

ДОКЛАДЫ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

Выходит шесть номеров в год

Журнал основан в июле 1957 года

МИНСК, БЕЛОРУССКАЯ НАУКА, 2014, ТОМ 58, № 5

Учредитель – Национальная академия наук Беларуси

Редакционная коллегия:

В. Г. Гусаков (главный редактор),
С. Я. Килин (заместитель главного редактора),
С. А. Чижик (заместитель главного редактора),
И. М. Богдевич, Н. А. Борисевич, П. А. Витязь,
И. Д. Волоотовский, И. В. Гайшун, А. Е. Дайнеко, И. В. Залуцкий,
О. А. Ивашкевич, Н. А. Изобов, Н. С. Казак, А. А. Коваленя,
Ф. Ф. Комаров, И. В. Котляров, В. А. Лабунов, Ф. А. Лахвич, О. Н. Левко,
А. И. Лесникович, В. Ф. Логинов, А. А. Махнач, А. А. Михалевич, В. А. Орлович,
О. Г. Пенязьков, Ю. М. Плескачевский, А. Ф. Смянович,
Л. М. Томильчик, В. М. Федосюк, Л. В. Хотылева, И. П. Шейко,
ведущий редактор **Т. П. Петрович**

Адрес редакции:

220072, Минск, ул. Академическая, 1, к. 119,

тел. 284-19-19

<http://nasb.gov.by/rus/publications/dan/>

E-mail: doklady@open.by

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Ядченко А. А. О факторизации π -разрешимых неприводимых линейных групп	5
Забрейко П. П., Матысик О. В. Теорема М. А. Красносельского и некорректные линейные задачи с самосопряженным оператором	12
Матус П. П., Во Тхи Ким Туен, Гаспар Ф. Монотонные разностные схемы для линейного параболического уравнения с граничными условиями смешанного типа	18
Ровба Е. А., Дирвук Е. В. Об одной квадратурной формуле интерполяционно-рационального типа по узлам Чебышева–Маркова	23
Антоневич А. Б., Глаз А. Н. Квазипериодические алгебры, инвариантные относительно линейного отображения	30
Жестков С. В. Новый анзац и точные решения обобщенной нелокальной оптической системы	36

ФИЗИКА

Комаров Ф. Ф., Климович И. М., Зайков В. А., Пилько В. В. Контролируемое нанесение Ti–Al–N покрытий методом реактивного магнетронного распыления	40
---	----

Курочкин Ю. А., Рыбак И. Ю., Шёлковый Д. В. Когерентные состояния на орисфере трехмерного пространства Лобачевского.....	44
Белов М. А., Крылов Г. Г. Полевое управление когерентным квантовым транспортом заряда в неупорядоченных нанопроволоках.....	49
Поведайло В. А., Яковлев Д. Л. Спектры возбуждения флуоресценции струйно охлажденных оксалилгаллидов.....	54
Гончаренко А. М. Распространение световых пучков в отрицательных селфоках.....	62

ХИМИЯ

Матулис Вадим Э., Григорьев Ю. В., Суханов Г. Т., Крупнова И. А., Ивашкевич О. А. Стандартные энтальпии образования в газовой фазе и относительная устойчивость таутомерных форм С-алкокси-1,2,4-триазолов и изомерных N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов: квантовохимическое исследование	64
Соломянский А. Е., Безрученко В. С., Агабеков В. Е. Формирование и оптические свойства светорассеивающих покрытий на основе частиц диоксида титана.....	70
Матусевич Ю. И. Фоточувствительные оптические материалы на основе полиметилметакрилата, модифицированного сополимеризацией с органическими кислотами.....	74

БИОЛОГИЯ

Шаптуренко М. Н., Якимович А. В., Забара Ю. М., Хотылёва Л. В. Вклад молекулярно-генетической дивергенции капусты белокачанной в реализацию продуктивного потенциала гибридов F ₁	80
Каган Д. И., Сидор А. И., Маркевич Т. С. Генетическая структура популяций <i>Picea abies</i> (L.) Karst. в Беларуси (по данным полиморфизма митохондриальной ДНК).....	87
Урбанович О. Ю., Кузмицкая П. В., Козловская З. А. Исследование генетического разнообразия сортов слив с помощью молекулярных маркеров SSR-типа.....	92

МЕДИЦИНА

Лобанова В. В., Висмонт Ф. И. Об участии монооксида азота в механизмах реализации влияния три-йодтиронина на процессы детоксикации и температуру тела у крыс.....	98
--	----

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Пенязьков О. Г., Саверченко В. И., Фисенко С. П. Режимы электростатического осаждения фемтолитровых капель растворов на подложку-электрод при пониженном давлении.....	102
Рабинович О. С., Малиновский А. И. Устойчивость плоского фронта фильтрационного горения твердого топлива.....	107

СОЦИАЛЬНО-ГУМАНИТАРНЫЕ НАУКИ

Гаранін С. Л. Пераклады рэлігійнай літаратуры ў XVI ст. у ВКЛ.....	114
Безлепкин Я. П. История Беларуси периода Великой Отечественной войны в историографии США и Великобритании (1945–2013) (на англ. яз.).....	119

ДОКЛАДЫ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ. 2014. Т. 58, № 5

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь,
свидетельство о регистрации № 387 от 18.05.2009.

Редактор Т. П. Петрович

Компьютерная верстка Н. И. Кашуба

Сдано в набор 10.10.2014. Выпуск в свет 29.10.2014. Формат 60×84¹/₈. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 14,88. Уч.-изд. л. 16,4. Тираж 138 экз. Заказ 181.

Цена номера: индивидуальная подписка – 58 650 руб.; ведомственная подписка – 141 919 руб.

Издатель и полиграфическое исполнение:

Республиканское унитарное предприятие «Издательский дом «Беларуская навука».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя, распространителя печатных изданий № 1/18 от 02.08.2013. ЛП № 02330/455 от 30.12.2013. Ул. Ф. Скорины, 40, 220141, г. Минск.

DOKLADY OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

Published bimonthly

The journal has been published since July, 1957

MINSK, BELORUSSKAYA NAUKA, 2014, Vol. 58, N 5

Founder – National Academy of Sciences of Belarus

Editorial Board:

V. G. Gusakov (Editor-in-Chief),
S. Ya. Kilin (Associate Editor-in-Chief),
S. A. Chizhik (Associate Editor-in-Chief),
I. M. Bogdevich, N. A. Borisevich, A. Ye. Daineko, V. M. Fedosyuk, I. V. Gaishun,
O. A. Ivashkevich, N. A. Izobov, N. S. Kazak, L. V. Khotyleva, A. A. Kovalenya,
F. F. Komarov, I. V. Kotlyarov, V. A. Labunov, F. A. Lakhvich, O. N. Levko,
A. I. Lesnikovich, V. F. Loginov, A. A. Makhnach, A. A. Mikhalevich, V. A. Orlovich,
O. G. Penyazkov, Yu. M. Pleskachevsky, I. P. Sheiko, A. F. Smeyanovich, L. M. Tomilchik,
P. A. Vitiaz, I. D. Volotovskii, I. V. Zalutsky,
lead editor **T. P. Petrovich**

Address of the Editorial Office:

220072, Minsk, 1 Akademicheskaya Str., room 119

telephone: 284-19-19

<http://nasb.gov.by/eng/publications/dan/>

E-mail: doklady@open.by

CONTENTS

MATHEMATICS

Yadchenko A. A. On factorizations of π -solvable irreducible linear groups	5
Zabreiko P. P., Matysik O. V. Theorem M. A. Krasnoselski and ill-posed linear problems with self-adjoint operators	12
Matus P. P., Tuyen Vo Thi Kim, Gaspar F. Monotone difference schemes for linear parabolic equations with mixed boundary conditions	18
Rovba Y. A., Dirvuk Y. V. Quadrature formulas based on rational interpolation with nodes Chebyshev–Markov	23
Antonevich A. B., Glaz A. N. Quasi-periodic algebras invariant under a linear map	30
Zhestkov S. V. A new ansatz and exact solutions of generic nonlocal optical system	36

PHYSICS

Komarov F. F., Klimovich I. M., Zaikov V. A., Pilko V. V. Formation of Ti-Al-N coatings by controlled reactive magnetron sputtering	40
Kurochkin Yu. A., Rybak I. Yu., Shoukavy Dz. V. Coherent states on horospheres of the three-dimensional Lobachevsky space	44

Belov M. A., Krylov G. G. Electric field control of quantum charge transport in disordered nanowires	49
Povedailo V. A., Yakovlev D. L. Fluorescence excitation spectra of jet-cooled oxalyl halides	54
Goncharenko A. M. Propagation of the light beams in negative media	62
<i>CHEMISTRY</i>	
Matulis Vadim E., Grigoriev Y. V., Sukhanov G. T., Krupnova I. A., Ivashkevich O. A. Standard gas-phase formation enthalpies and relative stability of C-alkoxy-1,2,4-triazoles tautomeric forms and isomeric N-methyl-C-methoxy-1,2,4-triazoles: quantum-chemical calculations	64
Salamianski A. E., Bezruchenko V. S., Agabekov V. E. Formation and optical properties of light scattering coatings from particles of titanium dioxide	70
Matusevich Yu. I. Photosensitive optical materials based on the methylmethacrylate, modified by copolymerization with organic acids	74
<i>BIOLOGY</i>	
Shapturenko M. N., Yakimovich A. V., Zabara Y. M., Khotyleva L. V. The contribution of molecular-genetic divergence to F ₁ hybrid performance of white cabbage.	80
Kagan D. I., Sidor A. I., Markevich T. S. Genetic structure of populations of <i>Picea abies</i> (L.) Karst. in Belarus (according to mitochondrial DNA polymorphism)	87
Urbanovich O. Yu., Kuzmitskaya P. V., Kazlouskaya Z. A. Investigation of plum variety diversity using SSR markers	92
<i>MEDICINE</i>	
Lobanova V. V., Vismont F. I. Participation of nitric monoxide in realization mechanisms of triiodothyronine influence on the detoxication processes and body temperature in rats	98
<i>TECHNICAL SCIENCES</i>	
Penyazkov O. G., Saverchenko V. I., Fisenko S. P. Modes of electrostatic deposition of femtoliter droplets on electrode-holder	102
Rabinovich O. S., Malinouski A. I. Stability of plane front of solid fuel filtration combustion	107
<i>SOCIAL SCIENCES AND HUMANITIES</i>	
Haranin S. L. Translations of religious literature in the XVI century in Grand Duchy of Lithuania.	114
Bezlepkin Ya. P. The history of Belorussia during the Great Patriotic war in american and british historiography	119

МАТЕМАТИКА

УДК 512.542

А. А. ЯДЧЕНКО

О ФАКТОРИЗАЦИИ π -РАЗРЕШИМЫХ НЕПРИВОДИМЫХ ЛИНЕЙНЫХ ГРУПП

(Представлено академиком И. В. Гайшуном)

Институт математики НАН Беларуси, Минск

Поступило 01.10.2014

Введение. Пусть G – конечная группа, A – такая группа ее автоморфизмов, что $(|A|, |G|) = 1$ и $\Gamma = AG$ – полупрямое произведение групп G и A . Группа A при этом называется группой *копростых* автоморфизмов группы G . Если же $C_G(a) = C_G(A)$ для каждого элемента $a \in A^\#$, то A называется *сильноцентрализованной группой копростых автоморфизмов* группы G .

Условие В. Скажем, что для Γ, A, G, C, χ и n выполнено условие В, если $\Gamma = AG$, где G – нормальная в Γ подгруппа, $(|A|, |G|) = 1$, A – непримарная группа нечетного порядка, которая не является нормальной в группе Γ , $C_G(a) = C_G(A) = C$ для каждого элемента $a \in A^\#$ и G имеет точный неприводимый комплексный характер χ степени n , который является a -инвариантным хотя бы для одного элемента $a \in A^\#$.

В данной работе изучаются группы, удовлетворяющие условию В. На основе свойств таких групп установлена факторизация π -разрешимых неприводимых комплексных линейных групп G степени $n < 2|H|$, непримарные π -холловы TI -подгруппы H которых имеют нечетный порядок и не являются нормальными в G .

Т е о р е м а 1. Пусть для Γ, A, G, C, χ и n выполнено условие В.

Если $n = 2|A| - 1$, то $G = O_q(G)C$, q – нечетное простое число, C разрешима и $|A| - 1$ делит $|C|$, если C не абелева.

Если $n = 2(|A| - 1)$, то $G = O_2(G)C$ и либо C не абелева, но разрешима, либо $C / Z(G) \cong PSL(2, 5)$.

Т е о р е м а 2. Пусть для Γ, A, G, C, χ и n выполнено условие В и $n < 2|A|$. Тогда справедливо каждое из следующих утверждений:

(1) $G = O_q(G)C$, где $n = |A| - 1, |A|, |A| + 1, 2(|A| - 1)$ или $2|A| - 1$ и n – степень некоторого простого числа q за исключением случая $n = |A|$;

(2) если группа G не разрешима, то $n = 2(|A| - 1)$ и $C / Z(G) \cong PSL(2, 5)$.

Т е о р е м а 3. Пусть G – π -разрешимая неприводимая линейная группа степени $n < 2|H|$ с непримарной π -холловой TI -подгруппой H нечетного порядка и $H \triangleleft G$. Тогда справедливо каждое из следующих утверждений:

(1) $n = |H| - 1, |H|, |H| + 1, 2(|H| - 1)$ или $2|H| - 1$ и n – степень простого числа q , за исключением случая, когда $n = |H|$;

(2) факторгруппа $G / O_{\pi', \pi}(G)$ абелева;

(3) если $n = |H|$, то $G = [O_{\pi'}(G), H]N_G(H)$ с абелевой подгруппой $[O_{\pi'}(G), H]$ и $[O_{\pi'}(G), H] \cap N_G(H) = 1$, если же $n \neq |H|$, то $G = O_q(G)N_G(H)$, где q из (1);

(4) если группа G не разрешима, то $n = 2(|A| - 1)$ и $(C_G(H))_{\pi'} / Z(G) \cong PSL(2, 5)$.

Из теоремы, доказанной в [1–3], вытекает, что, если G – конечная неприводимая комплексная линейная группа степени $n < 2|A|$ с нетривиальной сильноцентрализованной группой A копростых автоморфизмов нечетного порядка, то $n = |A| - 1, |A| + 1, 2(|A| - 1)$ или $2|A| - 1$ и n – степень некоторого простого числа (см. лемму 6).

Айзексом [4] доказано, что если силовская p -подгруппа конечной p -разрешимой неприводимой комплексной линейной группы G степени $n < 2p$ не является нормальной в G , то $n = p - 1, p, p + 1, 2p - 2$ или $2p - 1$, n – степень простого числа и группа G разрешима за исключением, может быть, случая, когда $n = 2p - 2$. Романовским и Ядченко [5] установлено, что в последнем случае группа G импримитивна и ее силовская 2-подгруппа неабелева.

Некоторые определения, обозначения и предварительные результаты. Всюду под характером группы G будем понимать комплексный характер, а под группой – конечную группу. Подгруппа H группы G называется *TI-подгруппой* в G , если $H \cap H^g = 1$ для всех элементов $g \in G \setminus N_G(H)$. N – множество натуральных чисел; Z_+ – множество целых неотрицательных чисел; $i = 1, t$ обозначает $i = 1, 2, \dots, t$; $\pi = \pi(A)$ – множество всех простых делителей порядка группы A ; $\pi' = \pi(\Gamma) \setminus \pi$; если $X \subseteq \Gamma$, то $X_{\pi'}$ – холлова π' -подгруппа группы X ; если ψ – некоторый характер, то $\text{Irr}(\psi)$ обозначает множество всех неприводимых компонент характера ψ . Если $X \triangleleft \Gamma$ и ϕ – неприводимый характер подгруппы X , то условие, что ϕ – g -инвариантен для некоторого элемента $g \in \Gamma \setminus X$, запишем для краткости в виде $I_\Gamma(\phi) \neq X$. Все остальные обозначения и определения стандартны и их можно найти, например, в [6] или [7].

Пусть $\Gamma = AB$ – группа с подгруппами A и B , где $B \triangleleft \Gamma$, $(|A|, |B|) = 1$ и $|A|$ нечетен. Тогда она удовлетворяет условию теоремы 13.1 [7]. Согласно этой теореме, существует взаимно-однозначное соответствие $\pi(B, A) : \text{Irr}_A(B) \rightarrow \text{Irr}(C_B(A))$ между множеством всех A -инвариантных неприводимых характеров группы B и множеством всех неприводимых характеров подгруппы $C_B(A)$, которое обладает рядом свойств, зависящих, в частности, от свойств подгруппы A . Пусть $\chi \in \text{Irr}_A(B)$. Тогда по лемме 13.3 [7] существует единственный неприводимый характер $\hat{\chi}$ группы Γ такой, что $(\hat{\chi})_B = \chi$ и $A \subseteq \ker(\det \hat{\chi})$. Он называется *каноническим продолжением характера χ на группу Γ* . В дальнейшем под $\hat{\chi}$ будем понимать именно такой характер.

Приведем ряд вспомогательных лемм для групп $\Gamma = AB$ с некоторыми условиями.

Л е м м а 1. Пусть $\Gamma = AB$ – группа с подгруппами A и B , где $B \triangleleft \Gamma$, $(|A|, |B|) = 1$ и $|A|$ нечетен. Тогда $B = [B, A]C_B(A)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Согласно лемме 6 [8], $[B, A] \triangleleft B$. В силу теоремы 6.2.2 [6] для любого $q \in \pi(B)$ существует A -инвариантная силовская q -подгруппа Q . По теореме 5.3.5 [6] $Q = [Q, A]C_Q(A)$. Поскольку $Q \subseteq B$, то $[Q, A] \subseteq [B, A]$ и $C_Q(A) \subseteq C_B(A)$. Следовательно, $Q \subseteq [B, A]C_B(A)$. Так как $[B, A]C_B(A)$ – подгруппа из B и $|Q|$ делит $|[B, A]C_B(A)|$ для каждого $q \in \pi(B)$, то $|B|$ делит $|[B, A]C_B(A)|$ и, значит, $B \subseteq [B, A]C_B(A)$. Лемма доказана.

Л е м м а 2. Пусть $\Gamma = AB$ – группа, где $B \triangleleft \Gamma$, $(|A|, |B|) = 1$, A – разрешима и $C_B(a) = C_B(A)$ для каждого элемента $a \in A^\#$. Если $\phi \in \text{Irr}(B)$ и $I_\Gamma(\phi) \neq B$, то $\phi \in \text{Irr}_A(B)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из теоремы 13.1 [7] вытекает, что $|\text{Irr}_A(B)| = |\text{Irr}(C_B(A))|$ и $|\text{Irr}_{\langle a \rangle}(B)| = |\text{Irr}(C_B(\langle a \rangle))|$. Так как $C_B(\langle a \rangle) = C_B(A)$, то $|\text{Irr}_{\langle a \rangle}(B)| = |\text{Irr}_A(B)|$. Так как $\text{Irr}_A(B) \subseteq \text{Irr}_{\langle a \rangle}(B)$, то $\text{Irr}_A(B) = \text{Irr}_{\langle a \rangle}(B)$. Но из условия леммы вытекает, что $\phi^a = \phi$ для некоторого элемента $a \in A^\#$. Это означает, что $\phi \in \text{Irr}_{\langle a \rangle}(B)$. Значит, $\phi \in \text{Irr}_A(B)$. Лемма доказана.

В леммах 3–9 $\Gamma = AB$, $B \triangleleft \Gamma$, подгруппа A имеет нечетный порядок и не является нормальной в Γ , $(|A|, |B|) = 1$ и $C_B(a) = C_B(A)$ для каждого неединичного элемента $a \in A$. Положим $C = C_B(A)$.

Л е м м а 3. A – TI-подгруппа в Γ и, если $\phi \in \text{Irr}(B)$ и $I_\Gamma(\phi) \neq B$, то группа Γ имеет такой неприводимый характер $\hat{\phi}$ π' -степени, что $\hat{\phi}_B = \phi$. Группа $\Gamma = AO_{\pi'}(\Gamma)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть g – произвольный элемент из $\Gamma \setminus N_\Gamma(A) = \Gamma \setminus AC_\Gamma(A)$. Тогда $g = ax$, где $a \in A$ и $x \in B^\#$. Пусть $y \in A \cap A^g$. Тогда $y \in A^g = A^{ax} = (A^a)^x = A^x$ и, следовательно, $y = a_1^x$ для некоторого элемента $a_1 \in A$. Но $y \in A$. Поэтому $[a_1, x] = a_1^{-1}x^{-1}a_1x = a_1^{-1}a_1^x = a_1^{-1}y \in A$. Так как $B \trianglelefteq \Gamma$, то $[a_1, x] \in A \cap B = 1$. Отсюда $a_1x = xa_1$, т. е. $x \in C_B(a_1)$. Пусть $a_1 \neq 1$. Тогда $x \in C_B(A)$ и, следовательно, $g \in AC_B(A)$. Это противоречит выбору элемента g . Значит, $a_1 = 1$. Тогда $y = 1$. Поэтому $A \cap A^g = 1$, т. е. A – TI-подгруппа в группе Γ .

По лемме 2, $\phi \in \text{Irr}_A(B)$. Поэтому существует каноническое продолжение $\hat{\phi}$ характера ϕ на Γ . Ясно, что степень этого характера – π' -число. Последняя фраза леммы очевидна. Лемма доказана.

В [1] определен ряд свойств группы Γ , удовлетворяющей следующему условию: $\Gamma = AO_{\pi'}(\Gamma)$, где холлова π -подгруппа A нечетного порядка является TI-подгруппой в Γ и не является

нормальной (условие В из [1]). Из леммы 3 следует, что это условие выполняется в нашей ситуации. Поэтому можно использовать результаты из [1] о свойствах таких групп.

Л е м м а 4. Если $\varphi \in \text{Irr}(B)$ и $I_\Gamma(\varphi) \neq B$, то

(1) $\widehat{\varphi}_A = k\rho_A + \varepsilon\beta(1)1_A$, где $k \in \mathbb{Z}_+$, ρ_A – регулярный характер подгруппы A , $\varepsilon = \pm 1$ и β – такой неприводимый характер подгруппы C , что $\beta = (\varphi)\pi(B, A)$ и

(2) если $\upsilon \in \text{Irr}(\Gamma)$ – характер π' -степени, то характер $\psi = \upsilon_B$ неприводим, $\widehat{\psi} = \upsilon\lambda$ для некоторого линейного характера λ подгруппы A и для ограничения $\widehat{\psi}_A$ выполняется формула из пункта (1).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Все утверждения леммы непосредственно следуют из леммы 10 [1] и ее доказательства.

Л е м м а 5. Если $\varphi \in \text{Irr}(B)$, $I_\Gamma(\varphi) \neq B$ и $\varphi(1) < 2|A|$, то выполняется одно из следующих утверждений:

- (1) $\varphi_C = \beta + |A|\beta_1$, $\beta(1) < |A|$, $\beta_1(1) = 1$;
- (2) $\varphi_C = (|A|-1)\beta + |A|\beta_1$, $\beta(1) = \beta_1(1) = 1$;
- (3) $\varphi_C = (|A|-1)\beta$, $\beta(1) = 1$;
- (4) $\varphi_C = (|A|-1)\beta$, $\beta(1) = 2$;
- (5) $\varphi_C = (|A|+1)\beta$, $\beta(1) = 1$;
- (6) $\varphi_C = (2|A|-1)\beta$, $\beta(1) = 1$;
- (7) $\varphi_C = \beta$,

где $\beta, \beta_1 \in \text{Irr}(C)$ и $\beta = (\chi)\pi(G, A)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о вытекает из леммы 11 [1].

Л е м м а 6. Если $\varphi \in \text{Irr}(\Gamma)$ – точный характер степени $n < 2|A|$, то $n = |A|-1$, $|A|$, $|A|+1$, $2(|A|-1)$ или $2|A|-1$ и n – степень некоторого простого числа q за исключением, может быть, случая $n = |A|$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Поскольку характер φ неприводим и точный, то можно считать Γ комплексной неприводимой линейной группой, и так как по лемме 3 A – TI -подгруппа в Γ , то последняя удовлетворяет условию A [1]. Доказательство вытекает из теоремы, сформулированной там же.

Л е м м а 7. Если $K \triangleleft \Gamma$ такая подгруппа, что AK/K не является нормальной в Γ/K , то $A \cap K = 1$.

Д о к а з а т е л ь с т в о вытекает из леммы 9 [1].

Л е м м а 8. Если φ – характер степени $m = |A|-1 = 2^\alpha$ для некоторого $\alpha \in \mathbb{N}$ и $A \ker \varphi / \ker \varphi$ не является нормальной в $\Gamma / \ker \varphi$, то $|\Gamma : Z(\varphi)| = |A|2^{2\alpha}$.

Д о к а з а т е л ь с т в о.

По лемме 3, A – TI -подгруппа в Γ . Значит, $A \ker \varphi / \ker \varphi$ – холлова TI -подгруппа в группе $\bar{\Gamma} = \Gamma / \ker \varphi$, которая не является нормальной. Поскольку A не является нормальной в Γ , то, по лемме 7, $A \cap \ker \varphi = 1$. Тогда $|\bar{A}| = |A \ker \varphi / \ker \varphi| = |A|$ и, следовательно, $m = |\bar{A}|-1$. Видим, что группа $\bar{\Gamma}$ удовлетворяет условию B из [10]. По лемме 7 [10], $|\bar{\Gamma} : Z(\bar{\Gamma})| = |\bar{A}|2^{2\alpha}$. Поскольку по лемме 2.27 [7] $Z(\bar{\Gamma}) = Z(\varphi) / \ker \varphi$, то

$$|\bar{\Gamma} : Z(\bar{\Gamma})| = \frac{|\Gamma| / |\ker \varphi|}{|Z(\varphi)| / |\ker \varphi|} = |\Gamma : Z(\varphi)|.$$

Лемма доказана.

Л е м м а 9. Если $\varphi \in \text{Irr}(B)$ и $I_\Gamma(\varphi) \neq B$, $\varphi(1) = 2(|A|-1)$, $|A| \neq 3$ и B – 2-группа, то для неприводимого характера $\widehat{\varphi}$ группы Γ справедливо следующее утверждение: $\widehat{\varphi}_A = 2\rho_A - 2 \cdot 1_A$, где ρ_A – регулярный характер подгруппы A .

Д о к а з а т е л ь с т в о. Сохраним обозначения леммы 4. Пусть B – 2-группа. Поскольку $\beta = (\varphi)\pi(B, A)$ – неприводимый характер подгруппы $C_B(A)$, то $\beta(1)$ – степень числа 2. Так как $\varphi(1) = 2(|A|-1)$, то $k = 1$ или 2.

Пусть $k = 1$. Тогда $\varepsilon = 1$ и $\beta(1) = \widehat{\varphi}_A(1) - \rho_A(1) = 2|A| - 2 - |A| = |A| - 2$. Так как число $|A|$ нечетно и $\beta(1) = |A| - 2$ – степень числа 2, то $\beta(1) = 1$. Следовательно, $|A| = 3$, что противоречит условию доказываемой леммы.

Итак, $k=2$. Тогда $\varepsilon = -1$ и $\beta(1) = 2\rho_A(1) - \widehat{\varphi}_A(1) = 2|A| - 2|A| + 2 = 2$. Тогда $\widehat{\varphi}_A = k\rho_A + \varepsilon\beta(1)1_A = 2\rho_A - 2 \cdot 1_A$. Лемма доказана.

Пусть Γ – группа наименьшего порядка, для которых выполняются условия теоремы 1, но не выполняются ее заключения.

Л е м м а 10. Характер $\widehat{\chi}$ – точный.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Предположим $\ker \widehat{\chi} \neq 1$. Поскольку характер $\widehat{\chi}_G = \chi$ точный характер, то $\ker \widehat{\chi} \subseteq A$. Так как, по лемме 3, A – TI -подгруппа в Γ , то $A \triangleleft \Gamma$. Это противоречит условию доказываемой теоремы. Лемма доказана.

По лемме 10, группа Γ имеет точный неприводимый характер $\widehat{\chi}$ степени $n < 2|A|$. По лемме 6, n – степень простого числа q . По теореме 6.2.2 [6], группа G содержит A -инвариантную силовскую q -подгруппу.

Л е м м а 11. Пусть $q \in \pi(n)$ и Q – A -инвариантная силовская q -подгруппа группы G . Тогда подгруппа $[Q, A] \not\subseteq C$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Допустим, что $[Q, A] \subseteq C$. Поскольку по лемме 1 $Q = [Q, A]C_Q(A)$, то $Q \subseteq C$. По упражнению 13.2 [7], $\frac{\beta(1)|G:C|}{\chi(1)}$ – целое число, где β из леммы 4. Так как $Q \subseteq C$, то q не делит $|G:C|$. Поскольку $\chi(1)$ – степень q , то $\chi(1)$ делит $\beta(1)$. Так как $\beta(1) \leq \chi(1)$, то $\beta(1) = \chi(1)$. Из леммы 4 следует, что $k = 0$, $\varepsilon = 1$ и $\widehat{\chi}_A = \beta(1)1_A$, т. е. $A \subseteq \ker \widehat{\chi}$. Получили противоречие с леммой 10. Лемма доказана.

Ограничение объема сообщения не позволяет привести доказательства результатов без сокращений.

Л е м м а 12. Группа G не разрешима.

В [9, теорема] доказано, что π -разрешимая неприводимая линейная группа G степени $n < 2|H|$ с π -холловой TI -подгруппой H нечетного порядка, которая не является нормальной в G разрешима при $n \neq 2(|H|-1)$. По лемме 12, $n = 2(|H|-1)$, а из леммы 6 вытекает, что $n = 2^{\alpha+1}$, где $\alpha \in N$, т. е. $q = 2$.

Л е м м а 13. $|G:C|$ делится на нечетное простое число.

Л е м м а 14. Справедливо каждое из следующих утверждений:

$$(1) \widehat{\chi}_A = \rho_A + (|A|-2)1_A;$$

$$(2) \chi_C = \beta + |A|\beta_1.$$

Здесь $\beta = (\chi)\pi(G, A)$, $\beta(1) = |A|-2$ и $\beta_1 \in \text{Irr}(C)$, $\beta_1(1) = 1$.

Пусть Q – подгруппа из леммы 11 и $N = N_\Gamma(Q)$. Поскольку $q = 2$, то по лемме 12 $N \neq \Gamma$ и в силу леммы 11 $Q \not\subseteq C$. Рассмотрим характер

$$\widehat{\chi}_N = \sum_{i=1}^t \alpha_i \chi_i,$$

где $\alpha_i \in N$, $\chi_i \in \text{Irr}(N)$, $i = \overline{1, t}$. Пусть $A \ker \chi_i / \ker \chi_i \triangleleft N / \ker \chi_i$ для всех $i = \overline{1, t}$. Так как $\bigcap_{i=1}^t \ker \chi_i = \ker \widehat{\chi}_N = 1$, то подгруппа N изоморфно вкладывается в прямое произведение $N = \prod_{i=1}^t N / \ker \chi_i$. Поскольку каждый фактор $N / \ker \chi_i$ содержит нормальную холлову π -подгруппу $A \ker \chi_i / \ker \chi_i$, то $A \triangleleft N$. Тогда $Q \subseteq C$. Это противоречит выбору подгруппы Q . Значит, можно считать, что $A \ker \chi_1 / \ker \chi_1 \triangleleft N / \ker \chi_1$. Тогда с учетом лемм 6 и 7

$$\chi_1(1) \in \{|A|-1, |A|, |A|+1, 2(|A|-1)\}.$$

При этом $\chi_1(1)$ – степень 2, за исключением случая, когда $\chi_1(1) = |A|$.

