизирующих величину ошибки, использован метод оптимизации второго порядка – алгоритм Левенберга-Марквардта. В рамках которого поправочные значения весовых коэффициентов синаптических связей нейронов каждого слоя определяются следующим соотношением:

$$\overline{\Delta} = -(J^T J + \mu I)^{-1} J^T \overline{\varepsilon}, \qquad (2)$$

где J – матрица Якоби, μ – дополнительный параметр регуляризации, $\overline{\varepsilon}$ – вектор ошибок, I – единичная матрица.

Для оценки функции ошибки использована среднеквадратичная норма:

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(O_i^{target} - O_i^{calculated})^2, \qquad (3)$$

где O_i^{target} – фактическое значение из обучающей выборки, $O_i^{calculated}$ – прогнозируемое значение на выходе нейронной сети, n – объем обучающей выборки.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 1 представлена полученная в результате использования нейросетевой модели трехмерная фигура, описывающая зависимость приведенной плотности тока от величины приложенного напряжения и ширины барьеров.

В рамках верификации разработанной нейросетевой модели выполнено сравнение полученных результатов, с результатами, полученными с использованием модели на основе формализма Ландауэра Буттикера. Итоговая погрешность прогнозирования плотности тока при использовании модели искусственной нейронной сети не превышает 3% (рис. 2).

Сравнительный анализ временной сложности вычислительных алгоритмов для нейросетевой модели, квантовомеханической модели на основе функции Грина и модели на основе метода матриц переноса, позволил сделать вывод о том, что модель на основе обученной нейронной сети является более эффективной при многоитерационных вычислениях. Графическое представление зависимости времени вычисления для тестовой модельной структуры от величины шага дискретной сетки оси координат представлено на рис. 3.

ВЫВОДЫ

В работе представлена нейросетевая модель для прогнозирования вольт амперных характеристик современных приборов на основе низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур. Искусственная нейронная сеть, лежащая в основе представленной модели, обучена на основе квантомеханической модели, построенной на формализме функций Грина. Проведенные тесты производительности с использованием в качестве бенчмарка результатов моделирова-

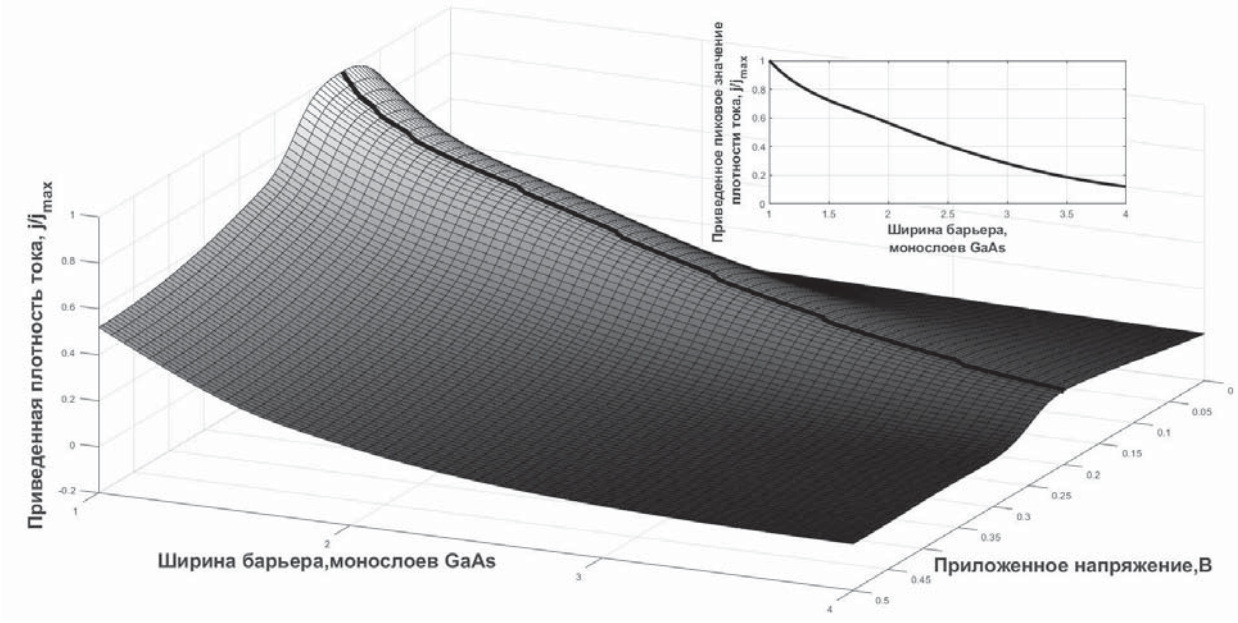


РИС. 1

Зависимость вольтамперной характеристики и значения пикового тока от ширины барьеров

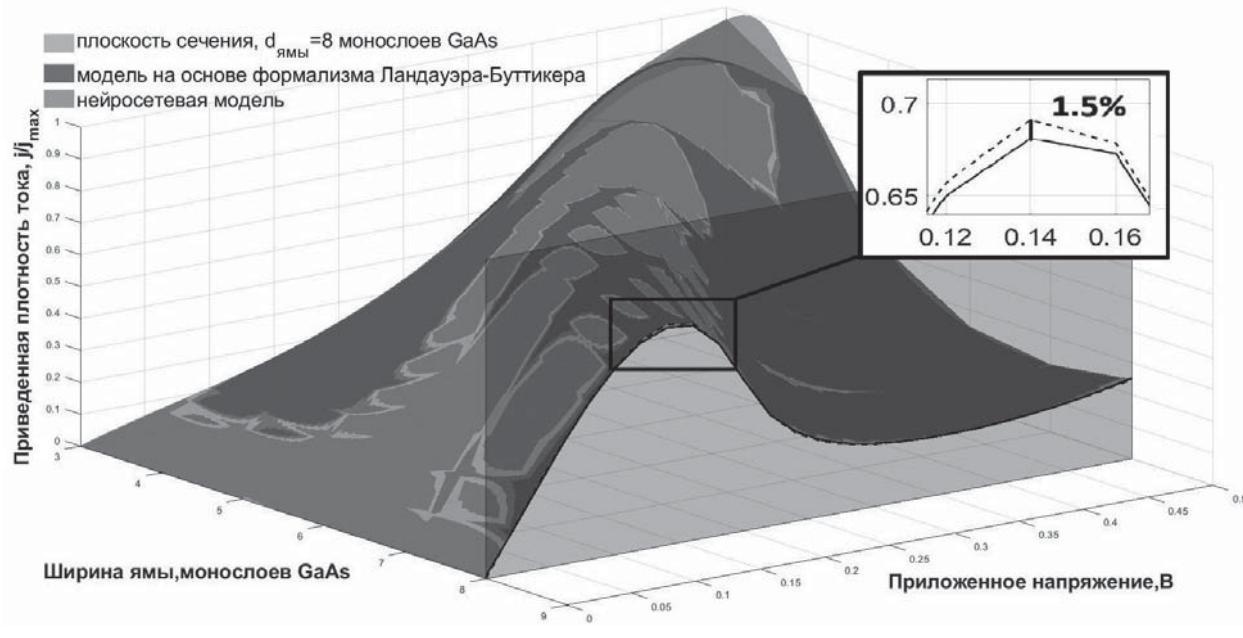


РИС. 2.

Зависимость плотности тока от приложенного напряжения и ширины ямы и сечение графика плотности тока плоскостью, соответствующей ширине ямы=8 монослоев GaAs

ния плотности тока для структуры с заданной топологией продемонстрировали, что время выполнения вычислительного алгоритма на основе обученной искусственной нейронной сети более чем на два порядка меньше по сравнению с результатами полученными при тестировании вычислительного алгоритма на базе квантово-механической модели. При этом погрешность прогнозирования начального участка ВАХ резонансно туннельной структуры не превышает 3%, что показано в рамках верификации разработанной нейросетевой модели прогнозирования электрических характеристик. Результаты, полученные

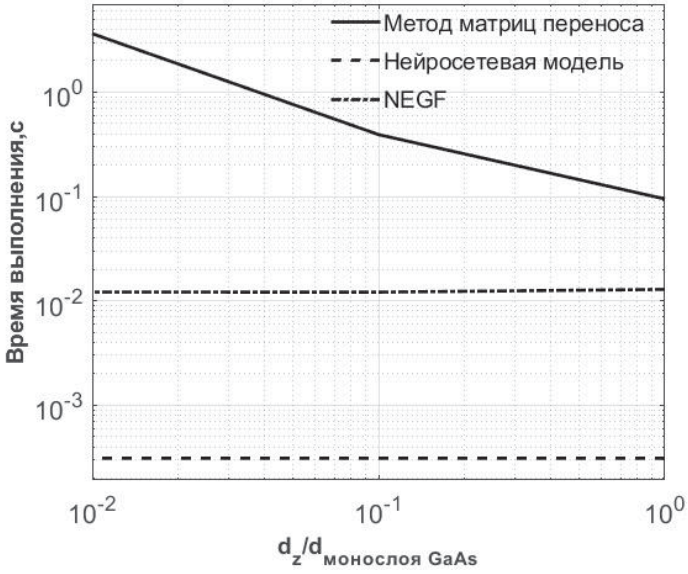


РИС. 3.

Зависимость времени расчета плотности тока от величины шага дискретизации координатной оси

с использованием разработанного вычислительного алгоритма, позволяют сделать вывод о целесообразности его применения при решении задачи синтеза оптимальной топологии структуры, обеспечивающего заданный уровень надежности полупроводниковых устройств с низкоразмерным каналом.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках Государственного контракта No. 16.1663.2017/4.6

Литература

1. **Ветрова Н.А., Козий А.А., Мешков С.А., Пчелинцев К.П., Шашурин В.Д.** Эффективный вычислительный алгоритм расчета электрических характеристик наноразмерных гетероструктур на основе формализма Ландауэра–Буттикера, Нанотехнологии: разработка, применение. 2019. Т. 1. № 11. С. 34–43
2. **Anantram M.P., Lundstrom M.S., Nikonov D.E.** Modeling of Nanoscale Devices, Proceedings of the IEEE. 2008. Vol. 96. N 9. P. 1511–1550.
3. **Bozzi M., Pierantoni L., Bellucci S.** Applications of Graphene at Microwave Frequencies, Radioengineering. 2015. Vol. 24. N 3. P. 661–669.
4. **Ciprut A., Chelly A., Karsenty A.** Usage and Limitation of Standard Mobility Models for TCAD Simulation of Nanoscaled FD-SOI MOSFETs, Active and Passive Electronic Components. 2015. P. 1–9.
5. **Cybenko G.** Approximation by superpositions of a sigmoidal function, Mathematics of Control, Signals and Systems. 1989. Vol. 2. P. 303–314.
6. **Glorot X., Bordes A., Bengio Y.** Deep Sparse Rectifier Neural Networks Journal of Machine Learning Research. 2010. P. 315–323.
7. **Morales O., Periago F., Vallejo J.A.** Robust Optimal Design of Quantum Electronic Devices, Mathematical Problems in Engineering, 2018.
8. **Nadar S., Zaknoune M., Wallart X., Coinon C., Emilien P. et al.** High Performance Heterostructure Low Barrier Diodes for Sub-THz Detection, IEEE Trans. On Terah. Sc. And Techn. 2017. Vol. 6. P. 780–788.
9. **Scaldaferri S., Curatola G., Iannaccone G.** Direct Solution of the Boltzmann Transport Equation and Poisson–Schrodinger Equation for Nanoscale MOSFETs IEEE Transactions on Electron Devices. 2007. Vol. 54. N 11. P. 2901–2909.
10. **Schmidhuber J.** Deep learning in neural networks: An overview, Neural Networks. 2015. Vol. 61. P. 85–117.
11. **Vetrova N.A., Pchelintsev K.P., Shashurin V.D., Meshkov S.A., Koziy A.A.** Quantum-mechanical models for calculating the electricalcharacteristics of semiconductor 2-d structures for technological optimization of nanoelectronics devices based on them, Journal of Physics: Conference Series. 2019. P. 1410.

Пчелинцев Кирилл Павлович,
аспирант МГТУ им. Н.Э. Баумана,

тел.: +7 (910) 421-80-84, e-mail: pkp@bmstu.ru

Ветрова Наталия Алексеевна,
доцент МГТУ им. Н.Э. Баумана,

e-mail: vetrova@bmstu.ru,

Шашурин Василий Дмитриевич,
профессор, заведующий кафедры МГТУ им. Н.Э. Баумана,
e-mail: schashurin@bmstu.ru,

105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр.1,
2nd Baumanskaya st.,5,.1, Moscow, 105005, Russia

УДК: 537.874.4

РАСЧЕТ ЭПР ВЫПУКЛОГО ПРОВОДЯЩЕГО ТЕЛА ВРАЩЕНИЯ С ТОНКИМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЛОЕМ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТОДАМИ ФИЗИЧЕСКОЙ ОПТИКИ

Н.А. Кривошеин
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В статье рассматривается задача расчета эффективной площади рассеяния (ЭПР) выпуклого гладкого идеально проводящего тела вращения как с тонким покрытием из диэлектрика, так и без этого покрытия. Расчетная схема построена в приближении физической оптики (ФО). Сформулирован алгоритм и проведено сравнение результатов численного расчета и аналитических решений.

Ключевые слова: *эффективная площадь рассеяния, ЭПР, физическая оптика, ФО, однослойное диэлектрическое покрытие.*

RADAR CROSS-SECTION COMPUTATION FOR CONVEX SOLID OF REVOLUTION WITH A THIN DIELECTRIC LAYER ON THE SURFACE BY PHYSICAL OPTICS METHOD

N.A. Krivoshein
Moscow Institute of Physics and Technology

In this article, method of Radar Cross-Section evaluation for convex solid of revolution with and without a thin dielectric layer on the surface in Physical Optics approaching is presented. Algorithm is formulated and comparison between numerical calculation and analytical solutions are made.

Keywords: *radar Cross-Section, RCS, Physical Optics, PO, single-layer dielectric covering.*

ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на большое количество различных методов расчета ЭПР тел метод физической оптики (ФО) не устарел и может применяться как для непосредственных вычислений ЭПР, так и для верификации корректности работы новых алгоритмов. В связи с появлением целого набора новых современных диэлектрических покрытий, рассмотрение возможностей данного метода представляет интерес в связи с простотой его программной реализации и физической наглядности. Также метод чрезвычайно легко распараллеливается и не требует интенсивного и сложного обмена данными между параллельными исполнителями.

1. АНАЛИТИЧЕСКОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАССЕЯНИЯ ВЫПУКЛОГО ТЕЛА В ПРИБЛИЖЕНИИ ФО.

Для описания амплитуды поля вторичной (рассеянной) волны в дальней зоне удобно использовать матрицу рассеяния [6]:

$$\begin{bmatrix} E_{sh} \\ E_{sv} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{4\pi R^2}} \begin{bmatrix} a_{hh} & a_{hv} \\ a_{vh} & a_{vv} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{eh} \\ E_{ev} \end{bmatrix} \qquad (1)$$

где E_{sh}, E_{sv} – компоненты вертикальной и горизонтальной поляризации вторичной(рассеянной) волны, E_{eh}, E_{ev} – компоненты вертикальной и горизонтальной поляризации первичной волны в некоторой отсчетной плоскости, которую располагают рядом с телом, R – расстояние до тела. Тогда ЭПР можно записать как

$$\sigma_{ij} = \lim_{R\to\infty} 4\pi R^2 \frac{E_{sj}E_{sj}^*}{E_{ej}E_{ej}^*} = \left|a_{ij}\right|^2 \qquad (2)$$

Введем ортонормированную систему координат $Oxyz$, где Oz направлена от тела к антенне, а оси Ox и Oy соответствуют вертикальной и горизонтальной поляризациям приемника антенны. Плоскость Oxy примем за отсчетную. Введем обозначения (рис. 1):

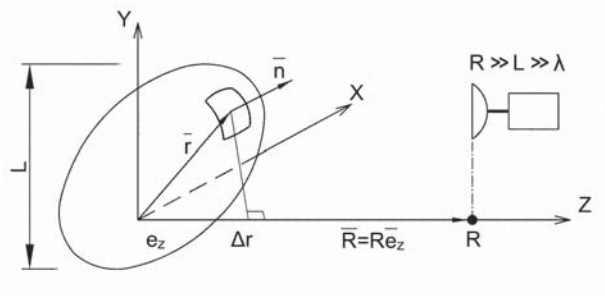


РИС. 1.
Основные обозначения

e_x, e_y, e_z – единичные векторы направленные по координатным осям системы $Oxyz$; r – радиус вектор к маленькой площадке F на поверхности тела, диаметр площадки мал по сравнению с длиной волны λ падающего излучения; n – единичный вектор внешней нормали к данной площадке F; n_x, n_y, n_z – координаты вектора n; $\Delta r = r \times e_z$ – расстояние от площадки F до отсчетной плоскости; R_H, R_E – комплексные коэффициенты отражения для H- и E-поляризованных волн падающих на данную площадку F; F_P – проекция данной площадки F на отсчетную плоскость; k – модуль волнового вектора.

В приближении ФО полагается, что расстояние до приемника/источника R много больше линейных размеров тела L, которые в свою очередь много больше длины волны излучения λ. Поведение вторичной волны в окрестности поверхности тела приближается ее поведением вблизи плоской поверхности, что дает хорошее приближение, если радиус кривизны поверхности тела ρ много больше λ. Вкладом в поле от теневой области и дифракционными явлениями на переходе свет-тень пренебрегают.

Тогда вклад во вторичное поле в области приемника от площадки F выражается формулой [6]:

$$\begin{bmatrix} E_{sh} \\ E_{sv} \end{bmatrix}_F = \frac{1}{\sqrt{4\pi R^2}} \frac{ik\,\mathrm{e}^{ikR}}{\sqrt{\pi}(1-n_z^2)} \cdot \left\{ \int_{F_p} \begin{bmatrix} R_H n_x^2 - R_E n_y^2 & (R_H + R_E) n_x n_y \\ (R_H + R_E) n_x n_y & R_H n_y^2 - R_E n_x^2 \end{bmatrix} \mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS' \cdot \right\} \begin{bmatrix} E_{eh} \\ E_{ev} \end{bmatrix} \quad (3)$$

Если первичная волна падает на площадку ортогонально ($n_z = 1$), то следует использовать формулу:

$$\begin{bmatrix} E_{sh} \\ E_{sv} \end{bmatrix}_F = \frac{1}{\sqrt{4\pi R^2}} \frac{ik\,\mathrm{e}^{ikR}}{\sqrt{\pi}} \cdot \left\{ \int_{F_p} \begin{bmatrix} R_H & 0 \\ 0 & R_H \end{bmatrix} \mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS' \cdot \right\} \begin{bmatrix} E_{eh} \\ E_{ev} \end{bmatrix} \quad (4)$$

Поскольку фазовый набег за счет преодоления волной расстояния от отсчетной плоскости до приемника в данном случае несущественен, то из выражения можно убрать член e^{ikR}. Тогда из (2), (3), и (4) получаем выражения для коэффициентов матрицы рассеяния:

$$a_{hh} = \sum_{F_{illum}} \begin{cases} \dfrac{ik}{\sqrt{\pi}(1-n_z^2)} \displaystyle\int_{F_p} (R_H n_x^2 - R_E n_y^2)\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS', & n_z \neq 1 \\ \dfrac{ik}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_{F_p} R_H\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS', & n_z = 1 \end{cases},$$

$$a_{vv} = \sum_{F_{illum}} \begin{cases} \dfrac{ik}{\sqrt{\pi}(1-n_z^2)} \displaystyle\int_{F_p} (R_H n_y^2 - R_E n_x^2)\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS', & n_z \neq 1 \\ \dfrac{ik}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_{F_p} R_H\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS', & n_z = 1 \end{cases}, \quad (5)$$

$$a_{hv} = a_{vh} = \sum_{F_{illum}} \begin{cases} \dfrac{ik}{\sqrt{\pi}(1-n_z^2)} \displaystyle\int_{F_p} (R_H + R_E) n_x n_y\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS', & n_z \neq 1 \\ \dfrac{ik}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_{F_p} R_H\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}\, dS', & n_z = 1 \end{cases},$$

где суммирование идет по всем освещенным площадкам F_{illum}. Если тело идеально проводящее, т.е R_H=1 , R_E =-1, то выражения сильно упрощаются:

$$a_{ic} \equiv a_{hh} = a_{vv} = \sum_{F_{illum}} \frac{ik}{\sqrt{\pi}} \int_{F_p} \mathrm{e}^{-2ik\Delta r} dS', a_{hv} = a_{vh} = 0 \quad (6)$$

2. ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА

Представим осесимметричное тело как набором из маленьких четырехугольных и треугольных фацетов. Для этого разобьем его координатной сеткой из меридиан и параллелей (по аналогии с географической системой координат). Меридианы получаются сечением тела плоскостями, лежащими на оси симметрии, параллели – плоскостями ортогональными оси симметрии (рис. 2). Вершины фацетов являются точками пересечения меридиан и параллелей. Диаметр фацетов должен быть много меньше длины волны. Поскольку метод ЭРТ на данный момент в программе не реализуется, ребра изломов не учитываются.

Интеграл по F_p в формулах (5) заменим произведением значения подинтегрального выражения в центре фацета (легко показать, что тогда ошибка минимальна) на площадь проекции фацета на отсчетную плоскость $dS' \to S\cos(\mathrm{n}, Oz) = Sn_z$.

После упрощения получаем:

$$a_{hh} = \sum_{F_{illum}} \begin{cases} \dfrac{ikn_z S}{\sqrt{\pi}(1-n_z^2)} (R_H n_x^2 - R_E n_y^2)\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}, & n_z \neq 1 \\ \dfrac{ikS}{\sqrt{\pi}} R_H\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}, & n_z = 1 \end{cases},$$

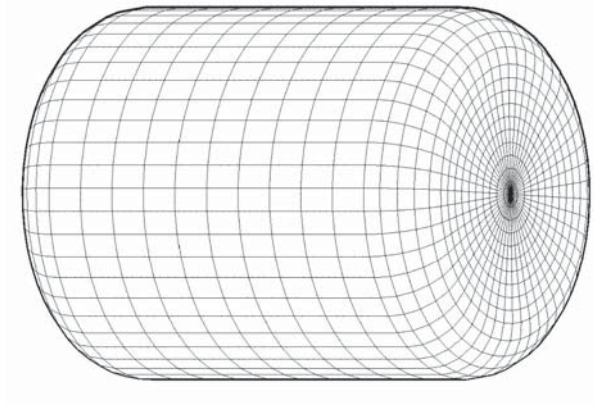


РИС. 2.
Схема разбиения на фацеты

$$a_{vv}=\sum_{F_{illum}}\begin{cases}\dfrac{ikn_zS}{\sqrt{\pi}(1-n_z^2)}(R_Hn_y^2-R_En_x^2)\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}, n_z\neq 1\\ \dfrac{ikS}{\sqrt{\pi}}R_H\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}, \quad n_z=1\end{cases}, \qquad (7)$$

$$a_{hv}=a_{vh}=\sum_{F_{illum}}\begin{cases}\dfrac{ikn_xn_yn_zS}{\sqrt{\pi}(1-n_z^2)}(R_H+R_E)\,\mathrm{e}^{-2ik\Delta r}, n_z\neq 1\\ 0, \quad n_z=1\end{cases}.$$

Считаем, что под диэлектриком находится идеальный проводник, а среда распространения волны – воздух (или вакуум). Примем за толщину диэлектрика h, его относительные диэлектрическую и магнитные проницаемости соответственно ε и μ (рис. 3). Обозначим за λ – длину волны в вакууме, $k_2=\dfrac{2\pi}{\lambda}\sqrt{\varepsilon\mu}$ – величина волнового вектора в диэлектрике, $Z=\sqrt{\dfrac{\mu}{\varepsilon}}$ – безразмерный относительный импеданс диэлектрика.

Коэффициенты отражения R_H, R_E считаются по формуле [1]

$$R_H=\frac{\Phi_H+\mathrm{e}^{i\phi}}{1+\Phi_H\,\mathrm{e}^{i\phi}}, \quad R_E=\frac{\Phi_E-\mathrm{e}^{i\phi}}{1-\Phi_E\,\mathrm{e}^{i\phi}} \qquad (8)$$

где $\phi=2k_2h\cos\alpha_2$ – фаза набегающая за счет прохождения волной слоя диэлектрика, $\cos\alpha_2=\sqrt{1-1/(\varepsilon\mu)\cdot\sin^2\alpha_1}$ – косинус угла прохождения волны, в общем случае комплексное число, Φ_H и Φ_E – коэффициенты Френеля для волны проходящей границу воздух-диэлектрик [8]

$$\Phi_H=\frac{\cos\alpha_1-Z\cos\alpha_2}{\cos\alpha_1+Z\cos\alpha_2}, \ \Phi_E=\frac{Z\cos\alpha_1-\cos\alpha_2}{Z\cos\alpha_1+\cos\alpha_2} \qquad (9)$$

Приведенные формулы заведомо верны при действительных значениях ε, μ и $\cos\alpha_2$. Можно принять, чтобы при малых отклонениях этих величин от действительного значения в комплексную плоскость, результаты расчета (или физического опыта) отклонялись мало, т.е. сохранялись непрерывности по переменным ε и μ. Следовательно, во всех формулах корень квадратный высчитывается с аргументом, лежащим в пределах $(-\pi/2, \pi/2]$.

Таким образом выстраивается простая цепочка для алгоритма вычисления коэффициентов матрицы рассеяния:

1. Вычисление коэффициентов Френеля Φ_H и Φ_E для каждого освещенного фацета F.
2. Вычисление коэффициентов отражения R_H, R_E для каждого освещенного фацета F.
3. Вычисление вклада каждого освещенного фацета F в соответствующие коэффициенты матрицы рассеяния и суммирование по ним.
4. Вычисление ЭПР по формуле (2)

Следует отметить, что алгоритм расчета не зависит от метода разбиения поверхности тела на фацеты, до тех пор, пока сами фацеты достаточно малы по сравнению с длиной волны излучения λ.

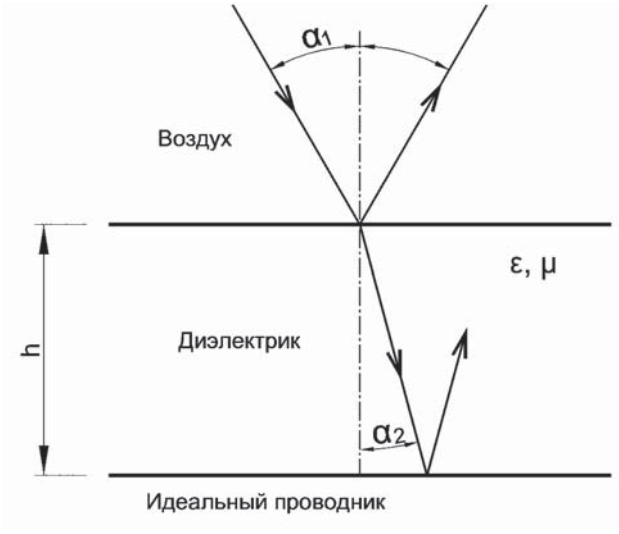


РИС. 3.
Схема отражения плоской волны от слоя диэлектрика

3. ОЦЕНКА ОШИБОК МЕТОДА

В данной секции все размеры приведены в длинах волн, а ЭПР выражается в дБ и высчитывается по формуле

$$\sigma_{ij}=20\cdot\lg\left|\frac{a_{ij}}{\lambda}\right| \qquad (10)$$

Формулы для расчета ЭПР (7) не привязаны к форме тела, и остаются применимыми до тех пор пока фацеты малы по размеру, а представляемое ими тело невогнуто (т.е. нет переотражений вторичной волны) и имеет достаточно большую кривизну поверхности. Одним из таких тел является пластина размера a×b. Аналитическое выражение для ЭПР проводящей пластины в случае, когда линия пересечения плоскости волнового фронта первичной волны и плоскости пластины параллельна одному из ребер, можно взять из [2]. Вне зависимости от линейных размеров пластины в диапазоне 1~50, при мелкости разбиения на фацеты 0.1 разница между точным аналитическим решением и машинным расчетом составляет порядка 0.025 дБ в пределах 50 дБ от абсолютного максимума значения ЭПР. Аналогичный результат получается для ЭПР проводящей сферы радиуса 1~25, разница с аналитическим значением $\sigma=\pi R^2$ (строго говоря, полученное

в приближении ФО) составляет не более 0.022 дБ. Источником этой ошибки является различие геометрической формы фигуры, составленной из фацетов, и моделируемой сферы.

Было осуществлено качественное сравнение работы программы с другой реализацией подобной схемы расчета методами ФО и обнаружено сходство результатов, в т.ч. совпадение числа пиков на графике зависимости ЭПР от угла облучения. Само число пиков из-за своей интерференционной природы должно быть порядка $N \times \frac{2D}{\lambda}$, где D – характерный размер тела.

Многие пики могут быть малы по амплитуде и сливаться с общей картиной (или вообще пропадать, если шаг расчета по углу облучения θ велик.

Проседание графика ЭПР при наличии тонкого слоя проводящего диэлектрика по отношению к ЭПР идеально проводящего тела по порядку величины совпадает с уменьшением коэффициентов отражения R_H и R_E при нормальном падении первичной волны, что косвенно подтверждает корректность полученных результатов.

Следует отметить возникновение неустранимой ошибки, связанной с конечностью толщины диэлектрика. Это можно продемонстрировать следующим образом. Намажем слой воздуха в качестве диэлектрика. С точки зрения физики система идентична проводящему телу без каких-либо поверхностных слоев. Однако результат расчета изменится. Формально, фацеты будут «вдавлены» внутрь тела на толщину воздушной прослойки h. По порядку величины эффект сравним с заменой тела на другое, проводящее и утолщенное на ту же толщину $\delta R=h$. В качестве примера взято тело F_0 (на рис. 4 показаны его образующая вместе с образующими его «утолщений» F_1 и F_2). На рис. 5 и рис. 6 показаны графики ЭПР соответствующие F_0, F_0 с «воздушным» слоем и соответствующему ему телу F_1 или F_2

4. НАПРАВЛЕНИЯ ДАЛЬНЕЙШИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Данный алгоритм может служить для расчета ЭПР осесимметричных тел наподобие боеголовок или головных обтекателей межконтинентальных баллистических ракет в сантиметровом диапазоне.

Для увеличения точности расчета можно добавить учет дифракции на острых кромках идеально проводящего тела, например, при помощи метода эквивалентных реберных токов (ЭРТ). Также возможен аналогичный расчет, хотя и более сложный, для ребер с покрывающим их слоем диэлектрика [7]. Как альтернативное направление разработки, для расширения класса решаемых задач, возможно добавление учета переотражения вторичных волн от поверхности невыпуклого тела методом итерационной физической

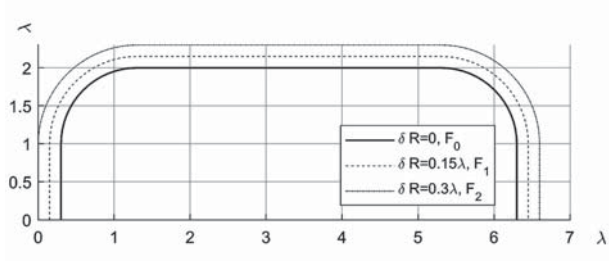


РИС. 4.
Образующие тел вращения F_0, F_1 и F_2 .

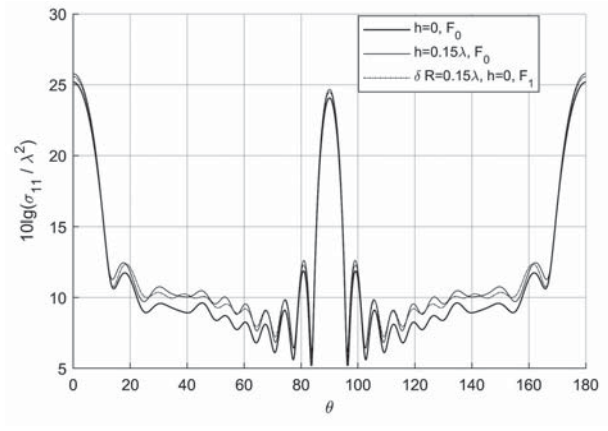


РИС. 5.
ЭПР тела F_0, тела F_0 с «воздушным» слоем h = 0,15 и тела F_1 являющимся утолщением тела F_0 на $\delta R = h$

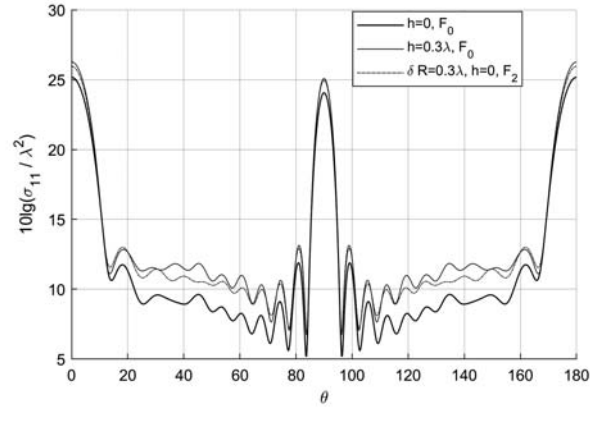


РИС. 6.
ЭПР тела F_0, тела F_0 с «воздушным» слоем h = 0,3 и тела F_2 являющимся утолщением тела F_0 на $\delta R = h$

оптики (ИФО) с модифицированной для лучшей сходимости итераций формулой [5].

Можно попытаться включить в ИФО (или любой другой аналогичный метод) учет дифракции на острых изломах тела, в том числе и вогнутых внутрь, когда происходят многократные переотражения вторичной волны в окрестности излома. Классическая формула ЭРТ в данном случае будет некорректна и нуждается в дальнейшем уточнении. Для этого потребуется исключить поле равномерной составляющей поверхностных токов в точном решении двумерной задачи дифракции на клине [3, 4].

Литература

1. **Бреховских Л.М.** Волны в слоистых средах. Москва: Наука, 1973. 343 с.
2. Под ред. Ширмана Я.Д. Теоретические основы радиолокации. Москва: Советское радио, 1970. 560 с.
3. **Уфимцев П.Я.** Метод краевых волн в физической теории дифракции. М.: Советское Радио, 1962. 244 с.
4. **Уфимцев П.Я.** Основы физической теории дифракции. Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. 350 с.
5. **Burkholder R.J., Tokgöz Ç., Reddy C.J., Coburn W.O.** Iterative Physical Optics for Radar Scattering Predictions // ACES JOURNAL. 2009. Vol. 24. № 2. P. 241–258.
6. **Klement D., Preissner J., Stein V.** Special problems in applying the physical optics method for backscatter computations of complicated objects // IEEE transactions on antennas and propagation. February 1988. Vol. 36. № 2. P. 228–237.
7. **Saez F., González I.D., Lozano P., Cátedra M.F.** Method Based on Physical Optics for the Computation of the Radar Cross Section Including Diffraction and Double Effects of Metallic and Absorbing Bodies Modeled With Parametric Surfaces // IEEE transactions on antennas and propagation. 2004. Vol. 52. № 12. P. 3295–3303.
8. **Stratton J.A.** Electromagnetic theory. IEEE Press, 2007. 640 p.

Кривошеин Николай Алексеевич,
студент магистратуры физтех-школы аэрокосмических технологий, кафедры технологий проектирования сложных технических систем Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»,.

141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9,
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, 141701,
тел: +7(916)-118-59-64,
e-mail: nikolaj.krivoshein@phystech.edu

УДК 621.396.67; 681.518.3

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ СТЕНД ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ АНТЕНН В ШИРОКОЙ ПОЛОСЕ ЧАСТОТ

Р.Р. Алимирзоев,
А.М. Ермолаев, И.О. Порохов
АО «Центральный научно-исследовательский радиотехнический институт имени академика А.И. Берга»

В данной работе рассматривается измерительный стенд, способный в автоматизированном режиме осуществлять управление входящими в состав стенда устройствами, проведение широкополосных измерений параметров антенн и обработку полученных результатов. Приведено описание автоматизированного стенда, измеряемые параметры и используемые методы измерений.

Ключевые слова: *антенные измерения, автоматизация, сверхширокополосные измерения.*

AN AUTOMATED STAND FOR MEASURING ANTENNA PARAMETERS IN A WIDE FREQUENCY BAND

R.R. Alimirzoev,
A.M. Ermolaev, I.O. Porokhov
JSC «Central Scientific Research Radio Engineering Institute named after academician A.I. Berg»

This paper presents a measuring stand that measures the parameters of antennas in a wide frequency band and processes the received data in an automated mode. For the implementation of the measurement stand used a network analyzer and the rotary device. The description of the automated stand, the measured parameters and the measurement methods used are given.

Keywords: *antenna measurements, automation, ultra-wideband measurements.*

Определение параметров антенн экспериментальным путем было и остается весьма трудоемким процессом, требующим дорогостоящего измерительного оборудования (генератор сигналов, анализатор спектра или векторный анализатор цепей) и специализированного помещения (безэховая камера). Тем не менее, такая задача продолжает оставаться в числе актуальных, поскольку необходимость в контроле параметров антенн на соответствие паспортным требованиям существует как для вновь разработанных антенн, так и для антенн, уже эксплуатируемых в радиоэлектронной аппаратуре.

В современном мире повышение производительности является одной из важных задач при исследованиях характеристик антенн, особенно в условиях серийного изготовления, при этом немаловажным является сохранение точности выполняемых измерений. Одним из способов повышения эффективности измерений является освобождение пользователя от выполнения однотипных задач, что может быть реализовано применением автоматизированного управления процессом измерения параметров антенн.

Существует множество систем и методов, применяющихся для измерений параметров антенн в автоматизированном режиме. Так, например, для измерений ДН и КУ в [2] используется беспилотный летательный аппарат, выполняющий облеты вокруг исследуемой антенны. В [6] и [1] представлены автоматизированные системы, в состав которых входят измерительный прибор, поворотное устройство и персональный компьютер. В [6] реализовано измерение только ДН в двух плоскостях, в отличие от [1], где в список измеряемых параметров антенн, также входят КУ, кросс-поляризация и положение фазового центра.

В данной работе представлен автоматизированный измерительный стенд, разработанный с целью снижения трудоемкости определения параметров антенн в широкой полосе частот экспериментальным путем в безэховой камере. Частотный диапазон измерений определяется техническими характеристиками векторного анализатора цепей, используемого в составе стенда, благодаря которому измерения параметров сверхширокополосных антенн проводятся одновременно во всем рабочем диапазоне, что снижает количество требуемого времени для их исследования.

РАЗРАБОТКА ИЗМЕРИТЕЛЬНОГО СТЕНДА

Состав разрабатываемого измерительного стенда определяется совокупностью измеряемых параме-

тров, которые в свою очередь определяются назначением испытуемых антенн. В число наиболее часто контролируемых параметров антенн, определяющих результирующие радиотехнические характеристики систем радиоэлектронного наблюдения, входят:

– коэффициент стоячей волны (КСВ);

– коэффициент усиления антенны (КУ);

– амплитудная и фазовая диаграммы направленности (ДН);

Для экспериментального определения в автоматизированном режиме вышеупомянутых характеристик был разработан измерительный стенд, структурная схема которого приведена на рис. 1. Расстояние R между антеннами должно удовлетворять соотношению $R \geq 2D_u^2/\lambda$, где D_u – линейный размер раскрыва исследуемой антенны, λ – длина волны излучения, на которой производятся измерения (λ_{min}, если измерения проводятся в диапазоне) [3].

В составе измерительного стенда используются: вспомогательная и эталонная антенны; опорно-поворотное устройство (ОПУ), на котором размещается исследуемая антенна; контроллер управления, осуществляющий управление ОПУ; источник питания для подачи напряжения на контроллер управления; векторный анализатор цепей (ВАЦ), осуществляющий передачу и прием измерительного сигнала; персональный компьютер (ПК) с программным обеспечением, выполняющим автоматизированное управление ВАЦ, и контроллером управления, а также сохранение полученных результатов и их обработку.

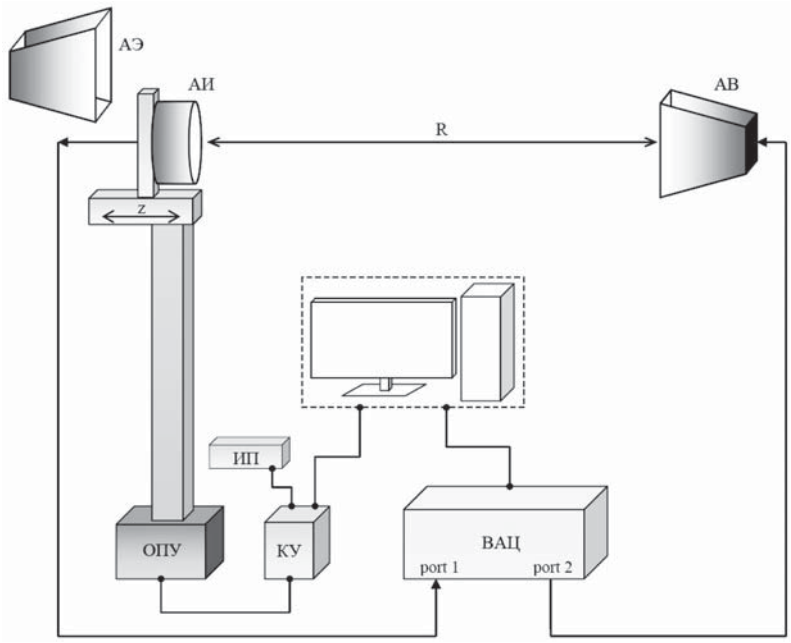


РИС. 1.

Структурная схема автоматизированного стенда: АЭ – антенна эталонная, АИ – антенна исследуемая, АВ – антенна вспомогательная, ИП – источник питания, ОПУ – опорно-поворотное устройство, КУ – контроллер управления, ВАЦ – векторный анализатор цепей

РЕАЛИЗОВАННЫЕ МЕТОДИКИ ИЗМЕРЕНИЙ

В основе методики автоматизированного измерения ДН антенны лежит метод вращающейся антенны [4], при котором исследуемая антенна вращается вокруг своей оси, а вспомогательная антенна установлена неподвижно на расстоянии R. Процедура определения ДН заключается в определении коэффициента передачи и фазы сигнала при последовательной ориентации исследуемой антенны на вспомогательную в азимутальной плоскости. Результатом измерений является зависимость значений коэффициента передачи и фазы сигнала от угловых координат.

Полученные в ходе измерения фазовой ДН данные могут быть использованы для определения положения центра излучения антенны (условного фазового центра), относительно которого поверхность равных фаз наименее отклоняется от поверхности сферы. Определение положения центра излучения выполняется на основе методики, изложенной в [5], суть которой заключается в нахождении такой точки вращения антенны в азимутальной плоскости (перемещение исследуемой антенны вдоль оси Z, рис. 1), при которой на заданной частоте и в указанном угловом секторе отсутствует зависимость фазы от угловых координат.

Для измерения КУ применен метод замещения, в котором последовательно подключают к приемному порту ВАЦ исследуемую и эталонную антенны (с известными значениями КУ), ориентируя главный максимум ДН на вспомогательную, сравнивают измеренные значения амплитуды сигнала, после чего КУ исследуемой антенны определяют из соотношения

$$G_u = G_э + \left(S21_x - S21_{ref}\right), \text{дБ}; \quad (1)$$

где $G_э$ – известные значения КУ эталонной антенны; $S21_x$ – измеренный коэффициент передачи между исследуемой и вспомогательной антеннами; $S21_{ref}$ – измеренный коэффициент передачи между эталонной и вспомогательной антеннами.

Существует способ измерения КУ по методу двух идентичных антенн, при котором две совершенно идентичные антенны ориентируются главными максимумами навстречу друг другу, и при таком положении измеряется коэффициент передачи $S21_x$. В этом случае КУ исследуемой антенны равно

$$G_u = \left(\frac{4\pi R}{\lambda}\right)_{дБ} + \frac{S21_x}{2}, \text{дБ}; \quad (2)$$

Разработанный автоматизированный стенд также позволяет провести

измерения коэффициента эллиптичности (КЭ) по методу вращающейся линейно-поляризованной антенны (метод поляризованных диаграмм) [3]. Методика измерений подразумевает вращение измерительной линейно-поляризованной антенны с равным шагом вокруг оси (один оборот), совпадающей с направлением на центр исследуемой антенны с вращающейся поляризацией. При каждом угловом положении измеряют коэффициент передачи, при этом исследуемая антенна остается неподвижной на протяжении всего измерения. Полученная в результате измерений информация позволяет определить КЭ согласно (3), при этом приемлемым значением КЭ принято считать от 0 дБ до 3 дБ.

$$r_э = S21_{max} - S21_{min}, \text{ дБ}; \qquad (3)$$

где $S21_{max}$ – максимальное измеренное значение коэффициента передачи в пределах одного оборота; $S21_{min}$ – минимальное измеренное значение коэффициента передачи в пределах одного оборота.

ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ ПРОВЕДЕНИЯ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

Методика проведения автоматизированных измерений ДН антенны предполагает обязательное использование ОПУ. Для используемого в составе стенда ОПУ поставляется официальное программное обеспечение по управлению ОПУ при помощи ПК, однако оно имеет ряд недостатков, среди которых непосредственное участие пользователя при проведении измерений, при этом данное ПО не выполняет управление измерительным прибором (ВАЦ).

Ввиду упомянутых выше недостатков, с целью автоматизации процесса измерений параметров антенн, была разработана программа, состоящая из пяти модулей со следующими функциональными назначениями:

– модуль взаимодействия с ВАЦ по интерфейсу Ethernet;

– модуль взаимодействия с контроллером управления ОПУ по интерфейсу RS 232;

– модуль сбора и обработки данных, полученных при измерениях;

– модуль исполнения программы;

– модуль графического интерфейса.

Разработанная программа способна в автоматизированном режиме формировать и передавать команды управления на ВАЦ и контроллер управления ОПУ, выполнять сохранение и обработку полученных данных.

ОПИСАНИЕ ГРАФИЧЕСКОГО ИНТЕРФЕЙСА

Главное окно программы, представленное на рис. 2, содержит следующие поля:

– «Настройка персонального компьютера», которое позволяет подключить контроллер управления ОПУ к ПК по выбранному COM-порту;

– «Настройка контроллера», которое позволяет ввести границы значений поворота ОПУ в азимутальной плоскости в градусах, а также шаг поворота;

– «Настройка анализатора цепей», которое позволяет ввести границы измеряемого диапазона частот в МГц, количество частотных точек, выбрать S-параметр, задать полосу пропускания в кГц и мощность в дБм, а также указать какую из характеристик необходимо сохранять: фазо-частотную («Запись фазы») или амплитудно-частотную («Запись амплитуды»);

– «Журнал событий», которое позволяет отобразить запросы, формируемые от контроллера управления и ВАЦ в виде периодических сообщений, а также текущее состояние программы.

При нажатии кнопки «Старт» запускается автоматизированный процесс измерения ДН антенны, а процесс прохождения измерений отображается в строке прогресса ниже.

В процессе выполнения программы записываются файлы с полученными значениями фаз и амплитуд в соответствующие папки для их последующей обработки. По окончанию работы программы формируется текстовый файл, в котором в табличном виде представлена зависимость фазы и амплитуды от угловых координат для частотных точек в указанном диапазоне.

Во вкладке «Обработка» можно вызвать подпрограмму «Построение диаграммы направленности», с помощью которой можно оперативно построить ДН антенны, используя полученные результаты (рис. 3).

Используя сформированный по результатам измерений файл, можно определить для каких частот текущая ось вращения антенны в азимутальной плоскости является центром излучения антенны. Для этого используем подпрограмму «Определение положения ФЦ» (рис. 4), в которой в соответствующих полях можно задать требования к изменению значений фазы, а также интересующий угловой сектор.

Во вкладке «Поляризационные характеристики» находится подпрограмма измерения коэффициента эллиптичности для антенн с вращающейся поляризацией (рис. 5). Указав границы частотного диапазона и количество точек, необходимо выполнить измерения коэффициента передачи для каждого углового положения измерительной антенны (например, 8 измерений с шагом 22.5 градуса). При нажатии кнопки «Определить КЭ» программа выполнит расчет и сформирует файл со значениями КЭ исследуемой антенны во всем диапазоне.

Измерение КУ методом замещения производится с помощью подпрограммы во вкладке «Коэффициент усиления» (рис. 6). Для этого требуется предварительно подготовить и загрузить файл со значениями КУ эталонной антенны в формате .txt. После чего необходимо выполнить два измерения коэффициента передачи, предварительно указав в соответствующем поле названия эталонной и исследуемой антенн, диапазон частот и количество точек. Кнопка «Определить КУ»

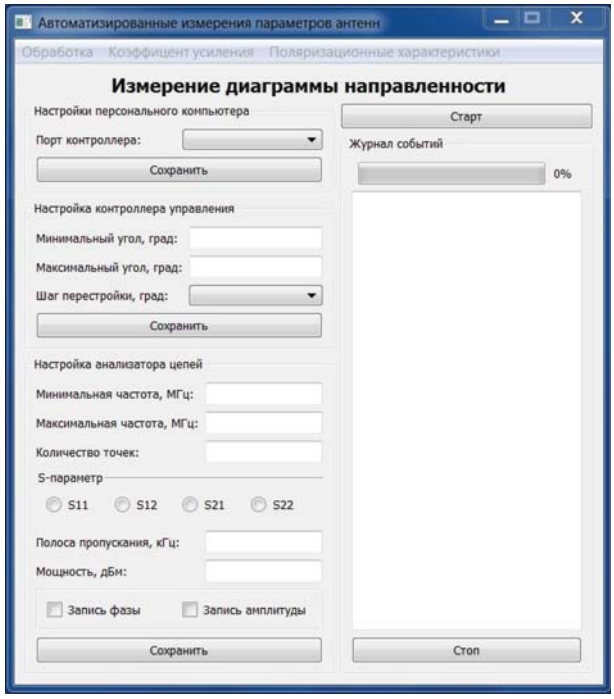


РИС. 2.
Главное окно программы измерения параметров антенн

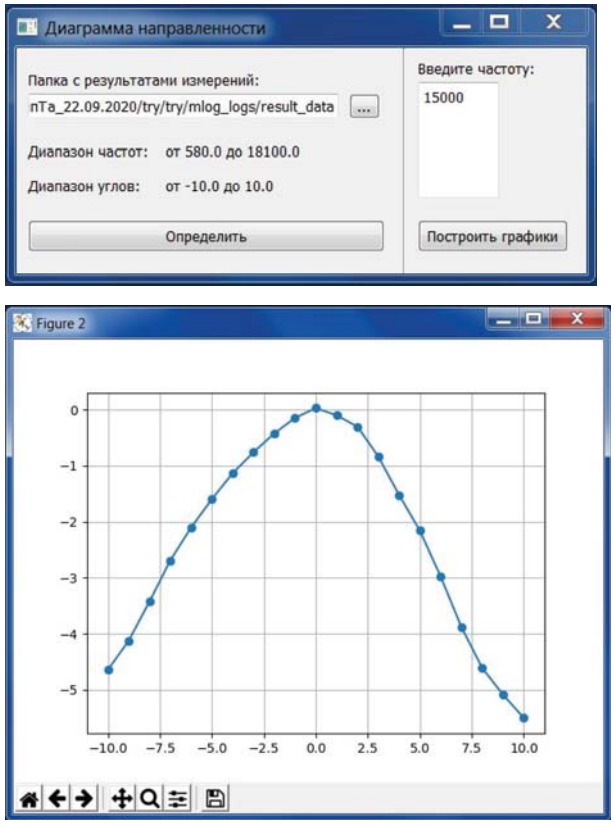


РИС. 3.
Построение амплитудной ДН антенны по измеренным данным

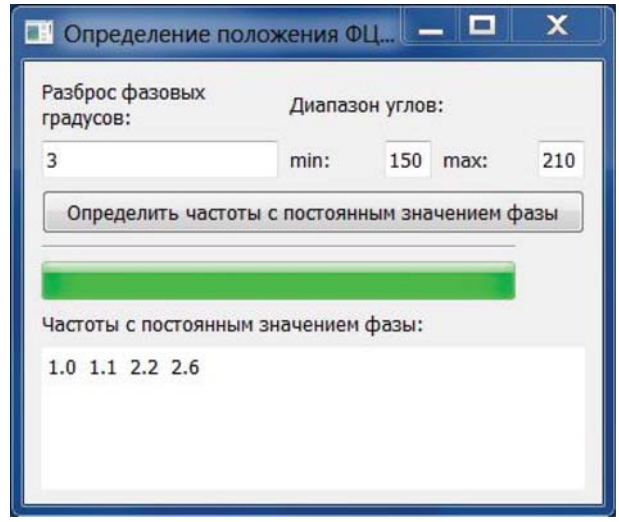


РИС. 4.
Результаты определения центра излучения антенны

сформирует файл с рассчитанными значениями КУ во всем частотном диапазоне, а также автоматически построит график.

ВЫВОДЫ

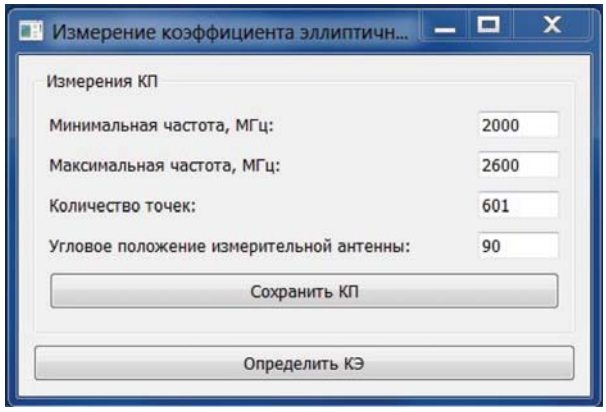
Представленный в данной работе стенд для измерений параметров антенн позволяет упростить проведение широкого круга антенных измерений путем применения автоматизированного управления процессом измерений.

Полученные в ходе разработки стенда результаты подтвердили, что применение программы для автоматизации измерений позволяет снизить временные затраты на проведение измерений без потери точности измерения параметров антенн.

Эффективность измерений параметров антенн при использовании разработанного автоматизированного стенда повышается вследствие исключения пользователя из процесса измерений. Точность установки угла ОПУ определяется его техническими характеристиками, а сохранение результатов измерений и формирование полученных данных исключает ошибку пользователя при обработке результатов.

Литература

1. **Андриянов А.В.** Автоматизированная система измерения параметров антенн. «Датчики и системы», 2013. №4. С. 32–36.
2. **Зубков М.П., Мухаметова А.А., Малков О.Б.** Автоматизированная система управления процессом измерения характеристик антенн. «Информационные технологии и автоматизация управления», 2019. С. 114–122.
3. **Страхов А.Ф.** Автоматизированные антенны измерения. Москва, «Радио и связь», 1985. 136 с.
4. **Фрадин А.З., Рыжков Е.В.** Измерение параме-



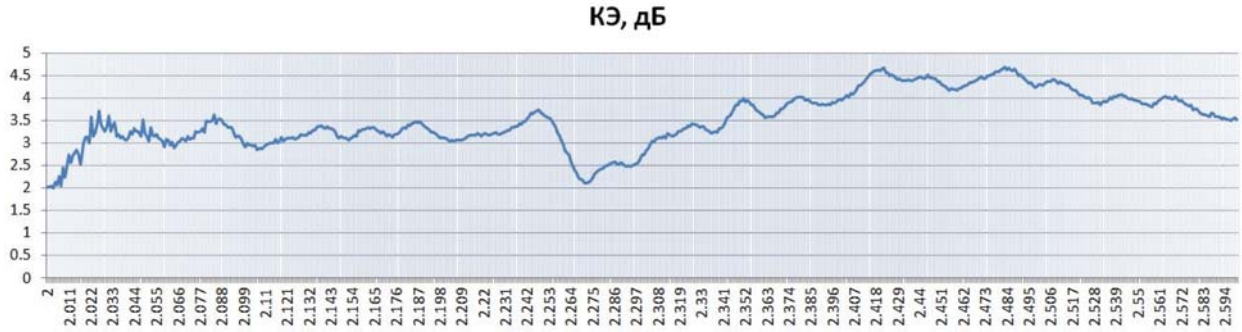
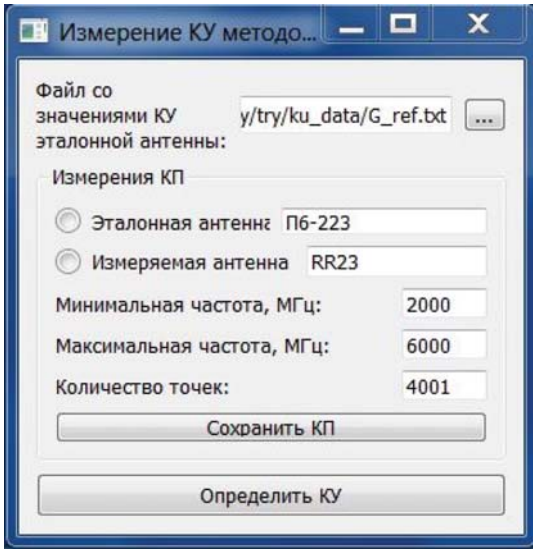


РИС. 5.
Окно программы измерения КЭ и результат измерений



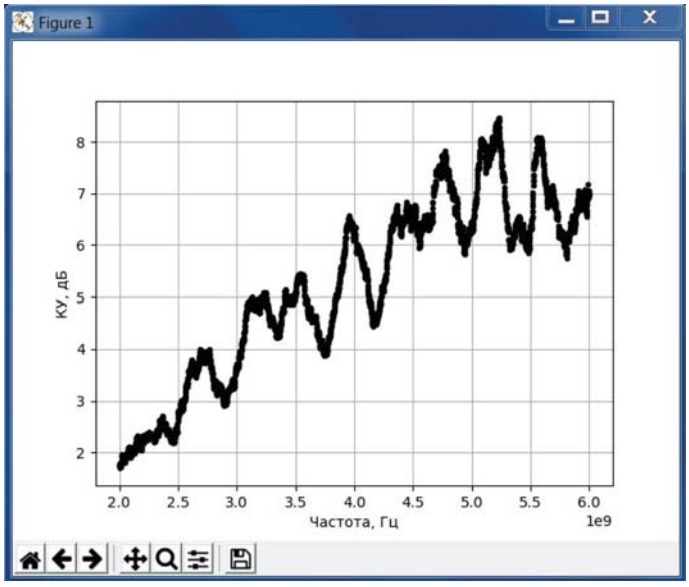


РИС. 6.
Окно программы измерения КУ и результат измерений

тров антенно-фидерных устройств. «Связьиздат», 1962. 312 с.

5. **Jun-ping S., De-min F., Ying-bo D.** Measurement of phase center for antenna with the method of moving reference point, IEEE. 2008
6. **Mayekar S., Bansode M., Rathod S.S.** An automated antenna pattern measurement system. International Conference on Intelligent Computing and Control. 2017.

Алимирзоев Рустам Родионович, начальник группы АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»
e-mail: alimirzoev.r@gmail.com
Ермолаев Андрей Михайлович, начальник группы АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»
e-mail: ermolaev.a.m.777@gmail.com
Порохов Игорь Олегович, к.т.н., начальник сектора АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»
e-mail: porokhov60@mail.ru

107078, г. Москва, Новая Басманная ул., д. 20, стр. 9, тел.: + 7 (499) 267-43-93; e-mail: post@cnirti.ru

УДК 628.7.036.54-63:662.61:534.83

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДЕМПФИРОВАНИЯ КОЛЕБАНИЙ ДАВЛЕНИЯ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ И ГАЗОГЕНЕРАТОРАХ ЖИДКОСТНЫХ РАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Р.А. Царапкин
Госкорпорация «Роскосмос»
Федеральное казенное предприятие
«Научно-испытательный центр
ракетно-космической
промышленности»

Предложен подход для оценки коэффициентов демпфирования колебаний давления в камерах сгорания (газогенераторах) форсированных ракетных двигателей, основанный на «жестком» возбуждении акустических колебаний определенной моды, последующей регистрации и обработки параметров, характеризующих реакцию процесса горения. Измеряются амплитуды колебаний давления до и после импульса, их частотные спектры. Разработано перспективное устройство для «жесткого» возбуждения высокочастотных колебаний давления, исключающее попадание металлических осколков в реакционный объём камеры сгорания. Приведены рекомендации для расчета акустических характеристик трактов сложных форм.

Ключевые слова: *ракетный двигатель, камера сгорания, акустические колебания, возмущающее устройство, декремент затухания, спектр, электрический взрыв проводников.*

EXPERIMENTAL DETERMINATION OF DAMPING DECREMENT ACOUSTIC VIBRATIONS IN COMBUSTION CHAMBERS OF LIQUID ROCKET ENGINES

R.A. Tsarapkin
State Corporation «Roscosmos»
Federal state enterprise
«Scientific Testing Center
of the Rocket and Space Industry»

An approach is proposing for assessing the damping decrements of pressure fluctuations in combustion chambers (gas generators) of forced rocket engines, based on "hard" excitation of acoustic vibrations of a certain mode, subsequent registration and processing of parameters characterizing the reaction of the combustion process. The amplitudes of pressure fluctuations before and after the pulse, their frequency spectra are measured. A promising device has been developing for «rigid» excitation of high-frequency pressure fluctuations, preventing metal fragments from entering the reaction volume of the combustion chamber. Recommendations are giving for calculation of acoustic characteristics of paths of complex forms.

Key words: *rocket engine, combustion chamber, acoustic vibrations, disturbing device, damping decrement, spectrum, electrical explosion of conductors.*

ВВЕДЕНИЕ

Акустические колебания давления в камерах и газогенераторах жидкостных ракетных двигателей (ЖРД) стали причиной значительного количества аварий, как при конструкторской отработке двигателей, так и при летных испытаниях ракетно-космических комплексов [12]. Материальные потери вследствие этих аварий были исключительно велики, в особенности, при запусках дорогостоящих космических аппаратов (КА) различного назначения. Все двигатели перед установкой на ракету проходили контрольно-технологические испытания, т.е. сам факт работоспособности при контрольных испытаниях не являлся доказательством достаточности запаса устойчивости рабочего процесса. Акустическая неустойчивость (неустойчивость горения) в агрегатах (в камерах сгорания и газогенераторах) ЖРД проявляется в самопроизвольном развитии автоколебаний с большими амплитудами параметров, характеризующих рабочий режим ракетного двигателя: давления, скорости, температуры газа и т.д., относительно их средних значений. При работе двигателя на стационарном или переходном режимах в камере сгорания (генераторе) присутствуют колебания давления с широким спектром частот, обусловленные различными механизмами возбуждения и имеющими различную физическую природу. К основным ис-

точникам колебаний можно отнести взаимодействие процесса горения с акустическими свойствами камер с обратной связью по давлению (внутрикамерные автоколебания) [2, 3, 4], а также возможное взаимодействие пульсаций, создаваемых насосами и турбиной [12, 13], с процессом преобразования топлива в продукты горения, либо влияние возмущений в трактах охлаждения на процессы впрыска с образованием сложной системы обратных связей и т.д. .

Колебания давления в камере сгорания подразделяют на собственные и вынужденные. Вынужденные колебания генерируются источниками, расположенными вне объема камеры сгорания, однако они могут влиять на процесс преобразования топлива в продукты сгорания. Высокочастотная неустойчивость рабочего процесса в ЖРД определяется связью колебаний давления с процессами тепло- и массоподвода при горении [1–8, 11–16].

Из-за отсутствия достоверных расчетных методик количественной оценки запасов устойчивости по отношению к акустическим колебаниям рабочего процесса в агрегатах в серийное производство поступали ЖРД с недостаточными запасами устойчивости.

При проектировании камер и газогенераторов ЖРД существует целый ряд вопросов, решение которых необходимо для обеспечения устойчивости рабочего процесса на всех требуемых режимах и при всех внешних условиях работы двигателя. При этом достигнутые запасы устойчивости рабочего процесса в камерах сгорания и газогенераторах должны контролироваться и сохраняться за весь период производства и поставок двигателя на ракету.

Экспериментальные методы искусственных возмущений и естественных «шумов» позволили по сравнению с другими известными подходами получить количественные оценки запасов устойчивости рабочего процесса [3, 4, 6, 12, 13]. Первый метод аналогичен применяемому в математике для исследований устойчивости систем уравнений: в работающую камеру сгорания или газогенератор вводится искусственное возмущение, в другом случае используются естественные возмущения рабочего процесса – «шумы при горении». Для этого были выработаны соответствующие критерии, количественно характеризующие запасы устойчивости, обеспечивающие гарантию работоспособности двигателя на всех требуемых режимах и внешних условиях, предусмотренных техническим заданием.

Анализ естественных «шумов» дает большой объем информации о запасах устойчивости рабочего процесса и, кроме того, позволяет при серийном производстве двигателей осуществлять контроль стабильности производства в части сохранения запаса устойчивости.

Математическую модель ЖРД можно представить в виде полной системы нелинейных уравнений [1–3, 5, 11, 13]. Введем возмущения, не нарушающие эту систему. Представим отклик системы на возмущения в виде суммы выражений [12]:

$$y = Ay_0 \exp\left(-\int_0^t \delta dt\right) \cdot \sin\left(\int_0^t \omega dt + \phi_0\right), \quad (1)$$

где Ay_0 – начальная амплитуда отклонения; $\delta = \delta(t)$, $\omega = \omega(t)$ – коэффициент демпфирования и частота колебаний; ϕ_0 – начальная фаза колебаний.

Коэффициент демпфирования колебаний имеет следующий физический смысл [5, 12]:

$$\delta = \left(E_2 - E_1\right) / 2E_{\Sigma}. \quad (2)$$

где E_2 – поток колебательной энергии (в единицу времени), диссипируемый системой; E_1 – поток колебательной энергии, поступающей в систему; E_Σ – полная энергия колебаний в системе.

Экспериментально полученные в камерах сгорания и газогенераторах ЖРД колебания можно анализировать, представляя в виде (1). Величины δ и ω полностью характеризуют колебания, это позволяет использовать их в качестве экспериментальных показателей устойчивости.

Для определения экспериментальных значений коэффициента демпфирования колебаний давления, в том числе, и по шумам могут быть применимы методы: спектральный, корреляционный, амплитудный и метод мгновенного периода. В экспериментальных исследованиях устойчивости рабочего процесса в ЖРД наибольшее распространение получили спектральный и корреляционный методы [3, 4, 12].

Коэффициент демпфирования колебаний давления, определяемый по спектральному методу, вычисляется по ширине спектра мощности сигнала $S(f)$, рис. 1.

Для детализации сложного колебательного процесса в камерах сгорания выполняется учет ширины спектра посредством конкретного фильтра Δf спектроанализатора. В используемом алгоритме применен трехточечный метод, учитывающий зависимости подъемов слева и справа, фона и других помех, относительно обсчитываемой точки. Одновременно выполняется перебор соседних пар точек вблизи максимума, далее выбирается пара точек, у которой получается минимальная сумма величины коэффициента демпфирования и его расчетного разброса. Корреляционый метод используется для вычисления коэффициента демпфирования по величине скорости затухания взаимокорреляционной функции $B(\tau)$, иллюстрация схемы расчета приведена на рис. 2 [3, 4, 12].

Идентификация спектра частот колебаний проводится с целью выделения собственных частот исследуемого акустического тракта, на которых в процессе отработки изделия реализуется усиление колебаний (резонанс). Основным методом является сравнение

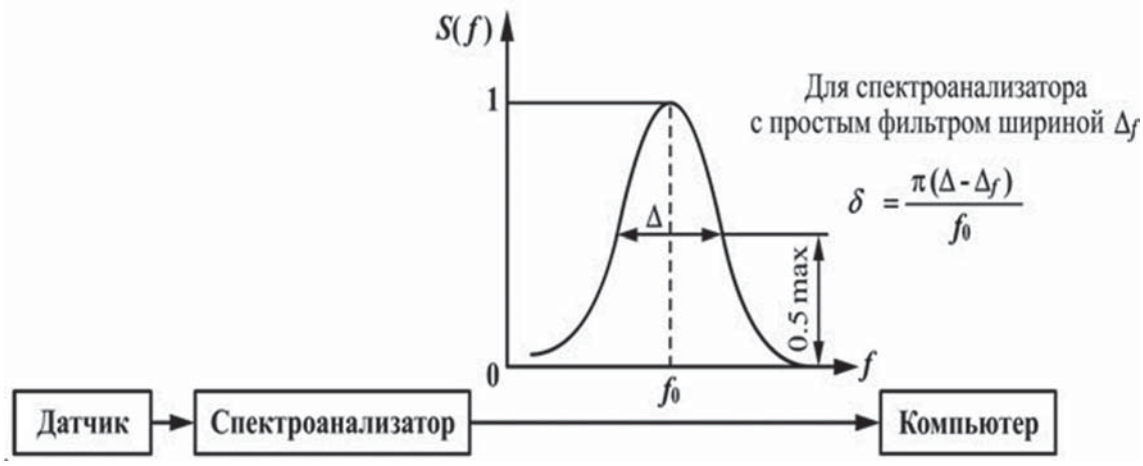


РИС. 1.
Схема определения коэффициента демпфирования колебаний давления по спектральному методу.
Обозначения: S(f) – спектр мощности; f_0 – резонансная частота; Δ – ширина $S(f)$ на уровне 0,5 max.