Л е м м а 15. $Z(Q) \subseteq Z(\Gamma)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о теоремы 1. Пусть $\chi_1(1) = |A|-1$. Обозначим $\mu = \widehat{\chi}_N - \chi_1(1)$. Предположим, что $A \ker \mu / \ker \mu \triangleleft N / \ker \mu$. Тогда из лемм 7 и 6 следует, что характер μ неприводим и $\mu(1) = |A|-1$. Используя лемму 4 убеждаемся, что

$$f = (\widehat{\chi}_A, 1_A)_A = ((\chi_1 + \mu)_A, 1_A)_A = ((\rho_A - 1_A)(\lambda_{\chi_1})^{-1} + (\rho_A - 1_A)(\lambda_{\mu})^{-1}, 1_A)_A = ((\rho_A - (\lambda_{\chi_1})^{-1}) + (\rho_A - (\lambda_{\mu})^{-1}), 1_A)_A \leq 2.$$

Здесь λ_{χ_1} и λ_{μ} – линейные характеры подгруппы A .

С другой стороны, из леммы 14 вытекает, что $f = (\rho_A + (|A| - 2)1_A, 1_A)_A = 1 + |A| - 2 = |A| - 1$. Поэтому $|A| - 1 \leq 2$, т. е. $|A| \leq 3$. Это противоречит условию В.

Теперь предположим, что $A \ker \mu / \ker \mu \triangleleft N / \ker \mu$. Тогда, по лемме 3 [1], $[O_{\pi'}(N), A] \subseteq \ker \mu$. Так как $Q \subseteq O_{\pi'}(N)$, то $[Q, A] \subseteq \ker \mu$. Поскольку характер $(\chi_1)_{A \ker \mu}$ точен, $[Q, A] \not\subseteq C$, по лемме 11, и $A \ker \mu \triangleleft N$, то из леммы 6 следует, что этот характер неприводим, ибо в противном случае $A \triangleleft N$, т. е. $[Q, A] \subseteq C$. Следовательно, по лемме 8, $A \ker \mu : Z(A \ker \mu) = |A| 2'$. Отсюда следует, что $(\ker \mu)_2 \text{char} A \ker \mu \triangleleft N$. Значит, $(\ker \mu)_2 \triangleleft Q$ и, следовательно, $Z = Z((\ker \mu)_2) \cap Q \neq 1$. Из теоремы Клиффорда вытекает, что характер $(\chi_1)_{(\ker \mu)_2}$ тоже неприводимый и точный. Поэтому $Z((\ker \mu)_2) \subseteq Z(\chi_1)$. Тогда для элемента $t \in Z$ порядка 2 получаем, что $\widehat{\chi}(t) = \widehat{\chi}_N(t) = (\chi_1 + \mu)(t) = \chi_1(t) + \mu(t) = -\chi_1(1) + \mu(1) = 0$.

С другой стороны, по лемме 15, получаем, что $\widehat{\chi}(t) = -\widehat{\chi}(1) = -2(|A| - 1)$. Противоречие.

Пусть теперь $\chi_1(1) = |A|$. Тогда $\mu(1) = |A| - 2$. Отсюда и теоремы 1 [10] вытекает, что $A \ker \mu / \ker \mu \triangleleft N / \ker \mu$. Поскольку $\chi_1(1) = |A|$, то все неприводимые компоненты характера $(\chi_1)_{N \pi'}$ линейные. Это означает, что $(N \pi')' \subseteq \ker \chi_1$. Так как $\ker \chi_1 \triangleleft N$, $A \ker \mu \triangleleft N$ и $\ker \chi_1 \cap \ker \mu = 1$, то $A_0 = \ker \chi_1 \cap A \ker \mu \subseteq A$. Но A – Π -подгруппа и $A / \triangleleft A \ker \mu$, ибо в противном случае $[Q, A] \subseteq C$, поскольку $[Q, A] \subseteq [O_{\pi'}(N), A]$ и $[O_{\pi'}(N), A] \subseteq \ker \mu \cap O_{\pi'}(N)$ по лемме 3 [1]. Тогда $A_0 = 1$. Значит, $\ker \chi_1 \subseteq C_N(A \ker \mu)$ и поэтому $\ker \chi_1 \subseteq C_{(N \pi')'}$ (A). Тогда $((N \pi')')' \subseteq C_{(N \pi')'}$ (A), т. е. $C_{(N \pi')'}$ (A) $\triangleleft (N \pi')$.

Из того, что $(N \pi')' \subseteq \ker \chi_1$ и $\ker \chi_1 \cap \ker \mu = 1$ следует, что подгруппа $\ker \mu \cap (N \pi)'$ абелева. Значит, подгруппа $[(N \pi)', A]$ – абелева. Так как $[(N \pi)', A] = [[(N \pi)', A], A] \times C_{[(N \pi)', A]}(A)$ и $[[[N \pi)', A], A] = [(N \pi)', A]$ по лемме 6 [8], то $C_{[(N \pi)', A]}(A) = 1$. Поскольку $[(N \pi)', A] \cap C_{(N \pi')'}$ (A) $\subseteq C_{[(N \pi)', A]}(A)$, то $[(N \pi)', A] \cap C_{(N \pi')'}$ (A) = 1. Так как по лемме 6 [8] $[(N \pi)', A] \triangleleft (N \pi)'$, $C_{(N \pi')'}$ (A) $\triangleleft (N \pi)'$ и $(N \pi)' = [(N \pi)', A] C_{(N \pi')'}$ (A) по лемме 1, то $(N \pi)' = [(N \pi)', A] C_{(N \pi')'}$ (A). Поэтому $[(N \pi)', A] \subseteq Z((N \pi)')$, так как группа $[(N \pi)', A]$ абелева. Отсюда следует, что $[Q, A] \subseteq Z(Q)$. По лемме 15, $[Q, A] \subseteq Z(\Gamma)$, т. е. $[Q, A] \subseteq C$, что противоречит лемме 11.

Поскольку $|A| \neq 3$, то $\chi_1(1) \neq |A| + 1$. Пусть, наконец, $\chi_1(1) = 2(|A| - 1)$. Тогда характер $\widehat{\chi}_N$ неприводим. Так как n – степень 2, то из теоремы Клиффорда вытекает, что характер $\widehat{\chi}_Q$ также неприводим. Поэтому $\widehat{\chi}_{AQ}$ неприводим. Поскольку Q – 2-группа, то из лемм 9 и 14 вытекает, что $\widehat{\chi}_A = \rho_A + (|A| - 2)1_A = 2\rho_A - 2 \cdot 1_A$. Следовательно, $\widehat{\chi}_A(a) = \rho_A(a) + (|A| - 2)1_A(a) = 2\rho_A(a) - 2 \cdot 1_A(a)$ для каждого $a \in A$. Отсюда $|A| - 2 = -2$, что невозможно. Теорема доказана.

Д о к а з а т е л ь с т в о теоремы 2. По условию В $I_{\Gamma}(\chi) \neq B$. По лемме 2 $\chi \in \text{Irr}_A(B)$. В силу леммы 10 каноническое продолжение $\widehat{\chi}$ – точный неприводимый характер группы Γ . Ввиду леммы 3 можно считать, что Γ – неприводимая линейная группа π' -степени $n < 2|A|$ с π -холловой Π -подгруппой A . Поэтому из леммы 6 следует, что $n = |A| - 1$, $|A| + 1$, $2(|A| - 1)$ или $2|A| - 1$ и n – степень некоторого простого числа.

Случай $n = |A| - 1$. Пусть $\bar{\Gamma} = \Gamma / Z(\Gamma)$. Из леммы 8 вытекает, что $|\Gamma : Z(\Gamma)| = |A| 2^{2\alpha}$ для некоторого натурального числа α . Так как $\Gamma = A O_{\pi'}(\Gamma)$, то $\bar{\Gamma} = (AZ(\Gamma) / Z(\Gamma)) O_2(\bar{\Gamma})$. Отсюда следует разрешимость групп $\bar{\Gamma}$, Γ и G . Из утверждения $|\Gamma : Z(\Gamma)| = |A| 2^{2\alpha}$ следует также, что $G_2 \subseteq Z(\Gamma)$. Поэтому $G_2 \triangleleft \Gamma$ и $G_2 \triangleleft G$. Следовательно, $G = O_2(G)C$.

Пусть $n = |A| + 1$. В [12, теорема] установлено, что $G = O_2(G)C_G(A)$ и группа C абелева. Отсюда вытекает утверждение теоремы.

При $n = 2(|A| - 1)$ или $n = 2|A| - 1$ утверждение теоремы непосредственно следует из теоремы 1. Теорема доказана.

Д о к а з а т е л ь с т в о теоремы 3. Тожественное преобразование группы G определяет точный неприводимый характер χ степени n .

Утверждение (1) теоремы доказано в серии работ [1–3].

Напомним, что $O_{\pi', \pi}(G) / O_{\pi'}(G) = O_{\pi}(G / O_{\pi'}(G))$. Так как, согласно теореме 6.3.1 [6], $O_{\pi'}(G / O_{\pi'}(G)) = 1$, то $O_{\pi}(G / O_{\pi'}(G)) \neq 1$. Поскольку $HO_{\pi'}(G) / O_{\pi'}(G)$ – π -холлова Π -подгруппа в $G / O_{\pi'}(G)$, то $O_{\pi', \pi}(G) = HO_{\pi'}(G)$. Отсюда и леммы 2.2.1 [11] вытекает, что

$$G = O_{\pi'}(G)N_G(H). \quad (1)$$

Докажем, что выполняется утверждение (2) теоремы. Положим $N = N_G(H)$. Тогда можем записать, что $N = N_{\pi'}H$. Поскольку подгруппа H не является нормальной в G , то она не является нормальной и в $O_{\pi',\pi}(G) = HO_{\pi'}(G)$. Поэтому и по лемме 7 [1], подгруппа H изоморфна дополнителю некоторой группы Фробениуса. Значит, все подгруппы Силова из H циклические, ввиду нечетности $|H|$. Следуя «аргументу Фраттини» можем утверждать, что для каждого простого числа $p \in \pi$ в группе N существует $N_{\pi'}$ -инвариантная p -подгруппа Силова S_p . Можем записать, что $N_{\pi'} \subseteq N^{(p)}$, где $N^{(p)} = N_G(S_p)$.

Известно, что факторгруппа $N^{(p)} / C_G(S_p) = N^{(p)} / C_{N^{(p)}}(S_p)$ изоморфна подгруппе из $\text{Aut}(S_p)$ – группы автоморфизмов группы S_p и что $\text{Aut}(S_p)$ абелева. Так как $N_{\pi'} / C_{N_{\pi'}}(S_p) = (N^{(p)})_{\pi'} / (C_{N^{(p)}}(S_p))_{\pi'}$ изоморфна подгруппе из $N^{(p)} / C_{N^{(p)}}(S_p)$, то факторгруппа $N_{\pi'} / C_{N_{\pi'}}(S_p)$ абелева для каждого простого числа $p \in \pi$.

Заметим также, что группа H порождается своими силовскими подгруппами S_p , $C_{N_{\pi'}}(H) \subseteq C_{N_{\pi'}}(S_p)$ и что $C_{N_{\pi'}}(H) = \bigcap_{p \in \pi} C_{N_{\pi'}}(S_p)$. Поскольку факторгруппа $N_{\pi'} / C_{N_{\pi'}}(H)$ изоморфна некоторой подгруппе из прямого произведения $N = \prod_{p \in \pi} N_{\pi'} / C_{N_{\pi'}}(S_p)$ и группа N – абелева, как прямое произведение абелевых подгрупп, то и факторгруппа $N_{\pi'} / C_{N_{\pi'}}(H)$ также абелева.

С другой стороны, поскольку $H \triangleleft N \subseteq G$ и $O_{\pi'}(G) \triangleleft G$, то $G / O_{\pi',\pi}(G) = O_{\pi'}(G)N / HO_{\pi'}(G) \cong N / H(O_{\pi'}(G) \cap N) = N / HC_{N_{\pi'}}(H) = N_{\pi'} / C_{N_{\pi'}}(H)$.

Здесь мы учли, что $C_{N_{\pi'}}(H) \subseteq O_{\pi'}(G)$, так как $O_{\pi'}(G)C_{N_{\pi'}}(H) \triangleleft G$, ибо $G = O_{\pi'}(G)N$ и $C_{N_{\pi'}}(H) \triangleleft N$. Отсюда следует, что $O_{\pi'}(G) \cap N = C_{N_{\pi'}}(H)$. Видим, что и факторгруппа $G / O_{\pi',\pi}(G)$ абелева. Утверждение (2) теоремы.

Теперь докажем утверждение (3). Пусть $n = |H|$. Так как из теоремы Клиффорда вытекает, что все неприводимые компоненты характера $\chi_{O_{\pi'}(G)}$ линейные, поэтому подгруппа $O_{\pi'}(G)$ абелева. Как и ранее с помощью лемм 1 и 6 [8] убеждаемся в том, что $O_{\pi'}(G) = [O_{\pi'}(G), H]C_{O_{\pi'}(G)}(H)$. Так как $C_{O_{\pi'}(G)}(H) \subseteq N_G(H)$, то из предыдущего выражения и равенства (1) следует, что $G = [O_{\pi'}(G), H]N_G(H)$ и $[O_{\pi'}(G), H] \cap N_G(H) = 1$.

Пусть теперь $n \neq |H|$. Предположим, что характер $\chi_{HO_{\pi'}(G)}$ приводим. Как и ранее для характера $\hat{\chi}_N$ убеждаемся в том, что $H \ker \psi / \ker \psi \triangleleft HO_{\pi'}(G) / \ker \psi$ для некоторой неприводимой компоненты ψ этого характера. Поскольку $HO_{\pi'}(G) \triangleleft G$, $H / \triangleleft HO_{\pi'}(G)$, $n < 2|H|$, то из теоремы Клиффорда и утверждения (1) доказываемой теоремы вытекает, что $\chi_{HO_{\pi'}(G)} = \psi + \psi^x$ для такого $\psi \in \text{Irr}(HO_{\pi'}(G))$, что $\psi(1) = |H| - 1$ и $x \in G \setminus I_G(\psi)$ или $\chi_{HO_{\pi'}(G)} = 2\psi$. Причем $H \ker \psi / \ker \psi \triangleleft HO_{\pi'}(G) / \ker \psi$.

Пусть $\chi_{HO_{\pi'}(G)} = \psi + \psi^x$, $x \in G \setminus I_G(\psi)$. Тогда $H \ker \psi^x / \ker \psi^x \triangleleft HO_{\pi'}(G) / \ker \psi^x$. По лемме 8 $|O_{\pi'}(G)H : Z(\psi)| = |H| 2^{2\alpha}$ и $|O_{\pi'}(G)H : Z(\psi^x)| = |H| 2^{2\alpha}$ для $\alpha \in N$. Отсюда и из леммы 5 [1] вытекает, что $(O_{\pi'}(G))_{2'} \subseteq Z(\psi) \cap Z(\psi^x) = Z(HO_{\pi'}(G))$.

Поэтому $(O_{\pi'}(G))_{2'} \subseteq C_{O_{\pi'}(G)}(H)$ и, значит,

$$O_{\pi'}(G) = (O_{\pi'}(G))_2 C_{O_{\pi'}(G)}(H). \quad (2)$$

Поэтому нетрудно видеть, что $O_{\pi'}(G) = O_2(O_{\pi'}(G))C_{O_{\pi'}(G)}(H)$. Так как $O_2(O_{\pi'}(G)) \subseteq O_2(G)$ и $C_{O_{\pi'}(G)}(H) \subseteq N_G(H)$, то согласно равенству (1) $G = O_2(G)N_G(H)$. Если же $\chi_{HO_{\pi'}(G)} = 2\psi$, то равенство (2) доказывается еще проще и, следовательно, выполняется утверждение (3) доказываемой теоремы.

Пусть теперь характер $\chi_{HO_{\pi'}(G)}$ неприводим. Значит, неприводим и характер $\phi = \chi_{O_{\pi'}(G)}$. К тому же $\phi \in \text{Irr}_H(O_{\pi'}(G))$. Положим $\Gamma = HO_{\pi'}(G)$, $C = C_{O_{\pi'}(G)}(H)$. В силу леммы 6 [1] $C = C_{O_{\pi'}(G)}(h)$ для любого неединичного элемента $h \in H$. Таким образом, для группы Γ , ϕ и n выполняется условие В, сформулированное в начале сообщения; при этом группы H и $O_{\pi'}(G)$ играют роли подгрупп A и G соответственно из условия В. Из утверждения (1) теоремы 2 вытекает, что $O_{\pi'}(G) = O_q(O_{\pi'}(G))C_{O_{\pi'}(G)}(H)$. Поэтому справедливо утверждение (3) доказываемой теоремы.

Докажем, наконец, что выполняется утверждение (4) теоремы. Пусть группа G не разрешима. Тогда ввиду утверждения (2) теоремы не разрешима и подгруппа $O_{\pi',\pi}(G)$. Так как $H/\triangleleft G$, то и $H/\triangleleft O_{\pi',\pi}(G)$. Поскольку $O_{\pi',\pi}(G)\triangleleft G$ и $n < 2|H|$, то из теоремы Клиффорда, утверждения (1) теоремы и теоремы 2 [10] вытекает, что либо характер $\chi_{O_{\pi',\pi}(G)}$ неприводим, либо $n = 2(|H| - 1)$ и $\chi_{O_{\pi',\pi}(G)} = \psi + \psi^x$ для такого $\psi \in \text{Irr}(O_{\pi',\pi}(G))$, что $\psi(1) = |H| - 1$ и $x \in G \setminus I_G(\psi)$ или же $\chi_{O_{\pi',\pi}(G)} = 2\psi$. Пусть характер $\chi_{O_{\pi',\pi}(G)}$ не является неприводимым. Поскольку $(O_{\pi'}(G))_{2'} \subseteq Z(HO_{\pi'}(G))$, что установлено ранее, то в этом случае подгруппа $O_{\pi',\pi}(G)$ разрешима. Это противоречит предположению. Из утверждения (2) и доказательства утверждения (3) теоремы следует, что группа G разрешима и при $n = |H|$.

Пусть характер $\chi_{O_{\pi',\pi}(G)}$ неприводим и $n \neq |H|$. Значит, неприводим и характер $\phi = \chi_{O_{\pi'}(G)}$. К тому же $\phi \in \text{Irr}_H(O_{\pi'}(G))$. Положим $\Gamma = HO_{\pi'}(G)$, $C = C_{O_{\pi'}(G)}(H)$. В силу леммы 6 [1] $C = C_{O_{\pi'}(G)}(h)$ для любого неединичного элемента $h \in H$. Таким образом, для группы Γ , ϕ и n выполняется условие В, сформулированное в начале сообщения; при этом группы H и $O_{\pi'}(G)$ играют роли подгрупп A и G соответственно из условия В. Из утверждения (2) теоремы 2 вытекает, что $n = 2(|A| - 1)$ и $C/Z(G) \cong \text{PSL}(2, 5)$. Поэтому $C_{O_{\pi'}(G)}(H)/Z(HO_{\pi'}(G)) \cong \text{PSL}(2, 5)$.

С другой стороны, $C_G(H) = Z(H)(C_G(H))_{\pi'} \triangleleft N_G(H)$. Поэтому $(C_G(H))_{\pi'} \triangleleft N_G(H)$. Следовательно, $X = (C_G(H))_{\pi'} O_{\pi'}(G)$ – подгруппа G , нормализатор которой содержит $N_G(H)$. Из равенства (1) следует, что X нормальна в G . Но X – π' -группа. Стало быть, $X \subseteq O_{\pi'}(G)$ и поэтому $(C_G(H))_{\pi'} \subseteq O_{\pi'}(G)$. Очевидно также, что $C_{O_{\pi'}(G)}(H) \subseteq (C_G(H))_{\pi'}$. Поэтому $C_{O_{\pi'}(G)}(H) = (C_G(H))_{\pi'}$. Следовательно, $(C_G(H))_{\pi'}/Z(HO_{\pi'}(G)) \cong \text{PSL}(2, 5)$. Поскольку характер $\chi_{O_{\pi',\pi}(G)}$ неприводим и точен, то $Z(HO_{\pi'}(G)) = Z(O_{\pi',\pi}(G)) \subseteq Z(G)$. Понятно, что $Z(G) = Z(HO_{\pi'}(G))$. Теорема доказана.

Автор глубоко признателен И. Д. Супруненко за проявленное внимание к работе.

Литература

1. Ядченко А. А. // Тр. Ин-та математики НАН Беларуси. 2008. Т. 16, № 2. С. 118–130.
2. Ядченко А. А. // Тр. Ин-та математики НАН Беларуси. 2009. Т. 17, № 2. С. 94–104.
3. Ядченко А. А. // Тр. Ин-та математики НАН Беларуси. 2010. Т. 18, № 2. С. 99–114.
4. Isaacs I. M. // J. Algebra. 1973. Vol. 24, N 3. P. 513–530.
5. Романовский А. В., Ядченко А. А. // Матем. сб. 1988. Т. 137(179), № 4(12). С. 568–573.
6. Gorenstein D. Finite groups. New York, 1968.
7. Isaacs I. M. Character theory of finite groups. New York, 1976.
8. Glauberman G. // Canad. J. Math. 1968. Vol. 20. P. 1465–1488.
9. Бобр В. В. // Матем. заметки. 2003. Т. 73. В. 4. С. 494–501.
10. Ядченко А. А. // Арифметическое и подгрупповое строение конечных групп. Минск, 1986. С. 181–207.
11. Чунихин С. А. Подгруппы конечных групп. Минск, 1964.
12. Ядченко А. А., Заяц П. И. // Докл. НАН Беларуси. 2010. Т. 54, № 4. С. 28–35.
13. Старостин А. И. // Укр. матем. журн. 1971. Т. 23, № 3. С. 629–639.
14. Ядченко А. А. // Матем. заметки. 1991. Т. 50. В. 3. С. 143–151.

A. A. YADCHENKO

yadchenko56@mail.ru

ON FACTORIZATIONS OF π -SOLVABLE IRREDUCIBLE LINEAR GROUPS

Summary

For finite π -solvable absolutely irreducible linear groups of degree $n < 2|H|$ over a field of zero characteristic with a π -Hall TI -subgroup H of a nonprimary odd order that is not normal, the existence of certain factorizations is proved.

УДК 519.6+517.983.54

П. П. ЗАБРЕЙКО¹, О. В. МАТЫСИК²**ТЕОРЕМА М. А. КРАСНОСЕЛЬСКОГО И НЕКОРРЕКТНЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ ЗАДАЧИ С САМОСОПРЯЖЕННЫМ ОПЕРАТОРОМ***(Представлено членом-корреспондентом Л. А. Яновичем)*¹Белорусский государственный университет, Минск²Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина

Поступило 04.08.2014

Метод последовательных приближений – один из основных методов приближенного решения линейных операторных уравнений второго рода $x = Bx + f$ в гильбертовом и банаховом пространствах. Основные теоремы о сходимости этого метода, скорости сходимости, оценках погрешности и т. д. сводятся к исследованию свойств ряда Неймана $\sum_{n=0}^{\infty} B^n$ для соответствующего оператора B и изложены во многих учебниках, монографиях и статьях, из которых отметим здесь [1; 2]. При этом основная часть этих результатов относится к так называемому некритическому случаю, когда спектральный радиус $\rho(B)$ этого линейного оператора строго меньше 1 – это условие необходимо и достаточно для сходимости ряда Неймана в пространстве операторов. Однако позднее обнаружилось, что ряд Неймана может сходиться (но уже не по норме операторов, а только сильно) и в случаях, когда спектральный радиус $\rho(B)$ соответствующего оператора равен 1. Одним из первых результатов в этом направлении был получен М. А. Красносельским [3] (см. также [2]), которым было показано, что для уравнения $x = Bx + f$ с самосопряженным оператором B в гильбертовом пространстве при условии $\|B\| \leq 1$ и дополнительном предположении, что -1 не является собственным значением B , последовательные приближения сходятся к одному из решений рассматриваемого уравнения, если только это уравнение разрешимо. Естественно, при $\|B\| < 1$ утверждение теоремы М. А. Красносельского тривиально. Однако при $\|B\| = 1$ эта теорема не является тривиальной, так как в этом случае $\rho(B) = 1$ и уравнение $x = Bx + f$ относится к классу некорректных (ill-posed). Теория последних развивалась независимо и изложена с разных точек зрения и с разной степенью подробности в монографиях [4–12].

Цель сообщения – показать, как упомянутая выше теорема М. А. Красносельского о сходимости последовательных приближений для уравнений с самосопряженными операторами с некоторыми естественными дополнениями содержит в себе основные результаты об итерационных методах приближенного решения некорректных линейных задач в гильбертовом пространстве.

Пусть X – гильбертово пространство. Нам удобно сформулировать теорему М. А. Красносельского в следующем виде

Т е о р е м а 1. Пусть B – самосопряженный оператор с $\|B\| \leq 1$ в гильбертовом пространстве X , не имеющий -1 собственным значением. Пусть уравнение

$$x = Bx + f, \quad (1)$$

разрешимо. Тогда последовательные приближения

$$x_{n+1} = Bx_n + f \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2)$$

при любом начальном условии $x_0 \in X$ сходятся к одному из решений уравнения (1). Более точно, приближения (2) сходятся к решению x_* уравнения (1), для которого $Px_* = Px_0$, где P – ортопроектор на множество собственных векторов оператора B , отвечающих собственному значению 1.

Приведем простую схему доказательства этой теоремы (ср. [2; 3]). Из (1) и (2) очевидным образом вытекают равенства

$$\begin{aligned}x_n &= B^n x_0 + (I + B + \dots + B^{n-1})f \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \\x_* &= B^n x_* + (I + B + \dots + B^{n-1})f \quad (n = 0, 1, 2, \dots),\end{aligned}\tag{3}$$

откуда

$$x_n - x_* = B^n(x_0 - x_*),$$

и далее, в силу теорем о спектральном разложении самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве (см., напр., [1; 13])

$$\|x_n - x_*\|^2 = \int_{SpB} |\lambda|^{2n} (dE_\lambda(x_0 - x_*), x_0 - x_*),\tag{4}$$

где E_λ – спектральная мера для оператора B . Последовательность $|\lambda|^{2n}$ сходится к нулю всюду на $(-1, 1) \cap SpB$. Точка -1 (если она входит в SpB) в условиях теоремы 1 имеет нулевую спектральную меру. Точка 1 (опять-таки, если она входит в SpB) может иметь положительную меру, однако лишь в случае, когда $Px_* \neq Px_0$. Тем самым утверждение теоремы 1 следует из теоремы Лебега о предельном переходе под знаком интеграла.

В качестве примера здесь можно рассмотреть в пространстве $X = L_2(\Omega)$, где Ω – некоторое замкнутое множество отрезка $[-1, 1]$ с $1 \in \Omega$ (или $-1 \in \Omega$), уравнение

$$x(t) = tx(t) + f(t).$$

Это уравнение разрешимо в X , если и только если $(1-t)^{-1}f(t) \in L_2(\Omega)$. Последовательные приближения (2) в этом случае имеют вид

$$x_{n+1}(t) = tx_n(t) + f(t)$$

или, что то же самое,

$$x_n(t) = t^n x_0(t) + (1 + t + t^2 + \dots + t^{n-1})f(t).$$

Они сходятся в X (при любом $x_0(t) \in L_2(\Omega)$) к функции $(1-t)^{-1}f(t)$, которая по предположению о разрешимости уравнения принадлежит $L_2(\Omega)$. Уравнение в этом примере не является корректным. Аналогичная ситуация имеет место и в случае, если $X = L_2(\Omega, \sigma)$, где σ – некоторая мера на Ω , причем $\sigma(\{-1\}) = 0$. Пример этот носит достаточно общий характер; известно, что каждый самосопряженный оператор с простым спектром подобен оператору умножения на независимую переменную в пространстве $L_2(\Omega, \sigma)$ при подходящем выборе меры σ .

Рассмотрим теперь вопрос о поведении невязок $x_n - Bx_n - f$ для приближений (2). Так как

$$x_n - Bx_n - f = x_n - x_{n+1},$$

то из (3)

$$x_n - Bx_n - f = B^n((I - B)x_0 - f).$$

Из этого равенства вытекает, что

$$\|x_n - Bx_n - f\| = \|B^n((I - B)x_0 - f)\| \leq \|B^n(I - B)x_0\| + \|B^n f\|.$$

Снова из спектральной теоремы для самосопряженных операторов вытекает неравенство

$$\|x_n - Bx_n - f\|^2 \leq \int_{SpB} |\lambda|^{2n} |1 - \lambda|^2 (dE_\lambda x_0, x_0) + \int_{SpB} |\lambda|^{2n} (dE_\lambda f, f).\tag{5}$$

К этому неравенству снова можно применить теоремы Лебега о предельном переходе. В результате получаем следующее утверждение.

Теорема 2. Пусть B – самосопряженный оператор с $\|B\| \leq 1$ в гильбертовом пространстве X , не имеющий -1 собственным значением. Пусть $Pf = 0$, где P – ортопроектор на множество собственных векторов оператора B , отвечающих собственному значению 1 . Тогда невязки $x_n - Bx_n - f$ для последовательных приближений (2) при любом начальном условии $x_0 \in X$ сходятся к нулю.

Отметим, что условие $Pf = 0$ в этой теореме необходимо, но в общем случае не достаточно для разрешимости уравнения (1). Таким образом, невязки для последовательных приближений могут сходиться к нулю и в том случае, когда исходное уравнение вообще не имеет решений.

Наиболее важными вопросами в теории итерационных методов являются вопросы о скорости сходимости, о наличии свойства устойчивости метода, в частности, свойства сохранения сходимости последовательных приближений к точному решению, а невязок к нулю при малых возмущениях правых частей или при ошибках при проведении вычислений. Эти свойства достаточно хорошо изучены (см., напр., [8; 11; 12]) в некритическом случае, когда $\rho(B) < 1$. Однако в интересующем нас критическом случае, когда $\|B\| = \rho(B) = 1$, ситуация оказывается совершенно иной.

Из теоремы Банаха–Штейнгауза [1] легко можно вывести, что равномерная на любом шаре $\|f\| \leq r$ или на любом шаре $\|x_0\| \leq r$ сходимостью итераций (2) влечет за собой неравенство $\rho(B) < 1$. В рассмотренном выше модельном примере видно, что эта скорость неравномерна ни на каком шаре $\|f\| \leq r$, а определяется тем, насколько быстро стремится в бесконечность f при стремлении t к 1 .