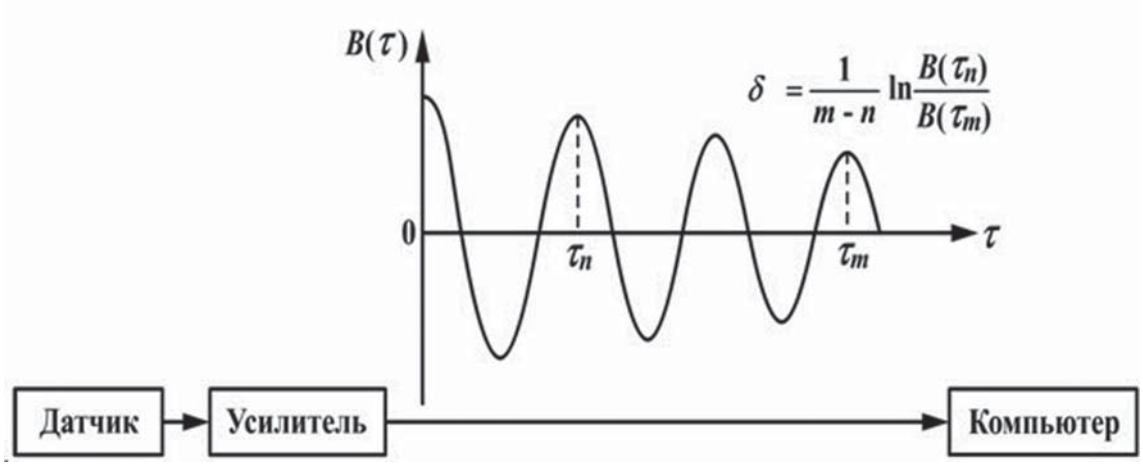


РИС. 2.
Схема определения коэффициента демпфирования колебаний корреляционным методом.
Обозначения: τ_n и τ_m – времена, соответствуют максимумам функции B(τ) для *n*-го и *m*-го периода колебаний B(τ)

экспериментальных частот с расчетными значениями для собственных форм колебаний газового объема тракта. Сведения о значениях других различных параметров необходимы для статистики и уточнения их предельных значений, а также при необходимости внесения изменений в конструкцию камеры сгорания, влияющих на устойчивость.

Для создания алгоритмов по количественной оценке запаса устойчивости ЖРД потребовалось решение ряда задач:

– выбор оптимальных показателей устойчивости процесса;

– разработка аппаратуры для регистрации и обработки исходной информации;

– исследование связи показателей устойчивости с конструктивными и режимными параметрами двигателей;

– определение требуемых значений показателей для обеспечения достаточных запасов устойчивости рабочего процесса двигателей различных схем.

СПОСОБЫ СОЗДАНИЯ ИСКУССТВЕННЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ И ГАЗОГЕНЕРАТОРАХ ЖРД

Известны следующие способы внесения возмущений в испытуемой камере ЖРД, работающей на номинальном режиме:

– путем создания гармонических пульсаций или импульсных возмущений в системе подачи;

– путем вдува нейтрального газа для создания возмущений давления в заданном сечении вблизи периферийной части камеры;

– путем подрыва заряда пиропатрона (внутрикамерного возмущающего устройства – ВВУ и внеш-

него импульсного устройства – ВИУ) с возмущением полей давления и скоростей в камере сгорания.

Исследования устойчивости рабочего процесса путем создания гармонических колебаний расхода на входе в камеру сгорания с использованием методических решеток подробно представлены в работах [5, 6].

При оценке запасов устойчивости рабочего процесса в камере степень приближения инициируемых возмущений, по отношению к возникающим в реальных условиях, зависит от места положения ввода и величины импульса, создаваемого внешним устройством. Вдув газа в камеру сгорания приводит к созданию импульсного возмущения расхода и изменению распределения скорости газов. ВВУ и ВИУ генерируют мощные импульсы давления, а возмущения скорости газа существуют только в начальный момент и кратковременны. Достоверность полученных оценок устойчивости зависит от того, насколько тот или другой метод создания возмущений воспроизводит реальный механизм импульсного возбуждения акустической неустойчивости горения. Например, сферический фронт волны давления может привести к последующему дроблению крупных капель и уменьшению времени преобразования топлива в продукты горения, что в целом изменит динамические характеристики процесса горения. Внешние импульсные устройства (ВИУ) создают направленное возмущение давления, благодаря этому можно инициировать конкретные моды неустойчивости, например, тангенциальные колебания. Для определения склонности камеры сгорания к какой-то либо моде неустойчивости, стараются разместить ВВУ так, чтобы инициировать наибольшее число собственных форм колебаний. Требования, предъявляемые к ВВУ и ВИУ, изложены в [2–4, 5–7, 9, 11–14]. Эти устройства должны обеспечивать:

– соответствие амплитуды возмущений наиболее часто наблюдаемых естественных импульсов давления в камерах сгорания или газогенераторах;

– спектральный состав импульса должен обладать таким распределением энергии по частотам, чтобы происходило возбуждение в камере сгорания (как акустическом резонаторе) колебаний давления достаточной интенсивности в рассматриваемой области частот;

– возможность изменения амплитуды в желаемом диапазоне и стабильность характеристик при повторном возмущении, ряд периодических импульсов;

– ввод возмущений в широком диапазоне значений давления.

При этом на ВИУ накладываются эксплуатационные ограничения, например, минимально допустимый диаметр входного отверстия для ввода возмущений с целью уменьшения воздействия на целостность камеры сгорания, а также минимальные габариты и стойкость к повышенным температурам, вибрациям и др. .

Наиболее важным является выбор места ввода возмущения. Ответ на этот вопрос можно найти из прогнозирования моды и частоты собственных колебаний тракта, либо исходя из статистики на основе многочисленных экспериментов.

Конструкция ВВУ и ВИУ представляет собой изолированный корпус с заключенной в нем навеской взрывчатого вещества (ВВ) и детонатором для инициирования взрыва. Корпус обычно изготавливается в виде цилиндра, но несмотря на это форма генерируемой волны ВВУ трансформируется в процессе распространения в сферическую. У ВИУ внешняя торцевая часть представляет собой мембрану, которая после подрыва ВВ вместе с продуктами горения по каналу попадает в камеру сгорания. В качестве взрывчатого вещества ВВУ используется гексоген, либо тетранитрат пентаэритрита (ТЕН) и другие детонирующие ВВ, обладающие необходимой бризантностью. Амплитуда возмущений давления пропорциональна энергии, выделяемой при взрыве, и зависит от объема ВВ и давления прорыва мембраны. При взрыве навесок ВВ, больших 1 г, возникают две последовательные ударные волны, которые далее в канале преобразуются в одну, причем вторая имеет большую амплитуду, чем первая. Плоская в канале ВИУ ударная волна в камере сгорания становится близкой к полусферической. При подрыве навесок ВВ, меньших 0,9 г, инициируется одиночная ударная волна. Величина навески ВВ из-за необходимости создания возмущения давления определенной амплитуды зависит от объема испытуемой камеры. Желательно создание ударной волны с крутым фронтом, а еще предпочтительней создание серии таких ударных волн, например, пятизарядным устройством с применением низкоскоростной детонации [4], рис. 3.

При большой величине навески ВВ в составе ВВУ или ВИУ возможны деформации огневой стенки камеры сгорания (газогенератора), сопел форсунок, либо повреждения мембран датчиков давления и др. . Деформация стенок камеры сгорания от разлета осколков ВВУ в виде вмятин со скругленными или острыми краями является недопустимой, поэтому применяются меры для устранения таких нежелательных воздействий. В этой связи важно создание эффективных инициирующих устройств, обладающих достаточной энергией взрыва, и одновременно, лишенных указанных недостатков. Применительно к этому разработаны перспективные устройства, в которых детонатором и источником тепловой энергии является взрывающаяся проволока. На рис. 4 представлено одно из простейших конструктивных решений [9]. Ударная волна возбуждается в реакционной камере 9, заполненной азотом или гелием, за счет высоковольтного разряда в плазменном канале, образующемся при испарении медной проволоки 10 диаметром 0,8 мм. Этот метод создания искусственных возмущений давления до-

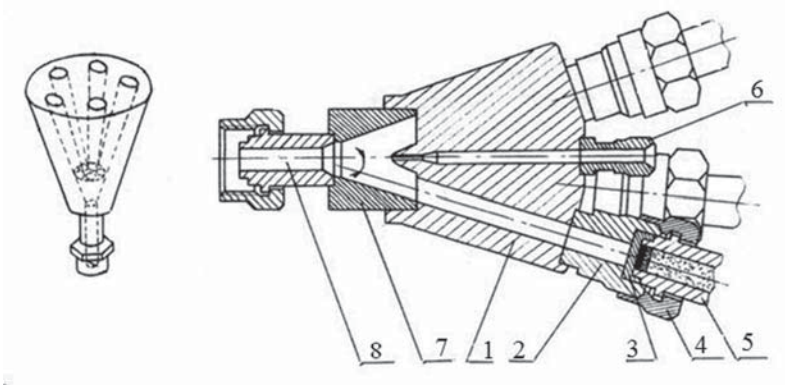


РИС. 3.

Пятизарядное камерное возмущающее устройство.

Обозначения: 1 – корпус; 2 – штуцер; 3 – мембрана; 4 – накидная гайка; 5 – зарядная камера с взрывчатым веществом (гексоген); 6 – штуцер продувки; 7 – переходная втулка; 8 – выходной канал.

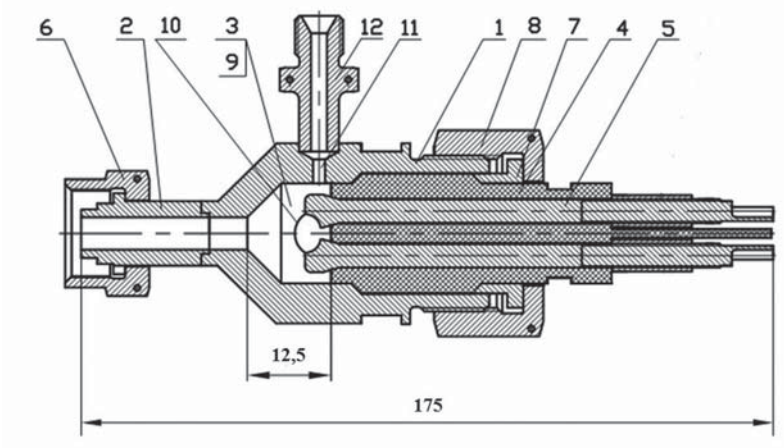


РИС. 4.

Конструкция импульсного электровзрывного возмущающего устройства (ИЭВУ). Обозначения: 1 – корпус; 2 – ниппель; 3 – реакционная камера; 4 – изолятор; 5 – электроды; 6, 8 – накидная гайка; 7 – нажимная втулка; 9 – камера вдува нейтрального газа; 10 – медная проволока; 11, 12 – канал и штуцер для подвода нейтрального газа

веден до величин энергии взрыва, сопоставимых с зарядом ВВ, и проходит апробацию. Для этой цели используется подсоединяемая к модельной камере натурная форсунка, работающая на газообразных компонентах при атмосферном давлении и электроимпульсное возмущающее устройство, установленное на периферии модельной камеры. Функциональная схема участка экспериментальной установки схематично изображена на рис. 5. Модельная камера сгорания 1, с диаметром $D_к$=184 мм и длиной L=280 мм, охлаждается водой. Она установлена вертикально на металлической охлаждаемой пластине с отверстием. В это отверстие вставлена обвязка с эмульсионной форсункой 2, либо с блоком из пяти двухкомпонентных струйных форсунок 14. Электроды через разъединитель цепи 6 соединены кабелем с высоковольтным конденсатором 7, заряжаемым от высоковольтного источника 8 типа ВС 23. Для замера пульсаций давления в камере установлены два датчика пульсаций, расположенных в той же горизонтальной плоскости, что и устройство для ввода возмущений. Датчик Д1 расположен рядом с источником импульсов давления 3 под углом 29° к диаметру, проходящему через 3, а датчик Д2 размещен напротив 3, рядом с форсункой. В отверстия вставлены два акустических зонда, состоящие из трубок-волноводов 9 и 10 с датчиками пульсаций ЛХ-610. Сигналы с датчиков усиливаются широкополосными усилителями 11 типа У7 1 и У7 6, записываются и далее обрабатываются с помощью программного комплекса на компьютере 12. На экран монитора выводятся осредненные в темпе испытания спектр пульсаций с датчика Д1, амплитуда и частота главного спектрального максимума, а также значения расходов компонентов топлива. Для визуального контроля пульсаций используется осциллограф 13 типа С1 69.

Импульс давления газа в объеме камеры сгорания инициируется следующим образом. От источника высокого напряжения ВС 23 производится зарядка конденсатора 7 напряжением U= 2400 В и далее цепь замыкается контактом 6. Электрический ток, проходящий через проволочку 5, в очень короткий промежуток времени, практически мгновенно ее перегревает и она испаряется. Выделенное тепло поглощается нейтральным газом – азотом, который подается через канал и в результате создается импульс давления газа. Импульсы давления генерировались для трех рабочих режимов – на заведомо устойчивом режиме, в области гистерезиса автоколебаний и в области самовозбуждения автоколебаний. Основной интерес представляла оценка реакции рабочего процесса на импульс давления от ЭИВУ в области гистерезиса автоколебаний, известной как область потенциальной неустойчивости к различного рода возмущениям.

Запас устойчивости к жесткому возбуждению является достаточным, если после введения импульсного возмущения колебания давления затухают достаточно быстро и выполняется определенное соотношение между начальным пиком и значением давления газа в камере до его создания. Однако подбор оптимальных

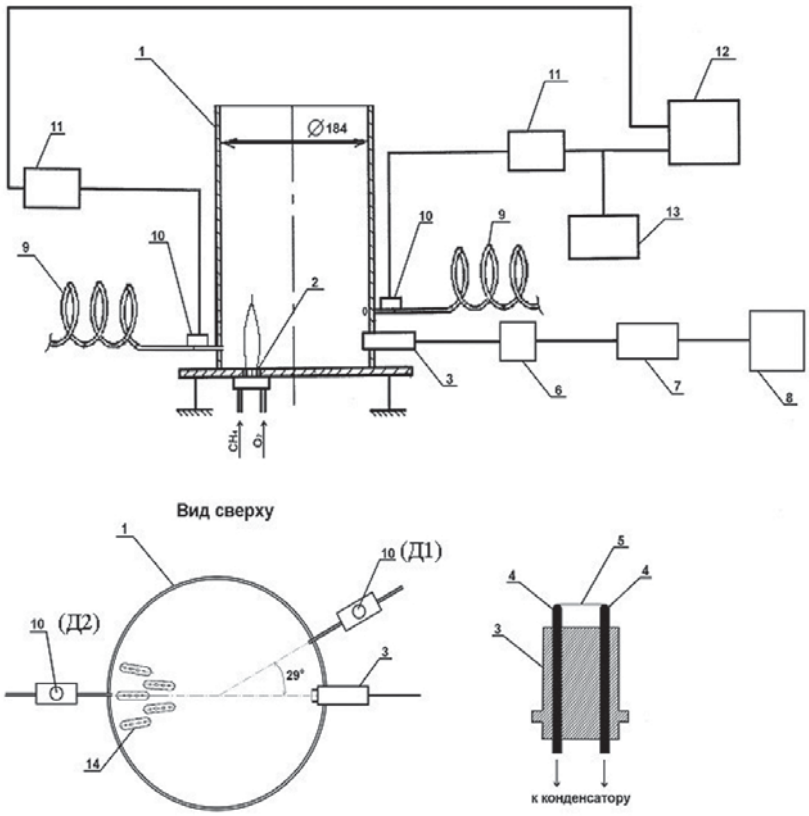


РИС. 5.

Схема экспериментальной установки для исследования устойчивости рабочего процесса по отношению к «жесткому» возбуждению высокочастотных колебаний. Обозначения: 1 – модельная камера сгорания; 2 – форсунка; 3 – корпус и изолятор ИИВУ; 4 – электроды; 5 – медная проволока; 6 – выключатель (размыкатель) электрической цепи; 7 – блок конденсаторов; 8 – высоковольтный источник; 9 – волноводы; 10 – высокочастотные датчики давления; 11 – широкополосные по частоте аналоговые усилители; 12 – компьютер; 13 – осциллограф; 14 – форсуночная головка (объект исследования)

соотношений параметров рабочего процесса, необходимых для оценки достаточных запасов устойчивости по отношению к акустическим модам колебаний, потребовал обработки большого объема статистических данных для ряда двигателей [4, 11, 12].

Минимальный импульс от искусственного возмущения выбирается с учетом того, что:

– должен превышать величину, ниже которой может возникнуть вероятностное возбуждение неустойчивости рабочего процесса;

– должен значительно превышать уровень пульсаций «шума» для обеспечения вычисления параметров устойчивости с достаточной точностью. Максимальное значение начального импульса давления должно быть ограничено из-за минимального вмешательства в рабочий процесс исследуемой камеры сгорания, либо газогенератора.

Установлено, что для оценки устойчивости рабочего процесса к конечным возмущениям необходимо [3, 4, 12] ввести импульс давления в пределах $15A_{св} < Ам < 25A_{св}$ и определить время релаксации $t_{релакс}$.

где $A_м$ – среднее значение абсолютного максимума импульса; $A_{св}$ – средневыпрямленное значение пульсаций естественных шумов; $t_{релакс} = t_1 + t_е$ – полное время релаксации рабочего процесса; t_1 – время воздействия на рабочий процесс первой волны возмущения; $t_е$ – время уменьшения амплитуды колебаний давления в е раз.

Камера сгорания считается устойчивой к конечным возмущениям, если $t_{релакс} < 15$ мс. При испытании натурных двигателей нужно производить оценку коэффициентов демпфирования и спектров колебаний давления до введения возмущения и после затухания колебаний. Коэффициенты демпфирования колебаний давления и спектры не должны отличаться в пределах точности измерений. Существенное их отличие будет означать нестабильность рабочего процесса.

ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ РАСЧЕТА СОБСТВЕННЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ЧАСТОТ ГАЗОВЫХ ТРАКТОВ АГРЕГАТОВ ЖРД

Параметры применяемые для контроля устойчивости:

– амплитуда колебаний давления естественных и искусственных возмущений в камере сгорания (газогенераторе);

– границы устойчивости в координатах параметров;

– параметры амплитудного спектра колебаний давления в предфорсуночных полостях горючего и окислителя, величины виброускорений в осевом и радиальном направлении;

– идентификация спектра частот колебаний.

Идентификация спектра частот колебаний проводится с целью выделения собственных частот исследуемого акустического тракта, на которых в процессе отработки изделия реализуется усиление колебаний (резонанс). Основным методом является сравнение экспериментально полученных с расчетными значениями частот собственных форм колебаний газового объема камеры сгорания.

Для двигателей без дожигания газогенераторного газа собственные частоты камеры сгорания определяются как для цилиндра с эквивалентной длиной [3, 4]

$$L_{ЭКВ} = L_Ц + \frac{2}{3} L_{СУЖ}, \qquad (3)$$

где $L_ц$ – длина цилиндрической части камеры сгорания; $L_{СУЖ}$ – длина дозвуковой (сужающейся) части сопла.

Частота продольных колебаний определяется по формуле

$$f = n\frac{C}{2L_{ЭКВ}}(n = 1, 2, ...), \quad (4)$$

где C – скорость звука в продуктах сгорания, n – тон колебаний.

Частоту комбинированных форм колебаний можно определить по зависимости

$$f = \sqrt{f_0^2 + f_1^2}, \quad (5)$$

$$f_0 = \frac{a \times C}{D}; f_1 = (n + 0,5)\frac{C}{2L_{ЭКВ}}(n = 1, 2, ...). \quad (6)$$

где α = 0,586 для 1-го тона тангенциальных колебаний, α = 0,972 для 2-го тона тангенциальных колебаний и т.д. [3, 4].

При наличии антипульсационных перегородок длиной l частота поперечных колебаний f вычисляется по соотношению

$$\frac{L}{D_Ц} = \frac{f/f_0}{2\pi\alpha} arctg\sqrt{\left(\frac{f}{f_0}\right)^2 - 1}. \quad (7)$$

Частоту определяют путем построения графика $\frac{L}{D_Ц}$ в зависимости от f/f_0 По этой же формуле рассчитывается частота поперечных колебаний с учетом влияния холодной зоны длиной l, примыкающей к огневому днищу форсуночной головки.

Для двигателей схемы с дожиганием генераторного газа в камере сгорания расчет частот собственных форм акустических колебаний можно выполнить по приведенным выше соотношениям, но при этом следует иметь в виду, что значения частот в этом случае получаются с меньшей точностью из-за неучтенного влияния объема газовода.

Оценка влияния газовода длиной $L_Г$ может быть выполнена по зависимости [4]

$$f_{ПР} = n\frac{C}{2\left(L_{ЭКВ} + L_Г\frac{C}{C_Г}\right)}(n = 1, 2, ...). \quad (8)$$

Здесь $C_г$ – скорость звука в газоводе.

Для оценок собственных частот газогенератора можно использовать формулы (3) – (8), с учетом скорректированных значений скорости звука в продуктах сгорания газогенератора. Длина газогенератора определяется как длина газового тракта вдоль осевой линии от огневого днища до соплового аппарата турбины. В сложных случаях определение собственных частот газового тракта осуществляется путем холодного озвучивания полостей натурных или модельных агрегатов ЖРД с помощью акустического излучателя. При холодном озвучивании реальных камер сгорания предпочтительно заменить камеру на модельный тракт в форме отрезка цилиндрической трубы длиной $L_{ТР} = L_{ЭКВ}\frac{C_Г}{C}$ и диаметром $D_{ТР} = D\frac{C_Г}{C}$. При этом граничные условия слева моделируются установкой реальной форсуночной головки. Переход от трубы до форсуночной головки в большинстве случаев является конусом, его длина выбирается равной предполагаемой длине «холодной» зоны l = (30 – 40) мм. Инициирование поперечных колебаний осуществляется через отверстие в боковой стенке труб акустическим излучателем, а торец трубы остается открытым. Продольные акустические колебания возбуждаются с торца трубы, на который устанавливается заглушка с центральным отверстием для излучателя. В случаях, когда спектр резонансных частот оказывается загущенным и сравнение расчетных значений собственных частот и полученных экспериментально затруднительно, то рекомендуется по [4]:

– сопоставление спектров, измеряемых в различных точках газовых трактов (камер сгорания, газогенераторов и др.), предфорсуночных полостях, в магистралях после ТНА и др., и определение коэффициентов взаимной корреляции по измеряемым параметрам;

– сопоставление (по соотношениям последовательных значений частот) конечных участков измеренного и расчетного (модельного) спектра;

– сопоставление на соответствующих частотах амплитуд колебаний в различных точках камер сгорания, находящихся в одном поперечном сечении. Амплитуды акустических колебаний в различных точках должны быть примерно одинаковыми. Исключения могут составлять автоколебания (акустические колебания с сильно выраженной нелинейностью), а также случаи, когда существуют условия для установления преимущественной ориентации акустического поля при поперечных колебаниях, излучением от антипульсационных перегородок, секционных головок и др. При изменении режима работы камеры сгорания (газогенератора) одновременное и одинаковое изменение частот спектров, измеренных в различных точках, свидетельствует об их общей природе;

– сравнение спектра естественных пульсаций давления со спектром возбуждаемых колебаний при внесении импульса, при котором реализуются акустические колебания собственных форм газового тракта.

ВЫВОДЫ:

Предложена методика оценки запасов ВЧ-устойчивости рабочего процесса в камерах сгорания (газогенераторах) высокоэнергетичных ЖРД, основанная на жестком возбуждении акустической неустойчивости в газовых трактах и последующем анализе реакции процесса горения. Для «жесткого» возбуждения высокочастотных колебаний давления в камерах ЖРД разработано перспективное электроимпульсное возмущающее устройство, исключающее повреждение конструкции элементов камер сгорания.

Литература

1. **Бирюков В.И., Белая А.Ю.** Обеспечение устойчивости рабочего процесса в камере сгорания жидкостных ракетных двигателей // Вестник Московского авиационного института. 2011. Т. 18. №3. С. 110–115.
2. **Бирюков В.И., Мосолов С.В.** Акустика газовых трактов жидкостных ракетных двигателей. М.: Изд-во МАИ, 2013. 164 с.
3. **Бирюков В.И., Мосолов С.В.** Динамика газовых трактов жидкостных ракетных двигателей. М.: Изд-во МАИ, 2016. 168 с.
4. Двигатели ракетные жидкостные. Методика оценки высокочастотной устойчивости рабочего процесса. ОСТ В92-9000-78, НИИхиммаш, 1978. 105 с.
5. **Лебединский Е.В., Калмыков Г.П., Мосолов С.В., и др.; Под ред. Коротеева А.С.** Рабочие процессы в жидкостном ракетном двигателе и их моделирование. М.: Машиностроение, 2008. 512 с.
6. **Лебединский Е.В., Лозино-Лозинская И.Г., Меркулов И.В. и др.** Акустические средства борьбы с неустойчивостью горения. М.: Изд-во ФГУП «Центр Келдыша», 2004. 205 с.
7. **Мосолов С.В., Бирюков В.И.** Антипульсационные перегородки как средство подавления акустических колебаний в камерах жидкостных ракетных двигателей // Вестник машиностроения. 2011. №11. С. 6–11.
8. **Мосолов С.В., Бирюков В.И.** Гидродинамические способы обеспечения устойчивости рабочего процесса в камерах сгорания жидкостных ракетных двигателей // Вестник машиностроения. 2011. №12. С. 12–17.
9. **Нарижный А.А., Пикалов В.П., Царапкин Р.А.** Патент РФ № 2523921 C1 от 31.05.2013 г. Генератор импульсов давления в акустических полостях камер сгорания и генераторов жидкостных ракетных двигателей / Бюллетень изобретений №21 от 27.07.2014.
10. **Скучик Е.** Основы акустики. М.: Мир, 1976. Т. 2. 542 с.
11. **Шибанов А. А., Пикалов В.П., Сайдов С.С.** Методы физического моделирования высокочастотной неустойчивости рабочего процесса в жидкостных ракетных двигателях / Под ред. д-ра техн. наук Денисова К.П. М.: Машиностроение / Машиностроение – Полет, 2013. 512 с.
12. **Dranovsky M.** Combustion Instabilities in Liquid Rocket Engines: Testing and Development Practices in Russia, Progress in Astronautics and Aeronautics // Reston, Virginia, AIAA, 2007. Vol. 221. 320 p.
13. **Editor Harrje David T., associate Editor Reardon Frederick H.** Liquid propellant rocket combustion instability. Washington, National aeronautics and space administration, 1972. 637 p.
14. Liquid Rocket Engine Combustion Stabilization Devices. USA, Nasa Space Vehicle Design Criteria (Chemical Propulsion), 1974. SP 8113. 127 p.
15. **Mosolov S.V., Biryukov V.I.** Maintenance of Operational Stability in Liquid-Propellant Rocket Engines by Adjusting the Acoustic Properties of the Combustion Chambers // Russian Engineering Research. 2013. Vol. 33. № 6. P. 313–318.
16. **Yang V.,Anderson W.** Liquid Rocket Engine Combustion Instability, Progress in Astronautics and Aeronautics // Washington, D. C., AIAA, 1995, Vol. 169. 580 p.

Царапкин Роман Александрович,
начальник группы Госкорпорации «Роскосмос» Федерального казенного предприятия «Научно-испытательный центр ракетно-космической промышленности»

141320, Московская обл., г. Пересвет, Сергиево-Посадский район, Бабушкина ул., д. 9, тел.: + 7 (496) 546-34-50, e-mail: mail@nic-rkp.ru
9 Babushkin St., Peresvet, Sergiev Posad District, Moscow Region, Russian Federation, 141320

УДК 621.375.4

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ АЛМАЗНЫХ ТЕПЛООТВОДОВ В МОЩНЫХ GaN МОДУЛЯХ СВЧ

П.Н. Астахов,
А.А. Калинин, Б.В. Крылов
АО «Центральный научно-исследовательский радиотехнический институт имени академика А.И. Берга»

Перегрев активных элементов модулей СВЧ вызывает значительное снижение их надежности, а также негативно сказывается на значениях выходной мощности и некоторых других технических характеристиках. Этим обусловлена актуальность использования высокоэффективных теплоотводящих материалов для разработки изделий с применением GaN СВЧ транзисторов. В статье приведены сравнительные результаты теплового моделирования конструкции и расчёты показателей безотказности модулей на GaN СВЧ транзисторах с использованием теплоотводящих алмазных материалов и без их использования, а также экспериментальные данные изменения выходной мощности и токов потребления в зависимости от температуры.

Ключевые слова: *GaN транзистор, СВЧ модуль, алмазный теплоотвод.*

STUDY OF THE EFFICIENCY OF USING DIAMOND HEAT SINKS IN HIGH-POWER GAN MICROWAVE MODULES

P.N. Astakhov,
A.A. Kalinin, B.V. Krylov
JSC «Central Scientific Research Radio Engineering Institute named after academician A.I. Berg»

Overheating of the active elements of microwave modules causes a significant decrease in their reliability, and also negatively affects the values of the output power and some other technical characteristics. This explains the relevance of the use of highly efficient heat sink materials for the development of products using GaN microwave transistors. The article presents the comparative results of thermal modeling of the design and calculations of the reliability indicators of modules based on GaN microwave transistors with and without heat-dissipating diamond materials, as well as experimental data on changes in output power and consumption currents depending on temperature.

Keywords: *GaN transistor, microwave module, diamond heat sink.*

Одним из основных требований к созданию современной СВЧ и силовой электроники является минимизация массогабаритных характеристик при сохранении или достижении более высоких выходных параметров, то есть повышению удельных характеристик (на единицу массы или объема) электронных изделий. Существенное уменьшение габаритов электронных модулей с увеличением функциональной плотности изделий обеспечивается использованием активных элементов в виде кристаллов, однако при этом остро встает проблема отвода тепла, выделяющегося при их работе.

Традиционно в качестве материала для теплоотводов используется алюмонитридная керамика, бериллиевая керамика, медь. Однако теплоотводы из вышеуказанных материалов не всегда удовлетворяют требованиям эффективного отвода тепла. В связи с появлением технологических процессов создания материалов с заданными свойствами наиболее перспективным направлением реализации высокоэффективных кондуктивных теплоотводов предлагается применение алмаза ввиду его почти уникальных физических и физико-химических свойств [2].

Использование алмазных структур в электронике предпринимаются инженерами всего мира уже десятки лет [3]. Опубликованы сотни научных статей и патентов. Вместе с тем, большинство научных исследований в области тонкопленочной (CVD-алмазной) технологии было осуществлено лишь в последние пятнадцать лет. Данная технология открывает новые возможности для улучшения массогабаритных характеристик и показателей надежности (безотказности) СВЧ модулей.

Для оценки эффективности применения алмазных теплоотводов проведен сравнительный анализ основных характеристик СВЧ модулей, изготовленных с использованием теплоотводящих алмазных материалов с аналогичными характеристиками модулей, имеющих «традиционную» конструкцию.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВОГО РЕЖИМА

Рассмотрен нитрид галлиевый (далее – GaN) СВЧ

модуль – усилитель мощности, выполненный в гибридном интегральном исполнении (рис. 1). В качестве активного элемента взят дискретный GaN транзистор с высокой подвижностью электронов TGF2023-2-02 фирмы Qorvo [6]. Транзистор, пассивные элементы, а также поликоровые платы с расположенными на них согласующими цепями установлены на медную раму. Выходная мощность модуля в режиме насыщения составляет 8...10 Вт, ток потребления по цепи положительной полярности (+25 В) не превышает 800 мА. Габаритный размер модуля 13×15×2,3 мм.

Цифровая 3D модель СВЧ модуля с GaN транзистором до установки алмазной пластины построена с использованием средств SolidWorks [5]. Из теплового моделирования исключены все платы и конденсаторы, так как из-за их низкой теплопроводности конвективные потоки энергии будут малы, кроме того эти компоненты не являются тепловыделяющими. Так же исключены поверхности рамы, находящиеся под компонентами.

Так как в модуле СВЧ один активный элемент, рассеиваемая мощность транзистора TGF2023-2-02 в динамическом режиме принята за основное тепловыделение модуля:

$$P_{расс}=U_{пит}\times I_{пит}-P_{вых}=0{,}8А\times 25В-8ВТ=12Вт \qquad (1)$$

где $U_{пит.}$, $I_{пит}$ – напряжение и ток питания транзистора; $P_{вых}$ – выходная мощность транзистора. Тепло полностью выделяется в активной зоне транзистора, который в тепловом расчете может быть заменен эквивалентным источником тепла размером 0,14 ×0,61×0,005 мм. Транзистор припаян к раме припоем ПЗлО 78,5 [4], толщина припоя между транзистором и рамой составляет 20 мкм.

Исходя из вышесказанного, построена тепловая модель СВЧ модуля с GaN транзистором (рис. 2). Результаты теплового моделирования с сеткой 0,1 мм приведены на рис. 3.

Изображение цифровой 3D тепловой модели СВЧ модуля с GaN транзистором, после установки алмазной пластины в качестве теплоотвода приведено на рис. 4.

В исходные данные для расчета, кроме перечисленных выше добавляется:

– алмазная прокладка – алмазная пластина 1,91 × 1,72 × 0,28 мм;

– алмазная прокладка припаяна к раме припоем ПЗлО 78,5 [4].Толщина припойного шва 40 мкм.

Построенная тепловая модель СВЧ модуля с алмазной пластиной приведена на рис. 5. Результаты теплового моделирования с сеткой 0,1 мм СВЧ модуля с алмазной пластиной приведены на рис. 6.

Из результатов моделирования видно, что при равной выделяемой тепловой мощности на транзисторах TGF2023-2-02 в типовом режиме эксплуатации применение алмазной пластины позволяет снизить температуру в активной зоне транзистора на 16° С.

Также было проведено тепловое моделирование для случая предельных рабочих температур (85° С), учитывая что максимальная допустимая температура активной зоны транзистора TGF2023-2-02 не

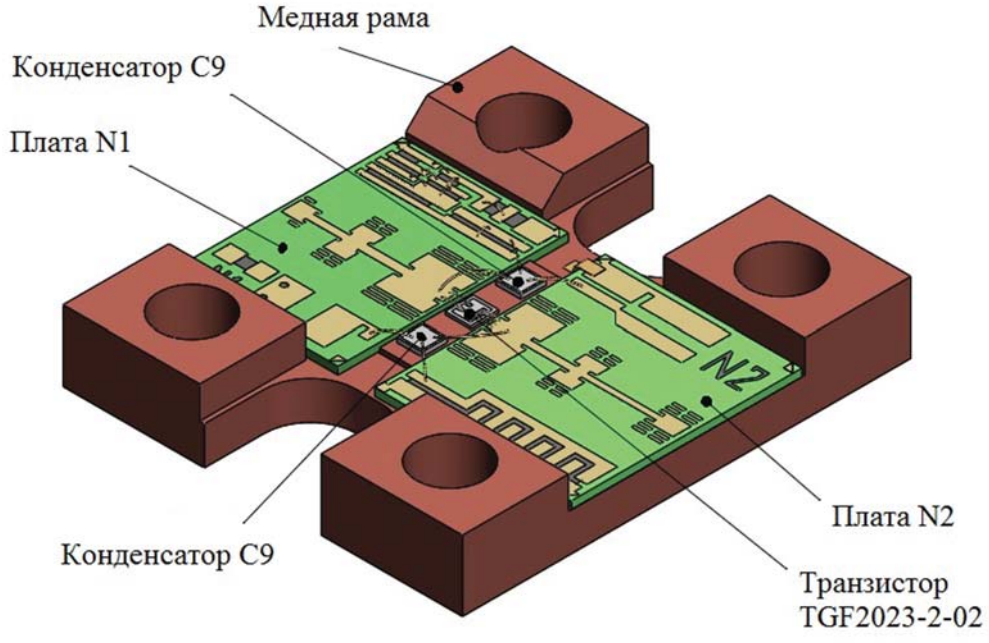


РИС. 1.
Изометрическая проекция СВЧ модуля с GaN транзистором

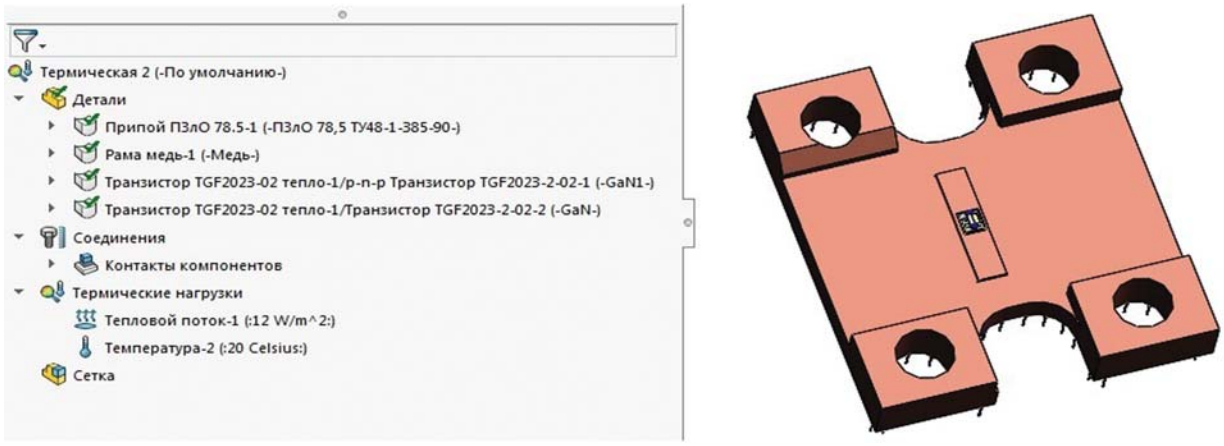


РИС. 2.
Тепловая модель СВЧ модуля с GaN транзистором

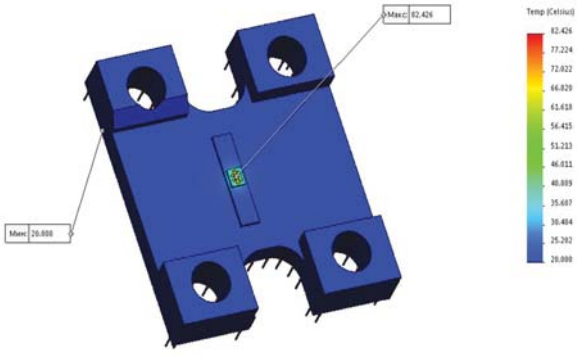


РИС. 3.
Результаты моделирования СВЧ модуля с GaN транзистором

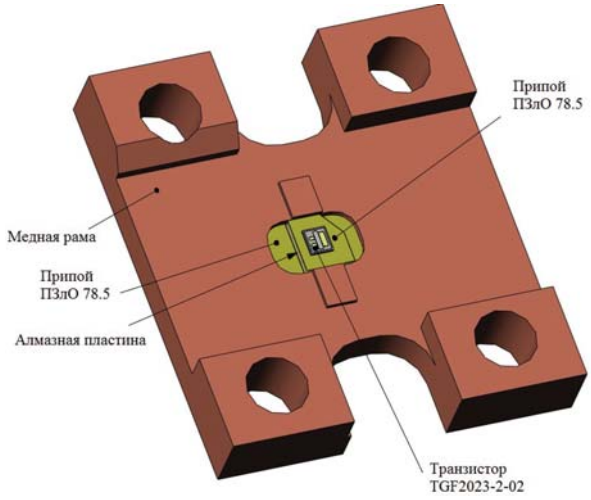


РИС. 4.
3D Тепловая модель СВЧ модуля с GaN транзистором, после установки алмазной пластины

должна превышать 225 °С [6]. В результате теплового моделирования установлено, что при температуре окружающей среды 85 °С максимально допустимая мощность потребления транзистора TGF2023-2-02 равна 25,3 Вт при использовании алмазной пластины и 19,7 Вт и без нее соответственно. Предполагая, что соотношение мощностей потребления транзистора при использовании алмазной пластины и без нее не зависит от температуры модуля и используя полученные значения, можно рассчитать соответствующую мощность потребления при нормальной температуре окружающей среды. Для случая использования алмазной пластины она составит 25,7 Вт, для случая без использования алмазной пластины 20 Вт, что эквивалентно приложению напряжения питания положительной полярности 32 В и 25 В при фиксированном токе потребления. Таким образом, использование алмазной пластины позволяет увеличить напряжение питания транзистора с 25 В до 32 В без изменения температуры активной зоны с сохранением показателей безотказности в нормальных климатических условиях.

ОЦЕНКА ПОКАЗАТЕЛЕЙ БЕЗОТКАЗНОСТИ

Одним из основных показателей безотказности [1] СВЧ модуля является его средняя наработка до отказа, которая прямо зависит от средней наработки до отказа его основных активных элементов (транзисторов). По Datasheet средняя наработка до отказа GaN транзистор TGF2023-2-02 при температуре канала 150° С равняется $2{,}4\times10^9$ часов [6]. Используя уравнение Аррениуса можно вычислить энергию активации данного транзистора:

$$T_{ср} = e^{\frac{Ea}{k}\left[\frac{1}{t}\right]} \qquad (2)$$

где: $T_{ср}$ = $2{,}4\times10^9$ – средняя наработка до отказа; t = 273+150 = 423 К – температура активной зоны

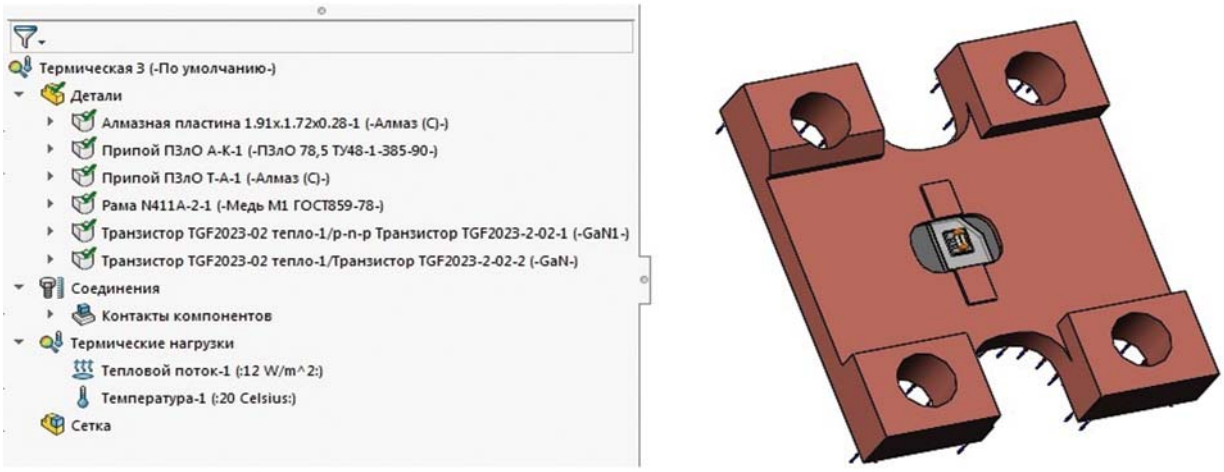


РИС. 5.
Тепловая модель СВЧ модуля с GaN транзистором, после установки алмазной пластины

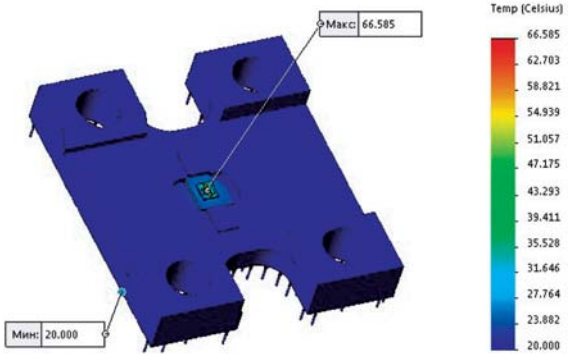


РИС. 6.
Результаты моделирования СВЧ модуля с GaN транзистором, после установки алмазной пластины

транзистора в градусах по шкале Кельвина; Еа – энергия активации; K=8,62×10^{-5} эВ/К – постоянная Больцмана.

Таким образом энергия активации GaN транзистора TGF2023-2-02 составляет 0,78 эВ. Оценка средней наработки до отказа СВЧ модулей проведена для температуры корпуса 50° С, с применением уравнения Аррениуса учитывающего физико-химический эффект интенсификации деградационных процессов при увеличении температуры (без изменения основных механизмов отказов).

Расчет температуры активной зоны транзистора $T_{АЗ}$(К) ведется по формуле:

$$T_{АЗ}=273+T_{корп}+R_T P_{расс} \quad (3)$$

где R_T – величина теплового сопротивления транзистора (13° С/Вт [6]); $T_{корп}$ – рабочая температура корпуса модуля (рамы) (50° С); $P_{расс}$ – мощность рассеяния транзистора TGF2023-2-02 (1).

По формуле (3) температура активной зоны транзистора в динамическом режиме при конструктивном исполнении (рис. 1) без применения алмазного теплоотвода составляет 479 К (206° С), а средняя наработка до отказа рассчитанная по формуле (2), составляет 1,39×10^8 часов.

Результаты теплового моделирования применения алмазной пластины в качестве теплоотвода показывают возможность снижения температуры в активной зоне транзистора на 16° С. Рассчитанная по формуле (2) средняя наработка до отказа GaN транзистора TGF2023-2-02 при температуре активной области 463 К составляет 2,65×10^8 часов. Таким образом, применение алмазной пластины в GaN модуле СВЧ позволяет увеличить среднюю наработку до отказа приблизительно в 2 раза.

ЛАБОРАТОРНЫЕ ИСПЫТАНИЯ

Для проведения лабораторных испытаний подготовлены два макетных образца СВЧ модулей с GaN транзистором с применением алмазных пластин в качестве теплоотвода (рис. 7, 8) и один макетный образец СВЧ модуля с GaN транзистором без применения алмазной пластины. Алмазные пластины с металлизированной поверхностью предоставлены ООО «Производственно-Технологический Центр «УралАлмазИнвест».

Конструкция установки алмазных пластин в макеты СВЧ модуля с GaN транзистором показана на соответствующей 3D модели (рис. 4). Результаты экспериментального исследования снижения выходной мощности и тока потребления при повышении температуры корпуса подготовленных образцов приведены на рис. 9, 10.

Из графиков видно, что при увеличении температуры модуля от плюс 30° С до плюс 85° С выходная мощность макетов СВЧ модулей с применением алмазных теплоотводов снижается на 2,5%, а ток по-

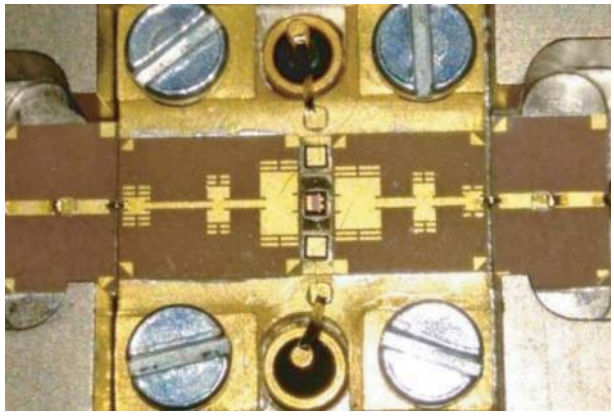


РИС. 7.
Вид СВЧ модуля с GaN транзистором

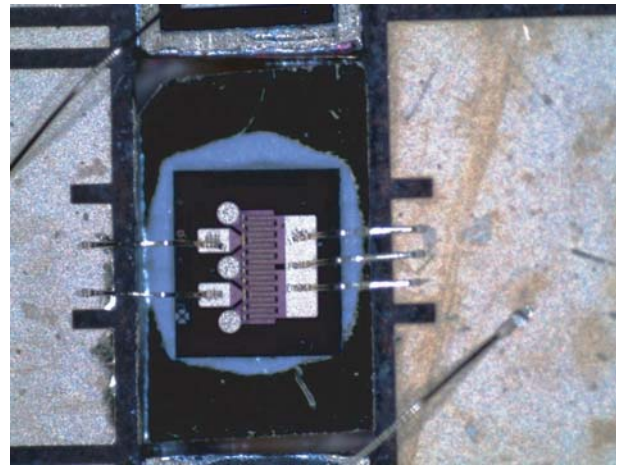


РИС. 8.
GaN транзистор на алмазной подложке

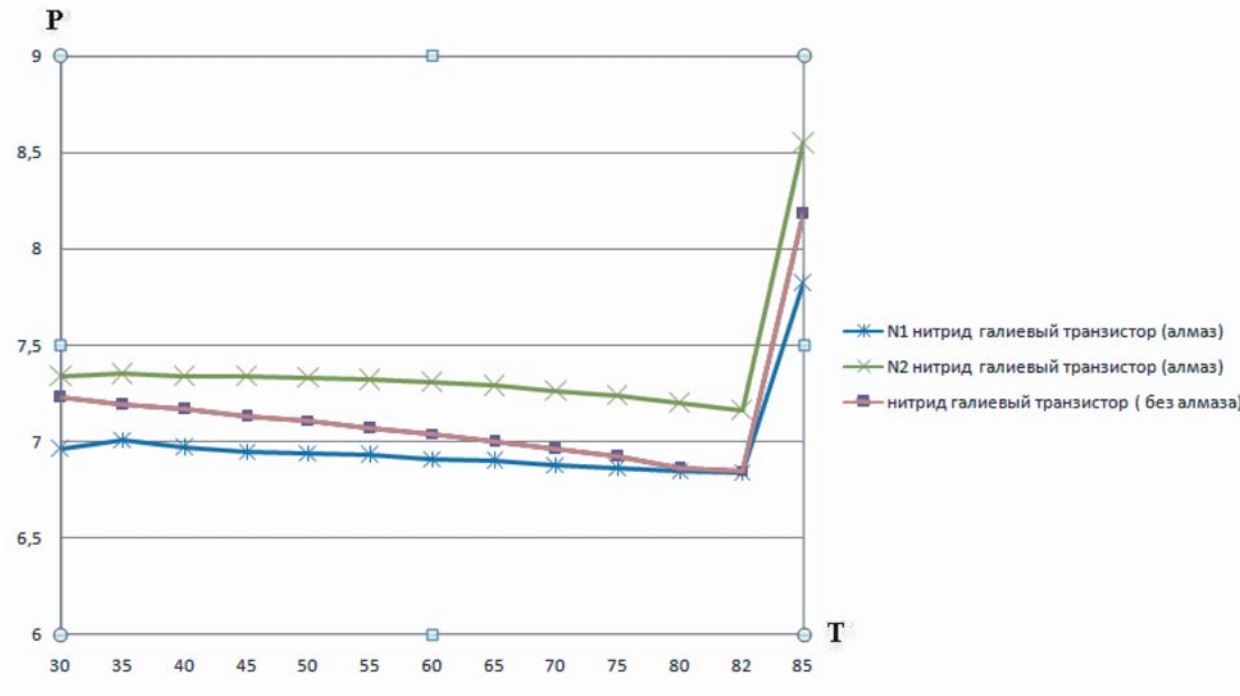


РИС. 9.
Зависимость выходной мощности от температуры макетов СВЧ модулей на GaN транзисторе с алмазной пластиной и аналогичного модуля без использования алмазного теплоотвода

требления на 1,5% и 1,8% соответственно. При этом выходная мощность и ток потребления аналогичного изделия без алмазного теплоотвода изделия снижается на 5,5% и 3,2% соответственно. Наблюдаемое снижение выходной мощности и тока потребления в изделиях с использованием алмазных пластин примерно в два раза меньше, чем в изделиях без их использования. Таким образом, подтверждается возможность заметного снижения теплового сопротивления конструкции СВЧ модулей за счет использования алмазных материалов.

Для экспериментальных образцов СВЧ модулей с алмазной пластиной были проведены измерения выходной мощности в режиме насыщения на одной частоте рабочего диапазона. При измерениях напряжение питания положительной полярности увеличивалось от 25 В до напряжения, при котором происходил отказ транзистора с шагом 2 В. При напряжении 35 В наблюдалась устойчивая работа модулей. Отказ произошел через несколько секунд после подачи напряжения питания 39 В.

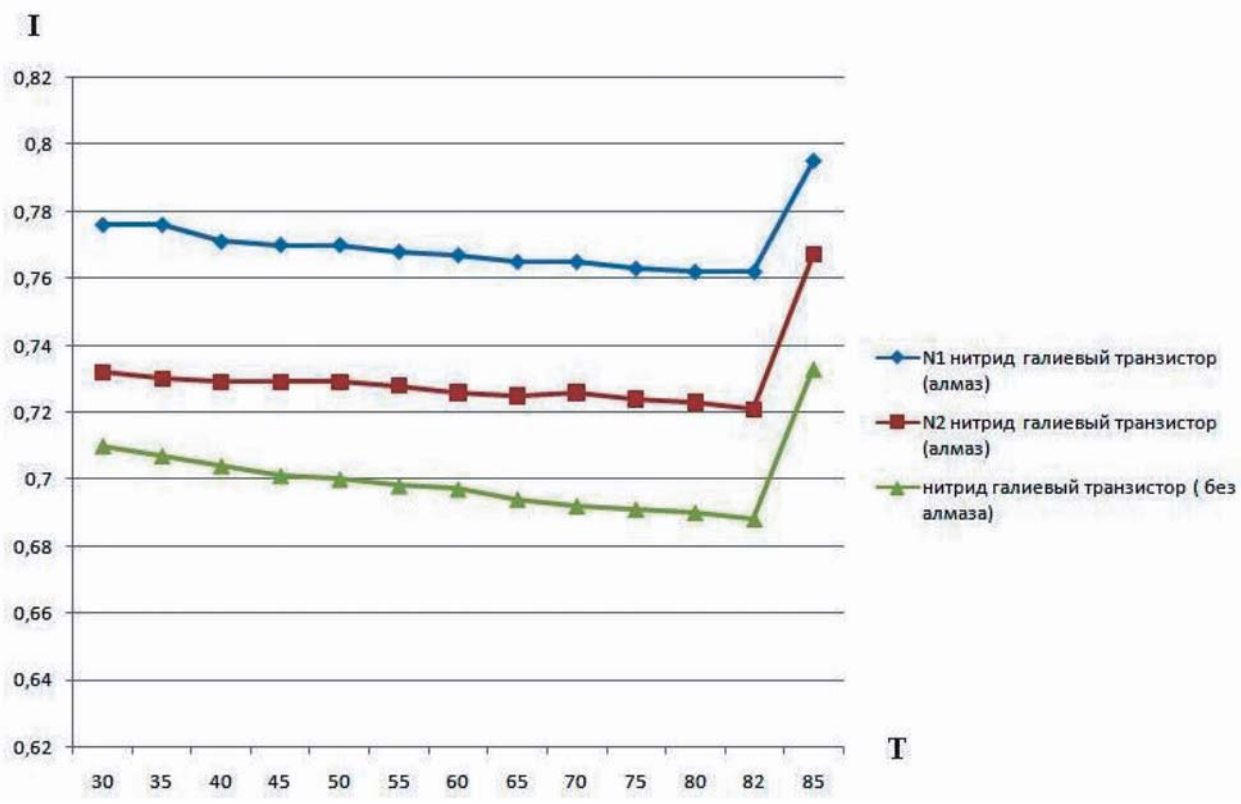


РИС. 10.

Зависимость тока потребления от температуры макетов СВЧ модулей на GaN транзисторе с алмазной пластиной и аналогичного модуля без использования алмазного теплоотвода

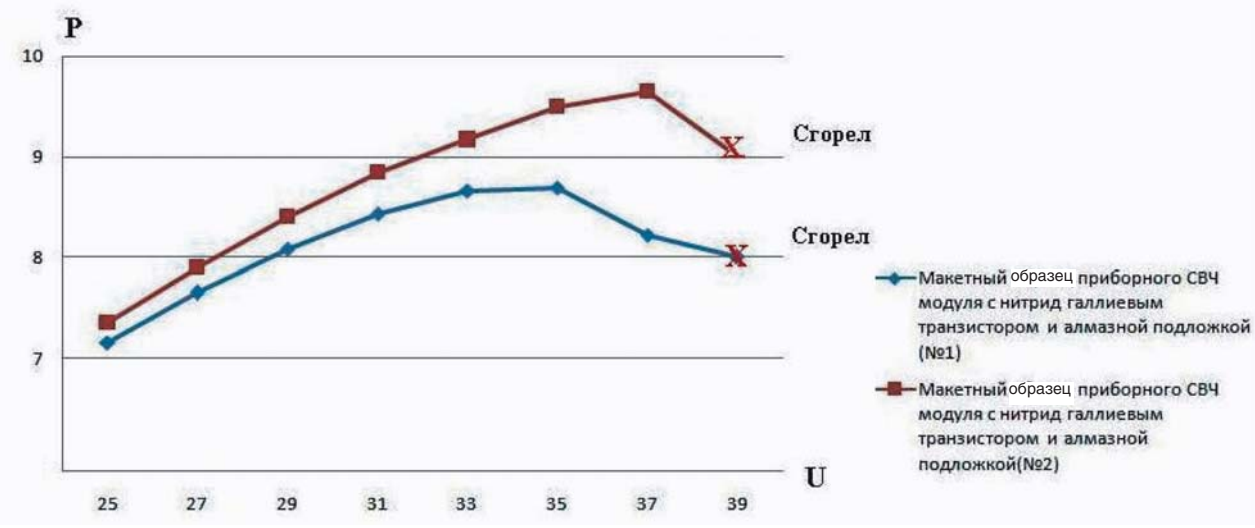


РИС. 11.

Зависимость выходной мощности от напряжения питания положительной полярности макета СВЧ модуля на GaN транзисторе с алмазной пластиной

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований и расчетов установлено снижение температуры активной зоны СВЧ транзисторов СВЧ модулей за счет использования теплоотводящих алмазных элементов. Показано, что за счет снижения температуры активной зоны GaN транзисторов с применением алмазных теплоотводов обеспечивается увеличение среднего времени наработки мощных GaN СВЧ модулей в 2 раза. В результате проведенных лабораторных испытаний макетных образцов GaN СВЧ модулей, с использованием теплоотводящих алмазных элементов и без них, продемонстрирована возможность заметного снижения теплового сопротивления конструкции, за счет использования теплоотводящих алмазных элементов.

Литература

1. ГОСТ 27.002-2015 – Надежность в технике. Термины и определения.
2. **Мальцев П.П., Редькин С.В., Глинский И.А., Побойкина Н.В., Духновский М.П. и др.** Алмазные наноструктуры для теплоотводов СВЧ полупроводниковой электроники. Российские нанотехнологии. 2016. Т. 11. №7–8. С. 82–88.
3. **Ральченко В., Конов В.** CVD-алмазы применение в электронике. Электроника: наука, технология, бизнес. 2007. № 4. С. 58–67.
4. ТУ48-1-385-90 – Полосы и фольга из припоя марки ПЗл078,5.
5. **David C.** Planchard and Marie P. Planchard. SolidWorks 2008 Tutorial. 2008.
6. Qorvo, GaN on SiC HEMT TGF2023-2-02. Available online: www.qorvo.com (Datasheet: Rev D 01-14-16).

Астахов Павел Николаевич,
начальник конструкторского бюро АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»

Калинин Алексей Алексеевич,
аспирант базовой кафедры АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга», инженер 2 категории АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»

e-mail: LeshKalin@rambler.ru

Крылов Борис Витальевич,
начальник центра микроэлектроники АО «ЦНИРТИ им. академика А.И. Берга»

107078 г. Москва, ул. Новая Басманная, 20, стр. 9
тел.: +7 (499) 267-43-93, e-mail: post@cnirti.ru

УДК 614.253.4:004.032.6

РОЛЬ И МЕСТО ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ В СОВРЕМЕННОМ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Л.Д. Шалыгин[1], О.И. Шалыгина[2]
[1]ФГБУ «Национальный медико-хирургический Центр имени Н.И. Пирогова» Минздрава России,
[2]Филиал ФГБВОУВО «Военно-медицинская академия им. С.М. Кирова» МО РФ

Показано что экстернатура рассматривается как предтеча дистанционного обучения. Представлены вопросы целесообразности и эффективности дистанционного обучения на современном этапе, обозначены очевидные «плюсы» дистанционных технологий в педагогическом процессе, а также выделены отрицательные моменты цифровых технологий в образовательной деятельности. Показаны возможности электронного образования как в рамках вузовской подготовки, так и на этапе последипломного обучения врачей, особенно при чрезвычайной ситуации – внезапно возникшей пандемии – SARS-CoV-2. Отмечено, что в медицинской отрасли приоритет необходимо отдавать традиционным формам обучения в сочетании с прогрессивными цифровыми технологиями подготовки медицинских кадров.

Ключевые слова: *экстернатура, традиционное очный режим обучения, дистанционное обучение, электронное образование, цифровые технологии в медицинском образовании, онлайн-обучение.*

ROLE AND PLACE OF DISTANCE LEARNING IN THE MODERN EDUCATIONAL PROCESS

L.D. Shalygin, O.I. Shalygina
Pirogov National Medical and Surgical Center,
Branch of the Kirov Military medical Academy

It is shown that externality is considered as a forerunner of distance learning. The questions of expediency and effectiveness of distance learning at the present stage are presented, the obvious «advantages» of modern distance technologies in the pedagogical process are identified, and the negative aspects of digital technologies in educational activities are highlighted. The possibilities of e-education are shown both in the framework of University training and at the stage of postgraduate training of doctors, especially in an emergency situation-a sudden pandemic-SARS-CoV-2. It is noted that in the medical industry, priority should be given to traditional forms of training with a reasonable combination of them with advanced digital technologies for training medical personnel.

Keywords: *externality, traditional full-time training, distance learning, e-education, digital technologies in medical education, online training.*

В настоящее время дистанционным обучением уже никого не удивить, большая часть учебных заведений различного уровня в России и за рубежом в той или иной степени используют в педагогическом процессе дистанционные технологии. Многие студенты сегодня рассматривают данную форму обучения как альтернативу обычной не только при получении второго образования, повышения квалификации, но и выбирают этот способ для получения первого высшего образования. Следует отметить то, что еще пятнадцать лет тому назад численность студентов в мире, получающих образование по дистанционным технологиям, превышала численность студентов очного обучения. От современных тенденций никуда не уйти, и многие вузы это понимают и стараются развиваться в этом направлении.

В образовательном процессе давно существовало и существует в настоящее время обучение в экстернатуре. Есть основания рассматривать в историческом аспекте экстернатуру как предтече дистанционного обучения. Суть экстерната состоит в возможности получить среднее или высшее образование без ежедневного посещения школы или университета. Главный принцип экстернатуры – освободить учеников и студентов от ежедневных многочасовых занятий в учебном заведении, сэкономив таким образом время, но при этом дать полноценное образование. Система образования экстерном устроена так, что за наименьший период времени обучающийся получает наибольшее количество информации. Мнение о том, что получаемые знания поверхностны, ошибочно. Обучающийся осваивает программу самостоятельно, а степень усвоения контролирует преподаватель. Для этого обучающийся сдает зачеты и экзамены и на основании положительных результатов получает аттестат государственного образца.

Следует отметить, что обучение в экстернатуре прошли такие известные люди, как вождь мирового пролетариата В.И. Ленин (Ульянов), советский физик, создатель водородной бомбы Андрей Дмитриевич Сахаров, американский изобретатель и предприниматель Томас Эдисон, американский ученый, изобретатель и бизнесмен, один из основоположников телефонии Александр Грэхем Белл, интернет-журналист, основатель WikiLeaks Джулиан Ассанж и многие другие.

Многие современные авторы рассматривают проблемы развития дистанционного обучения в России, но в первую очередь изучают вопрос целесообразности и эффективности такой формы обучения. Большинство исследователей первым «плюсом» дистанционного обучения называют возможность для студентов получать образование без отрыва от трудовой деятельности. Это, действительно, очень важный аргумент в пользу выбора такой формы обучения, особенно для тех, кто решил получить высшее образование в зрелом возрасте. Очень важным обстоятельством в процессе обучения является то, что студенту нет необходимости посещать учебное заведение, по крайней мере, делать это регулярно. Это особенно актуально для студентов из регионов, что ведет к сокращению их финансовых затрат и дает возможность получить диплом столичных или зарубежных вузов.

Дистанционное обучение является актуальным для тех обучающихся, кто физически не может находиться в учебной аудитории по причине инвалидности. Следует отметить, что у зарубежных образовательных учреждений, как и у наших вузов, имеется опыт дистанционной работы с такими студентами.

В нашем обществе всегда были и есть люди, способные «образовывать себя сами», т.е. занимающиеся самообразованием, но по тем или иным причинам не имеющие официально признанного результата такого образования – диплома. Дистанционная форма обучения позволяет в некоторой степени уменьшить зависимость человека, желающего и умеющего добывать знания самостоятельно, от образовательных учреждений и наравне с другими иметь возможность получить диплом о высшем образовании [2].

Дистанционное обучение предоставляет большую возможность для обучающихся активно участвовать в организации своего учебного процесса: выбирать время и место для работы с учебным материалом, определять скорость его изучения, соответствующую особенностям своего мышления, усидчивости, индивидуальной работоспособности и степени усвоения полученных знаний.

Следует отметить, что данный вид обучения у студентов повышает уровень осознанного отношения к учебе, они начинают чувствовать ответственность за результат своего обучения, учатся рационально распределять свое время и силы.

Цифровые электронные системы в учебном процессе позволяют использовать новейшие компьютерные технологии и гаджеты, но самое главное состоит в том, что студент или курсант вправе сам выбирать электронную платформу образования и, соответственно, учиться у тех преподавателей, которых считает наиболее квалифицированными в той или иной специальности.

Процесс онлайн-обучения стимулирует работу педагога. Для достижения успехов в виртуальном сотрудничестве с удаленной аудиторией он заинтересован в регулярном повышении, как своей профессиональной квалификации, так и знаний в области цифровых технологий. Таким образом, преподаватель должен постоянно совершенствовать свои лекционные материалы, проявляя творческий подход. Важно не просто добросовестно излагать подготовленный материал, а еще координировать дистанционное обучение, то есть, держать обратную связь со студентом [2].

Для вуза дистанционное обучение позволяет охватить большое число студентов в образовательный процесс, то есть значительно увеличить целевую аудиторию по той или иной изучаемой дисциплине или специальности.

Нет сомнений в том, что основной и главной формой образования при возникновении непредвиденных обстоятельств, стихийных бедствий, чрезвычайных ситуаций, вспышек заболеваний, эпидемий и т.п. является дистанционное обучение (пандемия COVID-19 наглядно это продемонстрировала), включая дистанционные отчеты обучающихся о проделанной работе, выполненных курсовых и научных исследованиях, проведение различных видов экзаменационных испытаний и др.

По мнению президента МГМСУ им. А.И.Евдокимова академика РАН Н.Д.Ющука пандемия COVID-19 стала триггером цифровой трансформации высшего образования. Именно цифровые технологии позволили в экстренном порядке переобучить десятки тысяч российских врачей разных специальностей в инфекционистов. Так, благодаря этому системе здравоохранения удалось выстоять перед наплывом огромного количества инфекционных больных. Дистанционное обучение в период пандемии COVID-19 оказалось востребовано на факультете ДПО МГМСУ им. А.И.Евдокимова кафедры инфекционных болезней и эпидемиологии. Сотрудники кафедры в течение мая – июня 2020 г. в дистанционном формате обучили около 1,5 тыс. врачей оказанию медицинской помощи пациентам с COVID-19, разработали новую учебную программу по коронавирусной инфекции с учетом всех актуальных научных сведений, которая предназначена не только для врачей, но и для студентов.