Как показывают простые примеры (и равенства (4), (5)), скорость сходимости последовательных приближений к точному решению и невязок к нулю существенно зависит от правой части f уравнения (1). Оценить эти скорости сходимости можно более точно для функций f из некоторых (обычно незамкнутых!) подпространств \tilde{X} пространства X . Среди таких подпространств наиболее простыми являются подпространства истокообразно представимых функций. Эти подпространства определяются при помощи некоторой определенной на SpB оператора B функции $\theta(\lambda)$ равенством $X(\theta) = \theta(B)X$ элементов вида

$$\tilde{h} = \int_{SpB} \theta(\lambda) dE_\lambda h \quad (h \in X).$$

Формула (4) при $x_0 - x_* \in X(\theta)$ переписывается в виде

$$\|x_n - x_*\|^2 = \int_{SpB} |\lambda|^{2n} |\theta(\lambda)|^2 (dE_\lambda h, h).$$

Из нее в силу спектральной теоремы для самосопряженных операторов следует неравенство

$$\|x_n - x_*\| \leq \gamma_n \|h\| \quad (x_0 - x_* = \theta(B)h, \quad h \in X), \quad (6)$$

где

$$\gamma_n = \max_{\lambda \in SpB} |\lambda|^n |\theta(\lambda)|. \quad (7)$$

Если $\gamma_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, то (6) дает квалифицированную оценку скорости сходимости приближений (2) к решению уравнения (1) сразу для всех функций x_0 и f , для которых $x_0 - x_* \in X(\theta)$ ($x_* - Bx_* = f$). Последнее условие трудно проверяемо, так как x_* неизвестно. Однако оно выполняется, если $f \in X(\tilde{\theta})$, где функции θ и $\tilde{\theta}$ связаны равенством $\theta(\lambda) = (1 - \lambda)\tilde{\theta}(\lambda)$. В результате вместо (6) мы имеем оценку

$$\|x_n - x_*\| \leq \tilde{\gamma}_n \|h\| \quad (x_0 - Bx_0 - f = \tilde{\theta}(B)h, \quad h \in X), \quad (8)$$

где

$$\tilde{\gamma}_n = \max_{\lambda \in SpB} |\lambda|^n |\tilde{\theta}(\lambda)|.$$

Аналогично, формула (5) при $(I - B)x_0 - f \in X(\theta)$ приводит к оценке

$$\|x_n - Bx_n - f\| \leq \gamma_n \|h\| (x_0 - Bx_0 - f = \theta(B)h, h \in X), \quad (9)$$

где последовательность γ_n снова определяется равенством (7).

Справедлива

Т е о р е м а 3. Пусть B – самосопряженный оператор с $\|B\| \leq 1$ в гильбертовом пространстве X , не имеющий -1 собственным значением. Тогда:

а) если θ – определенная на спектре SpB функция с $\theta(-1) = \theta(1) = 0$, то $\gamma_n \rightarrow 0$ и, следовательно, при $x_0 - x_* \in \theta(B)h$ скорость сходимости приближений (2) к соответствующему решению x_* уравнения (1) оценивается неравенством (6);

б) если θ – определенная на спектре SpB функция с $\theta(1) = 0$, представимая в виде $\theta(\lambda) = (1 - \lambda)\tilde{\theta}(\lambda)$ с $\tilde{\theta}(1) = 0$, то $\tilde{\gamma}_n \rightarrow 0$ и, следовательно, при $x_0 - Bx_0 - f = \tilde{\theta}(B)h$ скорость сходимости приближений (2) к соответствующему решению x_* уравнения (1) оценивается неравенством (8);

в) если θ – определенная на спектре SpB функция с $\theta(-1) = \theta(1) = 0$, то $\gamma_n \rightarrow 0$ и, следовательно, при $x_0 - Bx_0 - f = \theta(B)h$ скорость сходимости невязок для приближений (2) к нулю оценивается неравенством (9).

Достаточно показать, что $\gamma_n \rightarrow 0$ и $\tilde{\gamma}_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Пусть задано $\varepsilon > 0$. Тогда существует такое $\delta > 0$, что $|\theta(\lambda)| < \varepsilon$ при $1 - \delta < |\lambda| \leq 1$. На множестве $M = SpB \setminus ((-1, -1 + \delta) \cup (1 - \delta, 1))$ выполняется неравенство $|\lambda| < 1 - \delta$. Поэтому при $\lambda \in M$ справедливо неравенство $|\lambda|^n \leq (1 - \delta)^n$ и, значит, $|\lambda|^n < \varepsilon$ при $n > \frac{\ln \varepsilon}{\ln(1 - \delta)}$. Но при $\lambda \in SpB \cap ((-1, -1 + \delta) \cup (1 - \delta, 1))$ также справедливо неравенство $|\lambda|^n |1 - \lambda| < \varepsilon$ и, значит, это неравенство верно при всех $\lambda \in SpB$. Так как ε произвольно, а n не зависит от λ , то $\gamma_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Соотношение $\tilde{\gamma}_n \rightarrow 0$ доказывается аналогично.

Отметим, что условия теоремы 3 содержат начальное приближение x_0 . Если, как это обычно желается $x_0 = 0$, то условия теоремы 3 сводятся к предположениям о самом решении x_* или о заданном элементе f . Последнее справедливо и в том случае, когда x_0 берется ненулевым, но «достаточно хорошим» ($x_0 \in \theta(B)X, x_0 - Bx_0 \in \theta(B)X$).

Наконец, отметим также, что по существу утверждения а) и в) теоремы 3 означают сходимость к нулю по норме соответственно последовательностей операторов $B^n \theta(B)$, а утверждение б) – сходимость к нулю последовательности операторов $B^n T \theta(B)$, где T – квазиобратный (возможно, неограниченный) оператор для оператора $(I - B)$ (т. е. $(I - B)T(I - B) = I - B$).

Пусть теперь снова для самосопряженного оператора B выполнены условия теоремы 1, причем $\|B\| = 1$ и, следовательно, $\rho(B) = 1$. Пусть уравнение (1) разрешимо. В этом случае последовательные приближения (2) сходятся к одному из решений x_* уравнения (1). Рассмотрим теперь вместо точных приближений (2) приближения для случая, когда правая часть уравнения (1) задана приближенно или когда при вычислениях этих приближений на каждом шаге делается ошибка. В первом случае эти новые приближения x'_n записываются в виде

$$x'_{n+1} = Bx'_n + \tilde{f} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (10)$$

с приближенной правой частью \tilde{f} , причем $\|\tilde{f} - f\| \leq \delta$, где δ – некоторое малое положительное число. Во втором случае новые приближения x''_n записываются в виде

$$x''_{n+1} = Bx''_n + f_n \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (11)$$

в предположении, что $\|f_n - f\| \leq \delta$, где δ – снова некоторое малое положительное число. В первом случае из равенства (10) немедленно вытекает

$$x'_n = B^n x_0 + B^{n-1} \tilde{f} + \dots + B \tilde{f} + \tilde{f},$$

откуда, в силу (3),

$$x'_n = x_n + B^{n-1}(\tilde{f} - f) + \dots + B(\tilde{f} - f) + (\tilde{f} - f). \quad (12)$$

Во втором случае из (11) немедленно следует, что

$$x''_n = B^n x_0 + B^{n-1} f_1 + \dots + B f_{n-2} + f_{n-1},$$

откуда, снова в силу (3),

$$x_n'' = x_n + B^{n-1}(f_1 - f) + \dots + B(f_{n-2} - f) + (f_{n-1} - f). \quad (13)$$

Из (12) и (13) следует

$$\|x_n' - x_n\| \leq \|B^{n-1}\|\|\tilde{f} - f\| + \dots + \|B\|\|\tilde{f} - f\| + \|\tilde{f} - f\| \leq n\delta,$$

$$\|x_n'' - x_n\| \leq \|B^{n-1}\|\|f_1 - f\| + \dots + \|B\|\|f_{n-2} - f\| + \|f_{n-1} - f\| \leq n\delta,$$

и, таким образом,

$$\|x_n' - x_*\| \leq \|x_n' - x_n\| + \|x_n - x_*\| \leq \|x_n - x_*\| + n\delta, \quad (14)$$

$$\|x_n'' - x_*\| \leq \|x_n'' - x_n\| + \|x_n - x_*\| \leq \|x_n - x_*\| + n\delta, \quad (15)$$

где x_* – точное решение уравнения (1).

Из неравенств (14), (15) сходимость x_n' и x_n'' к x_* или даже близость приближений x_n' и x_n'' к x_* не вытекает! Действительно, правая часть этих неравенств при $n \rightarrow \infty$ стремится к бесконечности.

Однако, как оказывается, приведенные выше оценки позволяют указывать приближения x_n' и x_n'' достаточно близкие (и даже, если брать сколь угодно малые δ сколь угодно близкие!) к точному решению x_* уравнения $x = Bx + f$.

В самом деле, как показано выше, при каждом x_0 приближения x_n сходятся к x_* . Иными словами, справедливы неравенства

$$\|x_n - x_*\| \leq \mu(n),$$

где $\mu(\cdot)$ – зависящая от x_0 и x_* (и, следовательно, от x_0 и f) функция, для которой

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu(n) = 0.$$

При этом без ограничения общности можно считать, что $\mu(\cdot)$ строго убывает и, значит, имеет обратную $\mu^{-1}(\cdot)$. Неравенства (14) и (15) могут быть переписаны в виде

$$\|x_n' - x_*\| \leq \mu(n) + n\delta \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (16)$$

$$\|x_n'' - x_*\| \leq \mu(n) + n\delta \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (17)$$

Пусть задано $\varepsilon > 0$. Рассмотрим неравенство

$$\mu(n) + n\delta < \varepsilon. \quad (18)$$

Выберем произвольное $\varepsilon' < \varepsilon$; тогда при

$$n > \mu^{-1}(\varepsilon')$$

справедливо неравенство $\mu(n) < \varepsilon'$ и для выполнения неравенства (18) достаточно, чтобы выполнялось неравенство

$$n < \frac{\varepsilon - \varepsilon'}{\delta}. \quad (19)$$

Неравенства (18) и (19) совместны, если

$$\delta \mu^{-1}(\varepsilon') < \varepsilon - \varepsilon'. \quad (20)$$

Последнего вида можно добиться за счет малости δ . Итак, если (20) верно, то из (14), (15) вытекает, что при всех n , для которых

$$\mu^{-1}(\varepsilon') < n < \frac{\varepsilon - \varepsilon'}{\delta}$$

справедливо неравенство $\|\tilde{x}_n - x_*\| < \varepsilon$, где $\tilde{x}_n = x_n'$ для случая (10) и $\tilde{x}_n = x_n''$ для случая (11). Иными словами,

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\inf_{v \leq n < \infty} \|\tilde{x}_n - x_*\| \right) = 0.$$

Последнее соотношение обычно считается эквивалентным сходимости итерационных методов в случае некорректных задач. Отметим, что рассматриваемая в этом разделе задача является примером такой некорректной задачи.

Отметим, что при уменьшении ε промежуток $\left[\mu^{-1}(\varepsilon'), \frac{\varepsilon - \varepsilon'}{\delta} \right)$, на котором итерационная процедура (2) приводит к более точным приближениям, вообще говоря, сдвигается вправо, а при $\varepsilon \rightarrow 0$ «убегает» в бесконечность. Однако здесь существует важное исключение. Именно, если в качестве приближения x_0 взять само решение x_* , то в неравенствах (16) и (17) можно взять как-нибудь бы наилучшую функцию: $\mu(0) = 0$. Тогда неравенства (16) и (17) обращаются в неравенство $n\delta < \varepsilon$ и рассуждения, приведенные выше, вырождаются. Более того, теперь из неравенств (16) и (17) можно сделать лишь вывод, что n должно быть ограничено сверху, а наилучшая оценка погрешности верна при $n = 1$. Иными словами, теперь (16) и (17) влекут за собой «странный» на первый взгляд вывод, что итерационные процедуры (10) и (11) бессмысленны. Однако этот вывод правильный – если начальное приближение совпадает с точным решением x_* , то уточнять это приближение какими-либо итерационными процедурами бессмысленно.

В связи с последним замечанием удобнее считать, что величина δ не постоянная; в этом случае сходимость итерационного метода для некорректной задачи, как нетрудно видеть, означает справедливость соотношения

$$\lim_{n \rightarrow \infty, n\delta_n \rightarrow 0} \|\tilde{x}_n - x_*\| = 0. \quad (21)$$

Из приведенных рассуждений вытекает

Т е о р е м а 4. Пусть выполнены условия теоремы 1 и пусть либо правая часть уравнения (1) задана с ошибкой $\delta > 0$, либо приближения (1) вычисляются с ошибками, не превышающими $\delta > 0$. Тогда соответственно приближения (10) в первом случае и (11) во втором сходятся в описанном выше смысле к соответствующему решению x_* уравнения (1) (т. е. справедливо соотношение (21)).

Литература

1. Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ. СПб., 2004.
2. Красносельский М. А., Вайникко Г. М., Забрейко П. П. и др. Приближённое решение операторных уравнений. М., 1969.
3. Красносельский М. А. // Успехи математических наук. 1961. Т. 15, вып. 3.
4. Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П. Теория линейных некорректных задач и её приложения. М., 1978.
5. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М., 1979.
6. Лаврентьев М. М. О некоторых некорректных задачах математической физики. Новосибирск, 1962.
7. Вайникко Г. М., Веретенников А. Ю. Итерационные процедуры в некорректных задачах. М., 1986.
8. Бакушинский А. Б., Гончарский А. В. Итеративные методы решения некорректных задач. М., 1989.
9. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. М., 2004.
10. Gilyazov S. F., Gol'dman N. L. Regularization of ill-posed problems by iteration methods. Dordrecht ets., 2000.
11. Савчук В. Ф., Матысик О. В. Регуляризация операторных уравнений в гильбертовом пространстве. Брест, 2008.
12. Матысик О. В. Явные и неявные итерационные процедуры решения некорректно поставленных задач. Брест, 2014.
13. Данфорд Н., Шварц Д. Линейные операторы. Спектральная теория. М., 1966.

P. P. ZABREIKO, O. V. MATYSIK

zabreiko@mail.ru, matysikoleg@mail.ru

THEOREM M. A. KRASNOSELSKI AND ILL-POSED LINEAR PROBLEMS WITH SELF-ADJOINT OPERATORS

Summary

The article shows how theorem M. A. Krasnoselski on the convergence of successive approximations for equations with self-adjoint operators with some natural assumptions contains the main results of the iteration methods for the approximate solution of linear ill-posed problems in Hilbert space.

УДК 519.63

П. П. МАТУС¹, В. Т. К. ТУЕН², Ф. Ж. ГАСПАР³

МОНОТОННЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ ЛИНЕЙНОГО ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ СМЕШАННОГО ТИПА

(Представлено академиком И. В. Гайшуном)

¹Институт математики НАН Беларуси, Минск

²Белорусский государственный университет, Минск

³Университет Сарагосы, Испания

Поступило 01.10.2014

Введение. Монотонные разностные схемы играют важную роль при математическом моделировании прикладных задач, так как они позволяют получить численное решение без нефизических осцилляций. Для линейных задач под монотонностью понимаются схемы с положительными коэффициентами или схемы, удовлетворяющие сеточному принципу максимума [1]. При этом важно сохранить второй порядок аппроксимации по пространственной переменной. При построении вычислительных алгоритмов для параболических уравнений с краевыми условиями второго и третьего рода обычно используется аппроксимация уравнения на границе области. Однако монотонность таких алгоритмов в научной литературе не установлена. Более часто используются фиктивные узлы $x_0 = -\frac{h}{2}$, $x_{N+1} = l + \frac{h}{2}$. В случае краевых условий третьего рода монотонные схемы для параболических уравнений исследованы в [7].

В настоящей работе для параболических уравнений со смешанными условиями первого и второго рода строятся схемы, которые являются монотонными. Кроме того, для них устанавливается важное следствие принципа максимума, на основании которого можно сделать вывод об устойчивости алгоритма в равномерной норме. В основе конструкции лежит идея использования полуцелых узлов в граничных точках задания краевых условий второго или третьего рода.

Полученные результаты обобщаются для построения аналогичных алгоритмов для уравнений пороупругости в одномерном случае.

Монотонные разностные схемы для линейного параболического уравнения с граничными условиями смешанного типа. В области $\bar{Q}_T = \bar{\Omega} \times [0, T]$, $\bar{\Omega} = \{x : 0 \leq x \leq l\}$, $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$, $\partial\Omega = \{x = 0, x = l\}$ для линейного неоднородного параболического уравнения рассмотрим начально-краевую задачу со смешанными граничными условиями следующего типа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), \quad x \in \Omega, \quad t \in (0, T], \tag{1}$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \bar{\Omega}, \tag{2}$$

$$u(0, t) = \mu_1(t), \quad \frac{\partial u}{\partial x}(l, t) = 0, \quad t \in (0, T]. \tag{3}$$

Для построения монотонных алгоритмов поток $\frac{\partial u}{\partial x}$ естественно относить к полуцелым узлам по пространству, а приближенное решение будем вычислять как обычно в целых узлах. Для заданных граничных условий это приводит к необходимости введения следующей равномерной пространственно-временной сетки $\bar{\omega}_{h\tau} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau$:

$$\bar{\omega}_h = \left\{ x_i = ih, \quad i = \overline{0, N+1}, \quad h = \frac{l}{N+1/2}, \quad x_{N+1/2} = l \right\},$$

$$\bar{\omega}_\tau = \left\{ t_n = n\tau, \quad n = \overline{0, N_0}, \quad \tau N_0 = T \right\}.$$

Предполагается, что решение задачи (1)–(3) может быть непрерывным образом продолжено в область $\tilde{Q}_T = \tilde{\Omega} \times [0, T]$, $\tilde{\Omega} = \left\{ x: 0 \leq x \leq l + \frac{h}{2} \right\}$.

На сетке $\bar{\omega}_{h\tau}$ исходную дифференциальную задачу аппроксимируем чисто неявной разностной схемой:

$$y_{t,i} = \hat{y}_{\bar{x}\bar{x},i} + \hat{f}_i, \quad i = \overline{1, N}, \quad (4)$$

$$y_i^0 = u_0(x_i), \quad i = \overline{0, N+1}, \quad (5)$$

$$y_0^{n+1} = \mu_1^{n+1}, \quad y_{\bar{x}, N+1}^{n+1} = 0. \quad (6)$$

Нетрудно показать, что схема (4)–(6) аппроксимирует дифференциальную задачу с порядком $O(h^2 + \tau)$ во всех узлах сетки, включая и граничную точку $x_{N+1/2} = l$:

$$\Psi_{N+1}^{n+1} = u_{\bar{x}, N+1}^{n+1} - \frac{\partial u}{\partial x}(x_{N+1/2}, t_{n+1}) = O(h^2).$$

В дальнейшем исключим фиктивную точку x_{N+1} из рассмотрения при помощи разностного уравнения (4) при $i = N$ и второго граничного условия (6). Для доказательства монотонности схемы и получения двусторонних оценок запишем ее в каноническом виде [1]:

$$A_i y_{i-1}^{n+1} - C_i y_i^{n+1} + B_i y_{i+1}^{n+1} = -F_i^n \quad i = \overline{1, N-1}, \quad (7)$$

$$y_0^{n+1} = \mu_1^{n+1}, \quad C_N y_N^{n+1} = A_N y_{N-1}^{n+1} + F_N^{n+1}. \quad (8)$$

Здесь

$$A_i = B_i = \frac{\tau}{h^2} > 0, \quad D_i = C_i - A_i - B_i = 1, \quad F_i^n = y_i^n + \tau f_i^{n+1}, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad (9)$$

$$A_N = \frac{\tau}{h^2}, \quad C_N = 1 + A_N, \quad F_N^n = y_N^n + \tau f_N^{n+1}. \quad (10)$$

Так как выполнены все условия положительности коэффициентов (9), (10), то разностная схема (7), (8) является монотонной. Замечательным свойством данного вычислительного алгоритма является выполнение равенства $D_N = C_N - A_N = 1$, с помощью которого на основании использования стандартной техники принципа максимума [1; 3] устанавливается оценка устойчивости решения в равномерной норме

$$\max_{t \in \bar{\omega}_\tau} \|y(t)\|_{\bar{C}} \leq \max \left\{ \max_{t \in \bar{\omega}_\tau} \{ \mu_1(t), \|u_0\|_{\bar{C}} \} + T \max_{t \in \bar{\omega}_\tau} \|f(t)\|_{\bar{C}} \right\},$$

где как обычно $\|y\|_C = \max_{1 \leq i \leq N-1} |y_i|$, $\|y\|_{\bar{C}} = \max_{0 \leq i \leq N} |y_i|$.

Для изучения скорости сходимости разностного решения рассмотрим задачу для погрешности z , которая получается из системы уравнений (4)–(6) после подстановки $y = z + u$:

$$z_{t,i} = \hat{z}_{\bar{x}\bar{x},i} + \hat{\psi}_i, \quad i = \overline{1, N}, \quad (11)$$

$$z_i^0 = 0, \quad i = \overline{0, N}, \quad z_0^{n+1} = 0, \quad z_{\bar{x}, N+1}^{n+1} = \psi_{N+1}^{n+1}, \quad (12)$$

где

$$\psi_i^{n+1} = -u_{t,i} + u_{\bar{x}\bar{x},i}^{n+1} + f_i^{n+1} = O(h^2 + \tau).$$

Используя теперь стандартную технику метода энергетических неравенств для решения задачи (11), (12) в предположения достаточной гладкости исходного решения получим оценку для погрешности метода в сеточном аналоге соболевской нормы L_2 :

$$\max_n \|z^n\| \leq c(h^2 + \tau), \quad c = \text{const} > 0, \quad \|z\|^2 = \sum_{i=1}^N h z_i^2,$$

которая гарантирует сходимость со вторым порядком по пространственной переменной.

Двусторонняя оценка. Для получения аналогичных результатов для квазилинейных параболических уравнений, а также для уравнений пороупругости, нам понадобится следующая важная лемма о свойствах разностного решения, обобщающая принцип максимума.

Л е м м а 1. Для решения разностной схемы (7), (8) имеет место двусторонняя оценка вида:

$$m_1 \leq y_i^n \leq m_2, \quad i = \overline{0, N}, \quad n = \overline{0, N_0},$$

где

$$m_1 = \min \left\{ \min_{0 \leq n \leq N_0-1} \mu_1^{n+1}, \min_{0 \leq i \leq N} u_{0,i} \right\} + \min_{0 \leq n \leq N_0-1} \sum_{k=0}^n \tau \min_{1 \leq i \leq N} f_i^{k+1},$$

$$m_2 = \max \left\{ \max_{0 \leq n \leq N_0-1} \mu_1^{n+1}, \max_{0 \leq i \leq N} u_{0,i} \right\} + \max_{0 \leq n \leq N_0-1} \sum_{k=0}^n \tau \max_{1 \leq i \leq N} f_i^{k+1}.$$

Доказательство леммы проводится в соответствии с математическим аппаратом, предложенным в [4].

Монотонные алгоритмы для уравнений пороупругости. Рассмотрим следующую математическую модель, описывающую процессы пороупругой среды в одномерном случае [5; 6]:

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial p}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \beta p + \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\kappa}{\eta} \frac{\partial p}{\partial x} \right) = q(x, t),$$

с заданными начальными и смешанными граничными условиями

$$\left(\phi \beta p + \frac{\partial u}{\partial x} \right) (x, 0) = 0, \quad (13)$$

$$p(x, t) = \mu_1(t), \quad (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} (x, t) = -s_0(t), \quad \text{при } x = 0, \quad (14)$$

$$u(x, t) = \mu_2(t), \quad \frac{\partial p}{\partial x} (x, t) = 0, \quad \text{при } x = l,$$

где $u = u(x, t)$ – функция смещения; $p = p(x, t)$ – давление; $\lambda, \mu = \text{const} > 0$ – коэффициенты Ламе; $\kappa, \eta = \text{const} > 0$ – соответственно проницаемость пористой среды и вязкость. Тривиальным следствием системы (13), (14) является следующее уравнение для давления:

$$p(x, t) = (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} (x, t) + \mu_1(t) + s_0(t). \quad (15)$$

Для простоты дальнейших исследований также будем полагать, что ϕ, β – положительные постоянные.

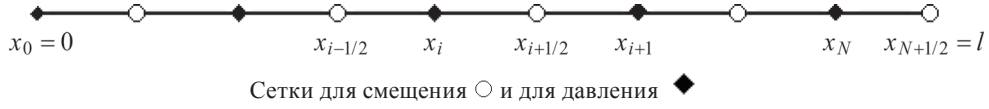
При построении соответствующей монотонной разностной схемы второго порядка аппроксимации в итоге будет использоваться равномерная пространственная сетка с целыми и полуцелыми узлами, лежащими только внутри интервала $[0, l]$:

$$\bar{\omega}_h = \left\{ x_i = ih, \quad i = \overline{0, N}, \quad h = \frac{l}{N+1/2}, \quad x_{i+1/2} = (i+1/2)h, \quad i = \overline{0, N}, \quad x_{N+1/2} = l \right\}.$$

Для нахождения приближенных значений исходных функций будем использовать следующие сеточные функции:

$$\bar{u}_h = u_{i+1/2}^n = u_h(x_{i+1/2}, t), \quad i = \overline{0, N-1}; \quad p_h = p_i^n, \quad i = \overline{0, N}; \quad \bar{u}_{h\bar{x}, i} = \frac{u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n}{h}, \quad i = \overline{1, N};$$

т. е. приближенные значения сеточной функции смещения u_h будем вычислять в полуцелых узлах, а давления p_h – в целых (рисунок).



На сетке $\bar{\omega} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau$ с использованием фиктивного узла $x_{N+1} = l + \frac{h}{2}$ исходную дифференциальную задачу аппроксимируем консервативной разностной схемой вида:

$$\begin{aligned} -\left((\lambda + 2\mu)\widehat{u}_{h\bar{x}}\right)_{x,i} + \widehat{p}_{hx,i} &= 0, \quad i = \overline{1, N-1}, \\ (\phi\beta p_h + \bar{u}_{h\bar{x}})_t - \left(\frac{\kappa}{\eta} p_{h\bar{x}}^{(\sigma)}\right)_{x,i} &= q^{(\sigma)}, \quad i = \overline{1, N}, \\ \phi\beta p_{h,i}^0 + \bar{u}_{h\bar{x},i}^0 &= 0, \quad i = \overline{0, N}, \\ p_{h,0}^{n+1} = \mu_1^{n+1}, \quad (\lambda + 2\mu)\bar{u}_{h\bar{x},i}^{n+1} &= -s_0^{n+1}, \\ \bar{u}_{h,N+1/2}^{n+1} = \mu_2^{n+1}, \quad p_{hx,N}^{n+1} &= 0, \end{aligned}$$

где $q_i^{(\sigma)} = \sigma q_i^{n+1} + (1-\sigma)q_i^n$.

Тривиальным следствием данной системы разностных уравнений является аппроксимация уравнения (15):

$$p_{h,i}^{n+1} = (\lambda + 2\mu)\bar{u}_{h\bar{x},i}^{n+1} + \mu_1^{n+1} + s_0^{n+1}. \quad (16)$$

Данная система разностных уравнений аналогично (7), (8) приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} A_i p_i^{n+1} - C_i p_i^{n+1} + B_i p_{i+1}^{n+1} &= -F_i^n, \quad i = \overline{1, N-1}, \\ p_{h,i}^0 &= c_1(\mu_1^0 + s_0^0), \quad i = \overline{0, N}, \\ p_0^{n+1} = \mu_1^{n+1}, \quad A_N p_N^{n+1} &= C_N p_{N-1}^{n+1} + F_N^n, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} A_i = B_i = \frac{\tau c_4}{h^2}, \quad C_i = 1 + A_i + B_i, \quad F_i^n &= p_i^n + \tau f_i^{n+1}, \quad f_i = c_3(q_i + c_2(\mu_{1t} + s_{0t})), \quad i = \overline{1, N-1}, \\ C_N = 1 + \frac{\tau c_4}{h^2}, \quad A_N = \frac{\tau c_4}{h^2}, \quad F_N^n &= p_N^n + \tau f_N^{n+1}, \quad f_N = c_3(q_N + c_2(\mu_{1t} + s_{0t})), \\ c_1 = \frac{1}{1 + \phi\beta(\lambda + 2\mu)}, \quad c_2 = \frac{1}{\lambda + 2\mu}, \quad c_3 = \frac{1}{\phi\beta + c_2}, \quad c_4 &= c_3 \frac{\kappa}{\eta}. \end{aligned}$$

Решение данной алгебраической системы уравнений находится по методу прогонки. Приближенное значение функции смещения находится из (16) с учетом граничного условия $u_{h,N+1/2}^{n+1} = \mu_2^{n+1}$:

$$u_{h,i-1/2}^{n+1} = \mu_2^{n+1} - c_2 \left(\sum_{k=i}^N h p_{h,k}^{n+1} - (l - x_{i-1/2})(\mu_1^{n+1} + s_0^{n+1}) \right), \quad i = \overline{1, N}. \quad (17)$$

Используя лемму 1 и уравнение (17), можно доказать двусторонние оценки для разностного решения:

$$\begin{aligned} m_1 \leq p_i^{n+1} \leq m_2, \\ \mu_2^{n+1} - c_2(l - x_{i+1/2})(m_2 - \mu_1^{n+1} - s_0^{n+1}) \leq u_{h,i+1/2}^{n+1} \leq \mu_2^{n+1} - c_2(l - x_{i+1/2})(m_1 - \mu_1^{n+1} - s_0^{n+1}), \quad i = \overline{0, N}, \end{aligned} \quad (18)$$

где константы m_1, m_2 определяются через входные данные задачи

$$m_1 = \min \left\{ \min_{0 \leq n \leq N_0-1} \mu_1^{n+1}, c_1(\mu_1^0 + s_0^0) \right\} + \min_{0 \leq n \leq N_0-1} \sum_{k=0}^n \tau \min_{1 \leq i \leq N} f_i^{k+1},$$

$$m_2 = \max \left\{ \max_{0 \leq n \leq N_0-1} \mu_1^{n+1}, c_1(\mu_1^0 + s_0^0) \right\} + \max_{0 \leq n \leq N_0-1} \sum_{k=0}^n \tau \max_{1 \leq i \leq N} f_i^{k+1}.$$

Например, в случае $\lambda + 2\mu = 1$, $\phi\beta = 0$, $\frac{\kappa}{\eta} = 1$, $\mu_1(t) = \mu_2(t) = q(x, t) = 0$, $s_0(t) = 1$, $l = 1$, оценки (18) примут вид

$$0 \leq p_i^{n+1} \leq 1, \quad 0 \leq u_{h,i+1/2}^{n+1} \leq 1 - x_{i+1/2}, \quad i = \overline{0, N}.$$

Литература

1. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
2. Самарский А. А., Вабищевич П. Н., Матус П. П. Разностные схемы с операторными множителями. М.: Наука, 1998.
3. Самарский А. А., Мажукин В. И., Малафеев Д. А., Матус П. П. // ЖВМ и МФ. 2001. Т. 41, № 3.
4. Matus P. // Comput. Methods Appl. Math. 2014. Vol. 14, N 3. P. 361–371.
5. Naumovich A. Efficient numerical methods for the Biot poroelasticity system in multilayered domains: genehmigte Dissertation, 2007.
6. Gaspar F. J., Lisbona F. J., Vabishchevich P. N. // Applied Numerical Mathematics. 2003. Vol. 44. P. 487–506.
7. Matus P., Martsynkevich G. // Comput. Meth. Appl. Math. 2004. Vol. 4, N 3.