Вместе с тем, у дистанционного обучения имеются и свои отрицательные моменты. Так, у студента нет возможности для консультации обратиться лично к преподавателю, нет возможности учиться «вживую» строить отношения в коллективе с одногруппниками, преподавателями, администрацией вуза, выступать

перед аудиторией с сообщениями, наблюдениями, докладами и т.п.

Не любую профессию можно освоить дистанционно (врач, ветеринар, актер, художник, скульптор и др.). Трудно себе представить, как дистанционно можно получить специальность врача, особенно овладеть практическими навыками и умением в стоматологии, педиатрии, лечебно-профилактическом деле и семейной медицине. Практически невозможно дистанционно обучить узким медицинским специальностям в ординатуре: по хирургии, анестезиологии и реанимации, акушерству и гинекологии, нейрохирургии, челюстно-лицевой хирургии и стоматологии, сердечно-сосудистой хирургии, рентгенэндоваскулярной диагностике и лечению и другим медицинским специальностям. Нельзя в медицине дистанционно подготовить научные и научно-педагогические кадры.

В процессе дистанционного обучения трудно проконтролировать практический навык, который должен быть сформирован у студента в ходе виртуального практического занятия. Особенно это обстоятельство актуально в медицине. Невозможно формировать профессиональные компетенции у будущих врачей с помощью цифровых технологий.

В медицинском, по мнению ректора Сеченовского Университета академика РАН П.В. Глыбочко, образовании главными приоритетами педагогической деятельности являются: личное общение преподавателей с обучающимися, а студентов – с пациентами. При общении со студентами через экран монитора, а не у постели больного, невозможно воспитать у врача такие важные качества, как милосердие и сострадание. Равно как невозможно формировать у него коммуникативные навыки, необходимые для общения и с пациентами, его родственниками, с коллегами [1].

Кроме того, не каждый студент умеет поддерживать у себя мотивацию к самостоятельной работе. К тому же сказывается отсутствие такого эффективного мотиватора учебной деятельности как постоянный контроль со стороны преподавателя. Из педагогического опыта известно, что очень низок процент студентов, которым такой контроль не нужен [5].

Очень значимым отрицательным обстоятельствам при дистанционном обучении является тот факт, что у студента отсутствует рядом педагог или лектор, который излагает материал со значительной, весомой и яркой эмоциональной окраской, что нередко влияет на степень его восприятия и понимания.

При дистанционной форме обучения известно, что у студента нет возможности сравнивать промежуточные результаты своего обучения и других студентов, причем сравнивать «вживую» при работе у доски, выступлениях на коллоквиумах, семинарах, конференциях, симпозиумах и т.п.

Для преподавателя при аудиторном ведении занятий важно чувствовать, насколько студенты понимают и воспринимают излагаемый материал по их взглядам, по задаваемым педагогу вопросам, по ответам на свои вопросы, что дает возможность оперативно скорректировать учебный процесс: еще раз повторить сложные моменты, дать дополнительные разъяснения по некоторым вопросам, изменить темп изложения и др. При дистанционном обучении такая связь между педагогом и обучающимся, к сожалению, теряется [5].

Кроме того у студента соблазн и достаточно возможности для «несамостоятельного» обучения, а у преподавателя нет возможности для качественного контроля подобных издержек дистанционных технологий. При онлайн-обучении нет эффективного контроля качества знаний, полученных студентом: проверить, сам ли он отвечал на вопросы тестовых заданий и писал контрольные работы, не представляется возможным.

Отрицательным моментом в дистанционном образовании является то, что у части профессорско-преподавательского состава низкая цифровая грамотность, которую следует устранять обучением работников высшей школы на дополнительных образовательных циклах по современным электронным технологиям [1].

Для образовательного учреждения введение дистанционного обучения связано с большими материальными затратами: техническое оснащение, программно-технические средства, подготовка специальных кадров и т.д. [4]

Исходя из практической работы учреждений образования известны три вида проблем, возникающих во время технологического процесса проведения дистанционного обучения, которые нередко существенно осложняют образовательную деятельность:

1) технические проблемы – возникают вследствие перебоев в работе программно-технических средств, линий телекоммуникационных связей, выход из строя компьютерной техники и т.п.

2) организационные проблемы – возникают из-за низкой согласованности действий участников телекоммуникационной сети или не качественного обслуживания и сопровождения дистанционного обучения;

3) содержательные проблемы – возникают из-за недостаточного или слабого уровня подготовки к дистанционному обучению профессорско-преподавательского состава.

Таким образом, большинство проблем, возникающих во время технологического процесса проведения дистанционного обучения, связаны с человеческим фактором [3, 6, 7].

В то же время следует отметить моменты, которые в некоторой степени компенсируют часть перечисленных недостатков: невозможно получить у педагога очную консультацию – можно проконсультироваться с помощью сообщений или скайпа; нет «живых» отношений с преподавателем и обучающимися – но для части студентов это обеспечивает более комфортную психологическую обстановку для обучения и т.д. К

тому же, традиционную форму обучения никто не отменял, у студентов всегда есть возможность выбора: обычное дневное обучение, очно-заочное, заочное или дистанционное [5].

При проведении анкетирования студентов в одном из технических вузов РФ с целью узнать их отношение к эффективности применения дистанционных технологий в учебном процессе было установлено, что на вопрос помог ли Вам электронный курс лучше освоить изучаемый предмет, опрошенные ответили следующим образом: 23% – «да», 59% – «да, в некоторой степени», 6% – «нет», 12% – не могли сказать ничего определенного.

При тестировании студентов другого гуманитарного вуза России по вопросам эффективности уроков удаленного обучения было выявлено, что электронные лекции «менее эффективны» по степени усвоения материала, чем аудиторные. Обучающиеся признались, что слушают видеолекции между делом, благо контроля присутствия нет. А он, по-видимому, должен быть!

Следует отметить, что у дистанционного обучения, как и любой другой формы получения знаний, множество своих преимуществ и недостатков. Существенным недостатком является отсутствие централизованной системы сертификации и аккредитации электронных курсов, результатом чего является множество «подделок», громко называемых электронными курсами и электронными учебниками, а в действительности представляющими собой обычные файлы word. Немаловажным фактором, препятствующим более интенсивному внедрению дистанционных технологий в учебный процесс, является недостаточная мотивация преподавателей вузов к работе в данном направлении. Возможно причиной этого является высокая трудоемкость, связанная с созданием методических материалов для дистанционного обучения, но тут нужно осознать, что в будущем затраты времени и сил должны компенсироваться сокращением времени на выполнение некоторых обычных видов учебной нагрузки преподавателя [5].

По сути дела, в настоящий момент мы являемся свидетелями смены парадигмы жизни и образования. Четко прослеживается формирование новой модели поведения, как в повседневной, так и в профессиональной деятельности, которую можно представить в виде схемы: «Человек – гаджет – цифровая поисковая система – искомая информация». Принимая это, как отражение реальности, мы должны развивать все возможные инновации в образовательном процессе [1].

Дистанционное обучение сегодня должно выполнять значимую, но не главную роль в образовательном процессе гуманитарных вузов. Вместе с тем, должно занимать важное место в подготовке специалистов различных профилей, особенно в технических вузах.

Таким образом, на данном этапе развития дистанционных технологий задача профессорско-преподавательского состава состоит в том, чтобы организовать учебный процесс так, чтобы новые формы обучения давали по степени качества результат как минимум такой же, как и традиционные. К тому же существует множество вопросов, связанных с методиками измерения эффективности дистанционного обучения. В медицине приоритет следует отдавать традиционным формам обучения. Безусловно, какие-то элементы цифровых технологий в процессе преподавания применимы и крайне необходимы. Но в целом не следует подменять понятия «дистанционные технологии обучения» и «дистанционное образование». Не вызывает сомнений тот факт, что качественная подготовка и совершенствование врача возможны только при классической (традиционной) форме обучения, которая вырабатывает необходимые профессиональные знания и компетенции, практические навыки и умения у постели больного.

Но как бы то ни было, огромный «плюс» дистанционных технологий в том, что они позволяют человеку учиться непрерывно – всю жизнь, что является важным, необходимым и обязательным процессом при овладении и совершенствовании любой специальности и профессии, особенно в медицинской отрасли.

Литература

1. **Буш Е.А.** Уйти в «онлайн» и не вернуться // Медицинская газета. 2020. №42. С. 12.
2. **Владимирский А.В., Лебедев Г.С.** Телемедицина. М.: ГЭОТАР – Медиа, 2018. 576 с.
3. **Григорьев А.И., Орлов О.И., Логинов В.А. и др.** Клиническая телемедицина. М.: Слово, 2001. 144 с.
4. **Камаев И.А., Леванов В.М., Сергеев Д.В.** Телемедицина: Клинические, организационные, правовые, технические, экономические аспекты. Нижний Новгород : Изд-во НГМА. 2001. 100 с.
5. **Кузнецова О.В.** Дистанционное обучение: за и против // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2015. №8–2. С. 362–364.
6. **Леванов В.М., Кирпичева И.С., Яшин А.А. и др.** Типичные ошибки при проведении телеконсультаций. 2014. №1(31). С. 15–18.
7. **Tachakra S.** Level of diagnostic, confidence and redsons for mistakes in teleradiology for minor injuries// Telemed. J.E. Health. 2002, Spring. Vol. 8. №1. P. 111–121.

Шалыгин Леонид Дмитриевич, д.м.н., профессор, ректор, зав. кафедрой сестринского дела Института усовершенствования врачей НМХЦ им. Н.И. Пирогова,
➔ 105203, г. Москва, ул. Нижняя Первомайская, д. 65,
105203, Moscow, st. Nizhnyaya Pervomayskaya, 65,
тел.: +7 (495) 464-05-54

Шалыгина Ольга Ивановна, к.м.н., доцент кафедры интегративной и восстановительной медицины Филиала ФГБВОУВО «Военно-медицинской академии им. С.М.Кирова» МО РФ
➔ 107392, г. Москва, ул. Малая Черкизовская, 7
107392, Moscow, st. Malaya Cherkizovskaya, 7

УДК 618.-006.6-091.811-07:577.1.088 (048.8)

ЭКОЛОГИЯ И ЗДОРОВЬЕ ЧЕЛОВЕКА – ПРОГРАММА, ПОЗВОЛЯЮЩАЯ УЛУЧШИТЬ ЗДОРОВЬЕ ЖЕНЩИН

Л.Н. Фишер, О.А. Фишер
Российская академия
медико-социальной реабилитации

Профилактика рака молочной железы как один из элементов здоровья женщины. Показаны новые возможности , такие как радиотермометрия и определение онкопанели микро-РНК. Показаны направления развития.

Ключевые слова: *экология, рак молочной железы, радиотермометрия, микро-РНК.*

ECOLOGY AND HEALTH OF MAN – THE PROGRAM, WHO CAN IMPROVE THE HEALTH OF WOMEN

L.N. Fisher, O.A. Fisher
Russian Academy of Medico-Social Reabilitation

Understanding of breast cancer prevention as one of the elements of a woman's health is presented. Shows new features such as radiometry and yhe determination of the panel the micro RNA. Directions of developmehts are shown

Keywords: *ecology, breast cancer, radiothermometry, micro-RNA.*

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что экологические принципы все увереннее утверждаются в современной жизни как главные условия существования современного общества. Первым дал определение «Экология» немецкий ученый Эрнст Геккель в 1866 году. Экология – наука о взаимодействиях живых организмов и их сообществ между собой и окружающей средой. Термин «экология человека» в науку ввели американские ученые Р. Парк и Э. Бюргеле в 1921 году. Экология человека – это наука, которая изучает взаимосвязь человека с природой, которая рассматривает следующие моменты:

1 Состояние организма человека;

2 Влияние природы на состояние и самочувствие людей;

3. Управление окружающей средой;

4. Улучшение здоровья населения.

Загрязнение окружающей среды, повышенная стресс-нагрузка способствуют значительному увеличению числа «болезней цивилизации», которые можно назвать ведущими проблемами экологии человека. Одной из главных проблем для женщин является значительный рост онкологических заболеваний молочной железы. Это проявляется во всех возрастных категориях. Так, по данным отечественных авторов [1] рост числа злокачественных заболеваний у женщин до 30 лет, за последние 20 лет, выросло в 4 раза. Среди множества путей уменьшения смертности, которые исследовались на различных уровнях, ведущим показал себя метод скрининга.

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ СКРИНИНГОВЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Скрининг – методика обследования группы населения определенного возраста определенным методом, который утвержден Минздравом РФ. Наиболее известным методом скрининга является скрининг рака молочной железы.

Известно, что скрининг рака молочной железы в современных условиях является единственным научно обоснованным методом, который дает возможность в условиях ограниченного финансирования решать сложные задачи. Главной задачей скрининговых исследований является обнаружение болезней на максимально ранних стадиях. На сегодняшний день современные методы исследования – маммография (ММГ), ультразвуковые исследования (УЗИ), компьютерная томография (КТ), магнитно-резонансная томография (МРТ) позволяют обнаруживать опухоли самых малых размеров – от 3 мм. И если проблема квалификации медицинского персонала решается различными курсами повышения квалификации и внедрением в широкую практику нейронных сетей и искусственного интеллекта, то объективные факты-а именно предел метода – например у маммографа, размер объекта – 3 мм, представляется на сегодняшний день невыполнимой задачей.

РАДИОТЕРМОМЕТРИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ ПУТЬ СКРИНИНГА

Таким образом, следующим этапом в развитии скрининговых исследований в проблеме раннего выявления рака молочной железы является формирование новых научных подходов, основанных на других физических принципах. Одним из таких путей является положительная корреляция между интенсивностью электромагнитного излучения биологических тканей и температурой данных тканей. Разработанный американским радиоастроном Барретом, используемый в медицине метод радиотермометрии, показал себя успешно в ранней диагностике рака молочной железы. Данная идея получила свое развитие в работах к.т.н. С.Г. Веснина Созданный им с группой сотрудников аппарат РТМ-01-РЭС позволял измерять температуру в молочной железе в блоке, ограниченном диаметром датчика глубиной до 7 см. Признаком развития риска рака молочной железы является выраженная очаговая термоасимметрия молочных желез. В дальнейшем д.м.н , проф Видюков В.И предложил математический алгоритм, по которому было выделено три группы пациенток. Высчитывалось два коэффициента. Если один коэффициент менее 2, а второй менее 2,5, то риск развития рака молочной железы составляет около15%; если один коэффициент более 2, а другой менее 2,5 или наоборот, то риск развития рака молочной железы составляет 60%. Если один коэффициент составляет более 2, а второй более 2,5, то риск развития рака молочной железы составляет более 85%. В ряде клинических примеров были получены результаты, показывающие, что полученные данные с использованием радиотермометрии опережали результаты маммографии на 1,5–2 года. Вместе с тем, при дальнейшем использовании данной методики, были получены данные, показывающие ограниченность при некоторых патологиях молочной железы этой технологии. Во-первых, при медленном росте злокачественного новообразования, наблюдается рассеивание тепла, которое маскируется выделяемым теплом окружающих тканей. Во-вторых, большое злокачественное новообразование молочной железы (4–5 см) может ограничиваться фиброзной капсулой, которая как сосуд Дьюара, не дает возможности теплу выйти за границу опухоли. Данные проблемы можно в значительной степени решить несколькими измерениями в короткий период времени. Если динамика ММГ будет зарегистрирована через 3–6 месяцев, то радиотермометрические исследования дадут нам динамику уже через 3–4 недели.

ПАНЕЛЬ МИКРО-РНК КАК МЕТОД ВЫЯВЛЕНИЯ ОБЛИГАТНЫХ ФОРМ ПРЕДРАКА МОЛОЧНЫХ ЖЕЛЕЗ И РАННЕЙ ДИАГНОСТИКИ РАКА

Другим путем выявления патологии тканей молочной железы является анализ соотношения предопухолевых и опухолевых заболеваний [2]. Работами Кассасенто (2015) показано, что генетические мутации в предопухолевых и опухолевых патологиях носят одинаковый характер. Таким образом формируется следующий вопрос – что способствует качественному переходу из предопухолевой патологии в неопластический процесс.

Первый вариант – определение мутаций в предопухолевых новообразованиях. Этот путь достаточно перспективный, он является перспективным в назначении таргетной терапии, но пока данный метод ограничивается финансовыми проблемами, связанными с ОМС.

Следующий из перспективных путей решения данной проблемы является анализ межклеточных взаимодействий, т.е результат работы мутантных генов. Доказано, что ведущую роль в этом процессе играют экзосомы и, более конкретно, их качественный состав. Основным фактором, передающим информацию, является количественный и качественный состав микро-РНК.

Микро-РНК представляют собой «глобальные переключатели генома», регулирующие множественные метаболические пути и образование белковых продуктов. Доказано, что ряд микро-РНК имеют онкогенное действие[3], к которым относят микро-РНК -21,155,196а-2, 27а, 9,199а-3р, 222-3р, let-7а-5р, 137,106а-5р. Микро-РНК 21 является одной из наиболее известных и изученных микро-РНК в разных видах опухолей. Ее экспрессия резко повышена при раке молочной железы, что связывают с ростом опухоли, метастазами и неблагоприятным прогнозом течения заболевания [4]. Гиперэкспрессия микро-РНК -155 проявляется при снижении уровня таурина и повышении влияния уровня оксидативного стресса и часто встречается в ткани опухоли молочной железы и негативно влияет на выживаемость и хемочувствительность (через ген FOXO3a) опухолевых клеток, в то время как пониженная экспрессия mir-155 может усиливать клеточную хемочувствительность и апоптоз.

Уровни некоторых микро-РНК изучены при доброкачественной патологии. По данным J. Chan экспрессия MiR-21 вызывает блокирование генов, связанных с апоптозом [5]. MiR-221/222 относят к онкогенным микро – РНК, сверхэкспрессия которых в разных типах опухолей приводит к усилению клеточной пролиферации, ингибированию апоптоза, индукции ангиогенеза. Подавление и низкий уровень экспрессии MiR 221/222 в опухолях молочной железы коррелирует с положительным статусом эстрогеновых рецепторов и более благоприятным прогнозом заболевания.

Активность MiR-155 [6] необходима для поддержания нормального функционирования клеток, увеличение экспрессии данной микро-РНК отмечено при

аутоиммунных заболеваниях и при различных формах рака. Кроме того, данная микро-РНК ассоциируется с эстроген- позитивным статусом опухоли и потенциально может служить диагностическим маркером.

По данным ряда авторов (Д.К. Чебанов, И.Н. Михайлова, А.А. Абрамов, Н.С. Воробьева, 2016) MiR-205 [7] индуцирует апоптоз и тормозит рост и инвазию клеток опухоли, а также является супрессором онкогенеза. В.В. Козлов изучил несколько микро-РНК у пациенток с диагнозом: фиброаденома молочной железы. Изучались: микро-РНК 21, 155, 221, 222. Автором отмечено десятикратное увеличение микро-РНК, индуцирующих апоптоз и клеточный рост. Изучение роли микро-РНК 137,199 позволило провести более информативный анализ резистентности организма к опухолевой агрессии [8]

Лабораторией Сколково «Онкоюнайт» – ген. директор Д.К. Чебанов совместно с кафедрой превентологии и реабилитации онкологических больных Российской академии медико-социальной реабилитации к.м.н., член-кор РАЕН Л.Н. Фишер и к.м.н., член-кор РАЕН О.А. Фишер разработана онкопанель микро-РНК для оценки риска и динамики развития рака молочной железы (Патент на изобретение №2705344 от 15.03.2019 Способ скрининга рака молочной железы и предрасположенности к нему).

1. Has-miR-199a-3p-ответственен за метастазирование. Стимуляция ангиогенеза через сверхэкспрессию ApoE – повышение в опухоли.
2. Has-miR-222-3p – супрессор, усиление пролиферации, а так же дифференцировка и блокада апоптоза в клетках – повышение при риске.
3. Has-let-7a-5p-увеличение уровня интегрина B-3 – ассоциирован с ФНО – контроль пролиферации – снижен при риске заболевания.
4. Микро-РНК-196a-2 – защитный фактор. Снижение роста и пролиферации, контроль миграции и инвазии – снижает риск образования опухоли.
5. Has-miR-106a-5p – индуцирует апоптоз, снижает пролиферацию – снижен при опухолях.
6. Has-miR-21-5p – активация PI-3K7 Akt пути – пролиферация и выживание клеток – повышение при риске.
7. Has-miR-21-137 – пролиферация, апоптоз – снижен при заболевании.
8. Has-miR-155 – снижение уровня таурина, повышение влияния оксидативного стресса – повышен при дефиците таурина.

Влияние уровня таурина на риск развития предопухолевых заболеваний молочной железы было изучено в кандидатской диссертации Л.Н. Фишера в которой доказано влияние таурина на уменьшение боли и восстановление структурно-функциональных взаимоотношений молочной железы.

РЕЗУЛЬТАТ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве примера: пациентка П., 1957 года рождения обратилась с жалобами на скудные выделения из соска правой молочной железы в апреле 2018 года. При ММГ – картина выраженного аденоза, высокая рентгенологическая плотность – breast density 5. При проведении УЗИ молочных желез, без узловых образований, обнаружено множество микрокист диаметром 4–5 мм. Проведено радиотермометрическое обследование молочных желез. Установлено, что 1 коэффициент равнялся 1,7 (норма до 2), 2 коэффициент 1,9 (норма 2,5). С целью уточнения диагноза назначено определение микро-РНК. Приводим полученные результаты (табл. 1).

По шкале риска – 0 – популяционный риск, 0–3 – небольшое повышение; 4–7 – значительное повышение; 7–10 – существенный риск заболевания.

Исходя из полученных данных шкалы риск развития рака молочной жеелезы незначительно повышен – 3.

Через 6 месяцев пациентка обратилась на контрольный осмотр с жалобами на появление узлового образования в правой молочной железе примерно 2 см, увеличение подмышечных л/узлов справа. ММГ – в правой молочной железе в в/нар квадранте определяется узловое полициклическое образование 2 см в диаметре, наличие сгруппированнных мкирокальцинатов. УЗИ молочных желез – в правой молочной железе в в/нар квадранте гипоэхогенное образование неправильной формы 2 см, в правой подмышечной области увеличенные узлы до 2.5 см. Проведение радиотермометрического исследования показало, что первый коэффициент составлял 2,45; второй коэффициент 3,2 (это соответствует вероятному развитию рака молочной железы более 85%). Динамическое исследование микро-РНК дало следующие результаты (табл. 2).

В результате коэффициент по определению микро-РНК составлял 7, что характерно для высокого риска развития рака молочной железы. Проведенное гистологическое исследование подтвердило наличие инвазивной карциномы.

ТАБЛИЦА 1.

1. Hsa-miR-155	Норма
2. Hsa -miR-199a-3p	Норма
3. Hsa-miR-222-3p	Незначительное повышение – 1
4. Hsa-let-7a-5p	Незначительное повышение – 1
5. Микро-РНК-196a-2	Норма
6. Hsa-miR-106a-5p	Незначительное повышение – 1
7. Has -miR-21-5p	норма
8. Has-miR-137	норма

ТАБЛИЦА 2.

1. Hsa-miR-155	норма
2. Hsa-miR-199a-3p	норма
3. Hsa-miR-222-3p	Выраженное повышение – 3
4. Hsa- let-7a-5p	Выраженное повышение – 3
5. Микро-РНК-196a-2	норма
6. Hsa-miR-106a-5p	Незначительное повышение – 1
7. Hsa – miR-21-5p	норма
8. Hsa- miR-137	норма

ВЫВОДЫ:

Таким образом, совместное использование радиотермометрии и панели вышеперечисленных микро-РНК позволяет выделить из массы дисгормональных заболеваний молочных желез группу тех патологий молочной железы, которая в обозримом будущем с большой вероятностью перейдет в рак. Это позволяет назначать индивидуальные онкопрофилактические комплексы, которые будут способствовать регрессу облигатного предрака и в перспективе можно добиться уменьшения случаев рака молочной железы.

Литература

1. **Аксель Е.М.** Злокачественные новообразования в России. 2018.
2. **Чехун В.Ф. и др.** Микро-РНК в опухолевом процессе // Онкология. 2012. Т. 15. №2. С. 136–140.
3. **Calin G.A., Crose C.M.** Micro RNA signatures in human cancer. Nat. Rev. Cancer. 6. P. 857–866.
4. **Pillai R.S.** Micro RNA function: multiple mechanisms for a tiny RNA? 2005. Vol. 11. P. 1753–1761.
5. **Savad S. et all.** Expression analusis of MiR 21. MiR 205 and MiR 342 in breast cancer in Iran. Asian Pac. J. cancer Res. 2007. Vol. 67. P. 11612–11620.
6. **Valastyan S. et all.** A pleiotropically acting micro RNA, miR -31, Inhibits breast cancer metastasis. Cell.-2009. 137. P. 1032–1046.
7. **WangJ. Wu J.** Role of MiR 155 in breast cancer. Front Biosci. 2012. Vol. 17. P. 2350–5.
8. **Zhao J.J. et all.** MicroRNA-221/222 negatively regulates estrogen receptor alpha and is associated with tamoxifen resistence in breast cancer // J. Biol. Chem.-2008, Nov. 7. Vol. 283. N45. P. 31079-86.

Фишер Леонид Наумович,
к.м.н., зав. кафедры превентологии и реабилитации онкологических больных Российской академии медико-социальной реабилитации,

тел.: +7 (917) 518-91-85

Фишер Ольга Алексеевна,
к.м.н., доцент кафедры превентологии и реабилитации онкологических больных Российской академии медико-социальной реабилитации,

119634, г. Москва, ул. Лукинская, д. 14,
119634, Moscow, st. Lukinskaya, 14,
тел: +7 (917) 519-30-18, e-mail: olgafisher2016@yandex.ru

УДК 622.248.3

ПЕРСПЕКТИВЫ ОСВОЕНИЯ НЕТРАДИЦИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ГАЗА – ГАЗОГИДРАТОВ В РАЙОНАХ РАСПРОСТРАНЕНИЯ МНОГОЛЕТНЕМЕРЗЛЫХ ПОРОД

З.А. Васильева
Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина

Работа посвящена анализу возможности освоения нетрадиционных источников газа – газогидратов в районах распространения многолетнемерзлых пород, способов разработки газогидратных залежей. Дан анализ проблем, возникающих при различных способах воздействиях на газогидратные пласты. Обоснована эффективность использования тепла термальных вод нижележащих горизонтов газогидратных месторождений для диссоциации природных газовых гидратов.

Ключевые слова: *газовые гидраты, диссоциация, гидродинамические исследования. технология добычи газа, погружная насосная установка, сепарация.*

PROSPECTS FOR THE DEVELOPMENT OF NON-CONVENTIONAL GAS SOURCES – GAS HYDRATES IN THE AREAS OF DISTRIBUTION PERMAFROST ROCKS

Z.A. Vasilyeva
Gubkin Russian State University of Oil and Gas

The work is devoted to the analysis of the possibility of developing unconventional gas sources - gas hydrates in the areas of permafrost distribution, methods of developing gas hydrate deposits. An analysis of the problems arising from various methods of impact on gas hydrate formations is given. The efficiency of using the heat of thermal waters of the underlying horizons of gas hydrate deposits for the dissociation of natural gas hydrates has been substantiated.

Key words: *gas hydrates, dissociation, well test, gas production technology, submersible pumping unit, separation.*

Структура ресурсной базы России и многих других газодобывающих стран претерпевает в настоящее время изменения в сторону преобладания средних и мелких месторождений, а также газа плотных глубокозалегающих горизонтов. С экономической и технологической точки зрения освоение этих ресурсов весьма близко к стратегии освоения нетрадиционных источников, но при этом нетрадиционные источники обладают многократно большим потенциалом для добычи в силу превышения их ресурсов над традиционными.

Истощение уникальных месторождений Западной Сибири: Медвежьего, Уренгойского, Ямбургского, где добывается около 70% от общего объема добычи газа и создана добывающая промышленная инфраструктура, привело к необходимости разведки дополнительных ресурсов газа как на самих месторождениях в более глубоких горизонтах с плотным коллектором, так в прилегающих областях, характеризующихся преобладанием мелких месторождений.

Для России перспективной ресурсной базой являются месторождения Восточной Сибири и Арктического шельфа, которые в отличие от месторождений сеноманского комплекса Западной Сибири представляют собой сложнопостроенные объекты с аномальными термодинамическими характеристиками и наличием значительного количества неуглеводородных газов, что создает благоприятные условия для образования техногенного газогидрата и наличия природного газогидрата. Поэтому изучение возможности добычи газа из нетрадиционных источников становится одним из перспективных направлений деятельности нефтегазовых компаний.

В последнее время в мире значительно возрос интерес к исследованиям газовых гидратов. Оценка возможности использования газовых гидратов в качестве альтернативного источника энергии является предметом многих исследований в настоящее время во всем мире. Ресурсы газа в гидратном состоянии в мире оценивается в пределах 21000 трлн. м^3.

Природные газовые гидраты, состоящие в основном из гидрата метана, рассматриваются как перспективные источники углеводородного сырья. Большую часть территории России составляют районы распространения многолетнемерзлых пород, где термо-

барические условия благоприятны для образования залежей природных газогидратов. Наиболее перспективными районами поиска и освоения гидратов являются районы распространения многолетнемерзлых пород в Западной и Восточной Сибири, на Дальнем Востоке, в акваториях Северных морей, в Охотском и Черном морях.

Возможность образования и существования газогидратов обеспечена присутствием многолетнемерзлых пород, глубиной воды в морях. Для гидратообразования метана необходима мощность многолетнемерзлых пород не менее 260 м. Чем больше мощность многолетнемерзлых пород, тем больше мощность зоны стабильности (ЗСГ) в многолетнемерзлых породах и под ними. Над зоной стабильности газогидратов могут существовать метастабильные или реликтовые гидраты, которые образовались в древние времена в пределах мерзлоты и были законсервированы льдом благодаря свойству газовых гидратов – самоконсервации при температуре ниже 0° С. Таким образом, газовые гидраты могут встречаться при бурении по всей мощности криолитозоны и под ней и являться причиной серии осложнений [2].

Отличительной особенностью многих месторождений Восточной Сибири является наличие аномальных пластовых давлений и низкой температуры. Мощность криолитозоны Северо-Сибирской приморской низменности превышает 600 м. Усредненные мощности криолитозоны по перспективным на нефть и газ площадям составляют: Балахнинской – 560 м, Средне-Пясинской – 500м, Рассохинской – 460 м, Джанготской – 510 м, Озерной – 600 м, Суходудинской – 470 м.

В центральной Якутии наблюдается самое глубокое охлаждение разреза криолитозоны. Максимальные мощности криолитозоны – 800–1500 м зафиксированы в Анабарской области. Мощность криолитозоны Ботуобинской области составляет 500–800 м. В Лено-Вилюйской области породы с отрицательными температурами залегают до глубины 399–500 м.

Пластовые условия восточносибирских месторождений показаны в табл. 1. Продуктивные пласты Верхневилючанского, Тас-Юряхского, Талаканского и Чаяндинского месторождений имеют низкие пластовые температуры и достаточно высокие пластовые давления, чтобы оказаться в области гидратообразования. Кроме того, при бурении и освоении скважин на этих месторождениях наблюдается ряд косвенных техногенных признаков индикации газогидратов [2].

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ МЕТОДОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ГАЗОГИДРАТНУЮ ЗАЛЕЖЬ

Процесс добычи газа из газогидратного месторождения представляет собой как огромный практический, так и теоретический интерес, так как физический процесс добычи газа в данном случае отличается от стандартного тем, что добыча газа сопровождается фазовым переходом твердого гидрата в газ и воду с поглощением большого количества тепла.

Разрушенные газогидраты образуют подвижные флюиды – природный газ и воду. Возможность диссоциации газогидратов в пласте с выделением газа в свободную фазу породила надежду строить принципы разработки газогидратных залежей на известной технологии разработки газовых и нефтяных месторождений.

ДЕПРЕССИОННЫЙ МЕТОД РАЗРАБОТКИ ГАЗОГИДРАТНЫХ ЗАЛЕЖЕЙ

Наиболее выгодным методом разработки газогидратного месторождения с точки зрения энергетических затрат является метод понижения давления в пласте [12].

Техника депрессионного метода направлена на добычу газа из газогидратных залежей путем снижения давления ниже равновесного давления гидратообразования при пластовой температуре. Пластовая температура будет непрерывно снижаться при диссоциации газогидрата, снижение может прекратиться, как только пластовая температура упадет до равновесной температуры при определенном давлении. Поэтому, чтобы поддерживать постоянную температуру во время добычи газа, необходим своевременный ввод теплоты в пласт. Вычислительные эксперименты для вертикальной скважины показали, что за счет понижения давления невозможно добиться какого-либо приемлемого дебита.

ТЕРМИЧЕСКАЯ СТИМУЛЯЦИЯ

Термическая стимуляция означает повышение температуры газогидратных залежей путем закачки горячей воды или пара, электрического нагрева, микроволнового излучения. Локальная температура оказывается выше температуры фазового равновесия при локальном давлении, что приводит к диссоциации газогидратов. Существует три способа термической стимуляции, включая циркуляцию горячей воды

ТАБЛИЦА 1.

P/T условия продуктивных пластов восточно-сибирских нефтегазоконденсатных месторождений

Название месторождения	Рпл, МПа	tпл, ° С
Соболох-Неджелинское	15–21	37–45
Среднетюнгское	27,6	58
Верхневилючанское	16,2	8
Тас-Юряхское	14,6	11,6
Талаканское	12,5	13,5
Чаяндинское	13,5	9–11
Ковыктинское	25,7	53

[16], нагрев ствола скважины, и метод периодической закачки пара [17].

Перспективными способами добычи газа являются технологии, основанные на применении горизонтальных скважин [8]. Предлагается использовать двухустьевые многоствольные скважины для осуществления одновременно добычи газа из газогидратов и нагнетания в продуктивный пласт тепловых агентов (горячая вода/пар). Предполагается создавать в залежи замкнутую циркуляционную систему горячего агента, который осуществляет, прогрев пласта, необходимый для диссоциации газогидратов.

У данных термических методов разработки имеются следующие недостатки. Образование газового пузыря при нагнетании теплоносителя в высоком темпе или взрывчатого носителя способствуют быстрому росту давления.

Необходимость соблюдать определенное соотношение между дебитом и тепловым потоком $F = Q/W$, показана в работе [6]. Предполагается, что в начальный момент времени пласт имеет температуру T_0 и давление P_0, связанные условием термодинамического равновесия, начальную водонасыщенность – s_0 и гидратонасыщенность – ν_0, $L_0 = T_0 / P_0$. Аналитическая зависимость между всеми параметрами, определяющими процесс диссоциации гидрата, при которых осуществляется фронтовой режим, имеет вид [6]:

$$\left(\frac{F q_h \rho_w \rho_h}{\left(\rho_{0g}\rho_w R L_0 + \rho_{0w} - \rho_w\right)}\right)^{\frac{\chi}{a-\chi}} = \tag{1}$$

$$= \pi m \rho_h \nu_0 q_h \frac{4}{W}\frac{\chi a}{a-\chi}\ln\left(\frac{F q_h \rho_w \rho_h}{\left(\rho_{0g}\rho_w R L_0 + \rho_{0w} - \rho_w\right)}\right)$$

Здесь m – пористость, ρ_W, ρ_h – плотность воды и гидрата, ν – гидратонасыщенность, R – газовая постоянная, ρ_{0g} – эффективная плотность газа в объеме, занимаемом гидратом, ρ_{0W} – эффективная плотность H_2O в объеме, занимаемом гидратом, q_h – удельная теплота диссоциации гидрата. a – коэффициент температуропроводности и χ коэффициент пьезопроводности, W, Q – тепловой и объемный поток через границу скважины

Зависимость (1) определяет области, при которых осуществляются три режима: 1) фронтовой режим (на кривой), 2) разложение гидрата в конечном объеме (под кривой), 3) разложение гидрата на подвижной границе и образование его за фронтом в некотором объеме (над кривой) рис. 1.

Если соотношение между дебитом и тепловым потоком соответствует области над кривой (рис. 1) [1], то режим диссоциации в зоне объемных фазовых переходов меняется на режим образования газогидратов, характеризуется превалированием процесса теплопередачи и осуществляется при значительном тепловом потоке на скважине. Данный режим характерен для малопроницаемых пластов при небольшом дебите газа. Если за фронтом диссоциации газогидратов недостаточно воды для его вторичного образования. то рост давления может превысить горное. Соответственно, может произойти неуправляемый гидроразрыв пласта и нарушение его герметизации, что в свою очередь приведёт к неконтролируемым перетокам, к грифонам и так далее. Кроме того, газовый пузырь будет не сплошной, и в эксплуатационные скважины будет поступать не чистый газ, а газожидкостная смесь.

ЗАКАЧКА ХИМИЧЕСКОГО ИНГИБИТОРА

Закачка химического ингибитора направлена на смещение кривой фазового равновесия на более высокое давление и более низкую температуру, в результате чего газогидраты становятся нестабильными в локальных термобарических условиях. Химические ингибиторы включают термодинамические ингибиторы и кинетические ингибиторы. Термодинамический ингибитор работает путем изменения условия равновесия газогидратов, в то время как кинетический ингибитор работает путем замедления скорости образования газовых гидратов [10].

ЗАМЕЩЕНИЕ CO_2-CH_4

С 1980-х годов проводились исследования использования CO_2 для получения CH_4 из газогидратов метана. Общим убеждением является то, что CO_2 не только работает на извлечение CH_4 из газогидратов, но также образует газогидраты CO_2 [18]. Термодинамическая осуществимость замены CO_2–CH_4 была полностью доказана в многочисленных исследованиях.

С термодинамической точки зрения, как чистые CO_2, так и молекулы CH_4 обычно образуют *sI*-гидраты в соответствующих условиях, и энтальпия образования гидратов CO_2 (около 57,98 кДж / моль) выше, чем у гидрата CH_4 (около 54,49 кДж / моль). Это означает, что гидрат CO_2 более устойчив, чем гидрат CH_4, при тех же условиях температуры и давления.

КОМБИНИРОВАННЫЙ МЕТОД

Комбинация методов рассматривается как наилучший метод повышения эффективности добычи газа. По сравнению с тепловой стимуляцией или понижением давления комбинированный метод более эффективен.

Другой комбинированный метод представляет собой закачку химического ингибитора, сочетающуюся с термической стимуляцией, и его можно считать как закачку горячего раствора с химическим ингибитором [3]. Комбинированный метод может эффективно предотвращать вторичное образование газогидратов из-за снижения температуры, в то время как химический ингибитор вместе с горячей водой может проникать в более отдаленные области от скважины. Однако

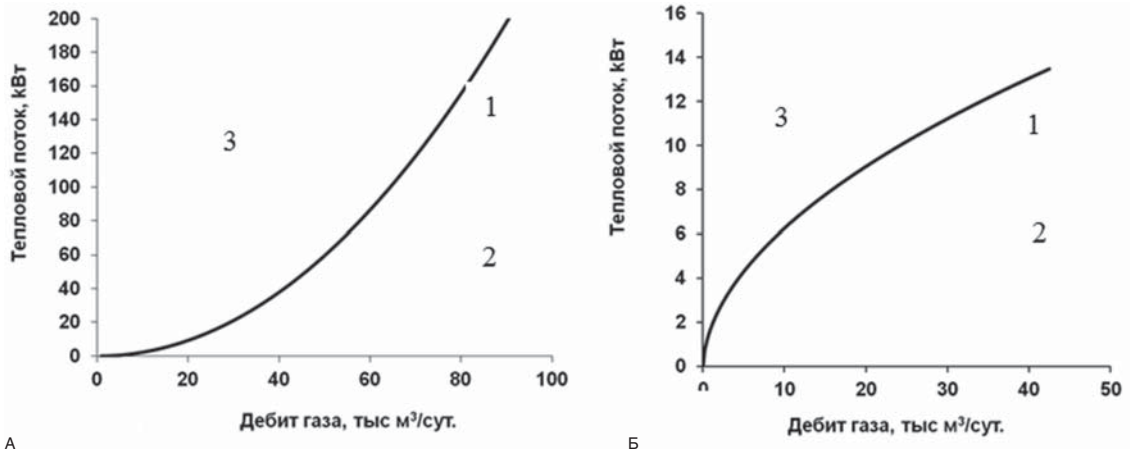


РИС. 1.
Зависимость теплового потока от дебита, при котором осуществляется фронтовой режим:
А – K =0,065×10^{-17} м^2, Б – K =0,45×10^{-17} м^2

закачка химического ингибитора связана с экологическими проблемами.

СПОСОБЫ РАЗРАБОТКИ ГАЗОГИДРАТНЫХ ЗАЛЕЖЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕОПРИРОДНЫХ ФАКТОРОВ

Следующие методы состоят в использовании тепла термальных вод нижележащих горизонтов газогидратных месторождений для диссоциации природных газогидратов.

Гидротермальные ресурсы (тепло подземных вод) могут применяться как теплоносители при разработке газогидратных месторождений. Целесообразность использования термальных вод обусловлена экономическим эффектом, получаемым при сравнении с другими видами тепловых агентов или топлива. По предварительным оценкам на территории стран СНГ прогнозные запасы термальных вод с температурой 313–523 К (40–250° С), минерализацией до 35 г/л и глубиной залегания до 3 000 м составляют 21–22 млн м^3/сут, что эквивалентно сжиганию 30–40 млн т условного топлива в год [5].

Изобретение [14] направлено на обеспечение интенсификации разработки газогидратных залежей, повышение газоотдачи пластов в масштабе целой залежи путем максимального её охвата по площади. Бурится перепускная скважина в центральной части газогидратной залежи до пласта с термальными пластовыми водами. Затем под подошву газогидратной залежи бурят горизонтальную скважину, в которую подаётся термальная пластовая вода. Горизонтальная скважина пронизывает весь газогидратный пласт. От перепускной скважины в верхнюю часть газогидратной залежи бурят горизонтальную скважину с вертикальным отводом на поверхность. В результате воздействия термальной пластовой воды на газогидратную залежь выделяется газ, который отбирается из горизонтальной скважины и выпускается на поверхность через вертикальный отвод. При этом в горизонтальной скважине создаётся давление ниже давления образования гидратов газа, что способствует эффективному извлечению газа.

Предлагаемый способ позволяет осуществлять эффективное тепловое воздействие на газогидратную залежь термальными водами с расширением зоны воздействия путем перепуска термальной воды в горизонтальные скважины, расположенные ниже и внутри продуктивного пласта. При этом наблюдается эффект расширения объема пор и трещин. Диссоциация газогидратов достигается комбинированным тепловым и ингибирующим воздействием, вследствие чего происходит вытеснение газа под действием перепада давления при движении фронта газонасыщенной жидкости снизу вверх по всему массиву пласта. При этом увеличивается химическое и тепловое воздействие контактирующей поверхности минерализованной пластовой воды. Так увеличение концентрации хлористого кальция в пластовой воде на 1% снижает равновесную температуру гидратообразования на 0,5° С, а пластовая вода с высокой степенью минерализации имеет теплоемкость значительно превышающую теплоемкость пресной воды.

В результате воздействия перечисленных факторов существенно повышается степень извлечения газа в масштабе целой залежи.

Например, для Лаявожского месторождения, продуктивный пласт которого, возможно, содержит газогидратную залежь, теплоемкость породы составляет C_n = 600 ккал/м$^{3\cdot0}$С ; пористость – m = 0,2; пластовая температура – $T_{пл}$ = 0° С, удельная теплота фазового

перехода гидрата – q_h =1,25 ккал/м^3, гидратонасыщенность – S_h = 0,4; температура термальной пластовой воды – T_0 = 90° С; теплоемкость термальной пластовой воды – C_T = 1000 ккал/м$^{3\cdot0}$С .

Количество термальной пластовой воды, необходимое для обработки одного м^3 породы, равно:

$$Q_T = \frac{c_s\left(T_* - T_{пл}\right) + ms_h q_h}{0.7\,C_T(T_0 - T_{пл})} = \quad , \qquad (2)$$

$$= \frac{600\times3 + 0.2\times0.4\times1.25}{0.7\quad 1000\times90} \approx 0.178 м^3$$

т.е. для осуществления способа по предлагаемому изобретению необходимо на каждый 1 м^3 породы примерно 0,178 м^3 термальной пластовой воды.

Добыча газа из гидратов в пористых средах вызывает увеличение объема жидкости, течение газа и воды, изменения пористости и проницаемости, миграцию мелкозернистых отложений. Эти процессы могут вызывать скопление жидкости, засорение пласта, вынос песка, замедление и низкую эффективность добычи газа [13]. Эти возникающие процессы могут вызывать нестабильность отложения, засорение пласта, вынос песка, замедление и низкую эффективность добычи газа [13].

На канадском месторождении Маллик испытание скважин было прекращено из-за выноса песка, но возобновлено после того, как система заканчивания скважин была переработана для контроля за выносом песка.

При испытании добычи газогидратов в японском Нанкай наблюдался значительный вынос песка [11]. Вынос песка создает проблемы с добычей газа, когда неуплотненные пески вместе с водой и газом попадают в ствол скважины.

Газогидратная структурно-поисковая скважина Mount Elbert была пробурена в 2007 г. с отбором керна в перспективную газогидратную толщу пород до глубины (абс.) 700 м. на основании интерпретации сейсмических данных в районе Северного Склона Аляски [15].

Отбор пластовой воды во время первого периода притока показал способность фильтрации остаточной воды в гидратонасыщенных пористых средах. По оценкам насыщенность подвижной воды составила примерно 15%. Исследования показали, что отбор воды является необходимым условием для снижения давления в гидратосодержащем пласте, который не находится в контакте с подстилающей свободной водой или газом. Из формул притока флюида из газогидратной скважины [9] также следует, что отбор водной фазы существенно снижает давление.

Поэтому предлагаем способы разработки [6, 7] с использованием погружной насосной установки с одновременной сепарацией газожидкостной смеси в скважине [4].

Способы разработки газогидратной залежи [6, 7] заключаются в бурении основной скважины со вскрытием продуктивного пласта и нижележащего водоносного пласта. Скважину перфорируют в зоне продуктивного пласта и нижележащего водоносного пласта, затем осуществляют спуск в основную скважину насосно-компрессорных труб с погружной насосной установкой. Отбор газожидкостной смеси производят на границе газоводяного контакта продуктивного пласта с одновременной сепарацией газожидкостной смеси в скважине. Причем добычу газа осуществляют по затрубному пространству, а жидкости с растворенным газом по насосно-компрессорным трубам, которую с помощью вышеупомянутой погружной насосной установки закачивают в нижележащий водоносный пласт (рис. 2).

К недостаткам способа [6] можно отнести неизбежное снижение температуры на забое скважины, вследствие как диссоциации газогидратов, происходящей с поглощением большого количества тепла, так и процесса дросселирования газа, дополнительно приводящего к снижению температуры. Снижение температуры в призабойной зоне приводит к образованию вторичных газогидратов. Следует также отметить низкую приемистость водоносного пласта, из которого ничего не отбирается, и возможно отсутствие приемистости через небольшой промежуток времени. Данный способ разработки может осуществляться непродолжительное время и может не оправдать затраты на погружную насосную установку.

Поэтому предлагается усовершенствовать данный способ разработки газогидратной залежи следующим образом [7] (рис. 2).

По периферии залежи бурятся перепускные скважины 16 (рис. 2) в породе до пласта 2 с термальными водами, нижележащего относительно газогидратной залежи, для поддержания давления в разрабатываемой залежи и обеспечения приемистости водоносного пласта путем перепуска термальной пластовой воды из нижележащего горизонта в вышележащий.

Технический результат достигается за счет снижения давления в призабойной зоне отбором воды, за счет исключения подъема пластовой воды на поверхность, обеспечения приемистости водоносного пласта, циркуляции термальной пластовой воды между водоносным и продуктивным пластом. Поскольку вода закачивается в ниже лежащий пласт, то решается не только проблема утилизации воды, но и выноса песка с забойной зоны в ниже лежащий пласт.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что с экономической и технологической точки зрения освоение трудноизвлекаемых запасов газа весьма близко к стратегии освоения нетрадиционных источников – газовых гидратов, но при этом нетрадиционные источники обладают многократно

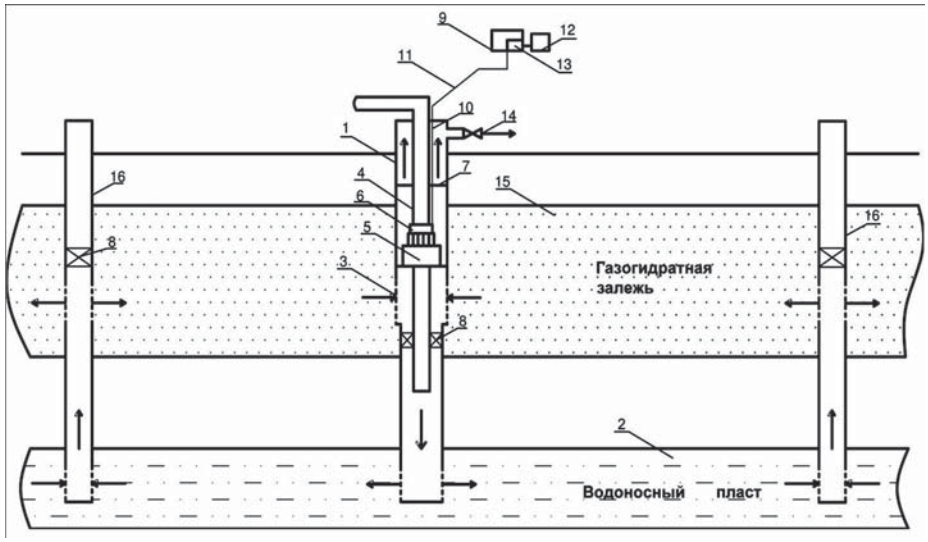


РИС. 2.

Схема разработки с использованием погружной насосной установки: 1 – скважина, 2 – водоносный пласт, 3 – перфорационное отверстие, 4 – насосно-компрессорная труба, 5 – насосная установка, 6 – погружной электродвигатель, 7 – динамический уровень, 8 – пакер, 9 – станция управления, 10 – внутрискважинный кабель, 11 – поверхностный кабель, 12 – трансформатор, 13 – частичный преобразователь, 14 – шлейф, 15 – продуктивный пласт, 16 – перепускная скважина

большим потенциалом для добычи в силу превышения их ресурсов над традиционными.

Выбор того или иного подхода к разработке газогидратных залежей зависит от конкретных геолого-физических условий. Отбор контактирующих с газогидратами флюидов приводит к снижению внутрипорового давления и нарушению равновесных условий гидратообразования. Если газогидратный пласт не находится в контакте с подстилающей свободной водой или газом, тогда отбор воды является необходимым условием для снижения давления в гидратосодержашем пласте и, соответственно, диссоциации газового гидрата. Эти выводы подтверждаются гидродинамическими исследованиями на структурно-поисковой скважине Mount Elbert в районе Северного Склона Аляски, где наличие природного гидрата было подтверждено отбором керна.

Из математического моделирования неизотермического притока пластовых флюидов к скважине из газогидратонасыщенного пласта также следует, что отбор водной фазы существенно снижает давление.

Любой способ разработки газогидратных залежей сопровождается увеличением объема воды, миграцией мелкозернистых отложений, а это, в свою очередь, приводит к снижению проницаемости пласта, засорению пласта, выносу песка и, в результате, замедлению и низкой эффективности добычи газа. При достижении водой определенного уровня происходит самозаполнение скважин водой и выбывание скважин из эксплуатации.

Для исключения перечисленных осложнений предлагается способ разработки с использованием погружной насосной установки с одновременной сепарацией газожидкостной смеси в скважине [7].

Перепускные скважины обеспечат приемистость водоносного пласта путем перепуска термальной пластовой воды из нижележащего горизонта в вышележащий.

Предлагаемый способ разработки газогидратной залежи обеспечивает разложение газогидратов не только за счет снижения давления на забое скважины в процессе отбора газожидкостной смеси, но и теплового и ингибирующего воздействия термальных вод.

Литература

1. **Васильева З.А., Джафаров Д.С.** Объемная модель диссоциации газовых гидратов в природных пластах // Автоматизация, телемеханизация и связь в нефтяной промышленности, 2015. № 7. С. 36–41.
2. **Васильева З.А., Джафаров Д.С., Аметова Т.А.** Косвенные техногенные признаки индикации газогидратов в криолитозоне // Криосфера Земли, 2011. Т. XV. № 1. С. 61–67.
3. **Гордеев П.В., Шемелина В.А., Шулякова О.К.** Гидрогеология. М.: Высш. шк. 1990. 448 с.
4. **Дроздов А.Н.** Влияние свободного газа на характеристики глубинных насосов // Нефтяное хозяйство. 2003. № 1. С. 68–70.
5. Патент RU2250365. Способ разработки газогидратной залежи Буслаев В.Ф., Васильева З.А., Шаровар И.И. Опубл. 26.05.2003.
6. Патент RU2438009. Способ разработки газогидратных месторождений. Дроздов А.Н., Васильева З.А., Булатов Г.Г., Сливкова Д.Ф. 04.05.2010.

7. Патент RU26026021. Способ разработки газогидратных месторождений. Калинчук В.Ю., Васильева З.А., Якушев В.С. 07.11.2015.
8. Патент RU2211319, приоритет от 21.03.2002, зарегистрирован 27.08.2003. Кульчицкий В.В., Басниев К.С. Способ разработки месторождений углеводородов.
9. **Цыпкин Г.Г.** О влиянии подвижности жидкой фазы на диссоциацию газовых гидратов в пластах // Изв. АН СССР. МЖГ. 1991. № 4. С. 105–114.
10. **Babaee S., Hashemi H., Javanmardi J., et al.** Thermodynamic model for prediction of phase equilibria of clathrate hydrates of hydrogen with different alkanes, alkenes, alkynes, cycloalkanes or cycloalkene. Fluid Phase Equilib 2012. 336. P. 71–8.
11. **Boswell R., Rose K., Collett T.S., et al.** Geologic controls on gas hydrate occurrence in the Mount Elbert prospect, Alaska North Slope. Journal of Marine and Petroleum Geology. 2011. Vol. 28. N2. P. 589–607.
12. **Collett T., Ginsburg G.** Gas hydrates in the Messoyakha gas field of the west Siberian basin – a re-examination of the geologic evidence. Int Offshore Polar E 1997. P. 96–103.
13. **Hancock S., Moridis G., Robertson A., et al.** Well design requirements for deepwater and arctic onshore gas hydrate production wells. In: Offshore technology conference. 2010.
14. **Jung J., Jang J., Santamarina J., et al.** Gas production from hydrate-bearing sediments: the role of fine particles. Energy Fuels. 2011. Vol. 26. P. 480–7.
15. **Lee M.W., Collett T.S.** In-situ gas hydrate saturations estimated from various well logs at the Mount Elbert Well, Alaska North Slope. Journal of Marine and Petroleum Geology. 2011. Vol. 28. N2. P. 439–449.
16. **Li G., Moridis G., Zhang K., Li X.** The use of huff and puff method in a single horizontal well in gas production from marine gas hydrate deposits in the Shenhu Area of South China Sea. J Petrol Sci Eng 2011. Vol. 77. P. 49–68.
17. **Li X., Wang Y., Duan L., Li G., et al.** Experimental investigation into methane hydrate production during three-dimensional thermal huff and puff. Appl Energy. 2012. Vol. 94. P. 48–57.
18. **Seo Y., Lee S., Lee J.**Experimental verification of methane replacement in gas hydrates by carbon dioxide. Chem Engineer Trans. 2013. Vol. 32. P. 163–8.

Васильева Зоя Алексеевна,
к.т.н., доцент кафедры разработки и эксплуатации газовых и газоконденсатных месторождений Российского государственного университета нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина,

119991, Москва, Ленинский пр-т, 65,
тел.: +7(916) 740-50-78, e-mail zoyava c @gmail.com

УДК 577.32

КОЛЕБАНИЯ И ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ВИРУСОВ И ДРУГИХ ПАТОГЕННЫХ БИОСТРУКТУР

П.Дж. Кервалишвили
Евросредиземноморская Академия Искусств и Наук, Афины-Лозанна

Изучение и обнаружение вирусов (бионаноагентов) по их колебательному оптическому спектру является революционным шагом для лечения различных заболеваний в современном здравоохранении. Для улучшения идентификации и характеристики вирусов, разработки новых инструментальных конструкций для конкретных клинических потребностей и создания обширных баз данных с вероятностными алгоритмами идентификации оптическая спектрометрия обладает реальным потенциалом в качестве надежной методики определения и лечения вирусов и вирусоподобных частиц. В настоящее время из-за проблем распространения опасных вирусов, таких как Эбола, грипп, Корона и др., чрезвычайно важно разработать новые процедуры биологической безопасности и соответствующие оптические наноинструменты. Основной задачей предлагаемой статьи является комплексный анализ спектроскопических свойств нанобиочастиц, оценка колебательных мод возможного резонансного диапазона длин волн с целью определения уникальных спектров вирусов. Оригинальная физическая модель оптического обнаружения основана на учете того факта, что вирион как физический нанообъект характеризуется набором специфических электро-геометрических параметров, определяющих их уникальные спектроскопические «отпечатки пальцев». Эта модель позволяет развить вычислителный метод обнаружения вирусов и вирусоподобных частиц через систему программных модулей. Результаты применимы в междисциплинарных исследованиях бионаночастиц различного происхождения, наносенсорных и детектирующих систем, инфоквантовой биологии.

Ключевые слова: *вирус, нанобиочастица, колебание, спектроскопия, вычисление.*

VIBRATION AND OPTICAL SPECTROSCOPY OF VIRUSES AND OTHER PATHOGENIC BIOSTRUCTURES

P.J. Kervalishvili
Euro-Mediterranean Academy Arts and Sciences, Athens-Lausanne

Study and detection of viruses (nanobioagents) using their oscillation optical spectrum is revolutionary step for development of novel methods of treatment of different diseases in the modern health care. For strengthen identification and characterization of viruses, elaboration of new instrumental designs for specific clinical needs and building up extensive databases with probabilistic identification algorithms, optical spectrometry has real potential as reliable characterization and treatment technique of viruses and virus-like particles. Nowadays due to issues of proliferation of dangerous viruses such as Ebola, Corona flu, others it is extremely important to elaborate novel procedures of biological security and relevant optical nanoinstruments. The main task of the proposing paper is comprehensive analyze of spectroscopic properties of nanobioparticles, estimation of vibrational modes, possible resonance wavelength range in purpose of determination of the unique spectra of viruses. Original physical model of optical detection is based on consideration that virion as physical nanoobject characterizes by the set of specific electro-geometrical parameters determining their unique spectroscopic «fingerprints». This new concept states the detecting model of VLPs as a system of programming and computing modules. Results are applicable in cross-disciplinary studies of nanobioparticles of different origin, nanosensory and detecting systems, info quantum biology.

Keywords: *virus, nanobioparticle, vibration, spectroscopy, computation.*

«В живой клетке он (вирус) ведет себя как живое существо, без клетки он мертв, как камень. Из чего очевидно, что невозможно провести четкую границу между живым и мертвым».

Уэнделл М. Стэнли – Нобелевская премия по химии, 1946 г.

«У Ухань-400 есть и другие не менее важные преимущества по сравнению с большинством биологических агентов. Во-первых, вы можете стать инфекционным носителем только через четыре часа после контакта с вирусом»,

«глаза тьмы», Дин Кунц, из-во Беркли / июль 1996 г.

ВМЕСТО ВСТУПЛЕНИЯ

Вирусы являются неклеточными образованиями, находящимися в серой области между живыми и не-

живыми состояниями. У вирусов наблюдается большое разнообразие форм и биологических свойств, однако все они имеют общие черты строения. Зрелые частицы вирусов называют виреосами – вирионами (vireos – virions). В отличие от других микроорганизмов, содержащих одновременно ДНК и РНК, вирион содержит только одну из нуклеиновых кислот – либо ДНК, либо РНК. По двум типам генетического вещества вирусы подразделяются на РНК- и ДНК-содержащие: 6 семейств относятся к РНК содержащим 11 семейств – к ДНК-содержащим [1, 2]. Поскольку вирусы могут переносить генетический материал между различными видами хозяев, они широко используются в генной инженерии. Вирусы также осуществляют естественную «генную инженерию»: вирус может включать в себя некоторый генетический материал от своего хозяина во время репликации и передавать эту генетическую информацию новому хозяину. Это известно как трансдукция, и в некоторых случаях она может служить средством эволюционных изменений – хотя неясно, насколько важен эволюционный механизм трансдукции на самом деле [32].

Вирусы являются так называемыми наночастицами из-за размеров – десятки нанометров [34]. Помимо базовой архитектуры, вирусы могут иметь поверхностные рецепторы, ферменты и молекулярные двигатели (рис. 1) [42].

Для материаловеда или нанотехнолога вирусы являются совершенно определенными органическими наночастицами, которые обычно используются в качестве каркасов или нановекторов. Следуя определению наносистемы в них можно осуществлять заданное и контролируемое манипулирование их субструктурами, менять их точное размещение, производить моделирование наноразмерного вещества с целью создания материалов, устройств и систем с принципиально новыми свойствами и функциями [24].

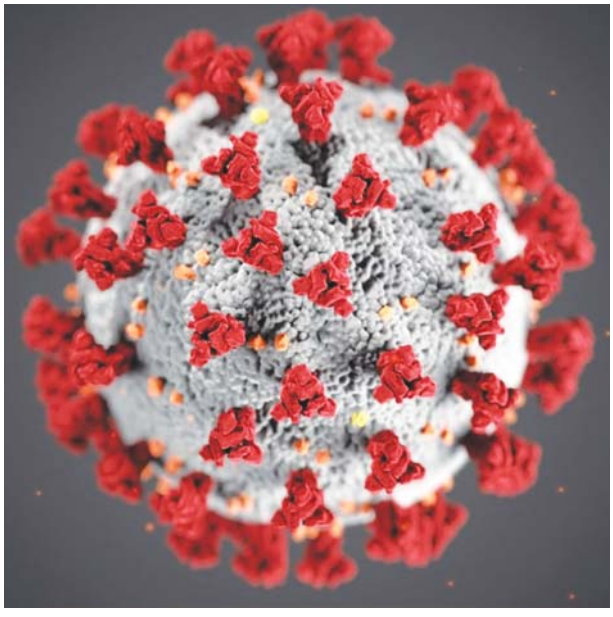


РИС.1.
Корона вирус

Как правило, биологические объекты работают как механические машины, но в основном они, в силу их размера, функционируют по другим принципам, в соответствии с правилом, что то, что уместно в микромасштабе, не обязательно уместно на наноуровне.

Одной из наиболее важных частей нанонауки и нанотехнологий являются нанобиология и нанобиотехнология, которые в принципе имеют одни и те же корни. Основной целью нанобиотехнологии является организация процесса поглощения клетками наноразмерных молекул, функционирующих внутри клетки. Если размер молекул превышает 10 нм, клетка принимает их способом эндоцитоза с помощью клатрина, называемым пиноцитозом, в то время как частицы размером более 200 нм в диаметре обычно фагоцитируются макрофагами. Фагоцитоз происходит в специализированных клетках, называемых фагоцитами, которые включают в себя макрофаги, нейтрофилы и другие лейкоциты.

В отличие от клеточных молекул (наноансамблей) размер вирусов варьирует от 20 до 300 нанометров. Практически все вирусы по размерам меньше, чем бактерии. Однако самые крупные вирусы, например вирус коровьей оспы, имеют такие же размеры, как и самые маленькие бактерии (хламидия и риккетсия), которые тоже являются облигатными паразитами и размножаются только в живых клетках. Поэтому отличительными чертами вирусов по сравнению с другими микроскопическими возбудителями инфекций служат не размеры или обязательный паразитизм, а особенности строения и уникальные механизмы репликации (саморазмножения). Вирусы – это шедевры наноинженерии с базовой общей архитектурой, состоящей из капсида – белковой оболочки, состоящей из повторяющихся белковых субъединиц, которые окружают вирусный геном.

Известно, что наноразмерные биологические агенты и патогены, такие как вирусы, ответственны за самые разные заболевания, такие как грипп, СПИД, герпес и т.д., в случае которых они ведут себя как биореагенты [12, 20].

На сегодняшний день есть экспериментально подтвержденные данные о том, что вирусные наночастицы могут доставлять лекарства непосредственно к раковым клеткам, чтобы их уничтожить. Ученые создали вирусные наночастицы из вирусов растений, вирусов насекомых и вирусов животных. Наночастицы могут обеспечить тип доставки лекарств, который является чрезвычайно специфичным для опухоли, и обладают сильно уменьшенными побочными эффектами [9, 33].

Среди природных объектов нанометрового размера можно выделить частицы растительного виру-

са, которые имеют вид симметрично расположенных объектов, сформированных путем самосборки белка. В частности, по вирусологии растений имеется много литературы, описывающей использование вирусных клеток растений для производства безопасных носителей вакцин и наночастиц для доставки лекарств. В этом контексте интересны данные, которые подтверждают, что атомные структуры вирусоподобных частиц (ВЧ) дикого типа, а также ВЧ химер были получены путем гомологического моделирования, и продемонстрировали, что капсиды вирусов растений могут также функционировать в качестве носителей для доставки лекарств, способных содержать химиотерапевтический препарат доксорубицин [8]. Насколько нам известно, данная работа первое систематическое прогностическое и эмпирическое исследование, посвященное вопросу о том, как этот икосаэдрический вирус можно использовать для производства как ВЧ, так и вирусных наночастиц для биомедицинских применений [31].

Вирусы и другие биологические виды могут быть охарактеризованы в соответствии с их размером, формой и оптическими / спектроскопическими свойствами. Эти свойства позволяют отличать их от других биологических видов и от других частиц, таких как частицы пыли. В ответ на новые задачи, стоящие перед медициной, разработка быстрого и эффективного диагностического теста в XXI веке считается первоочередной задачей. В этом направлении решающее слово принадлежит развитию нанобиотехнологии, которая является областью междисциплинарных исследований, включающей химию, инженерию, биологию и медицину, с большим потенциалом для использования в методах обнаружения, диагностики и лечения, например, для разработки биосенсора для быстрой диагностики вируса денге (ВД) посредством серологического анализа с помощью УФ – видимой спектроскопии [7].

Лихорадка денге является самым важным арбовирусным заболеванием в мире, и за последние двадцать лет значительно возросла его эпидемическая активность, расширилось географическое распространение, продолжилась передача нескольких серотипов и возникла чрезвычайная ситуация по поводу геморрагической лихорадки денге в районах, где эта болезнь ранее не наблюдалась. Взаимодействие с оболочечным белком серотипа было подтверждено с помощью УФ-видимой спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и атомно-силовой микроскопии.

Для исследования механизмов действия вирусов и патогенных микроорганизмов очень важно изучение их различных свойств, в том числе колебательных спектров. Нам представляется, что так же, как в случае бактерий колебания в вирусах (и ВПЧ) контролируют фундаментальные процессы, включая экспрессию генов, развитие клеточного цикла, деление клеток, сегрегацию ДНК и клеточную полярность. Есть также некоторые данные о генерации и принципах проектирования временных и пространственных колебательных систем в нанобиообъектах [29, 38].

ОСНОВНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Одним из эффективных методов исследования размера и формы частиц нанометрового размера (вирусные частицы можно рассматривать как наночастицы) является измерение величины оптического градиента. При движении жидкости внутри проточной кюветы перенос наночастиц возбуждается сильно сфокусированным лазерным сигналом. Обратно рассеянный свет детектируется фотодиодом, который встроен в петлю обратной связи с модулятором, который предотвращает захват скоплений вирусов или других крупных частиц и, таким образом, блокирует детектор. Свет, рассеянный в прямом направлении, используется для отслеживания положения частиц относительно фокуса (рис. 2) [22].