P. P. MATUS, VO THI KIM TUYEN, FRANCISCO GASPAR

matus@im.bas-net.by

MONOTONE DIFFERENCE SCHEMES FOR LINEAR PARABOLIC EQUATIONS WITH MIXED BOUNDARY CONDITIONS

Summary

In this paper, for parabolic equations with mixed boundary conditions monotone schemes are constructed. Moreover we establish an important corollary of the maximum principle for them. On the basis of this corollary one can make a conclusion about the stability of the algorithm in the uniform norm. The idea is to use half-integer nodes at boundary points of the boundary conditions with the second or third order. The obtained results are generalized to construct the similar algorithm for equations of poroelasticity in the one-dimensional case.

УДК 513.51

Е. А. РОВБА, Е. В. ДИРВУК

**ОБ ОДНОЙ КВАДРАТУРНОЙ ФОРМУЛЕ
ИНТЕРПОЛЯЦИОННО-РАЦИОНАЛЬНОГО ТИПА
ПО УЗЛАМ ЧЕБЫШЕВА–МАРКОВА**

(Представлено академиком И. В. Гайшуном)

Гродненский государственный университет им. Я. Купалы

Поступило 29.09.2014

Различные обобщения квадратурных формул типа Гаусса являются предметом исследований многих авторов. При этом использование интерполирования – классический способ построения таких формул. Особый интерес представляет задача построения квадратурных формул, часть узлов которых задается заранее, другая же часть узлов может быть взята произвольно. Если фиксируются оба конца рассматриваемого отрезка, то такая квадратурная формула называется квадратурной формулой типа Лобатто, если один – квадратурной формулой типа Радо. В настоящем сообщении мы исследуем одну из квадратурных формул типа Лобатто.

Пусть $a_k, k = 0, 1, \dots, 2n - 1$, являются действительными и $a_k \in (-1, 1)$, либо попарно комплексно сопряженными, $a_0 = 0$. Обозначим через $U_n(x)$ рациональную дробь Чебышева–Маркова второго рода

$$U_n(x) = \frac{\sin \mu_{2n}(x)}{\sqrt{1-x^2}}, \quad \mu_{2n}(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n-1} \arccos \frac{x+a_k}{1+a_k x},$$

где

$$\mu'_{2n}(x) = -\frac{\lambda_{2n}(x)}{\sqrt{1-x^2}}, \quad \lambda_{2n}(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n-1} \frac{\sqrt{1-a_k^2}}{1+a_k x}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Рациональная дробь $U_n(x)$ имеет вид (см., напр., [1, с. 47])

$$U_n(x) = \frac{p_{n-1}(x)}{\sqrt{\prod_{k=0}^{2n-1} (1+a_k x)}},$$

где $p_{n-1}(x)$ – алгебраический полином степени не выше $n - 1$ с вещественными коэффициентами. Нули дроби $U_n(x)$ расположены на интервале $(-1, 1)$ таким образом, что

$$-1 < x_{n-1} < x_{n-2} < \dots < x_1 < 1, \quad \mu_{2n}(x_k) = k\pi, \quad k = 1, \dots, n - 1.$$

Пусть $x_0 = 1, x_n = -1$. Тогда для всякой функции f , определенной на отрезке $[-1, 1]$, можно построить следующую рациональную функцию:

$$H_n(x, f) = \sum_{k=0}^n f(x_k) h_k(x) + \sum_{k=1}^{n-1} y_k \delta_k(x), \tag{1}$$

где

$$h_k(x) = \frac{1-x^2}{1-x_k^2} \left[1 - \left(\frac{U_n''(x_k)}{U_n'(x_k)} - \frac{2x_k}{1-x_k^2} \right) (x-x_k) \right] l_k^2(x), \quad k = 1, \dots, n-1;$$

$$h_0(x) = \frac{1+x}{2} \frac{U_n^2(x)}{U_n^2(1)}, \quad h_n(x) = \frac{1-x}{2} \frac{U_n^2(x)}{U_n^2(-1)};$$

$$l_k(x) = \frac{U_n(x)}{U_n'(x_k)(x-x_k)}, \quad k=1, 2, \dots, n-1;$$

$$\delta_k(x) = \frac{1-x^2}{1-x_k^2}(x-x_k)l_k^2(x), \quad y_k \in \mathbb{R}, \quad k=1, 2, \dots, n-1.$$

Справедливы следующие утверждения относительно свойств функции (1).

Л е м м а 1. Функция $H_n(x, f)$ является рациональной порядка не выше $2n-1$ и имеет вид

$$\frac{p_{2n-1}(x)}{\prod_{k=1}^{n-1} (1+a_k x)}, \quad (2)$$

где $p_{2n-1}(x)$ – некоторый полином степени не выше $2n-1$.

Л е м м а 2. Рациональная функция $H_n(x, f)$ является квази-интерполяционной функцией Эрмита–Фейера, т. е. имеют место равенства

$$H_n(x_k, f) = f(x_k), \quad k=0, 1, \dots, n;$$

$$H_n'(x_k, f) = y_k, \quad k=1, 2, \dots, n-1.$$

Л е м м а 3. Квази-интерполяционная рациональная функция Эрмита–Фейера (1) является точной для всякой рациональной функции вида (2), т. е.

$$H_n(x, r_{2n-1}) \equiv r_{2n-1}(x),$$

при условии, что $y_k = r'_{2n-1}(x_k)$, $k=1, 2, \dots, n-1$.

Отметим, что функцию $H_n(x, f)$ мы построили по аналогии с работой Г. Мина [2]. Однако в [2] эта функция имеет вид

$$\frac{p_{2n-1}(x)}{\prod_{k=1}^{n-1} (1+a_k x)^2}, \quad (3)$$

т. е. она содержит полюсы второй кратности и их в два раза меньше.

Теперь введем следующие числа:

$$A_k = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{1-x^2}{1-x_k^2} l_k^2(x) dx, \quad k=1, 2, \dots, n-1,$$

$$A_0 = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{1+x}{2} \frac{U_n^2(x)}{U_n^2(1)} dx, \quad A_n = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{1-x}{2} \frac{U_n^2(x)}{U_n^2(-1)} dx, \quad (4)$$

$$l_k(x) = \frac{U_n(x)}{U_n'(x_k)(x-x_k)}, \quad k=1, 2, \dots, n-1.$$

Тогда для всякой функции f , интегрируемой на отрезке $[-1, 1]$ с весом $p(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$, можно построить следующую квадратурную формулу типа Лобатто:

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx A_0 f(1) + \sum_{k=1}^{n-1} A_k f(x_k) + A_n f(-1). \quad (5)$$

Квадратурные формулы типа Лобатто в полиномиальном случае рассматривались в [3], а в рациональном – в [2], там же доказана точность этой формулы для всякой рациональной функции вида (3).

Заметим, что в работе [2] не рассматривались вопросы явного вида коэффициентов A_k , $k=0, 1, \dots, n$, и оценки остатка квадратурной формулы (5). Следует заметить также, что Г. Мин [2] построил квадратурную формулу (5) несколько иначе, не используя в явном виде рациональные дроби Чебышева–Маркова.

В настоящей работе найдены явные выражения для коэффициентов квадратурной формулы (5) A_k , $k = 0, 1, \dots, n$, и получена оценка скорости приближения рассматриваемой квадратурной формулы. Сравнение скорости приближения различными видами квадратурных формул проиллюстрировано на конкретном примере.

Основная часть. Имеет место

Т е о р е м а. *Квадратурная формула (5) имеет вид*

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{f(-1)}{2\lambda_{2n}(-1)} \pi + \sum_{k=1}^n \frac{f(x_k)}{\lambda_{2n}(x_k)} \pi + \frac{f(1)}{2\lambda_{2n}(1)} \pi \quad (6)$$

и для всякой непрерывной на отрезке $[-1, 1]$ функции f справедлива следующая оценка ее остатка:

$$\left| \int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx - \frac{f(-1)}{2\lambda_{2n}(-1)} \pi - \sum_{k=1}^n \frac{f(x_k)}{\lambda_{2n}(x_k)} \pi - \frac{f(1)}{2\lambda_{2n}(1)} \pi \right| \leq 2\pi R_{2n-1}(f; a), \quad (7)$$

где

$$R_{2n-1}(f; a) = \inf \|f(x) - r_{2n-1}(x)\|_{C[-1,1]},$$

точная нижняя грань берется по всем рациональным функциям $r_{2n-1}(x)$ вида (2).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Прежде всего заметим, что несложные подсчеты позволяют представить квадраты функций $l_k(x)$, необходимых для вычисления коэффициентов A_k , $k = 1, 2, \dots, n-1$, в следующем виде:

$$l_k^2(x) = \frac{(1-x_k^2)^2}{\lambda_{2n}^2(x_k)} \frac{\sin^2 \mu_{2n}(x)}{(1-x^2)(x-x_k)^2}, \quad k = 1, 2, \dots, n-1.$$

Для вычисления коэффициентов A_0, A_n найдем значения дробей Чебышева–Маркова второго рода $U_n(x)$ на концах отрезка

$$U_n(1) = \lim_{x \rightarrow 1} \frac{\sin \mu_{2n}(x)}{\sqrt{1-x^2}} = \lambda_{2n}(1), \quad U_n(-1) = \lim_{x \rightarrow -1} \frac{\sin \mu_{2n}(x)}{\sqrt{1-x^2}} = (-1)^{n+1} \lambda_{2n}(-1).$$

Учитывая найденные представления, коэффициенты (4) квадратурной формулы (5) будут равны

$$A_k = \frac{1-x_k^2}{\lambda_{2n}^2(x_k)} \int_{-1}^1 \frac{\sin^2 \mu_{2n}(x)}{(x-x_k)^2 \sqrt{1-x^2}} dx, \quad k = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$A_0 = \frac{1}{2\lambda_{2n}^2(1)} \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{1+x}{1-x}} \frac{\sin^2 \mu_{2n}(x)}{1-x^2} dx, \quad A_n = \frac{1}{2\lambda_{2n}^2(-1)} \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{1-x}{1+x}} \frac{\sin^2 \mu_{2n}(x)}{1-x^2} dx.$$

Вначале рассмотрим интеграл

$$I_k = \int_{-1}^1 \frac{\sin^2 \mu_{2n}(x)}{(x-x_k)^2 \sqrt{1-x^2}} dx.$$

Сделаем замену $x = (1-y^2)/(1+y^2)$. Известно [4, с. 246], что

$$\sin \mu_{2n} \left(\frac{1-y^2}{1+y^2} \right) = \sin \Phi_{2n}(y)$$

– синус-дробь Бернштейна с нулями в точках $\pm y_k$, $y_k = \sqrt{(1-x_k)/(1+x_k)}$, $k = 1, \dots, n$.

Таким образом,

$$1-x^2 = \frac{4y^2}{(1+y^2)^2}, \quad x-x_k = \frac{-2(y^2-y_k^2)}{(1+y^2)(1+y_k^2)}, \quad dx = \frac{-4y}{(1+y^2)^2} dy,$$

$$I_k = \frac{(1+y_k^2)^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \Phi_{2n}(y)(1+y^2)}{(y^2-y_k^2)^2} dy.$$

Далее используем метод, предложенный в [1, с. 92]. Рассмотрим вспомогательный интеграл

$$J_k(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \Phi_{2n}(y)(1+y^2)}{(y^2-z^2)^2} dy,$$

а затем интеграл I_k найдем с помощью предельного перехода

$$I_k = \frac{(1+y_k^2)^2}{4} \lim_{z \rightarrow y_k, \operatorname{Im} z > 0} J_k(z). \quad (8)$$

Синус-дробь Бернштейна можно представить в виде [1, с. 49]

$$\sin \Phi_{2n}(y) = \frac{1}{2i} (\chi_n(y) - \chi_n^{-1}(y)), \quad (9)$$

где $\chi_n(y) = \prod_{j=0}^{2n-1} \frac{y-z_j}{y-z_j}$, точки z_k являются корнями уравнения $y^2 + \frac{1+a_k}{1-a_k} = 0$, $\operatorname{Im} z_k > 0$, $k = 0, 1, \dots, 2n-1$. При этом ограничения, налагаемые на параметры a_k , $k = 0, 1, \dots, 2n-1$, влекут выполнение следующих условий:

1) $z_0 = i$,

2) паре комплексно сопряженных параметров из множества $\{a_k\}_{k=0}^{2n-1}$ соответствует пара симметричных относительно мнимой оси параметров из множества $\{z_k\}_{k=0}^{2n-1}$.

Из представления (9) несложно получить

$$\sin^2 \Phi_{2n}(y) = -\frac{1}{4} (\chi_n^2(y) - 2 + \chi_n^{-2}(y)).$$

Теперь интеграл $J_k(z)$ представим в виде суммы

$$J_k(z) = -\frac{1}{4} (J_{k_1}(z) - 2J_{k_2}(z) + J_{k_3}(z)),$$

где

$$J_{k_1}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_n^2(y) \frac{1+y^2}{(y^2-z^2)^2} dy, \quad J_{k_2}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1+y^2}{(y^2-z^2)^2} dy, \quad J_{k_3}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_n^{-2}(y) \frac{1+y^2}{(y^2-z^2)^2} dy.$$

Для вычисления этих интегралов применим теорию вычетов. Из условия $z_0 = i$ следует, что подынтегральная функция интеграла $J_{k_1}(z)$ в верхней полуплоскости имеет лишь одну особую точку $y = z$. Поэтому

$$J_{k_1}(z) = 2\pi i \operatorname{res}_{y=z} \chi_n^2(y) \frac{1+y^2}{(y^2-z^2)^2} = 2\pi i \lim_{y \rightarrow z} \frac{d}{dy} \chi_n^2(y) \frac{1+y^2}{(y+z)^2}.$$

Замечая, что

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy} \chi_n(y) &= \chi_n(y) \sum_{k=0}^{2n-1} \frac{z_k - \overline{z_k}}{(y-z_k)(y-\overline{z_k})}; \\ \frac{d}{dy} \left(\frac{1+y^2}{(y+z)^2} \right) &= \frac{2(yz-1)}{(y+z)^3}, \end{aligned}$$

и возвращаясь к вычислению интеграла $J_{k_1}(z)$, получим

$$J_{k_1}(z) = \frac{\pi i}{z^2} \chi_n^2(y) \left((1+z^2) \sum_{k=0}^{2n-1} \frac{z_k - \overline{z_k}}{(z-z_k)(z-\overline{z_k})} + \frac{z^2-1}{2z} \right).$$

Аналогично вычисляются оставшиеся интегралы $J_{k_2}(z)$ и $J_{k_3}(z)$

$$J_{k_2}(z) = \frac{\pi i}{z^2} \frac{z^2-1}{2z}, \quad J_{k_3}(z) = \frac{\pi i}{z^2} \chi_n^{-2}(y) \left((1+z^2) \sum_{k=0}^{2n-1} \frac{z_k - \overline{z_k}}{(z-z_k)(z-\overline{z_k})} + \frac{z^2-1}{2z} \right).$$

Учитывая, что

$$\prod_{j=0}^{2n-1} \frac{y_k - z_j}{y_k - z_j} = 1,$$

и переходя к интегралу (8), получим

$$I_k = -\frac{(1+y_k^2)^2 \pi i}{8y_k^2} (1+y_k^2) \sum_{k=0}^{2n-1} \frac{z_k - \bar{z}_k}{(y_k - z_k)(y_k - \bar{z}_k)}.$$

Преобразуем сумму, стоящую в правой части,

$$\sum_{k=0}^{2n-1} \frac{z_k - \bar{z}_k}{(y_k - z_k)(y_k - \bar{z}_k)} = \sum_{k=0}^{2n-1} \left(\frac{1}{y_k - z_k} - \frac{1}{y_k - \bar{z}_k} \right) = \frac{-2\lambda_{2n}(x_k)}{i(1+y_k^2)}.$$

Будем иметь

$$I_k = \frac{(1+y_k^2)^2 \lambda_{2n}(x_k)}{4y_k^2} \pi = \frac{\lambda_{2n}(x_k)}{1-x_k^2} \pi$$

и

$$A_k = \frac{1-x_k^2}{\lambda_{2n}^2(x_k)} \frac{\lambda_{2n}(x_k)}{1-x_k^2} \pi = \frac{\pi}{\lambda_{2n}(x_k)}. \quad (10)$$

Проделав аналогичные вычисления, найдем

$$A_0 + A_n = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{\lambda_{2n}(1)} + \frac{\pi}{\lambda_{2n}(-1)} \right). \quad (11)$$

Подставив результаты для интегралов (10) и (11) в (5), получим (6).

Выводу неравенства (7) предположим следующие леммы.

Л е м м а 4. Квадратурная формула (6) является точной для всякой рациональной функции $r_{2n-1}(x)$ вида (2).

Нетрудно видеть, что для доказательства леммы 4 достаточно показать, что

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} (x-x_k) l_k^2(x) dx = 0, \quad k=1, 2, \dots, n-1. \quad (12)$$

Равенства (12) получаются таким же образом, как и (6).

Л е м м а 5. Квадратурная формула (6) является положительной, т. е. $A_k > 0$, $k=0, 1, \dots, n$, и

$$\sum_{k=0}^n A_k = \pi.$$

Первое утверждение этой леммы очевидное, второе следует из точности формулы (6) для $f(x) \equiv 1$.

Теперь легко найти оценку (7). Действительно, пусть $r_{2n-1}^*(x)$ – рациональная функция вида (2), осуществляющая наилучшее равномерное приближение функции f на $[-1, 1]$:

$$\left| f(x) - r_{2n-1}^*(x) \right| \leq R_{2n-1}(f; a), \quad x \in [-1, 1].$$

Введем следующие обозначения:

$$F_n(f, a) = \frac{f(-1)}{2\lambda_{2n}(-1)} \pi + \sum_{k=1}^n \frac{f(x_k)}{\lambda_{2n}(x_k)} \pi + \frac{f(1)}{2\lambda_{2n}(1)} \pi,$$

$$\varepsilon_n(f, a) = \left| \int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx - F_n(f, a) \right|.$$

Тогда, пользуясь леммой 4, получим

$$\varepsilon_n(f, a) = \left| \int_{-1}^1 \frac{f(x) - r_{2n-1}^*(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \right| + \left| F_n(r_{2n-1}^*, a) - F_n(f, a) \right| \leq \pi R_{2n-1}(f, a) + R_{2n-1}(f, a) F_n(1, a).$$

Ввиду точности квадратурной формулы (6) для функции $f(x) \equiv 1$ будем иметь, что $F_n(1, a) = \pi$. Таким образом неравенство (7) доказано.

З а м е ч а н и е 1. Полагая $a_k = 0, k = 0, \dots, 2n-1$, получим известную квадратурную формулу полиномиального типа [3]

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{n} \left(\frac{f(-1)}{2} + \sum_{k=1}^n f\left(\cos \frac{k\pi}{n}\right) + \frac{f(1)}{2} \right). \quad (13)$$

З а м е ч а н и е 2. Квадратурная формула (6) по форме совпадает с квадратурной формулой, полученной в [5]. Однако формула (6) содержит в два раза больше параметров и естественно является более точной.

Проиллюстрируем эффективность полученной квадратурной формулы (6) на следующем примере.

П р и м е р. Рассмотрим интеграл

$$\int_{-1}^1 \frac{\pi x / 1,1}{\sin(\pi x / 1,1) \sqrt{1-x^2}} dx. \quad (14)$$

Такой интеграл рассматривался в качестве примера в [6]. Результаты из [6] получены с помощью квадратурных формул типа Гаусса, при этом узлы в конечных точках не задавались.

Вычислим интеграл (14) с помощью квадратурных формул (6), (13) и сравним с результатами из [6]. Для применения рациональных квадратурных формул (6) определим последовательность комплексных чисел $\{a_k\}_{k=0}^{2n-1}$ следующим образом:

$$a_{2n-1} = a_0 = 0, a_k = 1 - e^{-k/\sqrt{an}}, a_{2n-1-k} = -a_k, k = 1, 2, \dots, n-1.$$

Некоторые числа a , зависящие от n , представлены ниже в таблице.

Относительные погрешности рассматриваемых квадратурных формул для интеграла (14)

n	a	Error1	Error2	Error3
2	0,55034	1,19e-07	1,42e-02	1,99e-01
4	0,88041	5,83e-10	7,68e-05	3,18e-02
8	0,91157	4,66e-14	1,24e-12	9,04e-04
16	1,37741	5,99e-18	2,45e-16	7,48e-07
32	2,59	3,26e-26	3,68e-16	5,14e-11

П р и м е ч а н и е. Вычисления выполнены при помощи программного пакета Maple 18.

Относительную погрешность квадратурных формул вычислим по формуле

$$\text{Error} = \left| \frac{I_n(f) - I_\mu(f)}{I_n(f)} \right|,$$

где $I_\mu(f)$ – приближенное значение интеграла; $I_n(f)$ – точное значение интеграла.

В таблице приведены относительные погрешности при применении квадратурных формул типа Лобатто (Error1 в рациональном случае, Error3 в полиномиальном случае) и квадратурных формул, рассмотренных в [6] (Error2).

Заключение. В работе найдены явные выражения для коэффициентов квадратурной формулы (6) A_0, A_1, \dots, A_n и получена оценка скорости приближения рассматриваемой квадратурной формулы.

Литература

1. Русак В. Н. Рациональные функции как аппарат приближения. Минск: Изд-во БГУ им. В. И. Ленина, 1979.
2. Min G. // J. of Computational and Applied Mathematics. 1998. N 94. P. 1–12.
3. Ермолаева Л. Б. // Изв. вузов. Математика. 2000. № 3. С. 25–28.
4. Турецкий А. Х. Теория интерполирования в задачах. Минск: Высш. шк., 1968.
5. Ровба Е. А., Смотрицкий К. А. // Докл. НАН Беларуси. 2008. Т. 52, № 5. С. 11–15.
6. Van Deun J., Bultheel A., Vera P. G. // Math. Comp. 2006. N 75. P. 307–326.

Y. A. ROVBA, Y. V. DIRVUK

rovba.ea@gmail.com; dirvuk@gmail.com

**QUADRATURE FORMULAS BASED ON RATIONAL INTERPOLATION
WITH NODES CHEBYSHEV-MARKOV**

Summary

In the paper we construct a Lobatto-type quadrature formulas on the segment $[-1, 1]$ by weight $1/\sqrt{1-x^2}$ by using quasi-Hermite-type rational interpolation with nodes Chebyshev-Markov. The coefficients of quadrature formulas of Lobatto-type were calculated and estimation of their error in particular. We give example of the use of these quadrature formula and compare the rate of approximation of various types of quadrature formulas.

УДК 517.986

А. Б. АНТОНЕВИЧ, А. Н. ГЛАЗ

КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИЕ АЛГЕБРЫ, ИНВАРИАНТНЫЕ
ОТНОСИТЕЛЬНО ЛИНЕЙНОГО ОТОБРАЖЕНИЯ

(Представлено членом-корреспондентом Я. В. Радыно)

Белорусский государственный университет, Минск

Поступило 22.09.2014

Почти периодические функции описывают многие важные в приложениях процессы и структуры [1–4]. Обычно рассматривается не вся алгебра почти периодических функций, а некоторые ее подалгебры. Такие подалгебры обычно являются коммутативными C^* -алгебрами, и поэтому однозначно определяются по пространству максимальных идеалов. Существуют подалгебры, у которых пространство максимальных идеалов является конечномерным тором (такие подалгебры называются *квазипериодическими*), и существуют подалгебры, у которых пространство максимальных идеалов устроено более сложно (бесконечномерный тор, соленоид). Структура кристаллов или квазикристаллов описывается с помощью некоторой квазипериодической подалгебры, при этом совокупность линейных отображений, сохраняющих такую подалгебру, задает группу симметрии рассматриваемой квазикристаллической структуры, которая задает геометрию квазикристалла [2–4]. В связи с этим представляет интерес построение квазипериодических подалгебр, инвариантных относительно линейных отображений.

В работе рассмотрена следующая задача. Пусть \mathcal{A}_0 есть некоторая квазипериодическая подалгебра на \mathbb{R}^m и $\alpha: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\alpha(x) = Mx$ – линейное отображение, задаваемое квадратной матрицей размера m . Линейное отображение α порождает *оператор сдвига*, действующий в пространстве почти периодических функций по формуле

$$Wa(x) = a(\alpha(x)). \quad (1)$$

Существует наименьшая замкнутая подалгебра \mathcal{A}^+ , содержащая \mathcal{A}_0 и инвариантная относительно α . Если отображение α обратимо, то существует наименьшая замкнутая подалгебра \mathcal{A} , содержащая \mathcal{A}_0 , инвариантная относительно α и α^{-1} . В работе получены условия на линейное отображение α , при котором эти подалгебры являются квазипериодическими.

Алгебру $CAP(\mathbb{R}^m)$ почти периодических функций на \mathbb{R}^m можно определить как замыкание относительно равномерной нормы множества квазиполиномов, т. е. функций на \mathbb{R}^m , представимых в виде конечных сумм $u(x) = \sum_j a_j e^{i2\pi \langle h_j, x \rangle}$, где $x \in \mathbb{R}^m$, $h_j \in \mathbb{R}^m$ и $\langle \cdot, \cdot \rangle$ – скалярное произведение в \mathbb{R}^m .

Известно [1; 5], что каждой почти периодической функции a соответствует формальный ряд Фурье $a(x) \sim \sum_{j=1}^{\infty} C_j e^{i2\pi \langle h_j, x \rangle}$.

Векторы h_j называются *частотами*, а множество векторов h_j называется *спектром* функции a .

Если A некоторая замкнутая и симметричная подалгебра алгебры $CAP(\mathbb{R}^m)$, то объединение спектров всех функций из A является подгруппой в \mathbb{R}^m (как группы по сложению). Эта подгруппа обозначается H_A и называется *группой частот алгебры A*.

Подалгебра A называется *квазипериодической с N квазипериодами*, если H_A есть группа с конечным числом N образующих, в этом случае $H_A \approx \mathbb{Z}^N$. Пространство максимальных идеалов такой алгебры есть тор \mathbb{T}^N , а группа H_A изоморфна группе характеров тора \mathbb{T}^N [1; 5].

Обозначим через $L(H_{\mathcal{A}_0})$ линейную оболочку группы $H_{\mathcal{A}_0}$, где \mathcal{A}_0 – рассматриваемая квазипериодическая алгебра.

Напомним, алгебра A называется *инвариантной относительно отображения α* , если

$$a \in A \Rightarrow Wa \in A.$$

Поскольку отображение α – линейно, то $\forall a \in CAP(\mathbb{R}^m) \Rightarrow Wa \in CAP(\mathbb{R}^m)$. Поэтому для любой подалгебры \mathcal{A}_0 в $CAP(\mathbb{R}^m)$ алгебра \mathcal{A}^+ является C^* -подалгеброй в $CAP(\mathbb{R}^m)$. Тогда по теореме Гельфанда–Наймарка [6] C^* -алгебра \mathcal{A}^+ изоморфна алгебре $C(Sp(\mathcal{A}^+))$, где $Sp(\mathcal{A}^+)$ есть (компактное) пространство максимальных идеалов алгебры \mathcal{A} . Этот изоморфизм задается с помощью преобразования Гельфанда.

Если алгебра \mathcal{A}^+ инвариантна относительно α , то оператор W индуцирует непрерывное сюръективное отображение $\hat{\alpha} : Sp(\mathcal{A}^+) \rightarrow Sp(\mathcal{A}^+)$ пространства $Sp(\mathcal{A}^+)$.

Если W обратимо, т. е. обратимо α , то алгебра \mathcal{A} также является C^* -алгеброй и изоморфна алгебре $C(Sp(\mathcal{A}))$. При этом отображение $\hat{\alpha}$ является гомеоморфизмом.

О п р е д е л е н и е 2. Матрицу M будем называть *целой алгебраической*, если существует полином $P(t) = \sum_{k=0}^N a_k t^k$ с целыми коэффициентами, такой, что $a_N = 1$ и $P(M) = 0$.

Основные результаты работы сформулируем в виде двух теорем.

Т е о р е м а 1. Пусть \mathcal{A}_0 есть квазипериодическая подалгебра в $CAP(\mathbb{R}^m)$, такая, что $L(H_{\mathcal{A}_0}) = \mathbb{R}^m$, и $\alpha(x) = Mx$. Подалгебра \mathcal{A}^+ является квазипериодической тогда и только тогда, когда матрица M является целой алгебраической.

Если, кроме того, α обратимо, то подалгебра \mathcal{A} является квазипериодической тогда и только тогда, когда существует такой полином P , что

$$P(t) = \sum_{k=0}^N a_k t^k, \quad a_N = 1, \quad a_0 = \pm 1, \quad a_k \in \mathbb{Z}, \quad P(M) = 0. \quad (2)$$

Утверждение теоремы 1 верно и при выполнении более слабого условия: если наименьшее векторное подпространство $\text{Inv}(H_{\mathcal{A}_0}, \alpha)$ в \mathbb{R}^m , содержащее $H_{\mathcal{A}_0}$ и инвариантно относительно α , есть все \mathbb{R}^m . Другими словами, если для матрицы M не существует нетривиальных инвариантных подпространств, содержащих $H_{\mathcal{A}_0}$.

В случае, если $\text{Inv}(H_{\mathcal{A}_0}, \alpha) \neq \mathbb{R}^m$, условия формулируются несколько иначе.

Т е о р е м а 2. Подалгебра \mathcal{A}^+ (\mathcal{A}) является квазипериодической тогда и только тогда, когда сужение отображения α на подпространство $\text{Inv}(H_{\mathcal{A}_0}, \alpha)$ задается целой алгебраической матрицей (матрицей, удовлетворяющей соотношению вида (2)).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Для построения подалгебр \mathcal{A}^+ и \mathcal{A} может быть использована следующая конструкция. Пусть \mathcal{A}_n^+ – алгебраическая оболочка

$$\mathcal{A}_n^+ = \text{Alg}[\mathcal{A}_0, W(\mathcal{A}_0), \dots, W^n(\mathcal{A}_0)],$$

где $W^k(\mathcal{A}_0) = \{a(\alpha^k(x)) : a \in \mathcal{A}_0\}$ есть образ алгебры \mathcal{A}_0 при действии W^k , т. е. \mathcal{A}_n^+ – наименьшая замкнутая подалгебра, содержащая функции $a(\alpha^k(x))$, где $a \in \mathcal{A}_0, k = 0, 1, \dots, n$.

Тогда очевидно, что если \mathcal{A}_0 подалгебра в $B(\mathbb{R}^m)$, α – линейное отображение, W – оператор (1), то имеют место включения $\mathcal{A}_0 \subset \mathcal{A}_1^+ \subset \dots \subset \mathcal{A}_n^+ \subset \dots$ и множество $\mathcal{A}^+ = \overline{\bigcup \mathcal{A}_n^+}$ является наименьшей замкнутой подалгеброй, инвариантной относительно отображения α и содержащей \mathcal{A}_0 .