Современные методы оптического обнаружения, которые хорошо разработаны для частиц размером один микрометр, не могут быть применены к наночастицам из-за сильной зависимости сигнала от размера частиц. Обычно такие датчики состоят из источника света, который освещает объем образца аэрозоля или потока жидкости, содержащего представляющие интерес частицы и внеосевого детектора, который измеряет мощность рассеянного света. Параметры рассеянного света являются функцией свойств частиц, таких как размер, концентрация и оптическая плотность. При режиме размера в десятки нанометров частицы действуют как диполи, поэтому мощность рассеянного света пропорциональна шестой степени размера частиц. Снижение пределов размера обнаружения для существующих детекторов накладывает особые требования к оптимизации шума. Поэтому сигнал, который имеет более слабую зависимость от

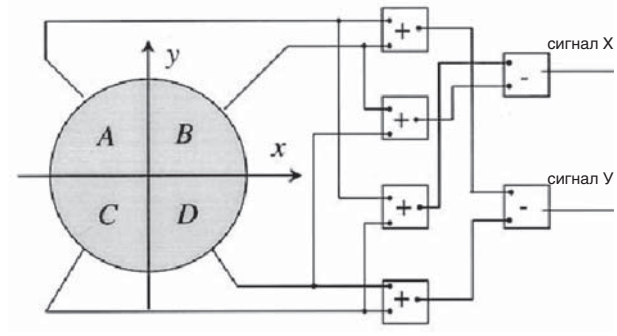


РИС. 2.

Вычисление дифференциальных сигналов Á x и Á y с учетом сигналов от квадрантного детектора. Дифференциальный сигнал Á x представляет движение частицы по каналу потока (направление x). Дифференциальный сигнал y представляет движение частицы поперек канала потока (направление y)

размера частиц, может позволить доступ к более мелким частицам [23].

Быстрое и точное обнаружение и определение характеристик наночастиц имеет большое значение в нескольких областях, таких как вирусология, мониторинг окружающей среды и т.д. Например, в области вирусологии очень важно точно определить количество вирусных частиц для изучения эффектов лекарственной терапии у пациентов. Вирусологам доступно несколько методов количественного определения вируса, таких как метод количественной полимеразной цепной реакции, метод титра бляшек и метод улучшенной микроскопии изображений [10, 20]. Однако проблема, характерная для большинства из этих методов, состоит в том, что анализ выборки включает в себя многочасовую работу, усложняющую проведение измерений.

Для идентификации структур наночастиц очень интересен метод вибрационной спектроскопии, который обеспечивает наиболее точную идентификацию видов поверхности, образующихся при молекулярной адсорбции. В принципе, любой метод, который можно использовать для получения вибрационных данных из образцов твердой или газовой фазы (инфракрасная спектрометрия – ИК, комбинационное рассеяние – КР и т.д.) интересен, однако только ИК, Электронная энергетическая спектроскопия потерь – ЭЭСП, Рамановская спектроскопия – РС и Полная частотная генерация – ПЧГ могут дать корректные результаты по исследованию поверхностей и колебания молекул на границах раздела [4, 21]. К примеру, рамановская спектроскопия используется для изучения акустических колебаний с низким волновым числом (≤20 см – 1) для бактериофага M13 (рис. 3) [18], где четко выраженная рамановская линия наблюдается примерно на уровне 8,5 см$^{-1}$. Полученные экспериментальные результаты сравниваются с теоретическими расчетами, основанными на модели упругого континуума и соответствующих правилах выбора комбинационного рассеяния, полученных из модели поляризованной связи. Показано, что наблюдаемая рамановская мода относится к одной из активных рамановских аксиальных мод оболочки белка фага M13. Ожидается, что обнаружение и характеризация этого низкочастотного колебательного режима могут быть использованы для приложений в биомедицинской нанотехнологии, таких как мониторинг процесса функционализации вируса и его самосборки.

Недавно была предложена технология, которая радикально отличается от традиционных подходов. Этот новый метод использует биологические объекты, такие как вирусы, в качестве нано-шаблонов для

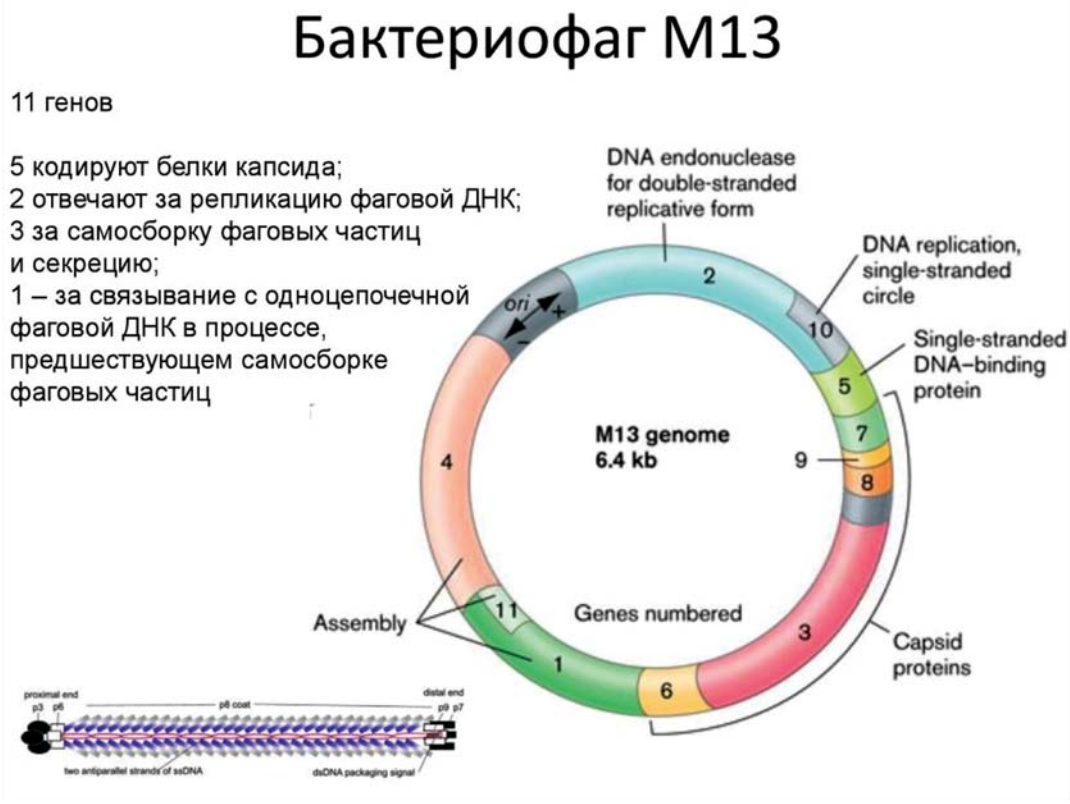


РИС. 3.
Бактериофаг M13 и его основные свойства.

изготовления элементов наноструктуры. Например, вирусы в форме палочек, такие как фаг M13 и вирус табачной мозаики, были успешно использованы в качестве биологических матриц для синтеза полупроводниковых и металлических нанопроводов. Акустические колебания низковолнового числа (<или = 20 $см^{-1}$) фага M13 были изучены с помощью спектроскопии КР [43].

Показано, что наблюдаемая рамановская мода относится к одной из комбинационно-активных осевых торсионных мод оболочки белка фага M13.

Было выявлено, что импульсно стимулированное рамановское рассеяние (ИСРР) является важным способом создания колебательных мод большой амплитуды в молекулах как в жидком растворе, так и в твердотельных системах. Сообщалось также об использовании видимой фемтосекундной лазерной системы для возбуждения когерентной акустической комбинационно-активной колебательной моды (которая связана с вибрациями вирусных капсидов) в фагах M13 до такого высокоэнергетического состояния, которое приводит к их инактивации, Эта работа демонстрирует новый метод манипулирования, контроля и инактивации нежелательных патогенов [45]. Это говорит о том, что основные принципы импульсного когерентного возбуждения с использованием лазерной оптической системы могут представлять собой общий способ избирательного изменения функции или даже инактивации вирусов и, возможно, других микроорганизмов через свойство их механических акустических возбуждений. Кроме того, поскольку структурные изменения, вызванные мутацией биообъектов, приводят к минимальному изменению частоты колебаний их капсидов, повреждения, вызванные вирусами и / или другими микроорганизмами вследствие вибрации их механических структур, вероятно, не будут защищены от простой мутации клетки. поверхностные рецепторы, и та же процедура обработки остается в силе; наш подход, таким образом, не вызовет проблем лекарственной устойчивости.

ИСРР была успешно продемонстрирована для создания когерентных колебаний большой амплитуды в молекулах в жидкостях, а также в твердотельных системах. Было предсказано, что ИСРР должно происходить без порога интенсивности лазерного излучения, даже когда через многие типы сред пропускается только один ультракороткий лазерный импульс. В этом случае – это ИСРР процесс рассеяния, который стимулируется, потому что стоксова частота находится в пределах спектральной ширины импульса возбуждения. Кроме того, было продемонстрировано, что ИСРР – это процесс, посредством которого возбуждение когерентной решетки или молекулярных колебаний будет происходить всякий раз, когда достаточно короткий лазерный импульс проходит через рамановски активную твердую среду или молекулярную жидкость и газ. Для одиночного возбуждения, если демпинг игнорируется, амплитуда (R_0) смещения от равновесного межмолекулярного расстояния, вызванного рамановским рассеянием, может быть показана как:

$$R_0 = 4\pi\, I\, (\delta\alpha / \delta R)_0\, e - \omega_0 2\tau L2 / 4 / m\omega_0 nc. \quad (1),$$

где I – интенсивность возбуждения лазера; α – поляризуемость среды; R – смещение от равновесного межмолекулярного расстояния; $\delta\alpha / \delta R$ пропорционально сечению комбинационного рассеяния; ω_0 – угловая частота когерентного колебательного возбуждения; τL – полувысота ширины импульса возбуждающего лазера; m – молекулярная масса; n – показатель преломления; и c – скорость света. Из уравнения (1) ясно, что большие поперечные сечения комбинационного рассеяния и более высокие плотности мощности лазера, а также более низкие частоты колебаний будут способствовать увеличению амплитуды возбужденных колебаний. Фактически с помощью ИСРР для умеренного поперечного сечения комбинационного рассеяния, достаточно низкой частоты колебаний и нормальных значений плотности мощности возбуждения, амплитуда колебательного смещения в диапазоне от 0,01 до 1 ангстрема может быть достигнута.

Интересный факт, вытекающий из уравнения (1), состоит в том, что для однолучевого возбуждения первичный пучок, также как и стоксов пучок, энергии фотонов которого обозначены через ω_L и ω_s, соответственно, определяют когерентные колебания с энергией ω_0, где $\omega_0 = \omega_L - \omega_s$. В результате полная ширина на половине максимума спектральной ширины лазера возбуждения должна превышать энергию возбужденных когерентных колебаний, что из-за гауссова распределения лазерного возбуждения как во времени и пространстве, так и с использованием принципа неопределенности, приводит к коэффициенту $e - \omega_0 2\tau L2 / 4$ в уравнении (1). Эта экспоненциальная зависимость указывает на то, что произведение угловой частоты возбужденного когерентного колебания (ω_0) на ширину импульса возбуждения (τ_L) должно быть небольшим, чтобы амплитуда R_0 возбужденного когерентного колебания могла быть значительной. Это объясняет, почему лазерное возбуждение должно быть сверхкоротким по ширине импульса для экспериментов по ИСРР. Это также объясняет, почему более длинный лазерный импульс возбуждения, даже при той же лазерной интенсивности примерно $6{,}4 \times 10^{-6}$ Дж / $см^2$, приводит к меньшей инактивации.

Вирусы и их геномы в основном заключены в капсиды и защищены ими – симметричными оболочками или оболочками, состоящими в основном из нескольких копий белковых субъединиц (рис. 4) [35]. Помимо использования в качестве защитного слоя, капсиды вовлечены в различные другие процессы жизненных

циклов вируса, включая своевременную инкапсуляцию вирусного генома (самосборка и упаковка генома), перенос вируса от клетки к клетке, проникновение в клетку-хозяина (например, через связывание с клеточными рецепторами), высвобождение генома в клетку-хозяина и т. д. Несмотря на их критическое значение для жизненного цикла, различные эволюционные давления, действующие на сферические капсиды, недостаточно известны. За полвека эмпирических данных был обнаружен большой массив размеров капсидов, составляющих от десятков до многих тысяч в составе субъединиц. Сферические капсиды всех наблюдаемых размеров могут быть получены из группы из двенадцати пентамеров (симметричных кластеров из пяти субъединиц), разделенных переменным числом гексамеров (кластеров из шести субъединиц). Это относится и к вирусам папилломы T ~ 7d, где все капсомеры состоят из пяти субъединиц, но они имеют как шестивалентную, так и пятивалентную конфигурацию, и к более крупным вирусам, чьи «гексамеры» фактически являются тримерами «слитых» или ковалентно связанные димеров.

Размер капсида может быть охарактеризован двумя целыми числами, h и k, которые описывают количество гексамеров (hzk{1), которое нужно было бы «пройти», чтобы перейти от одного пентамера к соседнему пентамеру в завершенном капсиде. Однако полезность системы классов не полностью потеряна. Специфические угловые структуры внутри капсида обеспечивают существование различных форм гексамеров (каждая форма окрашена по-разному). Очевидно, что образование капсида зарождалось, часто начиная с капсомера одного вида (например, пентамера) являющегося обычно симметричным кластером из пяти или шести субъединиц. В капсидах T ~ 1, где субъединицы находятся в идентичных / эквивалентных средах, зародышевая сборка возможна без дополнительного внешнего воздействия. Однако формирование двух или более капсомеров из одного места взаимодействия потребует использования так называемых квазиэквивалентных переключателей, капсидов, содержащих два разных капсомера – пентамер и гексамер одного типа. Добавление второй гексамерной формы требует для их правильной сборки второй механизм, такой как вспомогательные белки. Дополнительные механизмы для стабилизации этих новых форм в точных и правильных положениях внутри формирующего капсида, вероятно, также будут необходимы.

Поскольку капсиды из разных классов отображают разные геометрии, они обязаны иметь разные физические свойства. Периодическая природа содержа-

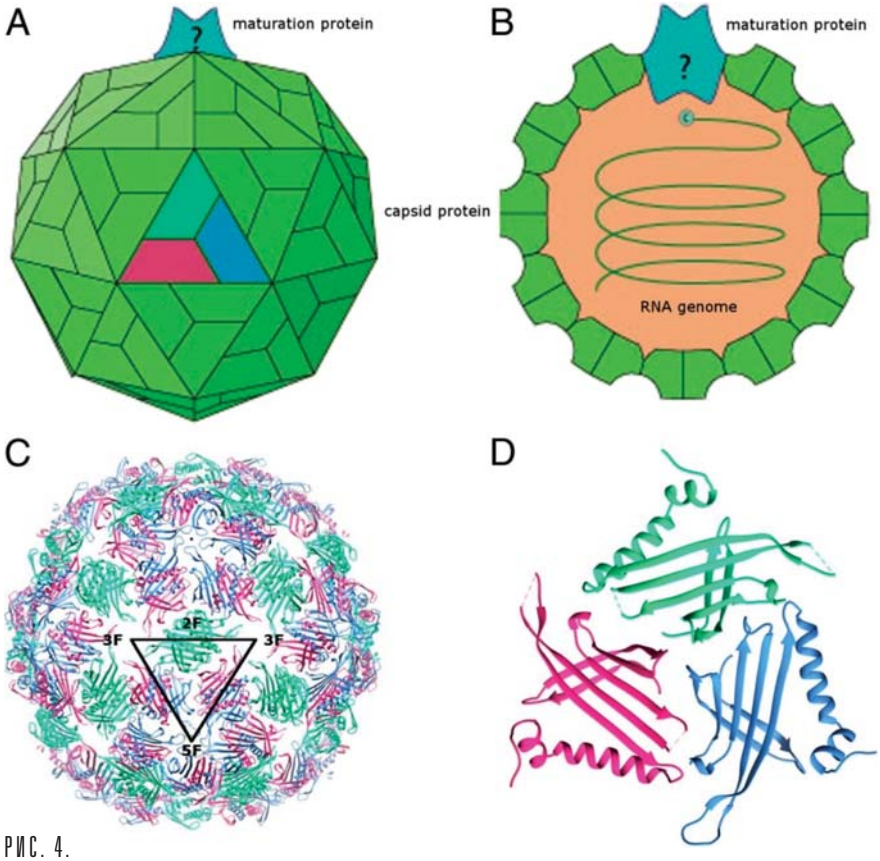


РИС. 4.
Капсиды вирусов и их формы

ния гексамера капсида также полезна для понимания «Т-переключения»: процесса, который позволяет каноническим субъединицам капсида легче отбирать капсиды, содержащие сходные формы гексамера. Это позволяет понять, какие трудноразрешимые проблемы связаны с лечением смертоносных палеоморфных вирусов таких как эбола и аренавирусы. Например, из приведенного выше правила Т-переключения разнообразие аренавируса может быть объяснено только в том случае, если мы предположим, что его биологически релевантной формой является капсид Т ~ 12.

Из исследованных структурированных образований вирусов наиболее изученными являются икосаэдрические субструктуры капсомеров. Они также помогают объяснить поведение капсидов иных морфологий таких как неикосаэдрические вытянутые капсиды phi29, нитевидные капсиды в эболы и др. В свете этого, геометрические ограничения, аналогичные эндо-углам, которые влияют на форму капсомера, могут быть полезны для получения понимания морфологии, поведения и классификации неикосаэдрического капсида, а также возможности их включения в расширенную периодическую таблицу капсидов. Необходимо подчеркнуть, что методика уничтожения вируса иммунодефицита человека (ВИЧ) и других вирусов с оболочкой основана на их высоко симметричной структуре.

Разработка методов, позволяющих проводить микро и нано масштабные исследования сложных биоматериалов на основе их молекулярного состава, представляет большой интерес для широкого круга областей исследований. Некоторые эксперименты показывают, что микроскопия с помощью РС является отличным аналитическим инструментом для изучения распределений различных биомолекул в многофазных системах [37]. Она сочетает молекулярную специфичность колебательной спектроскопии без меток с повышенной чувствительностью благодаря когерентному возбуждению молекулярных колебаний. Рамановская спектроскопия также позволяет получить индивидуальный отпечаток исследуемого вещества. В настоящее время это наиболее точный метод измерения, поскольку каждый такой отпечаток уникален.

Использование спектроскопии комбинационного рассеяния для биомедицинских приложений требует преодоления препятствия широкого фона, который также создается биологическими образцами. Этот фон, который часто в значительной степени объясняется флуоресценцией, часто на несколько порядков больше, чем рамановский сигнал, и его необходимо удалить, чтобы использовать спектры комбинационного рассеяния при анализе образцов. Для удаления флуоресцентного сигнала было предложено несколько методов, как инструментальных, так и вычислительных. Из вычислительных методов полиномиальная подгонка становится все более популярной, однако удаления полиномиального фона может оставить остаточные спектры с неоднородными артефактами, которые затрудняют результаты классификации. Однако, если для этого мешающего сигнала можно получить эталонный спектр, он может быть объединен в полиномиальную аппроксимацию и удален отдельно. Недавно был предложен способ удаления широкого и / или умеренно отраженного фонового сигнала. Помимо моделирования, метод был применен к спектрам биопленок Streptococcus mutans [13].

Быстрое, избирательное и чувствительное обнаружение вирусов имеет решающее значение для эффективного реагирования на вирусную инфекцию, например, с помощью лекарств или карантина. Способность быстро, напрямую и выборочно обнаруживать отдельные вирусные частицы может оказать существенное влияние на здравоохранение, поскольку она может позволить диагностировать на самых ранних этапах репликации в системе хозяина. Одним из подходящих решений этой проблемы является использование нелинейной двухцветной суммарно-частотной спектроскопии (2C-SFG), которая позволяет проводить работу в различных средах: (а) липидные монослои и бислои; (б) слои Ленгмюра и на границе раздела жидкость-жидкость; (в) отдельно и во взаимодействии с молекулами, включая пептиды и белки; (г) системы подверженные контролируемому стрессу (химический, pH, электрохимический).

Многообещающим инструментом исследования вирусов и других нано биообъектов является метод ПЧГ. Этот нелинейный процесс второго порядка по своей природе специфичен для границы раздела и не включает никакого вклада молекул в центросимметричном объеме, то есть в растворе или в газовой фазе. Он широко применяется для твердых поверхностей в вакууме, контролируемой атмосфере и электрохимических условиях. В течение нескольких лет технологическое развитие пикосекундных и фемтосекундных перестраиваемых лазерных источников привело как к увеличению числа экспериментальных установок ПЧГ по всему миру, так и к его применению для хрупких или скрытых интерфейсов. В дополнение к уникальным возможностям ПЧГ проводятся исследования по развитию этого метода, основанные на использовании лазера CLIO на свободных электронах. Это позволяет весьма эффективно измерять специфические колебания, расположенные в ближнем и дальнем инфракрасном диапазоне, таже как и во всем видимом и ультрафиолетовом спектре.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ КОЛЕБАНИЙ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОРАЗМЕРНЫХ БИОСТРУКТУР

Возбуждение колебательных состояний в монодисперсных биологических системах, состоящих из на-

норазмерных частиц, например вирусов, может оказывать существенное влияние на эти системы вплоть до их механического разрушения [48]. Наиболее эффективное возбуждение колебаний в таких системах может быть реализовано при резонансном воздействии на систему, а именно при совпадении собственной частоты системы с частотой внешнего воздействия. Использование электромагнитного излучения в видимом или ближнем инфракрасном диапазоне для эффективного возбуждения колебательных мод биологических объектов позволяет увеличить проникновение излучения в образец. Бигармоническое излучение наносекундной длительности, а также импульсное вынужденное комбинационное рассеяние при фемтосекундном возбуждении [41, 49] может реализовывать когерентное возбуждение низкочастотных комбинационно-активных мод различных наночастиц. Основным условием эффективного использования бигармонической накачки для эффективного возбуждения колебаний наночастиц является равенство разностной частоты и собственной частоты. Для точного расчета значения собственной частоты можно использовать модель капли жидкости или модель упругой сферы [16, 39]. Оба подхода требуют определенных знаний об упругих характеристиках наночастиц и окружающей среды. Для экспериментальных измерений собственных частот можно использовать низкочастотное комбинационное рассеяние [15, 36].

На сегодняшний день существует сравнительно небольшое количество работ, в которых низкочастотное комбинационное рассеяние вирусов в жидкой среде было получено экспериментально. Вирусы подвержены тому же виду механического возбуждения. Экспериментальная группа из Университета штата Аризона недавно показала, что импульсы лазерного света могут вызывать деструктивные колебания в оболочках вируса [11, 45]. Сложно подсчитать, какой толчок убьет вирус, поскольку в его оболочке могут быть миллионы атомов. Прямое вычисление движений каждого атома заняло бы несколько сотен тысяч гигабайт компьютерной памяти. В то же время изучение физических характеристик биоструктуры, рассеивающих и поглощающих свойств, оценка электромагнитного (ЭМ) спектра и диапазонов длин резонансных волн имеет важное значение для характеристики наномикромасштабных частиц и определения их биоструктур, а также точных спектральных характеристик, которые необходимы для систем обнаружения и идентификации биоагентов.

Поведение патогенных организмов наномикроразмера избирательно чувствительно к возбуждению электромагнитного (ЭМ) поля. Оценка частот вибрации микроорганизмов является предметом исследований, посвященных выявлению низкочастотных колебательных мод комбинационного рассеяния вирусных капсидов [40] и механизмов инактивации для возбуждения колебательных движений вирионов, приводящих к механическим резонансам или разрыву водородных связей, соответственно [47]. Кроме того, она является объектом спектроскопии или имитационных исследований молекулярной динамики (МД), дающих возможность определить волновые числа, соответствующие конкретным колебательным связям функциональных групп и структур.

Разработка физических моделей биочастиц, а также компьютерное моделирование (ЕМ) распределения ближнего и дальнего поля в областях частиц и окружающей среде (воздух, вода, другие жидкости) должны стать одним из способов исследования физических свойств биологических частиц различной морфологии и происхождения.

Метод оценки спектрального отклика на электромагнитное поле и взаимодействие частиц основан на решении электродинамики двумерных (2D) или трехмерных (3D) граничных задач [4, 6].

Аналитические выражения электромагнитных полей получены из строгих решений уравнений Максвелла и Гельмгольца и определены через безразмерные параметры диаметр (d) по длине волны возбуждения (λ). Это позволяет применять классический известный подход к характеристике субмикрочастиц. ЭМ-спектр, ближнее и дальнее ЭМ поля изучаются для вирусов, имеющих палочковидные, вытянутые непокрытые вирионы (например, вирус табачной мозаики – (TMV), бактериофаг (M13). Электродинамические (2D) решения применимы для частиц TMV, длина которых примерно в 16 раз больше диаметра. Уравнение Гельмгольца в цилиндрических координатах преобразуется в три дифференциальных уравнения с помощью метода разделения переменных [30]. Уравнение относительно радиальной функции R (ξ) имеет следующий вид:

$$\xi^2 R^{//}(\xi) + \xi R^{/}(\xi) + \left(\xi^2 - m^2\right) R(\xi) = \frac{k^2}{k_q^2}\mu_q \xi^2 f\left(\xi / k_q\right) R(\xi), \quad (2)$$

где, $\xi = k_q r$, $m = \pm 1, 2, \ldots$, обозначает производную по аргументу $f(\xi/k_q)$ и является функцией неоднородности, если диэлектрическая проницаемость является функцией радиального направления (r) и записывается как $\varepsilon_q^{(r)} = \varepsilon_q - f(r)$. Волновые векторы определяются по формулам ($k_q = k\sqrt{\varepsilon_q \mu_q}$) в среде ($q$), а в вакууме $k = w\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$; $\varepsilon_0 = 8{,}85 \times 10^{-12}$ F/m, представляет собой угловую частоту плоской волны возбуждения с электрическим вектором E, параллельным оси (z) цилиндра. Как правило, диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_q(w)$ и магнитная проницаемость $\mu_0 = 1{,}26 \times 10^{-6}$ H/m $\mu_q(w)$ представляют собой сложные значения. Подстрочный индекс (q) указывает параметры и функции, соответствующие ядру (q=1), оболочке (q=2) и окруженной среде (q=3). Уравнение (2) может быть решено путем применения аналитических или численных методов, относящихся к f(r). Поля в разных областях записываются в виде

сумм мультипольных волн [46] с использованием решений уравнения (2). Согласно методологии решения краевых задач электродинамики, на пограничных поверхностях двух сред компоненты электрического (E) и магнитного (H) полей удовлетворяют необходимым условиям непрерывности касательных компонент E_z и H_ϕ. Кроме того, при определении выражений электромагнитного поля учитываются условия излучения вне области частицы ($kr>>1$), конечность поля внутри частицы, а также условие для компонента E_z $(E_z \cdot grad\{\varepsilon_q - f(r)\}) = 0$ [3]. В случае, когда среда однородна, функция f(r)=0, и уравнение (2) принимает форму известного уравнения Бесселя [5]. Характеристики, описывающие способность рассеяния электромагнитных волн на частицах, известны как сечения рассеяния [20] и используются для изучения распределения электромагнитных полей в дальней (волновой) зоне и рассеивающих свойств частиц.

Характеристика биологических частиц основана на концепции, рассматривающей биообъект с физической точки зрения [25, 26]. Вирионы, внеклеточные инфекционные формы вирусов, моделируются частицами разных структур. Мы рассматриваем три структуры цилиндрической формы: гомогенную, неоднородную по радиусу цилиндра и структуру ядро-оболочка, отражающие свойства нуклеиновых кислот (ДНК или РНК) вирусов и капсидных белков. Форма, структура и набор геометрических, магнитных и электрических характеристик предложены в качестве основных параметров, определяющих спектральные свойства ЭМ частиц. Заслуживает внимания преимущество имитационного исследования сложных молекулярных систем, таких как вирионы, в отличие от измерительных экспериментов, связанных с обнаружением слабых сигналов.

Компьютерное моделирование на основе программного обеспечения MatLabR2013b было проведено для характеристики частиц TMV. Параметры частиц получены из научных публикаций, основанных на различных измерительных экспериментах [14, 17, 27].

Длина вириона TMV составляет 280–300 нм, наружный (d_2) и внутренний (d_1) диаметры капсида – 18 нм и 4 нм, соответственно. В данной работе две модели – однородная цилиндрическая (диаметром d_2) и однородная структура ядро-оболочка (диаметры – внешний d_2 и внутренний d_1) – используются для имитационного исследования вириона TMV.

Компьютерное моделирование показывает, что ожидаемый резонансный спектральный отклик наблюдается в характеристиках дальнего поля ($r>>2d_2^2/\lambda$) (рис. 5, 6), причем резонансные частоты колебаний всей частицы TMV могут быть связаны с максимумами сечения рассеяния. Значения и положения максимумов сильно зависят от диэлектрических (рис. 5) и магнитных (рис. 6) параметров, расстояние между соседними максимумами увеличивается с увеличением диапазона длин волн. Часть белковой оболочки частицы TMV в 19 раз больше, чем часть ядра, содержащего РНК, поэтому электромагнитные свойства оболочки значительно влияют на формирование

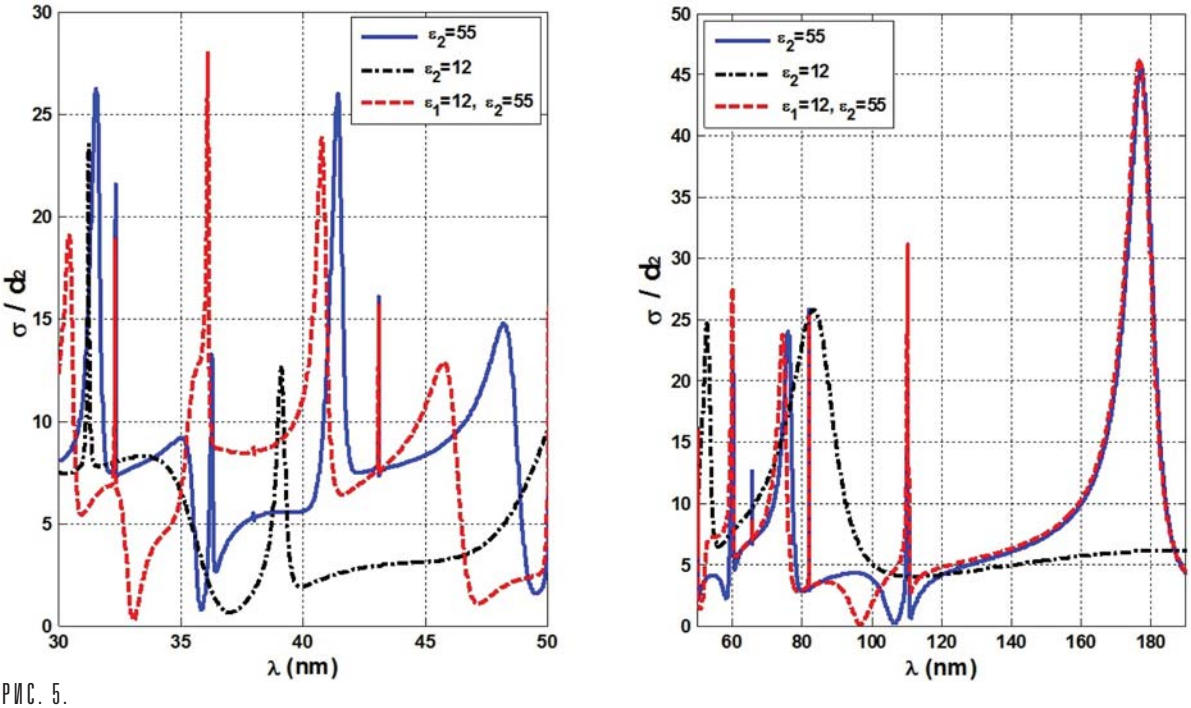


РИС. 5.

Сечение прямого рассеяния (σ/d_2) в зависимости от длины волны возбуждения (λ). Цилиндрическая модель: диаметр = 18 нм, диэлектрическая проницаемость ε_2=55 (сплошная линия), 12 нм (точки); Модель ядро-оболочка (штрих): диаметры d_2 = 18 нм (внешний) и d_1=4 нм (внутренний), диэлектрическая проницаемость: (ε_1=12 ядро), (ε_2=55 оболочка); (ε_3= 1 окружающая среда)

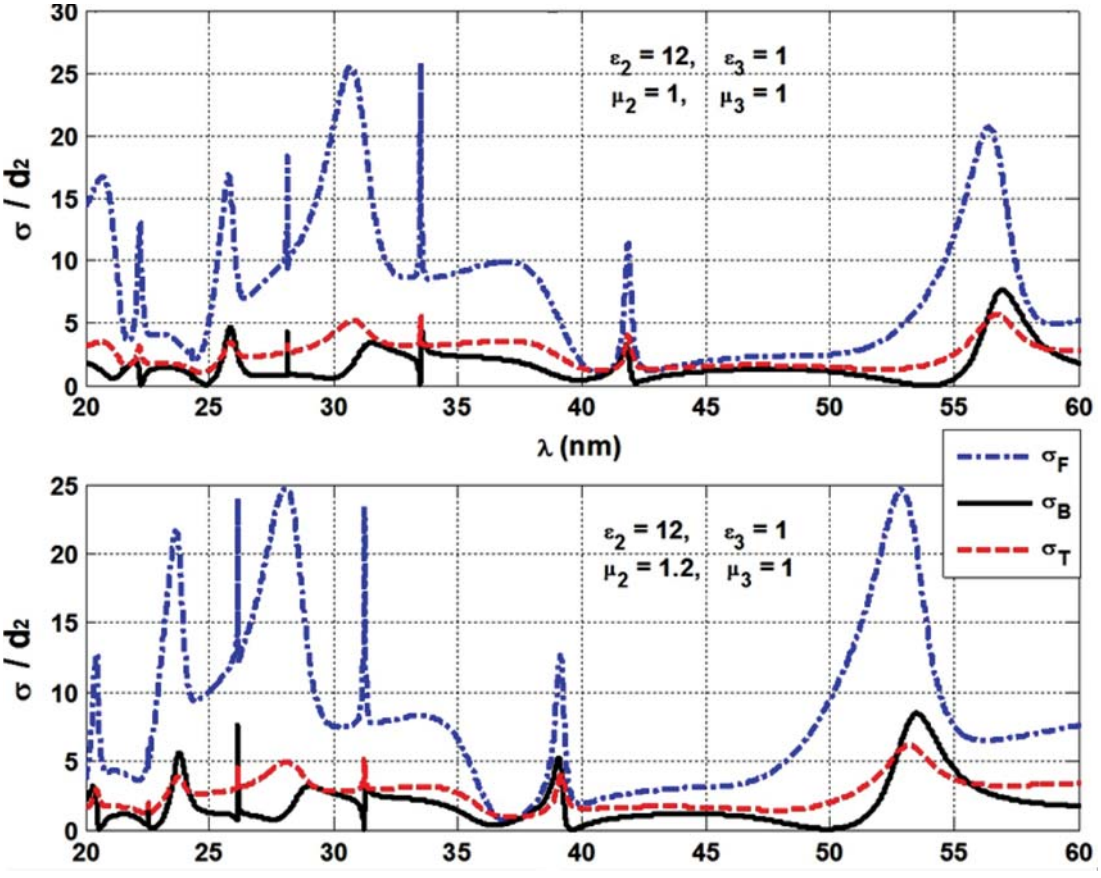


РИС. 6.

Сечения рассеяния (σ/d_2) в зависимости от длины волны возбуждения (λ): вперед (σ_F точки); назад (σ_B сплошная); всего (σ_T тире). Цилиндрическая модель вириона TMV: диаметр d_2 = 18 нм, диэлектрическая проницаемость частицы ε_2=12 и окружающей среды ε_3=1, магнитная проницаемость частицы μ_2=1.2 (a), 1 (b) и окружающей среды μ_3=1

спектров, резонансных значений у верхней границы резонанса и диапазона длин волн (рис. 5). Распределение ближнего поля, представленное в виде изолиний амплитуд электромагнитного поля (рис. 7), указывает на расположение максимумов энергии внутри и снаружи частицы. Исследование распределения электромагнитного поля позволяет получить представление о нанобиочастицах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен новый подход к изучению и обнаружению вирусов по их колебательному оптическому спектру. Показано, что оптическая спектроскопия имеет реальный потенциал как неинвазивная, простая в использовании, быстрая и надежная методика определения характеристик вирусов, которая в конечном итоге дает идентификацию на уровне отдельных клеток. Предложено использование новых нелинейно-оптических методов спектроскопии для индикации патогенных биологических агентов, а также оптических наноинструментов (датчиков) для разработки новых измерительных систем здравоохранения.

Разработан метод оценки характеристик электромагнитного поля и диапазонов резонансных волн, основанный на компьютерном моделировании и используемый для характеристики нанобиочастиц. Показана возможность определения резонансных (собственных) частот системы молекул типа вириона. Данный метод, который относится к области расчета и измерения спектроскопических свойств биочастиц, включает в себя определение частоты колебаний вирусов и является основой новой концепции: оценка уникальных вибрационных / колебательных свойств биообъектов и их оригинальные и специфические «отпечатки пальцев» (Характеристическая частота колебаний патогенных микроорганизмов).

Литература

1. **Букринская А.Г., Жданов В.М.** Молекулярные основы патогенности вирусов, М.: Медицина. 1991 256 с.
2. Молекулярные основы биологии вирусов. М.: Наука 1966. 408 с.
3. **Becherrawy T.** Electromagnetism: Maxwell Equati-

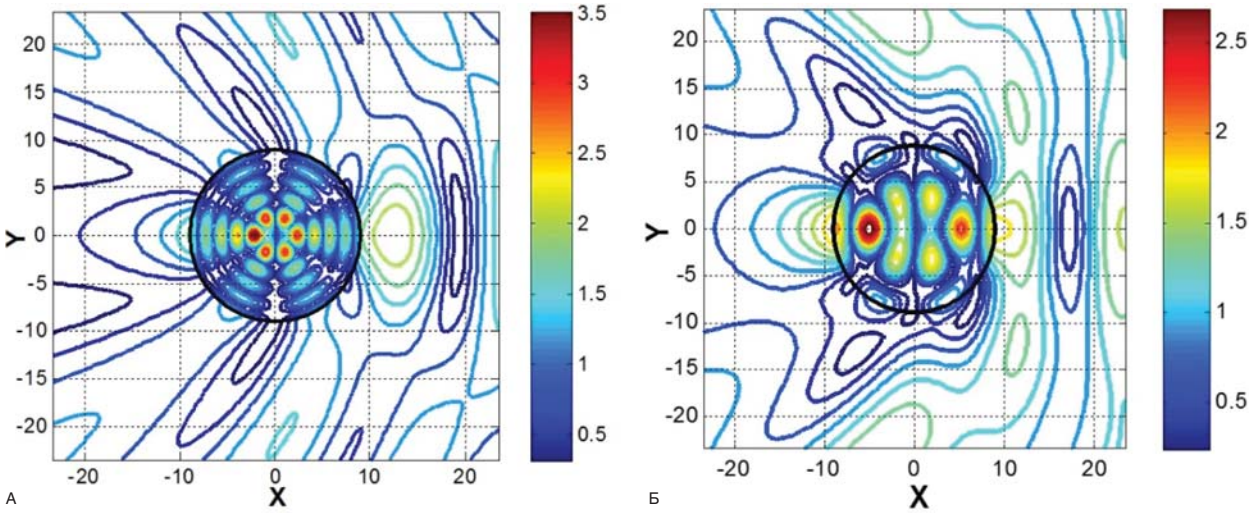


РИС. 7.

Изолинии амплитуд электромагнитного поля для цилиндрической модели вириона TMV в диапазоне (- λ, + λ). Диаметр цилиндра: d_2 = 18 нм; диэлектрическая проницаемость: цилиндрической частицы ε_2 =55 – (А), 12 нм – (Б), окружающей среды ε_2 =1, длина волны λ=23.5 nm. Плоскость xy перпендикулярна оси цилиндра

ons, Wave Propagation and Emission, July 2012 Wiley-ISTE. 560 p.

4. **Bohren C.F., Huffman D.R.** Absorption and scattering of light by small particles. John Wiley & Sons Inc. 1983, 530 p.
5. **Bowman F.** Introduction to Bessel Functions, Dover Books on Mathematics, Dover Publications October 2010. 160 p.
6. **Bzhalava T.N., Kervalishvili P.J.** Study of spectroscopic properties of nanosized particles of core-shell morphology, J. Phys., Conf. Ser. (IOP). 987. 2018. 012-023. P. 1–6.
7. **Caires A.F., Ladeira, A.J., Da Fonseca L.O.** Development Of A Biosensor For Dengue Virus Using Gold Nanorods. Virus Reviews and Research Journal of the Brazilian Society for Virology, Volume September, Supplement 1Annals of XXIV Brazilian Congress of Virology & VIII Mercosur Meeting of Virology, BV68, 2013. P. 39–40.
8. Cavaletti Guido, in Neurobiology of Disease, 2007 Elsevier, Science. 2011. 1104 p.
9. **Choi M. et all.** A cellular trojan horse for delivery of therapeutic nanoparticles into tumors. Nano Lett. 7, 2007. P. 3759–3765.
10. **Cromeans T.L., Lub X., Erdman D. D., et all.** Development of plaque assays for adenoviruses 40 and 41, J. Virol.Methods. 2008. 151. P. 140–145.
11. **Dykeman E.C.** Atomistic normal mode analysis of large biomolecular systems: theory and applications. Dissertation, Degree Doc. of Philosophy. Arizona State University 2008. 1–232 p.
12. **Engelmann D., Petzold, A. Kosinska, B. Hepkema, T. Schulz, and A. Heim.** Rapid quantitative PCR assays for the simultaneous detection of herpes simplex virus, varicella zoster virus, cytomegalovirus, epstein-barrvirus, and human herpesvirus DNA in blood and other clinical specimens, J. Med. Virol. 80, 2008. P. 467–477.
13. Emerging and Transboundary Animal Viruses edited by Yashpal Singh Malik, Raj Kumar Singh, Mahendra Pal Yadav, Springer, 2020. 377 p.
14. **Ermolina I., Morgan H., Green N., Milner J., Feldman Yu.** Dielectric spectroscopy of -Tobacco Mosaic Virus, Biochimica et Biophysica Acta, 1622. 2003. P. 57–63.
15. **Fonoberov V.A., Balandin A.A.** Low -frequency vibrational modes of viruses used for nanoelectronic self-assemblies. Phys. Status Sol. B, 241. 2004. P. R67–R69.
16. **Ford L.H.** Estimate of the vibrational frequencies of spherical virus particles, Phys. Rev., E, 67 2003, P. 051924.
17. **Fumagalli L., Esteban-Ferrer D., Cuervo A., Carrascosa J.L., Gomila G.** Label-free identification of single dielectric nanoparticles and viruses with ultraweak polarization forces. Nature Materials, 11, 2012. P. 808–816.
18. **Green M., Sambrook J.** Plating Bacteriophage M13, Cold Spring Harbor Protocols, 2017, DO-10.1101/pdb.prot093427.
19. **Hammes Gordon G.** Spectroscopy for the Biological Sciences, Willey, 2005. 184 p.
20. **Hubner W., McNerney G.P., Chen P., at all.** Quantitative3d video microscopy of HIV transfer across t cell virological synapses, Science 3232009. P. 1743–1747.
21. **Humbert C., Tadjeddine A., Busson B.** Sum-Frequency generation vibrational spectroscopy of an extramolecular chemical bond The Journal of Physical

Chemistry Letters, 2, 2011. P. 2770–2773.

22. **Ignatovich F., Hartschuh A., Novotny L.** Detection of nanoparticles using optical gradient forces, Journal of Modern Optics. Vol. 50. 2003. P. 25–31.
23. **Ignatovich F.V., Novotny L.** Real-time and background-free detection of nanoscale particles, Phys. Rev. Lett. 96, 2006, P. 013901.
24. **Jones R.A.L.** What biology does and doesn't prove about nanotechnology, Nanotechnology Perceptions, vol 1, N 3, 2005, P. 119–146.
25. **Kervalishvili P.J., Bzhalava T.N.** Investigations of Spectroscopic Characteristics of Virus-Like Nanobioparticles. Amer. Jour. Cond. Matt. Phys. Vol. 6. N1. 2016. P. 7–16.
26. **Kervalishvili P.** Computer simulation study of bionanoparticles. 3rd International Computational Science and Engineering Conference, 21–22 October 2019. Doha, Qatar.
27. **Kervalishvili P.** A Novel Approach to Methods and Tools of Optical Spectroscopy of Viruses. SIPS 2018 – Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition, Proceedings of Intl. Symp. on Advanced Manufacturing of Advanced Materials and Structures with Sustainable Industrial Applications 4–7 November 2018, Rio Othon Palace, Rio De Janeiro, Brazil. P. 25–26.
28. **Kervalishvili P., Berberashvili T., Chakhvashvili L.** About Some Novel Nanosensors and Nano sensory Systems. Nano Studies. 2011. N4. P. 155–164.
29. **Kervalishvili P.J.** Optical Spectroscopy Study of Oscillation of Pathogenic Bionanoobjects. (keynote lecture), NANOTEK – 2017 March 11th–13th, 2017, Hamburg.
30. **Kervalishvili P.J., Bzhalava T.N.** Computer Simulation Study of Physical Properties of Nanosized Biostructures. 11th Japanese-Mediterranean Workshop on Applied Electromagnetic Engineering for Magnetic, Superconducting Multifunctional and Nanomaterials., Batumi Shota Rustaveli State University July, 16–19, 2019, Batumi, Georgia.
31. **Kervalishvili P., Gotsiridze I.** Oscillation and optical properties of viruses and other pathogenic microorganisms, Physics and Biophysics, Springer, 2016. P. 187–194.
32. **Leppard K., Nigel D., Easton A.** Introduction to Modern Virology. Blackwell Publishing Limited, 2007. 536 p.
33. **Loo C., et all.** Nanoshell-enabled photonics-based imaging and therapy of cancer. Technol. Cancer. Res. 3, 2004. P. 33–40.
34. **Maitra A.** Nanotechnology and nanobiotechnology, nanotechnology perceptions. 2010. Vol. 6. N3. P. 197–204.
35. **Morais M.C.** Breaking the symmetry of a viral capsid, PNAS October 11. 2016. Vol. 113. N41. P. 11390–11392.
36. **Painter P.C., Mosher L.E., Rhoads C.** Low-frequency modes in the Raman spectra of proteins. Biopolymers. 21, 1982. P. 1469–1472.
37. **Roeffaers M.B.J., Zhang Xu., Freudiger C.W., et all.** Label-free Imaging of biomolecules on food products using stimulated Raman microscopy", J. Biomed. Opt. 16(2). 2011. P. 021118.
38. **Rubin A., Riznichenko G.** Oscillations, Rhythms, and Chaos in Biological Systems. In: Mathematical Biophysics. Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering. Springer, Boston, MA, 2014. P. 25–33.
39. **Saviot L., Murray D.B., Mermet A., Duval E.** Comment on estimate of the vibrational frequencies of spherical virus particles, Phys. Rev. E. 2004. Vol. 69. P. 023901–02391.
40. **Tama F., Brooks C.L.** III Diversity and identity of mechanical properties of icosahedral viral capsids studied with elastic network normal mode analysis, J. Mol. Biol. 2005. Vol. 345. P. 299–314.
41. **Tcherniega N.V., Pershin S.M., Bunkin A. F. et all.** Laser excitation of gigahertz vibrations in Cauliflower mosaic viruses' suspension. Laser Physics Letters Vol. 15. N9. September 2018. P. 095603.
42. **Thiel V.** Coronaviruses: Molecular and Cellular Biology. Caister Academic Press, 2007 Science, 350 p.
43. **Tsen Kong T. Dykeman Eric C., Sankey Otto F., et all.** Probingwater, J. Biomed. Opt. 2007. Vol. 12. N2. P. 024009.
44. **Tsen K. T., Shaw-Wei D. Tsen, Chih-Lo.** Inactivation of viruses with a very low power visible femtosecond laser, J. Phys.: Condens. Matter 19, 2007. P. 322102..
45. **Tsen S.W.D., Kingsley D.H., Poweleit C., et all.** Studies of inactivation mechanism of non-enveloped icosahedral virus by a visible ultra-short pulsed laser. Virology Journall. 11:20. 2014. P. 1–9.
46. **Ufimtsev P.Ya.** Fundamentals of the Physical Theory of Diffraction, Second Edition, John Wiley & Sons, May 2014, 269 p.
47. **Witz J., Brown F.** Structural dynamics, an intrinsic property of viral capsids. Arch. Virol., Vol. 146, 2001. P. 2263–2274.
48. **Yang S.-C., Lin H-C., Liu T-M.** Efficient Structure Resonance Energy Transfer from Microwaves to Confined Acoustic Vibrations in Viruses. In Scientific Reports 5:18030, December 2015.
49. **Zemskov K., Karpova O., Kudryavtseva A. et all.** Stimulated low-frequency Raman scattering in tobacco mosaic virus suspension. Laser Physics Letters May 2016. Vol. 13. N8.

Паата Дж. Кервалишвили,
д.ф.-м.н., профессор инженерно-физического факультета Грузинского технического университета, президент Евросредиземноморской академии искусств и наук, Академии естественных наук Грузии

ул. Мераба Костава, 77, Тбилиси, Грузия,
st. Merab Kostava, 77, Tbilisi, Georgia
e-mail: kervalpt@yahoo.com

ДОРОГОЙ КРЫЛОВА

13 февраля 2019 г. исполнилось 250 лет со дня рождения великого русского баснописца Ивана Андреевича Крылова. Высшая степень народной любви к писателю проявляется в именовании – «дедушка Крылов». «Дедушка» – близкий, родной человек почтенного возраста, который может при случае дать ценный совет, а может и пожурить, но по-родственному, указав на недостатки в характере и осудив недостойное поведение. Именно так народ и воспринимает баснописца Крылова, который свое время проявил себя и как талантливый журналист, и как драматург, и как переводчик, но наивысшего совершенства достиг в жанре басни. С самого детства многим памятны его бессмертные фразы: «Ай, Моська! Знать она сильна // Что лает на Слона!», «А ларчик просто открывался…», «У сильного всегда бессильный виноват…», «Так поди же, попляши!», «Когда в товарищах согласья нет, // На лад их дело не пойдет…», «Услужливый дурак опаснее врага» «А вы, друзья, как не садитесь, // Все в музыканты не годитесь».

И как бы ни старались иные политтехнологи, сатира, пусть и через два столетия с лишним, достигнет адресата. Конечно, у Крылова есть басни, созданные по конкретному поводу. Так, басня «Волк на псарне» была написана в связи с получением известия о попытке Наполеона вступить в мирные переговоры через Лористона. Кутузов же отклонил предложения Наполеона и 6 октября 1812 г. нанес сокрушительный удар по французской армии. Но ведь повод часто и не нужен для обличения таких общечеловеческих пороков, как жадность, глупость, корыстолюбие, чванство, зазнайство, лицемерие, беспечность, лень.

Едкая сатира, злая ирония и добродушный юмор – всеми этими приемами комического, активно

Крылов Иван Андреевич (1769–1844)

пользуется басня, которая появилась в литературе в глубокой древности, со времен античности. Эзоп, Федр, Корнель, Лафонтен, Ломоносов, Дмитриев и, наконец, Крылов, чьи басни написаны живым русским языком, вполне литературным и в то же время близким к народной речи. Персонажи в баснях Крылова не просто ходячие аллегории, а национально своеобразные характеры. Баснописец выступает в своем творчестве и как психолог, и как социальный педагог, и как выдающийся мастер слова. Многие выражения из басен стали крылатыми. Еще при жизни Крылова его басни были переведены на основные европейские языки. В 1811 г. Иван Андреевич Крылов стал действительным членом Императорской академии наук. По этому поводу существует известный литературный анекдот: российский император будто бы заявил: «Не выберете Крылова – закрою Академию».

Литературный критик В.Г. Белинский, определяя роль И.А. Крылова в развитии русской литературы, предполагал: «Крылов проложит и другим русским поэтам дорогу к народности». И действительно, вклад Крылова в развитие русской литературы, в формирование русского литературного языка и в бытование жанра басни трудно переоценить.

Басня же в русской литературе и после Крылова развивалась как жанр. Своеобразная басенная эстафета была подхвачена в 1850-х гг. Козьмой Прутковым, уникальным коллективным автором. В последние десятилетия XIX в. басня как бы останавливается в своем развитии, причем тогдашние баснописцы провозглашают себя прямыми наследниками Крылова. Так, С.А. Образцов именует свои произведения «Баснями» Крылова-внука. Басни в то время пишут малоизвестные и не слишком талантливые авторы. Из баснописцев же XX в. следует отметить такие имена, как Д. Бедный («мужик вредный»), С. Михалков и С. Маршак. Эти авторы обогатили басню актуальной социальной проблематикой.

Среди баснописцев XX века несомненно ведущее место занимает Сергей Михалков – советский и российский писатель, поэт, баснописец. Природа таланта С.В. Михалкова многогранна. Заложенные в нем возможности и счастливый дар схватывать смешную сторону явлений закономерно привели его к басне, к которой ему порекомендовал обратиться А. Н. Толстой. В 1944 г. газета «Правда» опубликовала одну за другой несколько басен С.В. Михалкова. В числе первых напечатанных басен были «Слон-живописец», «Две подруги», «Дальновидная Сорока». Особый читательский успех был у басен «Заяц во хмелю» и «Лиса и Бобер». Басни Сергея Михалкова – значимая часть всего его творчества. Героями его басен становятся подхалимы, глупцы, завистники, себялюбцы, ханжи, карьеристы, изображенные в баснях в виде животных. Они высмеиваются с такой издевкой, что многие ба-

сенные строки мгновенно стали пословицами и поговорками в речи людей. В басне «Соловей и Ворона» С.В. Михалков пишет: «Вот пишешь про зверей, про птиц и насекомых, а попадаешь все в знакомых».

И действительно, басни Михалкова резко клеймили существующие людские пороки и изъяны. Так, в басне «Заяц во хмелю» обличается и такой распространенный порок, как пьянство, а также стремление к подхалимажу. Конец этой басни немного отступает от традиционной заключительной «морали», но вдумчивому читателю нетрудно догадаться, на чьей стороне автор:

И, когти подобрав, Лев
отпустил Косого.
Спасен был хвастунишка наш.
Лев пьяных не терпел, сам в
рот не брал хмельного,
Но обожал… подхалимаж.

Басня «Лиса и Бобер» также затрагивает моральные проблемы. Объектом сатиры становятся уже немолодые ловеласы, которые с легкостью избавляются от семейных уз ради молодых, но коварных прелестниц. Конец такого адюльтера грустен, но вполне предсказуем:

Вот прибежал Бобер домой:
«Бобриха, двери мне открой!»
А та в ответ: «Не отопру!
Иди к своей Лисе в нору!»
Что делать? Он к Лисе во двор!
Пришел. А там – другой Бобер!
Смысл басни сей полезен
и здоров
Не так для рыжих Лис, как
для седых Бобров!

Наступил XXI век. Есть ли в бесконечном потоке информации место для скромной басни? Есть, конечно, ибо объекты для сатиры слишком многочисленны и мир, который нас окружает, слишком далек от совершенства. Басня – жанр очень древний и в то же время вечно юный. Секрет ее молодости в том, что она все время бичует общечеловеческие пороки и неизменно откликается на современные общественные «несовершенства»: непродуманные решения властей, злоупотребления на местах, непорядочное поведение лиц, которые, напротив, должны были бы подавать пример другим гражданам.

Ярким и самобытным представителем современных баснописцев, которые черпают вдохновение в сюжетах Крылова, Козьмы Пруткова откликаясь на наиболее актуальные темы российской действительности, является Баян Баянов – Евгений Артурович Наумов, российский ученый, экономист, профессор, действительный член Российской академии естественных наук, член МГО Союза писателей России, член Московского Союза художников, поэт, баснописец. По роду своей деятельности, связанной с фундаментальной наукой, в своих баснях он затрагивает злободневные вопросы научной жизни.

Одна из его басен так и называется – «Диссертация». В мире ученых зверей, который воссоздан в этой басне, все происходит так же, как и у научных работников: есть Академия наук, создан диссертационный совет, а на защите дискутируют оппоненты:

Пришла идея Льву, мой друг,
Создать лесную
Академию наук,
Чтоб в ней все было, как и
у людей,
Совет ученый и аспирантура.

Глядишь, и Зайцу вот-вот присудят ученую степень. Абсурдность ситуации, своим происхождением обязанной известному в научных кругах анекдоту, придает тема собственно диссертационного исследования – «О снятии шкур с лесных зверей», а вовсе не социальный статус соискателя.

И завершается басня, как ей и положено по законам жанра, моралью, с которой согласятся, пожалуй, все, кто обладает ученой степенью: «В науке, чтоб успешным стать, хотите – не хотите, Сегодня важен не талант, а кто руководитель».

А вот басня Баяна Баянова «Власть и мозги» посвящена более широкой проблеме взаимоотношений науки и общества, вызывая в памяти ситуацию с чередой кадровых перестановок и недействительных выборов в авторитетнейшем научном учреждении:

Но, что произошло?
Об этом знают только боги.
У Власти и Мозгов, как
видно, разошлись дороги.

Эта басня напоминает и о книге Ж. Алферова «Власть без мозгов. Отделение науки от государства» (2012). Впрочем, басня Баяна Баянова допускает и более свободное толкование, напоминая о высказывании одного государственного деятеля: «Присутствие ученых во власти не слишком заметно, заметно их отсутствие».

Баян Баянов обращается и к менее серьезным темам («Отцовское наставление», «Справка»), но при этом неизменно следует басенной традиции. Выбор животных, которые действуют в его баснях, тоже вполне традиционный: Лев, Бык, Муха, Мышь, Кот, Заяц, Комар, Пчела, Филин.

Басни Баяна Баянова посвящены актуальным проблемам науки и образования, отношениям народа и власти, вопросам морали – словом всему тому, на что традиционно нацелена басня, не почитающая чинов и званий, но уважающая смелость, мудрость, прямоту, честность, благородство и душевную щедрость. Среди написанных им басен следует отметить басню «Комар и Пчела», которая созвучна с известной басней И.А. Крылова «Стрекоза и Муравей», а также лирическую басню «Плющ и Роза, остросюжетные басни «Казан и Очаг», «Город Кемь», изданные в

сборнике «Какие песни для Баяна». Избранные басни Баяна Баянова опубликованы также в сатирическом сборнике «Литературные записки клуба братьев Жемчужниковых», вып. 1 (М., 2020).

У Баяна Баянова появились последователи – юные дарования, которых он собрал под крылом детского литературного творческого объединения «Родничок». Среди них выделяется талантливый 12-летний школьник из Брянска Александр Демин (Баянчик), написавший около десятка интересных басен: «Рыбалка», «Футболист» «Дружба», «Петька астроном» и др. Кстати, свои первые басни И.А. Крылов написал в одиннадцатилетнем возрасте.

Таким образом, древний жанр басни жив и востребован, а художественные принципы, заложенные великим русским баснописцем И.А. Крыловым, актуальны и по сей день.

О.С. Крюкова, д.ф.н., зав. кафедрой словесных искусств факультета искусств МГУ имени М.В. Ломоносова

ГЕОРГИЮ АЛЕКСАНДРОВИЧУ ЮРГЕНСОНУ – 85 ЛЕТ

Георгий Александрович Юргенсон – доктор геолого-минералогических наук, профессор, д. чл. РАЕН, Заслуженный деятель науки РФ, Почетный разведчик недр РФ, Почетный гражданин Читинской области, Почетный член Российского минералогического общества, имеет множество наград, в том числе медаль А.Е. Ферсмана «За заслуги в геологии» (2015), Лауреат Всесоюзного и дипломант Всероссийского фестивалей искусств (1967), дважды Отличник культурного шефства над вооруженными силами СССР (1967, 1972), Лауреат Всероссийского конкурса на лучшую книгу по истории геол. исследований (2002), Заслуженный деятель науки СО РАН (2020), Высшим горным советом РФ награжден знаком «Горняцкая слава» трёх степеней (2019, 2020) и малым золотым знаком «Горняк России» (2020).

Родился 16 октября 1935г. в с. Куровицы Кингисеппского р-на Ленинградской обл. В 1959 г. окончил геологический факультет Казанского университета по специальности геология, поиски и разведка месторождений полезных ископаемых. В 1959–1961 гг. ст. коллектор, геолог, прораб-геолог в Читинском геологуправлении, с 1961 г. по 1995 г. – зав лабораторией, зав отделом в Забайкальском НИИ Мингео СССР, с 1995 г. по настоящее время – ведущий научный сотрудник, зав. лабораторией, главный научный сотрудник ИПРЭК СО РАН.

Г.А. Юргенсон – основатель Забайкальской минералого-геохимической научной школы. Разработал новые научные направления: типоморфизм жильного кварца и его использование в практике геолого-разведочных работ; криоминералогенез; геммологическая минерагения; биогеохимическое и минералогическое направление геохимии ландшафта; технологическая археоминерагения. На основе изучения типоморфизма минералов разработал универсальную модель формирования рудоносных кварцевых жил, на её основе создал и внедрил в производство на территории бывшего СССР и в Монголии Способ поисков и разведки постмагматических близповерхностных кварц-золото-серебряных месторождений. Установил присутствие в основных сульфатах меди (брошантит, антлерит) кристаллогидратную воду, молекулы которой играют роль диполей и определяют возможность их флотации при воздействии слабых токов на пульпу, что определило возможность создания технологии флотации окисленных руд Удоканского месторождения.

Составил первую рудно-формационную карту размещения камнесамоцветного сырья Забайкалья (Республика Бурятия и Забайкальский край) масштаба 1: 1 000 000 (совместно с Т.Н. Юргенсон и Л.Е. Зарембо) (1996); в 2010 году её новый вариант экспонировался на Международной выставке в Москве.

Обосновал и выделил Забайкальско-Монгольскую флюоритоносную провинцию и ряд Забайкальских провинций камнесамоцветного сырья. Изучил 883-объекта камнесамоцветного сырья, из них оценил заново 90. Внес существенный вклад в познание минералогии и разведку рудных месторождений Афганистана. При его непосредственном участии созданы технологии обогащения руд Удоканского меди, Бугдаинского и Мало-Ойногорского молибдена и ряда других. Мунгун-Ундурского олова и серебра (Монголия).

Профессор Г.А. Юргенсон автор и соавтор более 600 научных, научно-популярных и научно-ху-

дожественных произведений, изданных в России, КНР, Болгарии, Афганистане, Индии и США, в том числе 14 монографий, 5 учебных пособий. Ответственный редактор и соавтор 4-х томной «Энциклопедии Забайкалья».

Один из основателей Читинского отделения Российского минералогического общества и с 1971 г. бессменный его председатель, главный редактор журнала «Вестник Забайкальского регионального отделения Российской академии естественных наук», член редколлегии журналов «Вестник Забайкальского госуниверситета», «Успехи современного естествознания», Член Ученого совета по присуждению степени доктора геолого-минералогических наук Д.003.002.01 при ГИН СО РАН, г. Улан-Удэ.

Его именем назван новый минерал юргенсонит IMA No. 2019-059 Yurgensonite $K_2SnTiO_2(AsO_4)_2$, который открыли на Камчатке (хранится в фондах Минералогического музея им. Ферсмана РАН).

Президиум РАЕН и коллеги поздравляют Георгия Александровича с юбилеем, желают новых открытий и крепкого здоровья.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Алексеев Александр Сергеевич — д.г.-м.н., профессор кафедры палеонтологии геологического ф-та МГУ имени М.В. Ломоносова, зав. лабораторией протистологии ПИН им. А.А. Борисяка РАН, главный редактор журнала «Вестник» РАЕН, Почетный работник сферы образования Российской Федерации

Глазко Валерий Иванович — д.с.-х.н., профессор, иностранный член РАН, зав. Центром нанобиотехнологии Российского государственного аграрного университета – Московской сельскохозяйственной академии им. К.А. Тимирязева, заместитель главного редактора журнала «Вестник РАЕН»

Поротникова Милена Всеволодовна — ответственный секретарь журнала «Вестник РАЕН»

Алексеев Владимир Николаевич — д.и.н., профессор Университета управления правительства Москвы, почетный работник высшего профессионального образования

Антонов Антон Валерьевич – д.э.н., профессор, начальник планово-экономического управления РАЕН

Аренс Виктор Жанович — д.т.н., профессор, Заслуженный деятель науки и техники РСФСР, Лауреат Государственной премии ТССР, почётный вице-президент РАЕН

Батлер Росс Расти — профессор, вице-президент Университета Долины штата Юта (США), директор Института Юта-Россия (США)

Бобров Андрей Викторович — д.г.-м.н., доцент, профессор кафедры геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Бурак Петр Иосифович — д.э.н., профессор, директор Института региональных экономических исследований, вице-президент РАЕН

Волков Юрий Григорьевич — д.филос.н., профессор, зав. кафедрой социологии, политологии и права, директор Института по переподготовке и повышению квалификации Южного федерального университета, Заслуженный деятель науки РФ

Грибов Лев Александрович — д.ф.-м.н., профессор, чл.-корр. РАН, почетный вице-президент РАЕН, Заслуженный деятель науки РФ

Епифанцев Сергей Николаевич — д.соц.н., действительный государственный советник II класса, профессор Южного федерального университета

Жданов Михаил Семенович – д.ф.-м.н., профессор, г.н.с. лаборатории электромагнитных методов геофизических исследований Института геоэлектромагнитных исследований Объединенного института физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН, профессор университета Солт-Лейк-Сити (США)

Золотарев Владимир Антонович — д.ю.н., д.и.н., профессор, действительный государственный советник РФ I класса, вице-президент РАЕН

Иваницкая Лида Владимировна — к.т.н., Первый вице-президент – Главный ученый секретарь РАЕН

Казарян Сурик Бахшиевич – д.ю.н., Судья третьего ранга Квалификационного класса Республики Армения, Гос. Советник юстиции, президент Высшего арбитражного консультативного совета ЗА, президент Американского научного центра РАЕН

Магомедов Шамиль Магомедович — д.э.н., профессор, зам. директора Института региональных экономических исследований

Панин Александр Николаевич — д.вет.н., профессор, академик РАН, директор Всероссийского государственного центра качества и стандартизации лекарственных средств для животных и кормов

Письменский Геннадий Иванович — д.воен.н., д.и.н., профессор, проректор НОУ ВПО «Современная гуманитарная академия»

Савельев Виктор Николаевич — д.филос.н., профессор кафедры правового обеспечения экономической деятельности ФГБУ ВО Российского государственного университета правосудия; директор департамента науки и экспертной оценки Совета по реализации стратегии пространственного развития страны

Смирнов Анатолий Иванович — д.и.н., профессор Дипломатической академии МИД России, Чрезвычайный и полномочный посланник Российской Федерации

Таганов Алексей Викторович — д.м.н., профессор, член союза журналистов России и международного союза журналистов

Терехин Михаил Тихонович — д.ф.-м.н., профессор кафедры математического анализа Рязанского государственного университета им. С.А. Есенина

Утямышев Ильдар Рустамович — д.т.н., ученый секретарь отде- ления «Научные основы регулирования естественных монополий», вице-президент РАЕН

Хачатрян Карен Геворгович – к.т.н., д-р горного дела, специалист по географическим системам управления (GIS) департамента государственных работ графства ЛосАнджелес (США), член Союза писателей Армении, вице-президент и ученый секретарь Американского научного центра РАЕН, гл. редактор журнала «Знаток»

Чень Цзяньпин — д.т.н., профессор, директор научно-исследовательского центра «Земли, ресурсов и высоких технологий» Китайского геологического университета (г. Пекин), начальник головной лаборатории и профессионального комитета математической геологии и геоинформации Китайского геологического общества. Лауреат пяти премий научно-технологического прогресса министерства геологии и минеральных ресурсов (Китай)

Черешкин Дмитрий Семенович — д.т.н., профессор зав. лабораторией Информатизации и информационной безопасности Института системного анализа РАН

Чжао Пенда — д.т.н., профессор Китайского геологического университета (г. Пекин), действительный член Китайской академии наук, председатель международного комитета по геологическим данным от азиатского региона (Китай)

Шахвердиев Азиз Ханович — д.т.н., генеральный директор НП «Институт системных исследований процессов нефтегазодобычи», вице-президент РАЕН

Шевченко Юрий Леонидович — д.м.н., профессор, академик РАН, Заслуженный врач РФ, Заслуженный деятель науки РФ, президент Национального медико-хирургического Центра им. Н.И. Пирогова

Якушина Ольга Александровна — д.т.н., университет «Дубна», Ученый секретарь НСОММИ Федерального научно-методического центра «ВИМС»

Яннакопулос Панайотис — профессор кафедры компьютерных систем, член управляющего совета Пирейского университета прикладных наук, Вице-президент Европейских программ ПУПИ, член совета Национального греческого информационного центра (Греция)