В случае обратимого α аналогично рассмотрим алгебраические оболочки

$$\mathcal{A}_n = \text{Alg}[W^{-n}(\mathcal{A}_0), \dots, W^{-1}(\mathcal{A}_0), \mathcal{A}_0, W(\mathcal{A}_0), \dots, W^n(\mathcal{A}_0)].$$

Имеют место включения $\mathcal{A}_0 \subset \mathcal{A}_1 \subset \dots \subset \mathcal{A}_n \subset \dots$, а множество $\mathcal{A} = \overline{\bigcup \mathcal{A}_n}$ является наименьшей замкнутой подалгеброй, инвариантной относительно отображений α и α^{-1} и содержащей \mathcal{A}_0 .

В общем случае все подалгебры \mathcal{A}_n^+ (\mathcal{A}_n) различны и алгебра \mathcal{A}^+ (\mathcal{A}) может иметь достаточно сложное строение, примеры таких алгебр описаны, например, в [7], посвященной исследованию обратимых расширений необратимых динамических систем. В этой работе рассматривается аналогичная конструкция инвариантных алгебр для произвольных исходных отображений

и произвольных алгебр. При этом показано, что если исходить из очень простых необратимых отображений, то в результате могут получаться пространства максимальных идеалов со сложным поведением индуцированного отображения $\hat{\alpha}$, такие, как подкова Смейла, аттрактор Плыкина и др.

Общая закономерность проявляется в том, что чем меньше поведение функций $a_0 \in \mathcal{A}_0$ согласовано с отображением α , тем сложнее устроены алгебры \mathcal{A}_n^+ и \mathcal{A}^+ , \mathcal{A}_n и \mathcal{A} . Соответственно, труднее построение пространств $Sp(\mathcal{A}^+)$ и $Sp(\mathcal{A})$. С этой точки зрения представляет интерес выделение ситуаций, когда пространство $Sp(\mathcal{A})$ устроено сравнительно просто.

Будем говорить, что цепочка алгебр \mathcal{A}_n^+ стабилизируется в положительном направлении, если при некотором N алгебра \mathcal{A}_N^+ инвариантна относительно α . В этом случае $\mathcal{A}^+ = \mathcal{A}_N^+$ для $n \geq N$, и тогда $\mathcal{A}^+ = \mathcal{A}_N^+$. В случае, когда α обратимо, будем говорить, что цепочка алгебр \mathcal{A}_n стабилизируется, если при некотором N алгебра \mathcal{A}_N инвариантна относительно α и α^{-1} . В этом случае $\mathcal{A}_n = \mathcal{A}_N$ для $n \geq N$, и тогда $\mathcal{A} = \mathcal{A}_N$.

В рассматриваемой задаче условие квазипериодичности алгебры \mathcal{A}^+ равносильно условию стабилизируемости в положительном направлении цепочки алгебр \mathcal{A}_n^+ , а условие квазипериодичности алгебры \mathcal{A} равносильно условию стабилизируемости цепочки алгебр \mathcal{A}_n .

Запишем условие стабилизируемости цепочки алгебр \mathcal{A}_n . Пусть $\{h_1, \dots, h_q\}$ – образующие группы частот $H_{\mathcal{A}_0}$ алгебры \mathcal{A}_0 и M^T – матрица, транспонированная к M . Тогда для любого $n \in \mathbb{N}$ алгебры \mathcal{A}_n^+ и \mathcal{A}_n квазипериодические, а наборы $\{(M^T)^j h_k, k=1, \dots, q; j=0, \dots, n\}$ и $\{(M^T)^j h_k, k=1, \dots, q; j=-n, \dots, n\}$ являются образующими для групп частот $H_{\mathcal{A}_n^+}$ и $H_{\mathcal{A}_n}$ соответственно.

Таким образом, условие, что цепочка алгебр \mathcal{A}_n^+ стабилизируется в положительном направлении, равносильно тому, что при некотором N для группы частот выполнено $H_{\mathcal{A}_N^+} = H_{\mathcal{A}_n^+}, \forall n \geq N$. А это в свою очередь равносильно тому, что для каждого $i = 1, \dots, q$ вектор $(M^T)^{N+1} h_i$ можно представить в виде линейной комбинации с целыми коэффициентами элементов $h_1, M^T(h_1), \dots, (M^T)^N h_1, \dots, h_q, M^T h_q, \dots, (M^T)^N h_q$. Аналогичное утверждение верно для \mathcal{A} .

Покажем, что сформулированное условие выполняется для целых алгебраических матриц.

Достаточность. Пусть существует полином P с целыми коэффициентами и старшим коэффициентом 1, такой, что $P(M) = 0$. Отметим, что тогда также $P(M^T) = 0$. Домножив справа равенство $P(M^T) = 0$ на вектор h_i , получаем, что вектор $(M^T)^{N+1} h_i$ можно представить в виде линейной комбинации с целыми коэффициентами элементов $h_1, M^T(h_1), \dots, (M^T)^N h_q$, что и требовалось.

Необходимость. Пусть каждый из векторов $(M^T)^{N+1} h_i, i = 1, \dots, q$, можно представить в виде линейной комбинации с целыми коэффициентами элементов $h_1, M^T(h_1), \dots, (M^T)^N h_q$. Это условие может быть записано в виде

$$M^0 \mathcal{H} = \mathcal{O}, \quad (3)$$

где

$$M^0 = \begin{pmatrix} (M^T)^{N+1} + P_{11}^{(N)}(M^T) & P_{12}^{(N)}(M^T) & \dots & P_{1q}^{(N)}(M^T) \\ P_{21}^{(N)}(M^T) & (M^T)^{N+1} + P_{22}^{(N)}(M^T) & \dots & P_{2q}^{(N)}(M^T) \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ P_{q1}^{(N)}(M^T) & P_{q2}^{(N)}(M^T) & \dots & (M^T)^{N+1} + P_{qq}^{(N)}(M^T) \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{H} = (h_1 \quad \dots \quad h_q)^T,$$

т. е. M^0 – квадратная матрица порядка q , элементами которой являются квадратные матрицы порядка m , \mathcal{H} – вектор-столбец, составленный из векторов h_1, \dots, h_q . Под символом \mathcal{O} подразумевается вектор-столбец размера q , элементами которого являются действительные нулевые вектор-столбцы размера m . Умножение в (3) есть обычное умножение матриц. Производя с матрицей M^0 «элементарные» преобразования, придем к диагональному виду

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} (M^T)^{N_1+1} + \tilde{P}_{11}^{(N_1)}(M^T) & \dots & 0 \\ \dots & \ddots & \dots \\ 0 & \dots & (M^T)^{N_q} + \tilde{P}_{qq}^{(N_q)}(M^T) \end{pmatrix},$$

где $\tilde{P}_{ii}^{(N_i)}(t)$ – некоторые многочлены степени $N_i \in \mathbb{N}$, $i = 1, \dots, q$, такие, что $Q(t) = \prod_{i=1}^q (t^{N_i+1} + \tilde{P}_{ii}^{(N_i)}(t))$ является многочленом с целыми коэффициентами, старшим членом 1 и выполнено $Q(M^T)h_i = 0$, $i = 1, \dots, q$. Из условий $L(H_{\mathcal{A}_0}) = \mathbb{R}^m$ следует, что $Q(M^T) = 0$, т. е. $Q(t)$ – искомый многочлен.

Для доказательства второго утверждения теоремы 1 достаточно применить первую часть теоремы к отображениям α и α^{-1} .

Доказательство теоремы 2 аналогично.

П р и м е р 1. Пусть \mathcal{A}_0 – алгебра функций на плоскости, периодических с периодом 1 по первой переменной и постоянных по другой. В качестве отображения α возьмем поворот на угол $2\pi\varphi$, т. е.

$$M = \begin{pmatrix} \cos 2\pi\varphi & -\sin 2\pi\varphi \\ \sin 2\pi\varphi & \cos 2\pi\varphi \end{pmatrix}.$$

Когда φ является рациональным числом p/q , то через конечное число оборотов q алгебра перейдет в себя, т. е. цепочка алгебр \mathcal{A}_n стабилизируются при $n = q$. В этом случае соответствующий многочлен имеет вид

$$P(t) = t^q - 1.$$

В рассматриваемом примере существуют повороты с иррациональным числом φ , такие, что цепочка алгебр \mathcal{A}_n (а следовательно, и цепочка алгебр \mathcal{A}_n^+) стабилизируется, т. е. пространства максимальных идеалов соответствующей алгебры \mathcal{A} (\mathcal{A}^+) является конечномерным тором. Существование таких углов было доказано еще в [8]. В свое время, как говорят авторы этой статьи, это было открытием, так как квазикристаллы с такой группой симметрии не могут быть реализованы и, значит, являются какими-то новыми объектами, неизвестными физикам. Интерес к таким примерам сохраняется до сих пор, этот вопрос рассматривался, например, в [4]. В этой работе повороты на иррациональный угол, при котором алгебра \mathcal{A} является квазипериодической, называются «скрытыми симметриями».

Из теоремы 2 следует, что для того, чтобы алгебра \mathcal{A} была квазипериодической, необходимо и достаточно, чтобы число $z = e^{2\pi i\varphi} \in \mathbb{C}$ было корнем некоторого многочлена с целыми коэффициентами со старшим коэффициентом, равным 1, и младшим, равным ± 1 . Заметим, что такие числа $e^{2\pi i\varphi}$ не могут быть корнями многочленов второй степени.

В качестве примера такого числа можно привести

$$z_0 = e^{2\pi i\varphi} = 1 + 2\sqrt{2} - 2\sqrt{3} + 2i\sqrt{\sqrt{3} - \sqrt{2} + 2\sqrt{6} - 5},$$

которое является корнем многочлена

$$P(t) = t^8 - 8t^7 - 132t^6 + 584t^5 - 634t^4 + 584t^3 - 132t^2 - 8t + 1.$$

Здесь при записи в виде $z_0 = e^{2\pi i\varphi}$ число φ является иррациональным.

П р и м е р 2. Пусть $X = \mathbb{R}$ и пусть \mathcal{A}_0 есть алгебра непрерывных функций, периодических с периодом 1. Эта алгебра с одной образующей – она порождена функцией $e^{i2\pi x}$, и ее пространство максимальных идеалов $Sp(\mathcal{A}_0) = \mathbb{T} = \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$.

Рассмотрим алгебры \mathcal{A}^+ и \mathcal{A} для класса отображений $\alpha(x) = qx$. Для разных q получаем качественно разные результаты.

П р и м е р 2.1. Если $\alpha(x) = 2x$, то $W(\mathcal{A}_0)$ есть алгебра функций, периодических с периодом $1/2$. Так как $W(\mathcal{A}_0) \subset \mathcal{A}_0$, то алгебра $\mathcal{A}^+ = \mathcal{A}_0$.

Рассмотрим обратное отображение. Получаем, что $\mathcal{A}_n = W^{-n}(\mathcal{A}_0)$ и это есть алгебра функций, периодических с периодом 2^n . Поэтому получаем расширяющуюся цепочку подалгебр периодических функций, т. е. $\mathcal{A}_0 \subset \mathcal{A}_1 \subset \dots \subset \mathcal{A}_n \subset \dots$.

В этом примере $Sp(\mathcal{A})$ является так называемым солениодом [7].

Пример 2.2. Пусть теперь $\alpha(x) = \sqrt{2}x$. Тогда $W(\mathcal{A}_0)$ есть алгебра функций, периодических с периодом $1/\sqrt{2}$ и $W(\mathcal{A}_0) \cap \mathcal{A}_0 = \{0\}$.

В этом случае алгебра \mathcal{A}_1^+ является квазипериодической с двумя квазипериодами. Число $q = \sqrt{2}$ является корнем полинома $P(t) = t^2 - 2$. При рассмотрении обратного отображения получаем расширяющуюся цепочку квазипериодических алгебр $\mathcal{A}_0 \subset \mathcal{A}_1 \subset \dots \subset \mathcal{A}_n \subset \dots$.

Получаем, что пространство $Sp(\mathcal{A})$ есть декартов квадрат солениодов.

Пример 2.3. Пусть теперь $\alpha(x) = \pi x$. Так как число π является трансцендентным, все алгебры $W^k(\mathcal{A}_0)$ существенно различны. Анализ показывает, что в этом примере алгебра \mathcal{A}^+ изоморфна алгебре непрерывных функций на бесконечномерном торе.

Пример 3. Пусть \mathcal{A}_0 алгебра функций на \mathbb{R}^3 , периодических с периодом 1 по каждой переменной. Пусть матрица M , задающая отображение α , имеет вид

$$M = \begin{pmatrix} 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где $\gamma \in \mathbb{R}, \gamma \neq 0$. Для матрицы M выполнено

$$M^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \gamma^2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M^3 = 0,$$

т. е. M является целой алгебраической матрицей и, следовательно, по теореме 1 алгебра \mathcal{A}^+ является квазипериодической.

В этом примере группа $H_{\mathcal{A}_0}$ порождена векторами $h_1 = (1, 0, 0)$, $h_2 = (0, 1, 0)$ и $h_3 = (0, 0, 1)$. Группа $H_{\mathcal{A}^+}$ порождена векторами h_i и векторами $(0, \gamma, 0)$, $(0, 0, \gamma)$ и $(0, 0, \gamma^2)$ – образами h_i при действии степеней матрицы M . Таким образом, алгебра \mathcal{A}^+ порождена функциями, периодическими с периодом 1 по первой координате, периодическими с периодами 1 и $1/\gamma$ по второй переменной, с периодами 1, $1/\gamma$ и $1/\gamma^2$ по третьей переменной. Здесь возможны три качественно различных случая.

1) Если $\gamma \in \mathbb{Z}$, то исходная алгебра инвариантна относительно α .

2) Если $\gamma = p/q \in \mathbb{Q} \setminus \mathbb{Z}$ и p/q – несократимая дробь, то все равно группа $H_{\mathcal{A}^+}$ имеет три образующих $(1, 0, 0)$, $(0, 1/q, 0)$ и $(0, 0, 1/q^2)$.

3) Если же $\gamma \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$, то группа $H_{\mathcal{A}^+}$ имеет шесть образующих: векторы h_i и векторы $(0, \gamma, 0)$, $(0, 0, \gamma)$ и $(0, 0, \gamma^2)$.

Литература

1. Шубин М. А. // УМН. 1978. Т. 33, вып. 2 (200). С. 560–587.
2. Дынников И. А., Новиков С. П. // УМН. 2005. Т. 60, вып. 1(361). С. 3–28.
3. Новиков С. П. // УМН. 1999. Т. 54, вып. 5 (329). С. 147–148.
4. Frank A. Farris. // Notices of American Mathematical Society. 2013. Vol. 59, N 10. P. 1386–1390.
5. Левитан Б. М., Жиков В. В. Почти-периодические функции и дифференциальные уравнения. М., 1978.
6. Мерфи Дж. С*-алгебры и теория операторов. М., 1997.
7. Квасневски Б., Лебедев А. В. // Матем. сб. 2008. Т. 199, № 11. С. 45–74.
8. Ле Т. К. Т., Пуухин С. А., Садов В. А. // УМН. 1993. Т. 48, вып. 1. С. 41–102.

A. B. ANTONEVICH, A. N. GLAZ

antonevich@bsu.by, anna-glaz@yandex.ru

QUASI-PERIODIC ALGEBRAS INVARIANT UNDER A LINEAR MAP

Summary

In this paper we consider the following problem. Let \mathcal{A}_0 be some quasi-periodic subalgebra of the algebra of almost periodic functions on \mathbb{R}^m and $\alpha: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\alpha(x) = Mx$, is a linear map defined by a square matrix of size m . There exists the smallest closed subalgebra \mathcal{A}^+ containing \mathcal{A}_0 and invariant under α , and there exists the smallest closed subalgebra \mathcal{A} containing \mathcal{A}_0 , invariant under α and α^{-1} . We obtain conditions on the linear map α when these subalgebras are quasi-periodic.

УДК 517+530.1

С. В. ЖЕСТКОВ

**НОВЫЙ АНЗАЦ И ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ОБОБЩЕННОЙ НЕЛОКАЛЬНОЙ
ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ**

(Представлено членом-корреспондентом В. И. Корзюком)

Могилевский государственный университет им. А. А. Кулешова

Поступило 08.07.2013

В [1] с помощью эллиптических функций Якоби получены точные решения оптической системы, описывающей распространение лазерного луча в нелокальной нелинейной среде. При $m \rightarrow 1$ функции Якоби превращаются в гиперболические функции, а периодические волновые решения становятся солитонными решениями.

Цель работы – получение солитонных решений новой формы и законов их распространения для указанной системы с произвольными постоянными и переменными коэффициентами.

I. Для полноты изложения рассмотрим оптическую систему из [1] с произвольными действительными коэффициентами

$$iu_z + pu_{xx} + qun = 0, \quad n - dn_{xx} = R|u|^2. \tag{1}$$

При $d = 0$ система (1) переходит в обобщенное уравнение Шредингера с керровской нелинейностью. Используя прямой метод из [2], солитонное решение системы (1) будем строить в виде

$$u(z, x) = v(\xi) \exp(i\eta), \quad \xi = \alpha z + \beta x + \varphi, \quad \eta = \omega z + kx + \psi, \tag{2}$$

$$n(z, x) = f(\xi),$$

где $v(\xi), f(\xi)$ – неизвестные волновые функции; $\alpha, \beta, \varphi, k, \omega, \psi$ – произвольные действительные числа. Подставляя (2) в (1), получим систему определяющих уравнений

$$(\alpha + 2p\beta k)v'(\xi) = 0, \quad f''(\xi) = A[f(\xi) - Rv^2(\xi)], \quad v''(\xi) = Bv(\xi) - Cv(\xi)f(\xi), \tag{3}$$

$$A = \frac{1}{d\beta^2}, \quad B = \frac{\omega + pk^2}{p\beta^2}, \quad C = \frac{q}{p\beta^2}.$$

Исследуем систему (3). Пусть $v(\xi) = \text{const} \equiv v_0$. Тогда из (3) найдем

$$f(\xi) = \text{const} = f_0 = B/C, \quad v_0^2 = \frac{f_0}{R} = \frac{B}{CR}.$$

Таким образом, система (1) имеет элементарное решение вида

$$u(z, x) = \pm \sqrt{\frac{B}{CR}} \exp(i\eta), \quad n(z, x) = \frac{B}{C}, \quad \frac{B}{CR} > 0.$$

Пусть выполнено условие

$$\alpha + 2p\beta k = 0. \tag{4}$$

Тогда система (3) сводится к нелинейной системе из двух уравнений

$$f'' = A(f - Rv^2), \quad v'' = Bv - Cv f, \tag{5}$$

причем, если $v(\xi)$ – решение системы (5), то и $(-v(\xi))$ – решение системы (5). Это значит, что система (5) наследует аналогичное свойство уравнения Шредингера с керровской нелинейностью.

Решение системы (5) строится в виде [3]

$$f(\xi) = M\Phi^{-1}(\xi), \quad v(\xi) = N\Phi^{-1}(\xi), \quad (6)$$

где M, N – неизвестные параметры,

$$\Phi(\xi) = \lambda_0 + \lambda_1 \exp(\xi) + \lambda_2 \exp(-\xi), \quad (7)$$

$\lambda_0 > 0, \lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0$. Подставляя (6), (7) в (5), получим систему определяющих уравнений относительно коэффициентов системы (5) и параметров солитона

$$A=1, \quad 3\lambda_0 M = RN^2, \quad \lambda_0^2 = 4\lambda_1\lambda_2, \quad B=1, \quad 3\lambda_0 = CM, \quad (8)$$

т. е., справедлива

Т е о р е м а 1. Для того чтобы уравнение (1) имело решение вида (2), (6), (7) необходимо и достаточно, чтобы выполнялись соотношения (4), (8).

Соотношения (4), (8) являются законами распространения указанного солитонного решения и представляют интерес для приложений. В частности, из (8) следует, что

$$RN^2 = CM^2 \quad \text{или} \quad \left(\frac{M}{N}\right)^2 = \frac{R}{C}.$$

Отметим, что искомые функции $f(\xi), v(\xi)$ удовлетворяют следующим краевым условиям:

$$f(\pm\infty) = v(\pm\infty) = 0,$$

которые характерны для огибающих светлого солитона.

Интересно, что при $\lambda_1 = \lambda_2 = 1, \lambda_0 = 2$ решение $u(z, x)$ можно записать в виде

$$u(z, x) = 4Nch^{-2} \left(\frac{\xi}{2}\right) \exp(i\eta). \quad (9)$$

Решение (9) отличается от классического светлого солитона степенью (-2) . Наличием этого свойства система (1) отличается от классического уравнения Шредингера с керровской нелинейностью.

II. Анализ системы (5) на основе th -метода и баланса порядка старших производных с нелинейными членами показывает, что в качестве ее решения можно взять анзац вида

$$f(\xi) = \lambda_2 th^2 \xi + \lambda_1 th \xi + \lambda_0, \quad v(\xi) = \chi_2 th^2 \xi + \chi_1 th \xi + \chi_0, \quad (10)$$

где $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \chi_0, \chi_1, \chi_2$ – неизвестные действительные числа. Подставляя (10) в (5), получим следующую систему определяющих уравнений:

$$\begin{aligned} 2\lambda_2 &= A[\lambda_0 - R\chi_0^2], & 2\chi_2 &= (B - C\lambda_0)\chi_0, \\ -2\lambda_1 &= A[\lambda_1 - 2R\chi_0\chi_1], & -2\chi_1 &= B\chi_1 - C(\chi_0\lambda_1 + \lambda_0\chi_1), \\ -8\lambda_2 &= A[\lambda_2 - R(\chi_1^2 + 2\chi_0\chi_2)], & -8\chi_2 &= B\chi_2 - C(\chi_0\lambda_2 + \lambda_1\chi_1 + \lambda_0\chi_2), \\ \lambda_1 &= -AR\chi_1\chi_2, & 2\chi_1 &= -C(\chi_1\lambda_2 + \lambda_1\chi_2), \\ \lambda_2 &= -AR\chi_2^2, & 6 &= -C\lambda_2. \end{aligned} \quad (11)$$

Т е о р е м а 2. Для того чтобы система (1) имела решение вида (2), (10) необходимо и достаточно, чтобы выполнялись соотношения (4), (11).

Разрешимость системы (11) обеспечивает существование солитонных решений указанной формы (10).

Рассмотрим частный случай, когда $\lambda_1 = \chi_1 = 0, p = 1/2, q = 1, R = 1, \beta = 1$. В этом случае $C = 2, A = 1/d, \lambda_2 = -3$. Кроме того, из системы (11) найдем

$$\lambda_0 = 3, \quad \chi_0 = \frac{3}{\sqrt{2}}, \quad \chi_2 = -\frac{3}{\sqrt{2}}, \quad d = \frac{1}{4}, \quad A = 4, \quad B = 4.$$

Таким образом, система

$$iu_z + \frac{1}{2}u_{xx} + un = 0, \quad n - \frac{1}{4}n_{xx} = |u|^2$$

имеет решение

$$u(z, x) = \frac{3}{\sqrt{2}} ch^{-2}\xi \exp(i\eta), \quad n(z, x) = 3ch^{-2}\xi.$$

III. Рассмотрим оптическую систему с зависящими от z коэффициентами

$$iu_z + p(z)u_{xx} + q(z)un = 0, \quad n - dn_{xx} = R|u|^2, \quad (12)$$

где $p(z), q(z)$ – непрерывные интегрируемые на всей числовой оси функции; R, d – константы. Решение системы (12) строится в виде [4]

$$u(z, x) = v(\xi) \exp(i\eta), \quad \xi = \int_0^z \alpha(s) ds + \beta x + \varphi, \quad \eta = \int_0^z \omega(s) ds + kx + \psi, \quad (13)$$

$$n(z, x) = f(\xi),$$

где $\alpha(s), \omega(s)$ – непрерывные интегрируемые на всей числовой оси функции. Подставляя (13) в (12), получим

$$[\alpha(z) + 2\beta kp(z)]v'(\xi) = 0, \quad f''(\xi) = A[f(\xi) - Rv^2(\xi)], \quad v''(\xi) = B(z)v(\xi) - C(z)v(\xi)f(\xi), \quad (14)$$

$$A = \frac{1}{\beta^2 d}, \quad B(z) = \frac{\omega(z) + k^2 p(z)}{\beta^2 p(z)}, \quad C(z) = \frac{q(z)}{\beta^2 p(z)}.$$

Исследуем систему (14). Ее решение строится в виде (6), (7). Тогда из (8) найдем следующие соотношения:

$$A = \frac{1}{\beta^2 d} = 1, \quad 3\lambda_0 M = RN^2, \quad \lambda_0^2 = 4\lambda_1 \lambda_2, \quad (15)$$

$$\frac{\omega(z) + k^2 p(z)}{\beta^2 p(z)} \equiv \text{const} = 1, \quad 3\lambda_0 = c_0 M,$$

где

$$\frac{q(z)}{\beta^2 p(z)} \equiv \text{const} = c_0.$$

Соотношения (15) являются законами распространения солитонного решения (13), (6), (7) системы (12). Из них, в частности, следует, что функции $\omega(z), q(z), p(z)$ должны быть линейно зависимыми.

Таким образом, справедлива

Т е о р е м а 3. Пусть выполнены условия (15). Тогда система (12) имеет солитонное решение

$$u(t, x) = N \left[\lambda_0 + \lambda_1 \exp \left(\int_0^z \alpha(s) ds + \beta x + \varphi \right) + \lambda_2 \exp \left(- \int_0^z \alpha(s) ds + \beta x + \varphi \right) \right]^{-1} \times$$

$$\exp \left\{ i \left[\int_0^z \omega(s) ds + kx + \psi \right] \right\},$$

$$n(z, x) = M \left[\lambda_0 + \lambda_1 \exp \left(\int_0^z \alpha(s) ds + \beta x + \varphi \right) + \lambda_2 \exp \left(- \int_0^z \alpha(s) ds + \beta x + \varphi \right) \right]^{-1}.$$

IV. Исследуем вопрос о существовании решения (10) для системы (12). Для этого подставим (10) в (14) и предположим, что

$$\frac{\omega(z) + k^2 p(z)}{\beta^2 p(z)} \equiv \text{const} = b_0, \quad \frac{q(z)}{\beta^2 p(z)} \equiv \text{const} = c_0. \quad (16)$$

Тогда соотношения (11) примут вид

$$\begin{aligned}
2\lambda_2 &= A[\lambda_0 - R\chi_0^2], & 2\chi_2 &= (b_0 - c_0\lambda_0)\chi_0, \\
-2\lambda_1 &= A[\lambda_1 - 2R\chi_0\chi_1], & -2\chi_1 &= b_0\chi_1 - c_0(\chi_0\lambda_1 + \lambda_0\chi_1), \\
-8\lambda_2 &= A[\lambda_2 - R(\chi_1^2 + 2\chi_0\chi_2)], & -8\chi_2 &= b_0\chi_2 - c_0(\chi_0\lambda_2 + \lambda_1\chi_1 + \lambda_0\chi_2), \\
\lambda_1 &= -AR\chi_1\chi_2, & 2\chi_1 &= -c_0(\chi_1\lambda_2 + \lambda_1\chi_2), \\
6\lambda_2 &= -AR\chi_2^2, & 6 &= -c_0\lambda_2.
\end{aligned} \tag{17}$$

Таким образом, справедлива

Т е о р е м а 4. Пусть выполнены условия (16), (17). Тогда система (12) имеет решение

$$\begin{aligned}
u(z, x) &= \left[\chi_2 th^2 \xi + \chi_1 th \xi + \chi_0 \right] \exp(i\eta), & n(z, x) &= \lambda_2 th^2 \xi + \lambda_1 th \xi + \lambda_0, \\
\xi &= \int_0^z \alpha(s) ds + \beta x + \varphi, & \eta &= \int_0^z \omega(s) ds + kx + \psi.
\end{aligned}$$

З а м е ч а н и е. Аналогичные результаты справедливы для системы вида

$$iu_z + pu_{xx} + qun = 0, \quad n - dn_{xx} = R|u|^2 + Q|u|^4.$$

Литература

1. Zhong W.-P., Belic M., Huang T. // Applied Physics B. 2011. Vol. 102. P. 53–58.
2. Жестков С. В. Конструктивные методы построения глобальных решений нелинейных уравнений в частных производных. Могилев: МГУ им. А. А. Кулешова, 2006.
3. Жестков С. В., Новашинская В. С. // Докл. НАН Беларуси. 2010. Т. 54, № 3. С. 41–46.
4. Жестков С. В., Новашинская В. С. // Докл. НАН Беларуси. 2012. Т. 56, № 4. С. 32–36.

S. V. ZHESTKOV

zhestkov_s@rambler.ru

A NEW ANSATS AND EXACT SOLUTIONS OF GENERIC NONLOCAL OPTICAL SYSTEM

Summary

The direct method of constructing soliton solutions of generic nonlocal optical system is developed.

ФИЗИКА

УДК 621.762:71; 539.216; 538.951-405

Член-корреспондент Ф. Ф. КОМАРОВ, И. М. КЛИМОВИЧ,
В. А. ЗАЙКОВ, В. В. ПИЛЬКО

**КОНТРОЛИРУЕМОЕ НАНЕСЕНИЕ Ti-Al-N ПОКРЫТИЙ
МЕТОДОМ РЕАКТИВНОГО МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ**

Белорусский государственный университет, Минск

Поступило 15.09.2014

Введение. Благодаря низкому коэффициенту трения, повышенной твердости и термостойкости, а также стойкости к окислению, пленки Ti-Al-N увеличивают срок эксплуатации изделий и улучшают их механические свойства [1; 2]. Именно поэтому Ti-Al-N покрытия являются коммерчески привлекательными для многих приложений промышленности.

Большинство выполненных до сих пор работ по нанесению Ti-Al-N покрытий выполнялось методом катодно-дугового осаждения [3; 4]. Целью этих исследований было определение оптимальных режимов, обеспечивающих однородность слоев по поверхности подложки и максимальное устранение капельной фракции. Однако полностью устранить капельную фракцию и обеспечить высокую гомогенность поверхности этим методом не удастся. В связи с этим для получения покрытий Ti-Al-N в настоящей работе использовался метод реактивного магнетронного распыления. Однако процесс магнетронного распыления неустойчив и для высокой воспроизводимости элементного состава пленок требует управления расходом газов в реальном времени. Способ контроля магнетронного нанесения, используемый в данной работе, заключается в стационарном поддержании неравновесного процесса с помощью прибора спектрального управления.

В качестве экспериментального подтверждения эффективности использования покрытий Ti-Al-N в промышленности в настоящей работе выполнено исследование элементного состава, микроструктуры, коэффициента трения и твердости полученных покрытий.

Методика нанесения пленочных структур. Получение необходимой структуры и химического состава покрытий осуществляется обычно подбором режимов осаждения, таких как парциальное давление рабочей газовой смеси, температура и отрицательное напряжение смещения подложки.

Непосредственно перед напылением была проведена ионная очистка подложек. Выбран следующий режим работы ионного источника «Радикал»: рабочее давление $P = 4,5 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст.; ток разряда $I = 20$ мА; напряжение разряда $U = 2,4$ кВ; время очистки $t = 5$ мин. Выбор параметров разряда и времени очистки обусловлен стабильным горением разряда, а также распылением адсорбированного слоя и частично подложки, что значительно увеличивает адгезию пленки к подложке.

Процесс распыления проводили с использованием составной мишени (110 мм) на основе Ti с цилиндрическими Al вставками (6 мм), расположенными по среднему диаметру зоны эрозии. Среднее значение диаметра зоны эрозии составляет 84 мм. Площадь алюминиевых вставок в зоне эрозии составляла примерно 76 %.

Режимы реактивного магнетронного нанесения: давление $P = 5,4 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст.; напряжение на источнике питания $U = 300-320$ В; ток разряда $I = 1,3-1,75$ А; смещение на подложке $U = -90$ В; температура подложки $T = 450$ °С. Время напыления выбиралось в соответствии

с предъявляемыми требованиями к толщине покрытия. Некоторые пленки требовали напыления подслоя TiAl для улучшения адгезионных качеств покрытия.

В рассматриваемом случае управление расходом аргона осуществлялось с помощью обратной связи между выходным сигналом вакуумметра и сигналом на натекаТЕЛЬ аргона, что позволяло поддерживать в вакуумной камере требуемую величину полного давления смеси газов аргон–азот. Контроль и управление напуском реактивного газа проводили с помощью прибора спектрального управления, который позволял для заданного значения мощности разряда поддерживать постоянное соотношение потоков распыленных атомов Ti и Al и потока азота на подложку [5]. Для управления расходом азота использовалась зависимость характеристик спектра оптического излучения разряда от содержания азота в вакуумной камере. В качестве параметра контроля использовалась линия титана TiII 506,5 нм, величина интенсивности которой связана со степенью реактивности α [6].

Исследование свойств полученных покрытий. Элементный состав сформированных пленочных структур исследовался с помощью метода резерфордовского обратного рассеяния (ROP) с использованием ускоренных ионов гелия с энергией 1,2 МэВ на ускорительном комплексе AN-2500 фирмы HVEE. Обработка спектров ROP выполнялась с использованием программных комплексов HEAD и SIMNRA. В табл. 1 приведены количественные соотношения элементов в покрытии Ti-Al-N, полученных при различном соотношении потоков частиц распыляемой мишени и азота.

Т а б л и ц а 1. Количественные соотношения элементов в покрытии при нанесении в различных режимах

α	Глубина, $\times 10^{-15}$ ат/см ²	Ti, %	Al, %	N, %	O, %	Al/Ti	N / (Al + Ti)
0,58	350	33	17	11	39	0,51	0,22
	2850	33	17	50	0	0,51	1
0,53	400	31	19	10	40	0,61	0,2
	2650	31	19	50	0	0,61	1

Из данных табл. 1 следует, что кислород присутствует только в поверхностном слое. Так как толщина окисла достаточно мала (~30 нм), можно сделать вывод о том, что поверхность пленки окисляется под воздействием окружающей среды после выгрузки образцов из вакуумной камеры.

Толщина покрытий измерялась с помощью растрового электронного микроскопа марки Hitachi S-4800 на сколах образцов и составляла 680–720 нм. Скорость напыления пленок Ti-Al-N при различном содержании азота в смеси рабочих газов отличалась и составляла: для $\alpha = 0,65$ –67,6 нм/мин; для $\alpha = 0,58$ –70 нм/мин и для $\alpha = 0,53$ –72 нм/мин.

На рис. 1 представлены фотографии сечений покрытий Ti-Al-N. Для пленок с избытком и дефицитом азота характерна столбчатая структура. В покрытиях стехиометрического состава столбчатая микроструктура переходит в глобулярную микроструктуру. Превращение столбчатой микроструктуры в глобулярную объясняется в [6] как трансформация однофазной системы в двухфазную (в случае пленки с глобулярной структурой формируется двухфазная пленка из смеси зерен TiN с ГЦК структурой и AlN с гексагональной решеткой типа вюрцита).

Для изучения трибомеханических характеристик покрытий был применен метод исследования износостойкости при трении в паре «диск–плоскость» с материалом диска из нержавеющей

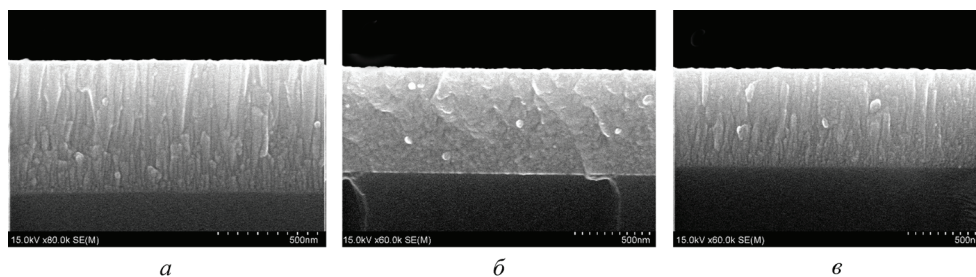


Рис. 1. Сечения Ti-Al-N покрытий с различным содержанием азота: $a - \alpha = 0,48$, $b - \alpha = 0,54$, $c - \alpha = 0,58$

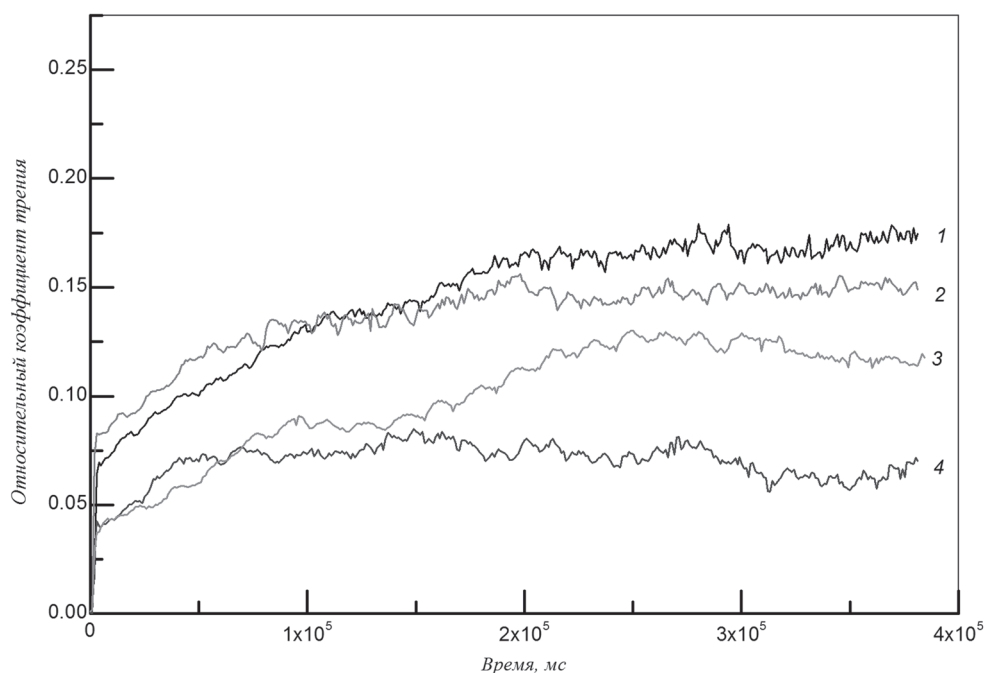


Рис. 2. Зависимость коэффициента трения от времени испытания для пленок Ti-Al-N с различным содержанием азота: 1 – нержавеющая сталь; 2 – $\alpha = 0,65$; 3 – $\alpha = 0,53$; 4 – $\alpha = 0,58$

стали 12X18H10T. На рис. 2 представлена зависимость относительного коэффициента трения от времени нагрузки. Исследования проводились при следующих параметрах: время испытаний – 400 с, нагрузка – 5 г. Образец со стехиометрическим покрытием показал уменьшение относительного коэффициента трения в 3 раза по сравнению с относительным коэффициентом трения подложки из нержавеющей стали.

Измерение микротвердости покрытий на основе Ti-Al-N проводилось на твердомере DuraScan 20. С целью учета влияния толщины покрытия на регистрируемые значения микротвердости измерения проводились при разных нагрузках: 0,98; 0,49; 0,24 и 0,09 Н.

В рассматриваемом случае большое влияние на процесс измерения твердости и величину регистрируемой данным методом твердости оказывает состояние поверхности подложки и ее состав. Можно предположить, что использование в качестве подложек твердосплавных материалов (ВК-20, ТК-15) приведет к дополнительному увеличению регистрируемого значения твердости системы покрытие–подложка в 1,5–2 раза.

Результаты измерений микротвердости покрытий, полученных при различных степенях реактивности α , представлены в табл. 2.

Т а б л и ц а 2. Результаты измерений микротвердости покрытий (ГПа)

Подложка	α	Нагрузка P , Н			
		0,09	0,24	0,49	0,98
Сталь 12X18H10T	0,65	11,020	5,390	3,260	2,800
	0,58	19,706	16,964	10,452	3,584
	0,53	15,562	13,188	8,472	3,268

По сравнению с микротвердостью подложки (3,594 ГПа), значения Н для нанесенных в стехиометрическом режиме покрытий увеличиваются в 5,48 раз.

Как следует из данных табл. 2, величина микротвердости значительно зависит от условий нанесения. Наилучшие показатели твердости при умеренной нагрузке (Н изменяется от ~11 до ~20 ГПа) соответствуют стехиометрическому режиму нанесения со степенью реактивности $\alpha = 0,58$.

Заключение. Проведенные исследования показали, что структура и механические свойства покрытий существенно зависят от условий их напыления. Пленки Ti-Al-N с дефицитом или из-

бытком азота имеют столбчатую структуру, в то время как пленки стехиометрического состава имеют глобулярную структуру; установлено, что наименьший относительный коэффициент трения покрытий (в 3 раза меньше, чем у нержавеющей стали) и максимальное значение твердости (19,7 ГПа) соответствуют пленкам с глобулярной структурой стехиометрического состава. Таким образом, полученные экспериментальные результаты доказывают возможность эффективного использования защитных покрытий Ti-Al-N в промышленности, включая режущие инструменты и иную оснастку для металлообработки.

Литература

1. Комаров Ф. Ф., Константинов С. В., Пилько В. В. // Трение и износ. 2014. № 3. С. 293–303.
2. Cavaleiro A., De Hosson J. T. // Nanostructured Coatings. Berlin: Springer-Verlag, 2006.
3. Погребняк А. Д., Шпак А. П., Азаренков Н. А., Береснев В. М. // Успехи физ. наук. 2009. Т. 179, № 1. С. 35–64.
4. Белоус В. А., Васильев В. В., Лучанинов А. А. и др. // ФИП. 2009. Т. 7, № 3. С. 216–222.
5. Бурмаков А. П., Зайков В. А., Лабуда А. А., Черный В. Е. // Журн. прикладной спектроскопии. 1996. Т. 63, № 6. С. 1049–1053.
6. Бизюков А. А., Кашаба А. Е., Середа К. Н. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. С. 69–73.
7. Музил И. // Физические и механические свойства твердых нанокompозитных пленок, получаемых реактивным магнетронным напылением. Наноструктурные покрытия. М., 2011.

F. F. KOMAROV, I. M. KLIMOVICH, V. A. ZAIKOV, V. V. PILKO

imklimovich@gmail.com

FORMATION OF Ti-AL-N COATINGS BY CONTROLLED REACTIVE MAGNETRON SPUTTERING

Summary

Ti-Al-N films were synthesized by a reactive magnetron sputtering to investigate the effects of sputtering conditions on the microstructure and mechanical properties. The deposited coatings were characterised by RBS (Rutherford backscattering spectroscopy), scanning electron microscopy and microindentation. Results show that deposition parameters have a large influence on the hardness of deposited coatings and their microstructure. It was revealed that the high hardness and low friction coefficient are corresponded to films with globular microstructure.

УДК 539.12, 530.145

Ю. А. КУРОЧКИН, И. Ю. РЫБАК, Д. В. ШЁЛКОВЫЙ

КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ НА ОРИСФЕРЕ ТРЕХМЕРНОГО ПРОСТРАНСТВА ЛОБАЧЕВСКОГО

(Представлено членом-корреспондентом Л. М. Томильчиком)

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск

Поступило 01.09.2014

Ведение. В 1926 г. Шредингером была предложена концепция того, что сегодня называют когерентным состоянием. После работ Глаубера [1] и Сударшана [2] 1963 г. был введен термин «когерентные состояния» и исследованы их свойства для некоторых квантовых систем. Описание обобщенных когерентных состояний на произвольных группах Ли было дано Переломовым [3; 4] и Гилмором [5]. На сегодняшний день обобщенные когерентные состояния получили широкое применение в различных областях физики: в квантовой оптике, в теории квантовых компьютеров, при решении общих проблем квантовой теории, при описании некоммутативной квантовой механики, в физике конденсированного состояния. Отметим также идею кватернионных когерентных состояний, выдвинутую при описании квантовомеханических состояний электрона в однородном магнитном поле в работе [6].

Параллельно с развитием методов когерентных состояний происходило развитие квантовой механики в пространствах постоянной кривизны. В работах Шредингера, Инфельда и Стивенсона были решены задачи об атоме водорода в пространствах отрицательной и положительной кривизны. Спектр энергий атома водорода в пространствах постоянной кривизны в дальнейшем исследовался в ряде работ [8–10]. Было показано, что задачи классической и квантовой механики в пространствах постоянной кривизны значительно расширяют множество интегрируемых динамических систем и позволяют решить ряд новых проблем [11]. Поскольку квантовомеханические задачи в пространствах постоянной кривизны, как и задачи квантовой механики в плоских пространствах, как правило, обладают высокой симметрией, то проблема построения обобщенных когерентных состояний, в принципе, аналогична данной проблеме в плоских пространствах. Однако в случае пространства Лобачевского (например, трехмерного) ситуация выделена тем, что в нем существуют поверхности – орисферы, на которых реализуется геометрия евклидова пространства. Данное обстоятельство открывает возможность введения в пространстве Лобачевского стандартных когерентных состояний, связанных с алгеброй Ли группы Гейзенберга–Вейля, которая, как известно, реализуется на множестве треугольных матриц. Это, в свою очередь, открывает дополнительные возможности для применения геометрии Лобачевского к решению задач в плоском пространстве.

Постановка задачи и решение. Рассмотрим стационарную квантовомеханическую задачу

$$H\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

в пространстве Лобачевского радиуса кривизны ρ с пространственным интервалом, записанным в орисферических координатах

$$dl^2 = e^{-2z/\rho}(dr^2 + r^2 d\varphi^2) + dz^2, \quad (2)$$

с гамильтонианом, содержащим взаимодействие в виде потенциала $V(r, \varphi)$ – независящего от переменной z :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(e^{2z/\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(r, \varphi) \right] + e^{2z/\rho} \frac{\partial}{\partial z} e^{-2z/\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (3)$$

Задача (1) с гамильтонианом (3) допускает разделение переменных

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(r, \varphi) \right] \chi(r, \varphi) = k_{\perp}^2 \chi(r, \varphi), \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} e^{-2z/\rho} \frac{\partial}{\partial z} w(z) = (k^2 e^{-2z/\rho} - k_{\perp}^2) w(z), \quad (5)$$

здесь введены обозначения $\Psi(r, \varphi, z) = \chi(r, \varphi)w(z)$, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

Общее решение уравнения (5) имеет вид $e^{z/\rho} J_{\sigma}(\rho k_{\perp} e^{z/\rho}) \Gamma(1 + \sigma)$, где J_{σ} – функции Бесселя первого рода; Γ – гамма-функция; $\sigma^2 = 1 - k^2 \rho^2$. К уравнению (5) в данной работе мы более не будем обращаться.

Очевидно, что уравнение (4) есть уравнение Шредингера (уравнение Гельмгольца) для стационарной задачи в двумерном евклидовом пространстве, записанное в цилиндрической системе координат r, φ , которое может быть переписано в декартовых координатах x, y , которые совпадают с кваздекартовыми координатами x, y одной из координатных систем, введенных в работе М. Н. Олевского [12].

Таким образом, (4) может быть переписано в декартовых координатах x, y , и для задачи на орисфере справедливы стандартные перестановочные соотношения для операторов проекций импульса

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \text{ и } p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y},$$

введенные на основе стандартной процедуры, т. е. имеет место алгебра Гейзенберга–Вейля

$$\begin{aligned} [x, p_x] &= [y, p_y] = i\hbar I, & [x, y] &= [p_x, p_y] = 0, \\ [x, I] &= [I, y] = [p_x, I] = [I, p_y] = 0, \end{aligned}$$

где I – единичный оператор.

Или для операторов рождения и уничтожения

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{x + ip_x}{\sqrt{2\hbar}}, \quad a_x^{\dagger} = \frac{x - ip_x}{\sqrt{2\hbar}}, \quad a_y = \frac{y + ip_y}{\sqrt{2\hbar}}, \quad a_y^{\dagger} = \frac{y - ip_y}{\sqrt{2\hbar}}; \\ [a_k, a_l^{\dagger}] &= \delta_{kl} I, \quad [a_k^{\dagger}, a_l^{\dagger}] = [a_k, a_l] = [a_k, I] = [a_k^{\dagger}, I] = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где $k, l = 1, 2$ соответствуют x или y .

Заметим, что из выше приведенного изложения следует, в принципе, общее положение, согласно которому любая двумерная задача для уравнения Гельмгольца с потенциалом в плоском двумерном пространстве может быть вложена в трехмерное пространство Лобачевского. Кроме того, очевидно, любая интегрируемая двумерная квантовомеханическая система в евклидовом пространстве порождает интегрируемую квантовомеханическую систему в трехмерном пространстве Лобачевского [13].

Когерентные состояния, как известно, определяются как собственные состояния операторов уничтожения с комплексными собственными значениями

$$a_x |z_1\rangle = z_1 |z_1\rangle, \quad a_y |z_2\rangle = z_2 |z_2\rangle.$$

Выражение для полного пространства когерентных состояний двумерной задачи на орисфере является тензорным произведением состояний, построенных с помощью операторов одной моды. При этом когерентные состояния определяются формулой

$$|z_1, z_2\rangle = \exp(z_1 a_x^{\dagger}) \exp(z_2 a_y^{\dagger}) |0, 0\rangle, \quad (7)$$

где вакуумное состояние определяется согласно условию

$$a_x |0, 0\rangle = a_y |0, 0\rangle = 0.$$

Для когерентных состояний имеет место условие полноты, которое, в частности, для состояний на орисфере (7) имеет вид

$$\int |z_1, z_2\rangle \langle z_1, z_2| d\mu(z_1, z_2) = \int |z_1\rangle \langle z_1| d\mu(z_1) \int |z_2\rangle \langle z_2| d\mu(z_2) = I.$$

Для когерентных состояний имеют место минимизированные соотношения неопределенностей

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y = \frac{\hbar}{2},$$

которые здесь имеют формальный математический смысл. Конкретный физический смысл они могут приобрести только в той физической модели, в которой введенные выше когерентные состояния будут использоваться.

Ниже мы рассмотрим ряд задач, в которых естественным образом могут быть введены когерентные состояния, рассмотренные выше.

1. Осциллятор на орисфере.

Если в уравнении (4) положить потенциал $V(r, \varphi) = \omega^2 r^2$, то задача на орисфере сводится к задаче о двумерном изотропном осцилляторе на евклидовой плоскости. Как хорошо известно, когерентные состояния, введенные выше, особенно адекватны для описания данной задачи. Следует иметь в виду, что данный осциллятор хотя и совпадает по форме с двумерным изотропным осциллятором, однако это осциллятор в трехмерном пространстве Лобачевского и он отличается от трехмерного изотропного осциллятора в этом же пространстве.

2. Квантовомеханические состояния заряженной частицы в аналоге постоянного однородного магнитного поля.

Гамильтониан задачи имеет вид [14]

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} e^{2z/\rho} \left(\frac{1}{r^2} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e}{\hbar c} A_\varphi \right)^2 - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(e^{-2z/\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right).$$

Учитывая явный вид потенциала $A_\varphi = -B \frac{r^2}{2}$ в орисферической системе координат, заданной формулой (2), можно записать операторы, коммутирующие с гамильтонианом

$$\begin{aligned} P_1 &= -i\hbar \cos \varphi \partial_r + \frac{i\hbar}{r} \sin \varphi \partial_\varphi + \delta r \sin \varphi, \\ P_2 &= -i\hbar \sin \varphi \partial_r - \frac{i\hbar}{r} \cos \varphi \partial_\varphi - \delta r \cos \varphi, \\ L_3 &= -i\hbar \partial_\varphi, \end{aligned} \quad (8)$$

где будем использовать следующие обозначения: $\delta = \frac{eB}{2c}$.

Стоит отметить, что кривизна не входит явно в операторы (8). Более того, для данного случая, разделяя переменные, уравнение Шредингера можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{2Em}{\hbar^2} e^{-2z/\rho} Z(z) + \frac{\partial}{\partial z} \left(e^{-2z/\rho} \frac{\partial}{\partial z} Z(z) \right) &= \lambda Z(z), \\ \frac{1}{r^2} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e}{\hbar c} A_\varphi \right)^2 F(r, \varphi) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} F(r, \varphi) \right) &= \lambda F(r, \varphi). \end{aligned}$$

То есть, вся особенность задачи сводится к виду функции $Z(z)$. А для плоскости с переменными r, φ задача эквивалентна задаче в плоском пространстве.

Перепишем в квазидекартовой системе координат

$$\begin{aligned} P_1 &= -i\hbar \partial_x + \delta y, \\ P_2 &= -i\hbar \partial_y - \delta x, \\ L_3 &= -i\hbar (x \partial_y - y \partial_x). \end{aligned} \quad (9)$$

По аналогии с (6) можно переписать выражения (9) с использованием операторов рождения и уничтожения

$$P_1 = \delta(a_x - a_x^+) + i\frac{\delta}{2}(a_x + a_x^+),$$

$$P_2 = \delta(a_y - a_y^+) - i\frac{\delta}{2}(a_x + a_x^+),$$

$$L = a_x^+ a_y - a_x a_y^+.$$

Введенные операторы удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$[L, P_1] = -P_2, \quad [P_2, L] = -P_1, \quad [P_1, P_2] = -i\hbar m\omega,$$

где $\omega = \frac{eB}{mc}$.

Введем новые операторы, линейные комбинации (9)

$$b^+ = \frac{P_2 - iP_1}{\sqrt{2\gamma}}, \quad b^- = \frac{P_1 - iP_2}{\sqrt{2\gamma}}, \quad n_b = -iL, \quad I = 1, \quad (10)$$

где $\gamma = im\omega\hbar$.

Тогда будут выполняться следующие соотношения:

$$[b^-, b^+] = I, \quad [n_b, b^+] = b^+, \quad [n_b, b^-] = -b^-, \quad (11)$$

$$[b^-, I] = [I, b^+] = [n_b, I] = 0.$$

Коммутационные соотношения (11) образуют алгебру Ли группы треугольных 3×3 -матриц. Операторы, введенные в (10), совпадают по своим свойствам с операторами рождения a^+ , уничтожения a^- , числа частиц n и единичного I оператора алгебры h_4 . Соответствующей ей группой будет группа Гейзенберга–Вейля H_4 . Стационарной подгруппой группы H_4 является $U(1) \otimes U(1)$ с алгеброй из элементов $\{I, n_b\}$. А элементы этой подгруппы будут иметь вид

$$h = e^{i(\delta n + \phi I)},$$

таким образом, действие элементов подгруппы $U(1) \otimes U(1)$ на квантовое состояние сводится к умножению на фазовый множитель, т. е. не меняет его.

Можно записать унитарное неприводимое представление смежных классов $H_4 / U(1) \otimes U(1)$ в виде

$$D(\beta) = \exp(\beta b^+ - \beta^* b^-).$$

Распишем $D(\beta)$ с помощью формулы Кэмпбелла–Хаусдорфа с учетом (11)

$$D(\beta) = \exp(-|\beta|^2 / 2) \exp(\beta b^+) \exp(\beta^* b^-). \quad (12)$$

И следовательно, когерентное квантовое состояние $|\beta\rangle$ в данном случае может быть записано как

$$|\beta\rangle = D(\beta)|0\rangle = \exp(-|\beta|^2 / 2) \exp(\beta b^+) |0\rangle.$$

Оператор (12) может интерпретироваться как оператор трансляций, который преобразует волновую функцию без изменения энергии.

Таким образом, задача о когерентных состояниях заряженной частицы в аналоге постоянного и однородного магнитного поля в пространстве Лобачевского в орисферической системе координат является полным аналогом плоской задачи, описание которой можно найти, например, в работе [15].

Заключение. В работе в трехмерном пространстве Лобачевского в орисферической системе координат построены стандартные двумерные когерентные состояния нерелятивистской квантовомеханической частицы, описывающие поперечное ее движение. Показано, что такие состояния естественным образом возникают в ряде квантовомеханических задач в трехмерном пространстве Лобачевского, а именно, в задачах о двумерном осцилляторе на орисфере и о заряженной частице в аналоге постоянного и однородного магнитного поля. Одним из выводов, следующих из работы, является также то, что любая квантовомеханическая задача в плоском двумерном пространстве может быть достроена до трехмерной задачи в пространстве Лобачевского, что открывает новые возможности для приложений квантовой механики данного пространства.

Авторы благодарят В. В. Кудряшова за полезные советы.

Литература

1. *Glauber R. J.* // Phys. Rev. 1963. Vol. 131. P. 2766.
2. *Sudarshan E. C. G.* // Phys. Rev. Lett. 1963. Vol. 10. P. 277.
3. *Perelomov A. M.* // Commun. Math. Phys. 1972. Vol. 26. P. 222.
4. *Переломов А. М.* Обобщенные когерентные состояния и их применения. М., 1987.
5. *Gilmore R.* // Ann. Phys. (NY). 1972. Vol. 74. P. 391.
6. *Березин А. В., Курочкин Ю. А., Толкачев Е. А.* Кватернионы в релятивистской физике. УРСС, 2003.
7. *Schrödinger E. A.* // Proc. R. Irish. Acad. A. 1940. Vol. 46, N 1. P. 9–16.
8. *Higgs P.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1979. Vol. 12, N 4. P. 309–323.
9. *Leemon H.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1979. Vol. 12, N 4. P. 489–501.
10. *Bogush A. A., Kurochkin Yu. A., Otchik V. S.* // Yad. Fiz. 1998. Vol. 61, N 10. P. 1889–1892.
11. *Gritsev V. V., Kurochkin Yu. A.* // Phys. Rev. B. 2001 Vol. 64. P. 035308.
12. *Олевский М. Н.* // Мат. сб. 1950. Т. 27. С. 379–426.
13. *Kalnins E. G., Miller W. Jr., Pogosyan G. S.* // J. Phys., A. 2000. Vol. 33. P. 4105–4120.
14. *Kurochkin Yu. A., Otchik V. S., Ovsyuk E. M.* // Physics of Atomic Nuclei. 2012. Vol. 75, N 10. P. 1245–1249; Ядерная физика. 2012. Т. 76, № 10. С. 1316–1320.
15. *Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.* // Physica. 1972. Vol. 59, N 2. P. 241–256.

Yu. A. KUROCHKIN, I. Yu. RYBAK, Dz. V. SHOUKAVY

shoukavy@ifanbel.bas-net.by

COHERENT STATES ON HOROSPHERES OF THE THREE-DIMENSIONAL LOBACHEVSKY SPACE

Summary

The separation of variables in the Laplace–Beltrami operator (Hamiltonian for a free quantum mechanical particle) of three-dimensional Lobachevsky space in the horospherical and quasi Cartesian coordinates provides an opportunity to introduce standard (conventional) coherent states. We consider problems, (oscillator, quantum mechanical particle in the uniform magnetic field) for which introduced coherent states are the adequate method of investigation.

УДК 519.6

М. А. БЕЛОВ, Г. Г. КРЫЛОВ

**ПОЛЕВОЕ УПРАВЛЕНИЕ КОГЕРЕНТНЫМ КВАНТОВЫМ ТРАНСПОРТОМ ЗАРЯДА
В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ НАНОПРОВОЛОКАХ***(Представлено членом-корреспондентом Л. И. Гурским)*

Белорусский государственный университет, Минск

Поступило 23.04.2014

Введение. Современное состояние в области разработки и миниатюризации электрокомпонентов достигло уровня, когда в устройствах непосредственно используются когерентные квантовые явления. Можно выделить два основных направления исследований, а именно, разработку новых материалов и создание приборов, использующих квантовые эффекты.

Материалы с выраженной высокой анизотропией поверхности Ферми обычно называют одномерными системами. У одномерных систем наблюдается ряд необычных свойств [1; 2], в том числе аномальные флуктуации проводимости. Одномерные модели активно рассматривались на этапе становления физики твердого тела, однако ввиду наличия таких аномальных свойств, их изучение было приостановлено. Интерес к одномерным системам возрос, когда были выявлены необычные электронные свойства таких веществ, как тетрагидрофульвалена-тетрацианохинодимертан, $(\text{SN})_x$, $(\text{CH})_x$, сильно отличающиеся от свойств трехмерных систем [3].

Были предложены теории, описывающие электронные и транспортные свойства одномерных и квазиодномерных систем [4–7], давшие описания температурной и частотной зависимости проводимости, аномальным флуктуациям проводимости для мезоскопических образцов, эффектам, обусловленным неупорядоченностью, локализацией квантовых состояний и прочего. Изучались свойства одномерной цепочки (волновода) нетривиальной формы [8–10]. В работе [11] было показано существование связанных состояний в таких волноводах, а также то, что локализация квантовых состояний является общим свойством ансамблей таких систем. Успешное теоретическое обобщение этих свойств приведено в [12]. Также хотелось бы выделить работы [13; 14], в которых авторы используют модель Кронига–Пенни для оценки эффекта компенсации локализации волновой функции для неупорядоченной нанопроволоки с управлением проводимости продольным электрическим полем.

Очевидным применением таких нанопроволок является их использование в качестве канала полевого транзистора. Аналитическое описание когерентного квантового транспорта заряда в нанопроволоках, помещенных во внешнее электрическое поле, приводится в работе [15], где для вычисления проводимости использовался подход Ландауэра и первое приближение теории возмущений по величине поперечной составляющей внешнего электрического поля. В этой работе пересмотрена модель нанопроволоки, введенная в [14], и описана проводимость (коэффициент пропускания) изогнутой нанопроволоки, помещенной во внешнее электрическое поле с продольным ускоряющим и поперечным управляющим компонентами. Показано существование области управления проводимостью и квадратичная зависимость коэффициента пропускания от величины поля.

В случае больших значений напряжений внешнего поля, а также для учета особенностей геометрии системы, требуются обобщения модели [14; 15] и более точный расчет зависимостей проводимости от величины электрического поля, что и является целью настоящей работы.

Описание модели. Будем рассматривать одномерную цепочку из N равноотстоящих рассеивающих центров, размещенных вдоль кривой, задаваемой выражением

$$z = s(x) = H \left(\frac{\exp(\beta(x/L - 1/2)^2) - \exp(\beta/4)}{1 - \exp(\beta/4)} \right), \quad (1)$$

где параметр $\beta = 16 \log 0,5$ выбран так, чтобы полуширина цепочки была равна половине длины системы (рис. 1). Концы цепочки фиксированы, $s(0) = s(L) = 0$. Цепочка помещена в однородное электрическое поле с компонентами E_x и E_z вдоль соответствующих осей. Тогда потенциальная энергия заряда в электрическом поле в произвольной точке цепочки (1) задается выражением

$$U(x) = e(E_x x + E_z z(x)). \quad (2)$$

Поскольку продольное поле должно ускорять электроны, использовано отрицательное значение E_x . При этом рассматривается случай достаточно вытянутой формы цепочки, удовлетворяющей условию $L \gg H$, что позволяет допустить, что рассеивающие центры распределены равномерно вдоль направления оси x .

За основу рассмотрения взята работа [13], где для расчета проводимости используется модель цепочки неупорядоченных рассеивающих центров типа Кронига–Пенни. Следуя работам [13; 14], запишем квантовую модель Кронига–Пенни с использованием потенциала (2):

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=1}^N V_n \delta(x - na) + U(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x),$$

где E – собственное значение Гамильтониана в атомных единицах $Ry \equiv hcR_\infty \approx 13,61$ эВ; a – параметр решетки; V_n – случайный потенциал n -го рассеивающего центра. Используется однородное распределение амплитуд случайного потенциала $V_n \in (V - \Delta V, V + \Delta V)$.

Как и в работах [13; 14], в связи со свойствами рассеивающих потенциалов стационарное уравнение Шредингера может быть представлено посредством лестничного приближения отображения Пуанкаре

$$\Psi_{n+1} = \left(\cos k_{n+1} + \frac{k_n \sin k_{n+1} \cos k_n + V_n \frac{\sin k_{n+1}}{k_{n+1}}}{k_{n+1} \sin k_n} \right) \Psi_n - \frac{k_n \sin k_{n+1}}{k_{n+1} \sin k_n} \Psi_{n-1},$$

где $k_n = (E + eE_z na + eE_x z(na))^{1/2}$; N – количество атомов в цепочке.

Коэффициент пропускания системы выражается формулой

$$T = \frac{k_0}{k_N} \frac{|\exp(2ik_N) - 1|^2}{|\Psi_{N-1} - \Psi_N \exp(-ik_L)|^2}, \quad (3)$$

где $k_0 = E^{1/2}$, $k_N = (E + eE_x Na)^{1/2}$.

Как было упомянуто, известной отличительной чертой одномерных моделей является наличие аномальных флуктуаций проводимости [5]. В рассматриваемой системе соответствующий эффект выражается в том, что дисперсия коэффициента пропускания достигает 10 % при 10000 реализаций модели для каждого волнового числа. Для уменьшения дисперсии при расчете

используется геометрическое среднее по 100000 реализаций для каждого значения T , рассчитанного по (3).

Очевидно, что управляющим параметром будет не напряженность поперечного электрического поля E_z , а максимум потенциальной энергии этого поля в цепочке $U_z = eE_z z(L/2)$. Из аналогичных соображений введена и энергия ускоряющего поля $U_x = eLE_x$. Пример зависимости коэффициента пропускания (в логарифмическом масштабе) от волнового числа электронов k_N для двух различных U_z приведен на рис. 2.

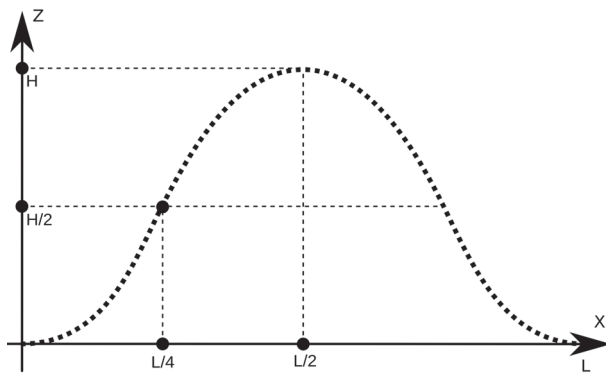


Рис. 1. Форма, размеры и ориентация нанопроволоки

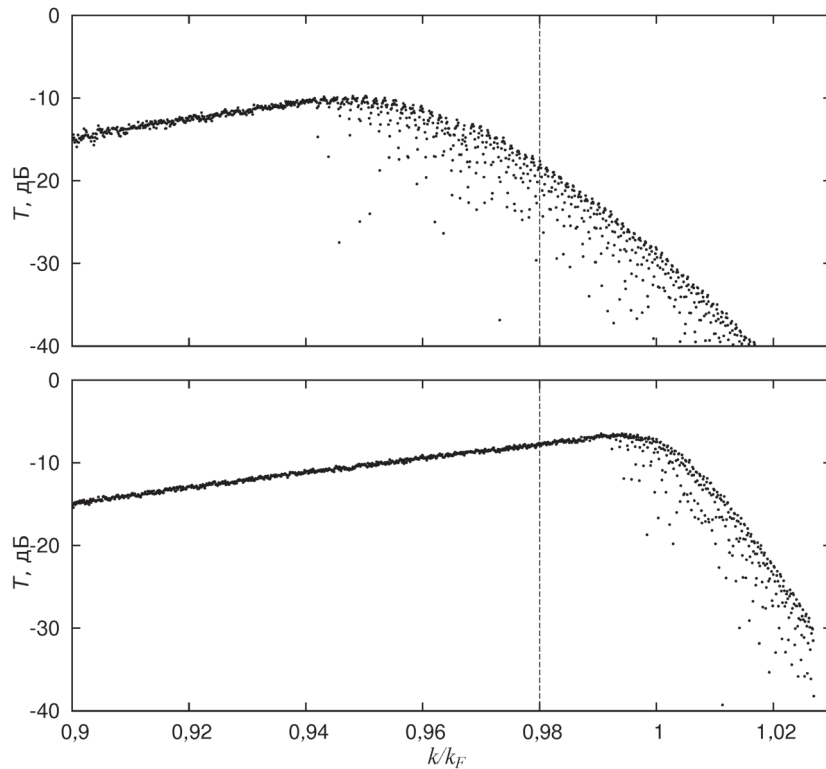


Рис. 2. Зависимость коэффициента пропускания рассеивающей цепочки в дБ ($10\log_{10}T$) от волнового числа k_N (в единицах волнового числа Ферми $k_F = \pi / a$) для двух различных значений энергии управляющего поля $U_z = 0,01$ эВ (сверху), $U_z = 0,07$ эВ (снизу)

Результаты моделирования. Прежде всего, интересна оценка влияния внешнего поля на коэффициент пропускания нанопроволоки, результаты моделирования показаны на рис. 2. Как видно, приложение поперечного поля может сильно изменять проводимость цепочки, особенно в диапазоне волновых чисел, близком к границе зоны Брюллиэна (например, для случая, обозначенного вертикальной штриховой линией на рис. 2); скачки коэффициента пропускания в этой области наблюдались также в работах [13; 14]. Таким образом, можно использовать поперечное электрическое поле для управления проводимостью в рассматриваемой одномерной системе.

Электроника является самой очевидной областью приложения эффекта полевого управления коэффициентом пропускания цепочки, при этом энергии, соответствующие волновым числам $k \approx k_F$, $E = k_F^2 / 2 \approx 50$ эВ, оказываются велики для электронных устройств. Соответственно, интересным представляется изучение проводящих свойств цепочки на более низких энергиях, а именно, при начальной энергии частицы $E = 1$ эВ, энергии продольного и поперечного поля до 1 эВ, средних значениях для потенциала рассеивающих центров $V = 1$ эВ и дисперсией $\Delta V = 0,1$ эВ. Следует также отметить, что точность выбранного метода не обеспечена для крайне малых значений T . При численном моделировании иногда наблюдалась потеря точности (антипереполнение) для значений T менее -200 дБ при использовании 80-битной арифметики с плавающей точкой, соответственно, в сообщении представлены лишь результаты со значениями T существенно выше данного уровня.

Во-первых, была изучена зависимость коэффициента пропускания от величины поперечного поля при нескольких значениях величин U_x и N . Вдалеке от границы зоны Брюллиэна флуктуации проводимости значительно ниже, так что усреднение по 1000 реализациям оказывается достаточным, и свойства системы ожидаются более стабильными. Результаты численного моделирования зависимости коэффициента пропускания T от величины поперечного поля U_z при нескольких значениях энергии управляющего поля U_x и количества рассеивающих центров N представлены на рис. 3. Как было упомянуто, теория возмущений дает квадратичную зависимость проводимости от U_z [15]. Однако в результате прямого численного моделирования показано, что

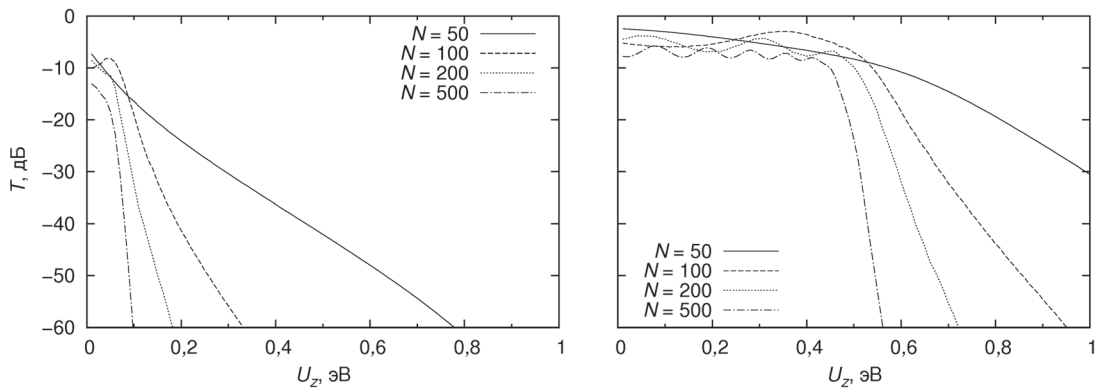


Рис. 3. Зависимость коэффициента пропускания цепочки T от энергии управляющего поля U_z при энергии ускоряющего поля $U_x = 0,1$ эВ (слева), $U_x = 1,0$ эВ (справа): сплошная линия для 50 рассеивателей, штриховая для 100, пунктирная для 200 и штрих-пунктирная для 500

наблюдается более сильное, а именно, экспоненциальное уменьшение коэффициента пропускания с ростом U_z . Следует также отметить, что наклон графика зависимости зависит от количества рассеивающих центров в цепочке. Приложение более сильного продольного поля приводит к сдвигу точки начала экспоненциальной зависимости вправо. Слева от этой точки коэффициент пропускания колеблется над уровнем -10 дБ, справа от нее экспоненциально падает.

Во-вторых, был изучен упомянутый сдвиг в зависимости от коэффициента пропускания. Для каждого значения U_x рассмотрены зависимости $T(U_z)$, и в них выбираются самые правые точки, для которых T превышает -10 дБ. Если такие точки существуют, то сдвиг выбирается как значение U_z в этих точках, иначе сдвиг полагается нулевым. Для полученных значений производится линейная аппроксимация, результаты которой приведены на рис. 4. В рассматриваемом диапазоне можно говорить про линейную зависимость сдвига от энергии ускоряющего поля; сдвиг имеет приблизительную величину $0,52$ эВ на 1 эВ энергии продольного поля. Для больших значений U_x наблюдается также зависимость сдвига от количества рассеивателей, но эта зависимость не вносит значительного вклада.

Наконец, на рис. 5 представлены зависимости $T(U_x)$. Зависимости для случая $U_z = 0$ оказываются типичными, коэффициент пропускания оказывается выше для более коротких цепочек. Для случая $U_z = 0,5$ эВ наблюдаются экспоненциальные зависимости, растущие вплоть до уровня -10 дБ. Как и в предыдущих зависимостях, наклон графика зависимости оказывается выше для более длинных цепочек.

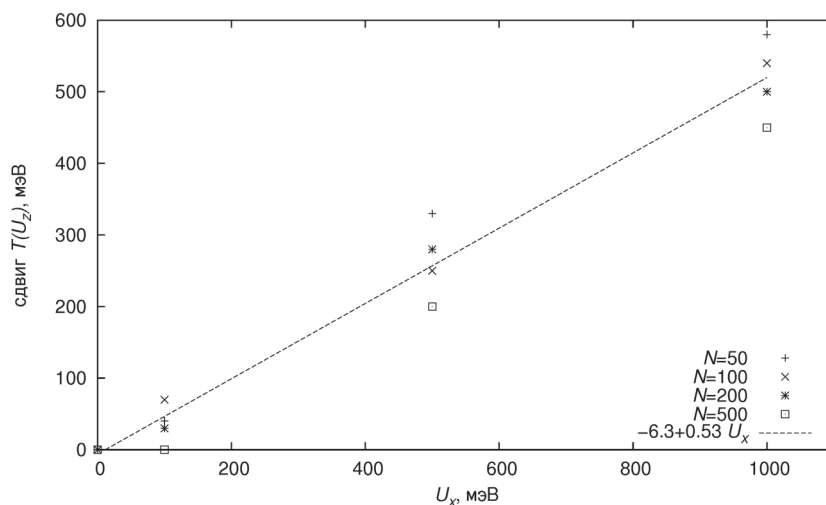


Рис. 4. Линейная аппроксимация зависимости сдвига коэффициента пропускания $T(U_z)$ от величины ускоряющего поля U_x для различных значений N

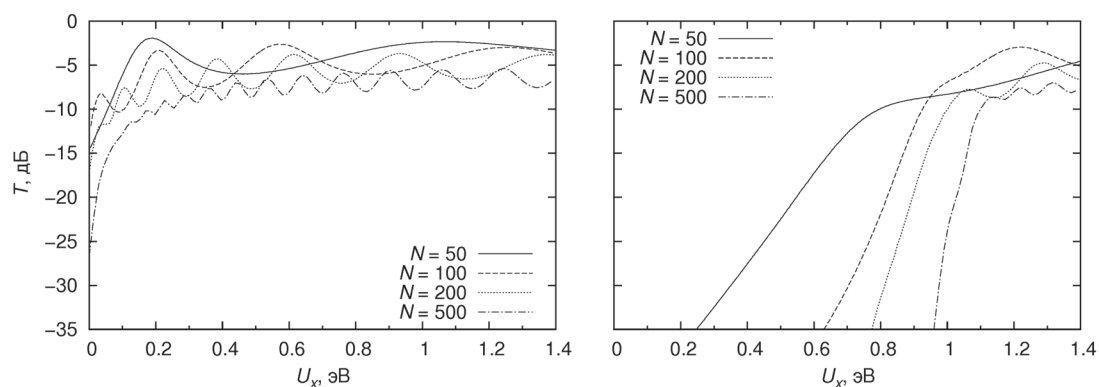


Рис. 5. Зависимость коэффициента пропускания T от U_x при различных значениях N в случаях $U_z = 0$ эВ (слева) и $U_z = 0,5$ эВ (справа)

Заключение. Результаты проведенного численного моделирования открывают возможность использования электронных ключей, основанных на эффекте управления когерентным квантовым транспортом заряда в изогнутой нанопроволоке посредством поперечного электрического поля. Наблюдаемые экспоненциальные зависимости проводимости системы от приложенного внешнего поля позволяют использовать модельную систему в широком диапазоне параметров.

Литература

1. Kagoshima S., Nagasawa H., Sambongi. One-Dimensional Conductors (Springer Series in Solid-State Sciences). Springer-Verlag, 1988.
2. Березинский В. Л. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65, № 3. С. 1251–1266.
3. Polymers, liquid crystals and low-dimensional solids / eds by N. March, M. Tosi. New York, 1984.
4. Edwards S. F., Anderson P. W. // J. Phys. F. 1975. Vol. 5. P. 965–974.
5. Shapiro B. // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 34. P. 4394–4397.
6. Сатанин А. М. // ЖЭТФ. 1991. Т. 100, № 3. С. 1077–1087.
7. Gogolin A. A. // Phys. Rep. 1988. Vol. 166, N 5. P. 269–351.
8. Exner P., Seba P. // J. Math. Phys. 1989. Vol. 30. P. 2574–2580.
9. Clark I. J. // J. Phys. A. 1998. Vol. 31. P. 2103–2107.
10. Duclos P., Exner P., Meller B. // Helv. Phys. Acta. Vol. 71. P. 133–162.
11. Domany E. et al. // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 28. P. 3110–3123.
12. Efetov K. Supersymmetry in Disorder and Chaos. Cambridge, 1997.
13. Ouasti R. et al. // J. Phys: Cond. Matt. 1995. Vol. 7. P. 811.
14. Zekri N. et al. // J. Phys: Cond. Matt. 1995. Vol. 7. P. L275.
15. Krylov G. // Int. J. Nonlin. Phen. Com. Sys. 2001. Vol. 4. P. 129–135.

M. A. BELOV, G. G. KRYLOV

mpui@tut.by; krylov@bsu.by

ELECTRIC FIELD CONTROL OF QUANTUM CHARGE TRANSPORT IN DISORDERED NANOWIRES

Summary

We have considered a one-dimensional Kronig–Penney-like model of coherent electron transport. The model represents a curved channel with scattering centers which is subjected to an external uniform electric field. We have shown that the transmission coefficient of the channel is exponentially sensitive to both transverse and longitudinal field magnitudes.

УДК 535.37

В. А. ПОВЕДАЙЛО, Д. Л. ЯКОВЛЕВ

**СПЕКТРЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ
СТРУЙНО ОХЛАЖДЕННЫХ ОКСАЛИЛГАЛИДОВ***(Представлено академиком Н. А. Борисевичем)**Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск**Поступило 18.08.2014*

Введение. Оксалилгалиды являются производными α -дикарбониллов и содержат в своей структуре фрагмент $O=C-C=O$. Они служат важным промежуточным продуктом при синтезе органических гетероциклических соединений [1] и изучаются в газовой, жидкой и твердой фазах. Большинство исследований проведено с глиоксалем $(COH)_2$ – простейшим представителем 1,2-дикарбониллов. В 1980-е годы глиоксаль обнаружен в атмосфере. Было установлено, что он образуется в процессе фотохимической реакции ряда органических соединений – загрязнителей атмосферы (бензола, ксилола, триметилбензола) с гидроксидом (OH) и оксидами азота (NO_x) [2], поэтому изучение спектральных свойств глиоксала и его производных осуществляется с целью постоянного мониторинга соединений в приземной атмосфере, изучения процессов их фотохимического разложения и других параметров.

Исследования представляющих несомненный интерес спектральных свойств оксалилгалидов проводились преимущественно при комнатной температуре. В этих условиях близко расположенные колебательные полосы перекрываются благодаря переналожению вращательных ветвей. Затруднение в идентификацию колебательных полос вносят и «горячие» полосы. При струйном охлаждении молекул представляется возможность понизить вращательную температуру до единиц Кельвина, что позволяет уменьшить полуширину полосы до $1-3\text{ см}^{-1}$ и исключить «горячие» полосы.

В данной работе изучены спектры возбуждения флуоресценции, возникающей в результате перехода $\tilde{A}^1A_u \leftarrow \tilde{X}^1A_g$ струйно охлажденных оксалилгалидов $(COF)_2$ и $(COCl)_2$. Проведено сравнение спектров возбуждения со спектрами поглощения в газовой фазе при комнатной температуре. Выполнен расчет потенциальной энергии конформационных структур оксалилгалидов при повороте симметричных фрагментов молекулы вокруг $C-C$ связи.

Методика эксперимента. Измерения спектров возбуждения флуоресценции струйно охлажденных молекул выполнены с использованием автоматизированного спектрометрического комплекса [3]. Газ-носитель гелий или аргон смешивался с газообразным оксалилфторидом. В то же время при комнатной температуре оксалилхлорид находится в жидком состоянии, поэтому для исследования в сверхзвуковой струе его пары помещались в баллон с газом-носителем. Концентрация оксалилгалидов в смеси составляла от 0,8 до 6 %. Спектры возбуждения флуоресценции регистрировались при давлении смеси до 2 атм. Импульсная сверхзвуковая струя формировалась истечением смеси газов при комнатной температуре в вакуумную камеру через круглое сопло диаметром 0,7 мм. Охлажденные молекулы возбуждались излучением второй гармоники перестраиваемого по частоте лазера на красителе на расстоянии 19 мм от сопла. Накачка лазера на красителе производилась второй гармоникой лазера на алюмоиттриевом гранате с неодимом (LOTIS ТП, LS-2134). Длина волны излучения лазера на красителе калибровалась по регистрируемому одновременно спектру возбуждения флуоресценции паров йода. Интегральная флуоресценция регистрировалась с помощью фотоэлектронного усилителя Hamamatsu R928. Регистрация вращательных контуров полос чисто электронных и электронно-колебательных переходов

осуществлялась при спектральной ширине линии возбуждающего лазерного излучения около $0,16 \text{ см}^{-1}$.

Оксалилфторид и оксалилхлорид производства фирм Appollo Scientific Limited и Merck, соответственно, подвергались дополнительной очистке сублимацией.

Расчет структуры конформационных форм. По данным экспериментальных исследований, в газовой фазе в широком температурном интервале [4–9] некоторые оксалилгалиты находятся в транс- и цис-, а другие – транс- и гош-формах. С целью подтверждения данных экспериментов [4–9] проведены теоретические расчеты зависимости потенциальной энергии молекул оксалилгалитов ($R=H, F, Cl, Br$) от угла поворота симметричных фрагментов COR вокруг C–C связи. Предварительно рассчитаны равновесные конфигурации молекул $(COF)_2$ и $(COCl)_2$, которые изучались в условиях струйного охлаждения. Расчеты выполнялись DFT/B3LYP методом с базисным набором функций 6-31+G(d), 6-311+G(d), 6-311++G(2d). Дополнительно оптимизация равновесной конфигурации проводилась MP2 методом с базисным набором 6-311+G(d) и 6-311++G(2d) с целью установления надежности результатов, полученных различными методами. Все расчеты были выполнены с использованием пакета программ Gaussian 03W. Соответствие локальных минимумов стационарных состояний подтверждалось вычислением действительных значений колебательных частот. Оптимизированные параметры длин связей и углов между ними молекулы оксалилфторида сведены в табл. 1, здесь же приведены экспериментальные данные [6].

Т а б л и ц а 1. Значения длин связей (r , Å) и углов (L , °) между ними молекулы транс-оксалилфторида, полученные различными методами расчета

Параметр	B3LYP/6-31+G(d)	B3LYP/6-311+G(d)	B3LYP/6-311++G(2d)	MP2/6-311+G(d)	MP2/6-311++G(2d)	Эксперимент [6]
$r(C-C)$	1,536	1,538	1,535	1,533	1,549	1,533
$r(C-O)$	1,186	1,177	1,177	1,186	1,194	1,178
$r(C-F)$	1,341	1,336	1,334	1,334	1,925	1,323
L_{CCO}	126,5	126,5	126,4	126,5	123,4	126,4
L_{CCF}	109,8	109,7	109,8	109,5	112,0	109,8

Как следует из данных табл. 1, наблюдаются небольшие расхождения (до 5 %) величин длин связей и углов между ними в зависимости от метода расчета и набора базисных функций.

В табл. 2 приведены данные аналогичных расчетов для молекулы оксалилхлорида.

Т а б л и ц а 2. Рассчитанные различными методами значения длин связей (r , Å) и углов (L , °) между ними молекулы транс-оксалилхлорида

Параметр	B3LYP/6-31+G(d)	B3LYP/6-311+G(d)	B3LYP/6-311++G(2d)	MP2/6-311+G(d)	MP2/6-311++G(2d)	Эксперимент [7]
$r(C-C)$	1,560	1,562	1,557	1,547	1,550	1,548
$r(C-O)$	1,189	1,179	1,178	1,194	1,190	1,184
$r(C-Cl)$	1,766	1,771	1,770	1,746	1,759	1,749
L_{CCO}	124,2	124,6	124,5	123,8	124,4	123,8
L_{CCCl}	112,3	111,9	111,7	112,0	11,6	111,8

Из сравнения параметров изучаемых молекул следует, что с увеличением атомной массы галогена все длины связей увеличиваются. Рассчитанные величины, приведенные в таблицах, хорошо согласуются с данными эксперимента [7].

На рис. 1, $a-z$ представлены рассчитанные зависимости потенциальной энергии (E) от значения двугранного угла d вдоль C–C связи двух симметричных фрагментов (COR) молекул оксалилгалитов ($R=H, F, Cl, Br$) при изменении d в пределах от 0 (транс) до 180° (цис). Использовался базисный набор функций 6-31+G(d). Как следует из рисунка, наиболее стабильна транс-форма ($d = 0^\circ$) соединений. С увеличением угла поворота фрагментов цис-форма наблюдается лишь для глиоксаля и оксалилфторида. Экспериментальные данные [4–6], полученные из микроволновых спектров и дифракции электронов, дают значения высоты расположения цис-уровня 1125 см^{-1} для глиоксаля [4] и 226 см^{-1} для оксалилфторида [5; 6]. Рассчитанные величины электронного уровня цис-формы (MP2 метод) существенно отличаются от экспериментальных и соответству-

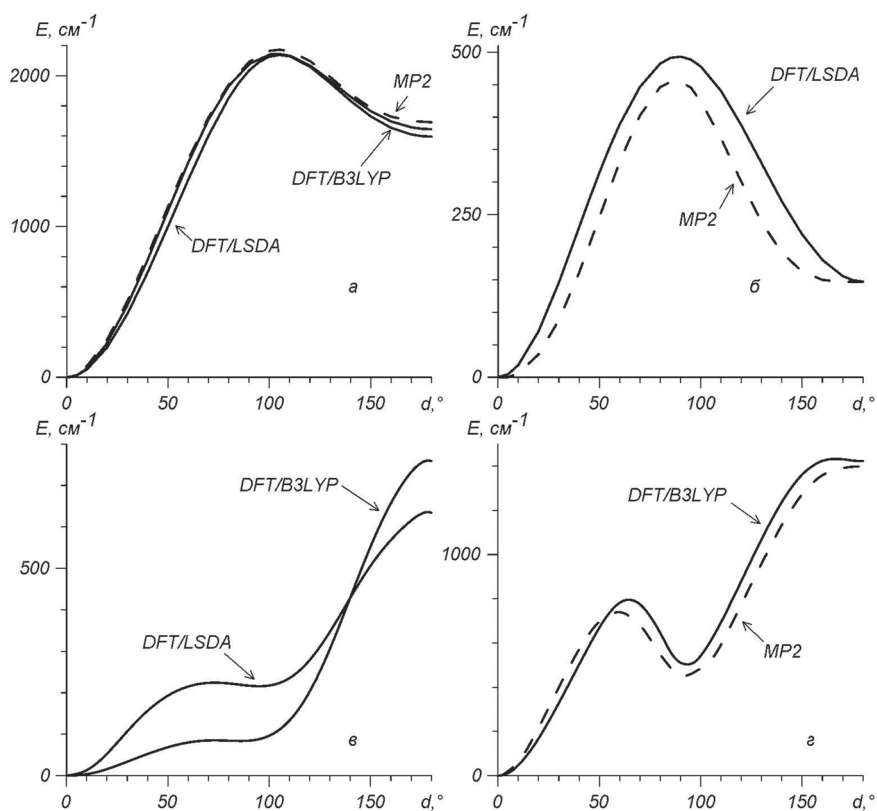


Рис. 1. Рассчитанная зависимость потенциальной энергии E оксалилгалидов относительно угла вращения d двух фрагментов молекулы вдоль С–С связи: а – глиоксаль, б – оксалилфторид, в – оксалилхлорид, з – оксалилбромид

ют значениям 1691 см^{-1} у глиоксаля и 147 см^{-1} у оксалилфторида. Для перехода из основного состояния в цис-форму требуется преодоление барьера высотой 2173 и 454 см^{-1} соответственно.

Другая зависимость потенциальной энергии от угла поворота двух фрагментов COR наблюдается для молекул оксалилхлорида и оксалилбромид. Для обоих соединений цис-форма является неустойчивым, переходным состоянием. Стационарными состояниями молекул кроме транс-формы является и гош-форма с углом разворота фрагментов, близким к 90° . Измеренная высота электронного уровня гош-формы превышает энергию основного состояния у оксалилхлорида на 289 см^{-1} [7] (350 см^{-1} [8]), а у оксалилбромид на 272 см^{-1} [9]. Рассчитанные значения и в этом случае (рис. 1, в, з) сравнимы с данными эксперимента.

Причина наличия неплоскостной гош-формы оксалилхлорида и оксалилбромид объясняется наличием комбинации противодействующих сил. С одной стороны, сопряжение связей стабилизирует плоскую структуру молекулы, а с другой – стерические отталкивания между атомами дестабилизируют ее. Во всех структурах оксалилгалидов предполагается, что атомы углерода подвергаются sp^2 -гибридизации. В цис- и транс-формах сопряжение играет наибольшую роль. Наличие цис-формы у глиоксаля и оксалилфторида отражает малый ван-дер-ваальсовый (вдв) радиус атомов водорода и фтора. В цис-оксалилфториде расстояние между атомами фтора (расчет MP2/6-311++G(2d)) равно $2,536\text{ \AA}$, тогда как двойной вдв радиус атома фтора составляет $2,70\text{ \AA}$. Это доказывает, что цис-форма у оксалилфторида более выгодна, чем гош. У глиоксаля ван-дер-ваальсовские радиусы атома водорода еще меньше по сравнению со фтором, и цис-конформер в большем выигрыше по сравнению с гош. У хлора и брома вдв радиусы по величине больше, чем у водорода и фтора, поэтому гош-форма является компромиссом сил отталкивания и притяжения.

Результаты и их обсуждение. Оксалилфторид. На рис. 2 представлен спектр возбуждения флуоресценции струйно охлажденных молекул оксалилфторида. Давление смеси газов составляло 2 атм при концентрации оксалилфторида $0,8\%$. Наиболее интенсивная и самая длинноволновая полоса в спектре с частотой $32455,0\text{ см}^{-1}$ отнесена к чисто электронному переходу (ν_0^0)

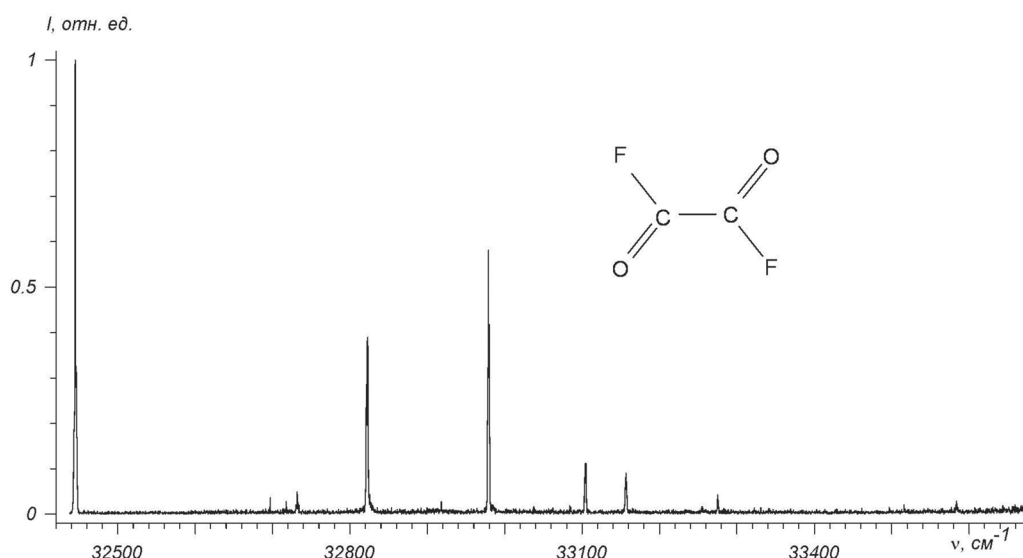


Рис. 2. Спектр возбуждения флуоресценции молекул транс-оксалилфторида, охлажденных в сверхзвуковой струе гелия. Давление смеси в предвыпускной камере $P = 2$ атм, $T = 295$ К, концентрация $(\text{COF})_2$ равна 0,8 %

молекул из основного состояния (1A_g) в первое возбужденное синглетное состояние ($^1A_u(n\pi^*)$). Последующие две интенсивные полосы в спектре возбуждения флуоресценции имеют частоты 32815,2 и 32976,2 cm^{-1} . Зарегистрированы полосы с более низкой интенсивностью при превышении энергии над частотой электронного перехода до 1200 cm^{-1} . Сравнение со спектром поглощения, полученным при комнатной температуре в многоходовой кювете [10], показывает, что в спектре поглощения проявляется большее количество полос, что обусловлено переходами из более высоко лежащих колебательных уровней основного S_0 состояния в электронно-возбужденное S_1 состояние. В табл. 3 приведены зарегистрированные частоты (ν_i) в спектре возбуждения флуоресценции, энергии колебаний ($\Delta\nu_i$) в S_1 состоянии, тип электронно-колебательного перехода и его отнесение согласно [10].

Т а б л и ц а 3. Частоты (ν_i , cm^{-1}), энергии колебаний ($\Delta\nu_i$, cm^{-1}), тип электронно-колебательного перехода и его отнесение к типам полос спектра возбуждения флуоресценции струйно охлажденных молекул оксалилфторида

Возбуждение флуоресценции		Тип	Отнесение
ν_i	$\Delta\nu_i$		
32445	0	C	0
32726	281	C	7_0^2
32815	370	A+B	$7_0^1 12_0^1$
32976	531	A+B	8_0^1
33105	660	A+B	$6_0^1 12_0^1$
33158	713	A+B	$7_0^1 11_0^1$

Транс-конформеры оксалилгалидов принадлежат точечной группе симметрии C_{2h} . 12 фундаментальных колебаний конформера образуют неприводимое представление $5a_g + 2a_u + b_g + 4b_u$. При электронном переходе $\tilde{A}^1A_u \leftarrow \tilde{X}^1A_g$ колебания разрешены, тогда как b_g колебания проявляются в электронном переходе как колебательно индуцированные; a_u и b_u колебания строго запрещены и могут наблюдаться как обертона и составные частоты в комбинации с колебаниями a_g или b_g симметрии. Вращательные контуры полос в спектрах поглощения и возбуждения флуоресценции $A_u \leftarrow A_g$ электронного перехода с участием колебаний a_g симметрии будут иметь полосу C-типа, как и полоса чисто электронного перехода. Активные колебания b_g симметрии будут иметь полосы смешанного (A+B)-типа.

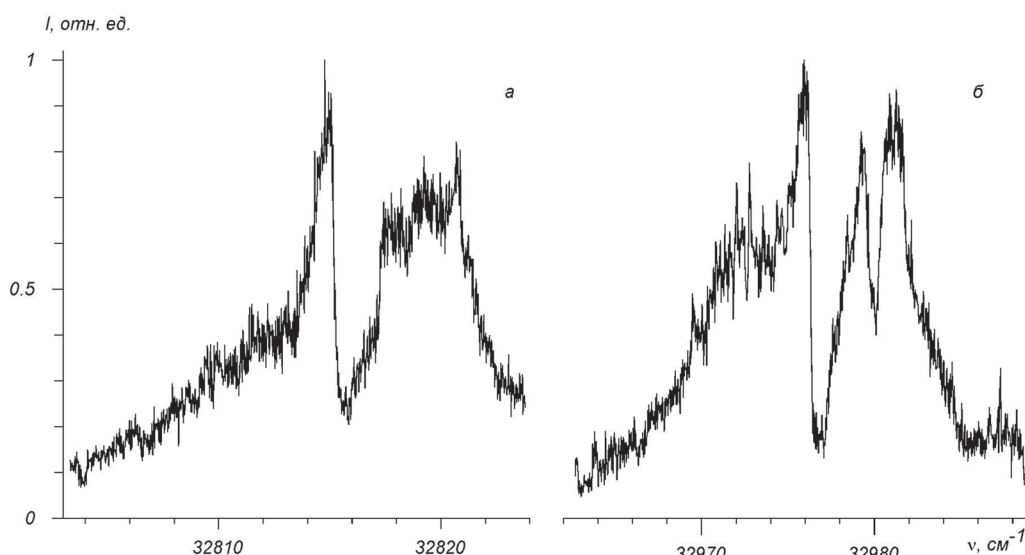


Рис. 3. Измеренные вращательные контуры полос в области частот 32815 см^{-1} (а) и 32976 см^{-1} (б). Собственное давление $(\text{COF})_2$ равно 42 Торр. Газ-носитель отсутствует, $T = 295 \text{ К}$

Согласно [10], спектр поглощения в области частот 32815 см^{-1} и 32976 см^{-1} при комнатной температуре и собственном давлении газа 12 мТорр состоит из двух полос в каждой области с типами колебаний $7_0^1 12_0^1$, 5_0^1 и 8_0^1 , 4_0^1 соответственно. Авторы других работ [11; 12] придерживаются несколько иной трактовки.

Вращательные контуры анализируемых полос без газа-носителя при собственном давлении в предвыпускной камере 42 Торр представлены на рис. 3, а, б. В полученных вращательных контурах полос спектров возбуждения флуоресценции, зарегистрированных при исходной температуре газа в предвыпускной камере 295 К, проявляются по три полосы. Две низкочастотные полосы принадлежат одному переходу смешанного (А+В)-типа. Согласно данным [10; 13], высокочастотные полосы анализируемых областей принадлежат фундаментальным колебаниям и не должны «вымораживаться» при регистрации в сверхзвуковой струе с газом-носителем.

С целью уточнения симметрии переходов нами зарегистрированы вращательные контуры полос в анализируемой области при струйном охлаждении. На рис. 4, а–в (сплошные линии)

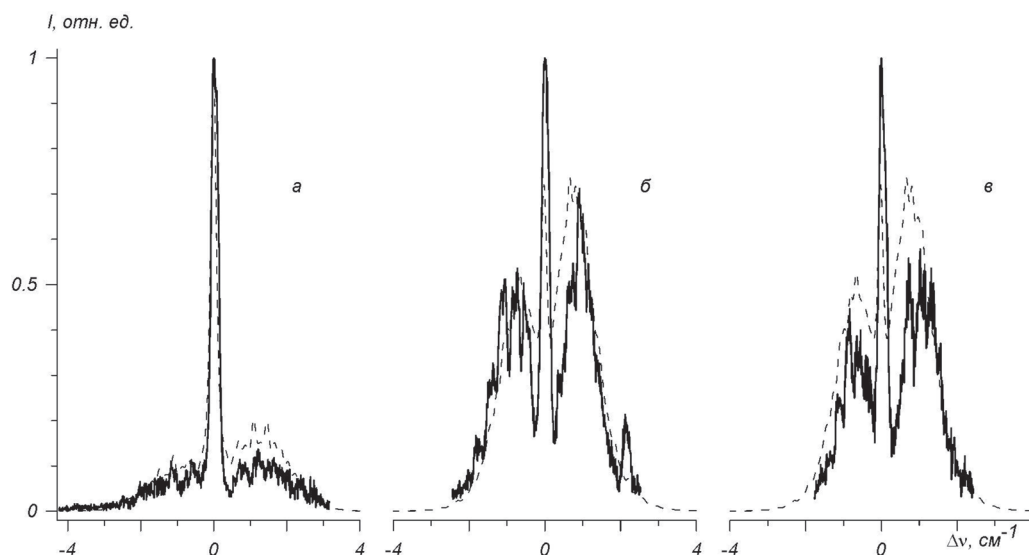


Рис. 4. Измеренные (сплошные линии) и рассчитанные (пунктирные линии) вращательные контуры полос струйно охлажденных молекул оксалилфторида: а – чисто электронный переход, б – электронно-колебательный переход в частоте $32815,2 \text{ см}^{-1}$, в – электронно-колебательный переход в частоте $32976,2 \text{ см}^{-1}$. Давление смеси в предвыпускной камере 2 атм, $T = 295 \text{ К}$

представлены контуры полос спектра возбуждения флуоресценции в частоте ν_0^0 и в области частот 32815 и 32976 см^{-1} со спектральным разрешением 0,16 см^{-1} . Спектры получены с газом-носителем гелием при давлении в 2 атм и концентрации оксалилфторида 0,8 %.

Для подтверждения результатов эксперимента рассчитаны спектры поглощения вращательных контуров А, В и С полос. Расчет выполнен с использованием программы PGOPHER для температуры 5 К и спектральной полуширины линии 0,16 см^{-1} . Квантовое число полного углового момента J изменялось от 0 до 120. Сравнение измеренных и рассчитанных вращательных контуров показывает, что наблюдается качественное сходство спектров лишь для частоты чисто электронного перехода, для которой зарегистрирована интенсивная и узкая Q ветвь, а также широкие и менее интенсивные P - и R -ветви. Полоса электронного перехода соответствует С-типу, и поэтому следует ожидать, что дипольный момент чисто электронного перехода ${}^1A_u \leftarrow {}^1A_g$ перпендикулярен плоскости молекулы. В отличие от частоты электронного перехода, полосы в области 32815 и 32976 см^{-1} являются полосами смешанного типа с 50 %-ным вкладом от А- и В-полос.

Отсутствие полос двух переходов в экспериментальных исследованиях при струйном охлаждении молекул с газом-носителем гелием или аргоном можно объяснить тем, что высокочастотные полосы двух спектральных областей обусловлены различными константами скорости безызлучательных переходов.

Из анализа данных табл. 3 следует, что флуоресценция наблюдается, когда молекулы оксалилфторида возбуждаются с участием нулевого и 7^2 колебательных уровней, имеющих симметрию a_g . В оставшихся четырех переходах излучение флуоресценции зарегистрировано при возбуждении колебаний в S_1 состоянии b_g симметрии. Флуоресценция не обнаружена даже при электронном возбуждении колебаний типов 4_0^1 и 5_0^1 , хотя переходы с участием этих колебаний очень интенсивны в спектре поглощения в газовой фазе [10]. Ранее [14; 15] высокая интенсивность флуоресценции при возбуждении запрещенных переходов наблюдалась на примере транс-глиоксаля. Этот эффект объяснялся проявлением механизма Герцберг–Теллера (первого и второго порядков). «Запрещенные» переходы глиоксаля соответствуют (А+В)- и А-типам [14]. Эти переходы наблюдались с рядом расположенными полосами С-типа [15].

Для большей достоверности полученных результатов проведены эксперименты со струйно охлажденным оксалилфторидом при изменении давления смеси He-(COF)₂, концентрации (COF)₂ в смеси, использовании в качестве газа-носителя Ar вместо He при варьировании концентрации (COF)₂ в смеси Ar-(COF)₂, а также регистрации спектров (COF)₂ без газа-носителя (давление от 40 до 90 Торр). В ряде случаев в спектрах возбуждения флуоресценции с невысоким охлаждением оксалилфторида зарегистрированы полосы с участием колебаний с горячими переходами 7_1^1 и 7_2^2 и их комбинации с составными частотами 7_0^1 , 12_0^1 и 8_0^1 .

Результатом исследований подтверждается, что в спектре возбуждения флуоресценции струйно охлажденного оксалилфторида флуоресценция преимущественно наблюдается при возбуж-

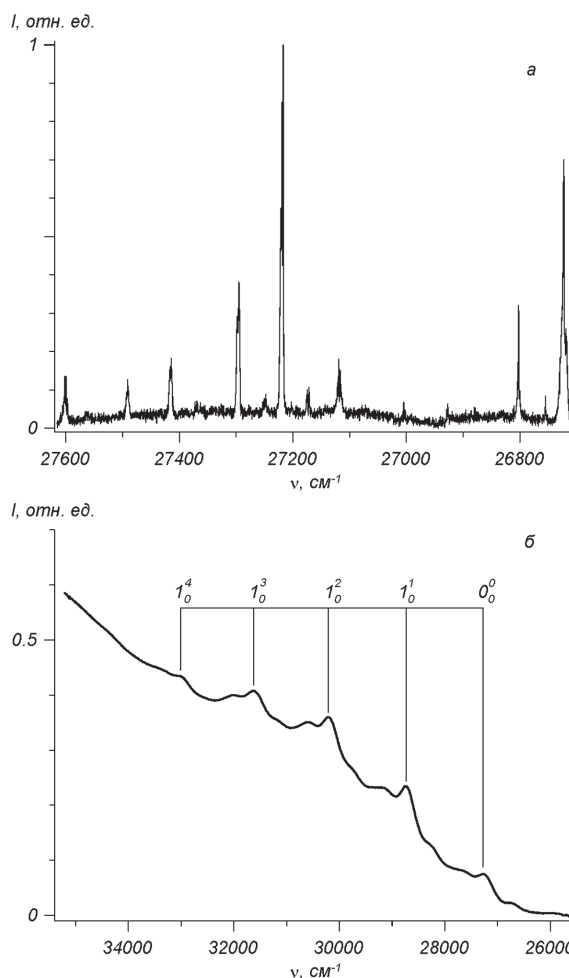


Рис. 5. Спектр возбуждения флуоресценции струйно охлажденного оксалилхлорида без газа-носителя, собственное давление (COCl)₂ равно 160 Торр, $T = 295$ К (а) и спектр поглощения в газовой фазе (б)

дении в S_1 состоянии колебательных уровней b_g симметрии, а не a_g , по причине высокой эффективности безызлучательных переходов в последнем случае.

Оксалилхлорид. Динамика возбужденных состояний струйно охлажденного оксалилхлорида исследовалась в работе [16]. В зарегистрированном спектре возбуждения флуоресценции за частоту электронного перехода принята интенсивная наиболее низкочастотная полоса. Такое отнесение не совпадает с результатами [17; 18], полученными в газовой фазе при комнатной температуре, почти на 500 см^{-1} . Для уточнения данных [16–18] нами зарегистрированы спектры возбуждения флуоресценции оксалилхлорида в условиях струйного охлаждения в смеси $\text{Ar}-(\text{COCl})_2$. Исследовались спектры при изменении давления смеси, варьировании концентрации $(\text{COCl})_2$ и без газа-носителя. На рис. 5 представлены спектр возбуждения флуоресценции струйно охлажденного оксалилхлорида без газа носителя (*a*) и спектр поглощения в газовой фазе (*b*) [18]. Следует отметить, что переход S_0-S_1 является переходом $n-\pi^*$ типа. В этом случае, как правило, в возбужденном состоянии проявляются и колебания $\text{C}=\text{O}$ группы в виде обертонов. И действительно, на рис. 5, *b* наблюдается прогрессия $\text{C}=\text{O}$ колебаний (1_0^n) вплоть до четвертого порядка $n = 4$. Из сравнения спектров поглощения и возбуждения флуоресценции следует, что частота чисто электронного перехода оксалилхлорида равна 27194 см^{-1} .

Энергии колебаний, типы вращательных контуров и симметрия колебательных полос спектра возбуждения флуоресценции оксалилхлорида приведены в табл. 4.

Отнесение колебаний по типам симметрии заимствовано из работы [18], в которой приведен полный перечень частот нормальных колебаний и их симметрия. В этой же работе горячие полосы X , лежащие в низкочастотной области относительно частоты ν_0^0 , отнесены к переходу $7_0^2 8_1^0$, у которого фундаментальные частоты $\nu_7(a_u)$ и $\nu_8(b_g)$ являются торсионным и деформационным ССЮ колебаниями соответственно. Кажется не убедительным, что такой горячий переход получен в условиях струйного охлаждения. Но и ранее, на примере струйно охлажденного транс-глиоксаля с колебательной температурой 10 К наблюдали аналогичный эффект. Зарегистрированы несколько горячих переходов, в том числе и переход 8_1^1 , колебательный уровень которого в основном состоянии имеет энергию 1047 см^{-1} . Как отмечалось в работе [14], охлаждение по колебательным степеням свободы в сверхзвуковой струе сильно зависит от типа нормального колебания. Это особенно существенно для деформационного СНО колебания 8 (b_g симметрии), для которого охлаждение менее эффективно по сравнению с другими типами колебаний ($T \sim 150 \text{ К}$) [15].

Высокая интенсивность $7_0^2 8_1^0$ полосы струйно охлажденного оксалилхлорида объясняется аналогичным эффектом.

Т а б л и ц а 4. Частоты (ν_i , см^{-1}), энергии колебаний ($\Delta\nu_i$, см^{-1}), тип электронно-колебательного перехода и его отнесение к типам полос спектра возбуждения флуоресценции струйно охлажденных молекул оксалилхлорида

Возбуждение флуоресценции		Тип [18]	Отнесение [18]
ν_i	$\Delta\nu_i$		
26695	-499	A+B	X
26727	-467	A+B	$X7_3^1$
26773	-421	A+B	$X7_1^1$
26902	-292	A+B	$X7_0^2$
26982	-212	A+B	$X5_0^1$
27094	-100	A+B	$X4_0^1$
27148	-46	C	7_2^0
27194	0	C	0_0^0
27225	31	C	7_3^1
27274	80	C	7_1^1
27398	204	C	7_0^2
27476	282	C	5_0^1
27593	399	C	4_0^1

Заключение. Получен спектр возбуждения флуоресценции молекул оксалилфторида при температурах в единицы Кельвина. Сравнением вращательных контуров полос при комнатной температуре и струйном охлаждении показана динамика изменения формы полос с давлением оксалилфторида. Обнаружена высокая активность «запрещенных» переходов в спектре возбуждения флуоресценции струйно охлажденных молекул оксалилфторида. За исключением разрешенных переходов 0_0^0 и 7_0^2 , в спектре преимущественно наблюдаются «запрещенные» полосы b_g симметрии. Дипольный момент электронного S_0-S_1 перехода ориентирован перпендикулярно плоскости молекулы, что следует из сравнения измеренного и рассчитанного вращательных контуров при низких температурах.

В высокочастотной области от ν_0^0 перехода спектра возбуждения флуоресценции струйно охлажденных молекул оксалилхлорида наблюдаются только разрешенные переходы. В низкочастотной области активны переходы $7_0^2 8_1^0$ и комбинации с участием $7_0^2 8_1^0$. Интенсивность переходов ν_0^0 и $7_0^2 8_1^0$ сравнима, хотя энергия уровня 8_1 равна 700 см^{-1} .

Из квантовомеханических расчетов равновесных конфигураций молекул оксалилгаллидов следует, что длины связей и углы между ними хорошо совпадают с экспериментальными данными. Расчет конформационных структур различными методами правильно отражает ожидаемую форму, но имеют место расхождения в расчете величины энергии структур.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф13А3-023).

Литература

1. Eicher T., Hauptmann S. // The Chemistry of Heterocycles. Wiley-VCH, 2003. – 572 p.
2. Koch D. M., Chieu N. H., Peslherbe G. H. // J. Phys. Chem. A. 2001. Vol. 105, N 14. P. 3598–3604.
3. Борисевич Н. А., Блохин А. П., Поводайло В. А. и др. // Опт. и спектр. 2012. Т. 112, № 1. С. 10–16.
4. Durig J. R., Tong C. C., Li Y. S. // J. Chem. Phys. 1972. Vol. 57, N 10. P. 4425–4431.
5. Marstokk K. M., Mollendal H. // Acta Chem. Scand. 1995. Vol. 49. P. 172–181.
6. Freisen D. T., Borgers T. R., Hedberg L. et al. // J. Phys. Chem. A. 2006. Vol. 110, N 48. P. 12986–12991.
7. Durig J. R., Davis J. F., Wang A. // J. Mol. Struct. 1996. Vol. 375, N 1. P. 67–81.
8. Danielson D. D., Hedberg L., Hedberg K. et al. // J. Phys. Chem. 1995. Vol. 99, N 23. P. 9374–9379.
9. Hagen K., Hedberg K. // J. Am. Chem. Soc. 1973. Vol. 95, N 15. P. 4796–4800.
10. Godunov I. A., Yakovlev N. N., Maslov D. V. et al. // J. Mol. Spectrosc. 2010. Vol. 260, N 2. P. 124–129.
11. Baronavski A. P., McDonald J. R. // J. Chem. Phys. 1995. Vol. 67, N 9. P. 4286–4290.
12. Makarov V. I., Abe H., Hayashi H. // Mol. Phys. 1995. Vol. 84, N 5. P. 911–941.
13. Bokarev S. I., Godunov I. A. // J. Mol. Spectrosc. 2010. Vol. 260, N 1. P. 50–56.
14. Peyroula E. P., Jost R. // J. Mol. Spectrosc. 1987. Vol. 121, N 1. P. 167–176.
15. Peyroula E. P., Jost R. // J. Mol. Spectrosc. 1987. Vol. 121, N 1. P. 177–188.
16. Yoshii T., Kiritani M., Hirota N. et al. // J. Phys. Chem. 1996. Vol. 100, N 9. P. 3354–3358.
17. Balfour W. J., King G. W. // J. Mol. Spectrosc. 1968. Vol. 26, N 3. P. 384–397.
18. Godunov I. A., Yakovlev N. N., Bokarev S. I. et al. // J. Mol. Spectrosc. 2009. Vol. 255, N 1. P. 39–44.

V. A. POVEDAILO, D. L. YAKOVLEV

poved@imaph.bas-net.by

FLUORESCENCE EXCITATION SPECTRA OF JET-COOLED OXALYL HALIDES

Summary

The fluorescence excitation spectra of jet-cooled oxalyl halides $(\text{COF})_2$ and $(\text{COCl})_2$ are measured and compared with their absorption spectra in the gas phase. High efficiency fluorescence of oxalyl fluoride molecules excited to the single vibronic levels of b_g symmetry and high efficiency of nonradiative transitions for molecules excited to the single vibronic levels of a_g symmetry are observed. High intensity hot band $7_0^2 8_0^1$ is detected in the spectrum of oxalyl chloride. These results are compared with data for glyoxal $(\text{COH})_2$, obtained earlier.

УДК 530.1

Академик А. М. ГОНЧАРЕНКО

РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ В ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ СЕЛФОКАХ

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск

Поступило 01.09.2014

Сейчас активно исследуются среды с отрицательным значением показателя преломления [1–5]. Предполагается, что с помощью таких сред можно создавать плоские фокусирующие линзы, а также другие устройства с необычными свойствами. В данном сообщении исследованы особенности распространения гауссовых пучков света в отрицательных селфоках.

Распространение узких световых пучков достаточно хорошо определяется решением соответствующего параболического уравнения [6]. В случае отрицательной волноводной среды предполагаем, что постоянная распространения $k = k_0 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{k_0} \frac{x^2}{x_0^2}$. При этом $k_0 = -\sigma$, а σ , α – положительные величины*.

Параболическое уравнение представляем в виде

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2i\sigma \frac{\partial \psi}{\partial z} - \alpha \frac{x^2}{x_0^2} \psi = 0.$$

Перейдем для удобства к системе $x' = x\sqrt{\sigma}$ и получаем (штрихи опускаем)

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2} + i \frac{\partial \psi}{\partial z} - \alpha_0 \frac{x'^2}{x_0'^2} \psi = 0 \quad (\alpha_0 = \alpha / 2\sigma). \tag{1}$$

Будем искать решение этого уравнения в виде следующего гауссова пучка:

$$\psi = \exp\left(i\gamma_1 - \gamma_2 - \frac{x'^2}{fx_0'^2} + i \frac{x'^2}{gx_0'^2}\right). \tag{2}$$

Здесь γ_1, γ_2, f, g – неизвестные функции от z . Подставляя (2) в уравнение (1), получаем следующую систему уравнений:

$$\gamma_1' + \frac{2}{fx_0'^2} = 0, \quad \gamma_2' - \frac{2}{gx_0'^2} = 0; \tag{3}$$

$$\frac{f'}{f} - \frac{8}{gx_0'^2} = 0, \quad \frac{4}{f^2 x_0'^2} - \frac{4}{g^2 x_0'^2} + \frac{g'}{g^2} - \alpha_0 = 0, \tag{4}$$

где штрих означает производную по z .

Уравнения (4) приводятся к следующему дифференциальному уравнению второго порядка:

$$2ff'' - f'^2 + \delta_1^2 f^2 - \delta_2^2 = 0. \tag{5}$$

При этом $\delta_1 = 4\sqrt{\alpha_0} / x_0$, $\delta_2 = 8 / x_0^2$. Решение уравнения (5) есть функция [7]

$$f = a + b \sin(\delta_1 z + \gamma).$$

* При $\alpha < 0$ получаем расходящееся решение.

Из граничных условий при $z = 0$ находим $\gamma = \frac{\pi}{2}$, $f(0) = f_0$. В итоге

$$f = a + b \cos \delta_1 z. \quad (6)$$

Здесь $a = \frac{1}{2} f_0 + \frac{1}{2} \frac{\delta_2^2}{\delta_1^2 f_0}$, $b = \frac{1}{2} f_0 - \frac{1}{2} \frac{\delta_2^2}{\delta_1^2 f_0}$.

Подставляя (6) в уравнения (3), (4), получаем

$$\gamma_1 = x_0 \sqrt{\alpha_0} \operatorname{arctg} \frac{2}{x_0 f \sqrt{\alpha_0}} \operatorname{tg} \frac{1}{2} \delta_1 z,$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{4} \ln(a + b \cos \delta_1 z),$$

$$g = -\frac{2}{x_0} \frac{a + b \cos \delta_1 z}{b \sqrt{\alpha_0} \sin \delta_1 z}.$$

Итак, получаем, что поле светового пучка в отрицательной среде может быть представлено в виде

$$u = (a + b \cos \delta_1 z)^{-1/4} \exp \left(i\omega t + i\sigma z + ix_0 \sqrt{\alpha_0} \operatorname{arctg} \frac{2}{x_0 f_0 \sqrt{\alpha_0}} \operatorname{tg} \frac{1}{2} \delta_1 z \right) \left(-i \frac{x^2}{2x_0} \frac{b \sqrt{\alpha_0} \sin \delta_1 z}{a + b \cos \delta_1 z} - \frac{x^2}{fx_0^2} \right).$$

Следовательно, световой пучок, как и в обычных средах, периодически изменяется с глубиной проникновения в отрицательную среду, а фазовый фронт его распространяется в обратном направлении: $v_\phi \sim \frac{dz}{dt} = -\frac{\omega}{\sigma_0} < 0$. Последнее и является характерной особенностью распространения света в отрицательных средах.

Литература

1. Веселаго В. Г. // УФН. 1967. Т. 92, вып. 7. С. 517–526.
2. Шевченко В. В. // УФН. 2011. Т. 181, вып. 11. С. 1171–1182.
3. Силин Р. А. // Оптика и спектроскопия. 1978. Т. 44, вып. 1. С. 189–191.
4. Pendry J. B. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 3966–3969.
5. Shadrivov I. V. et al. // Phys. Rev. 2003. Vol. E67. P. 057602–4.
6. Гончаренко А. М. Гауссовы пучки света. М., 2005.
7. Гончаренко А. М. // Весті НАН Беларусі, сер. фіз-мат. навук. 2008. № 4. С. 120.

A. M. GONCHARENKO

a.goncharenko@ifanbel.bas-net.by

PROPAGATION OF THE LIGHT BEAMS IN NEGATIVE MEDIA

Summary

It is considered same property of the propagation of the light beams in negative media.

ХИМИЯ

УДК 547.792.4+544.15+544.18

Вадим Э. МАТУЛИС¹, Ю. В. ГРИГОРЬЕВ¹, Г. Т. СУХАНОВ²,
И. А. КРУПНОВА², академик О. А. ИВАШКЕВИЧ¹

**СТАНДАРТНЫЕ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ
И ОТНОСИТЕЛЬНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ
С-АЛКОКСИ-1,2,4-ТРИАЗОЛОВ И ИЗОМЕРНЫХ N-МЕТИЛ-С-МЕТОКСИ-1,2,4-
ТРИАЗОЛОВ: КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ**

¹Научно-исследовательский институт физико-химических проблем, Минск²Институт проблем химико-энергетических технологий

Сибирского отделения РАН, Бийск

Поступило 29.09.2014

N-Алкил-3-алкоксизамещенные 1,2,4-триазолы являются биологически активными соединениями и могут представлять интерес для нужд современной медицины. Например, N-метил-3-метокси-1,2,4-триазолы могут с высокой вероятностью проявлять достаточно широкий спектр биологической активности (табл. 1).

Т а б л и ц а 1. Рассчитанная с использованием программы PASS Online [1] биологическая активность N-метил-3-метокси-1,2,4-триазолов

Соединение	Вероятность проявления	Тип предполагаемой биологической активности
1-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	0,770	Выраженный усилитель гена HMGCS2
2-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	0,793	Выраженный усилитель гена HMGCS2
	0,757	Ингибитор образования холестерина
4-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	0,829	Средства, снижающие тревогу, страх
	0,785	Неопиоидное обезболивающее
	0,774	Выраженный усилитель гена HMGCS2
	0,785	Ингибитор образования холестерина

Удобным способом получения N-алкил-3-алкоксизамещенных 1,2,4-триазолов является нуклеофильное замещение нитрогруппы в доступных N-алкил-3-нитро-1,2,4-триазолах, которое в настоящее время мало исследовано и ограничивается лишь несколькими примерами. Так, в работе [2] исследована кинетика замещения нитрогруппы гидроксильной группой в 1-метил-3-нитро-, 1-метил-5-нитро- и 3-нитро-4-метил-1,2,4-триазолах. Авторами работы [3] на примере N₁- и N₂-замещенных 3-нитро-1,2,4-триазолов изучено замещение нитрогруппы с использованием в качестве нуклеофильных реагентов тиолов и алкоколятов натрия (метилат, *n*-гептаноат) и др. Показано, что в реакцию нуклеофильного замещения нитрогруппы вступают исключительно N₂-замещенные 3-нитро-1,2,4-триазолы. Недавно 1-метил-3-метокси-1,2,4-триазол с выходом 85 % получен путем длительного кипячения 1-метил-3-нитро-1,2,4-триазола в метанольном растворе гидроксида натрия [4].

Для прогнозирования возможности протекания реакций нуклеофильного замещения нитрогруппы в N-алкил-3-нитро-1,2,4-триазолах в различных условиях необходимы данные о термодинамических характеристиках реагентов и относительной устойчивости образующихся изомеров. Экспериментальные данные об энтальпиях образования и относительной устойчивости изомерных N-алкил-С-алкокси-1,2,4-триазолов в газовой фазе и в растворах в литературе отсутствуют.

В настоящей работе выполнены квантовохимические расчеты стандартных энтальпий образования в газовой фазе таутомерных форм С-алкокси-1,2,4-триазолов (алкокси = OCH_3 , OC_2H_5 , $\text{Oi-C}_3\text{H}_7$, $\text{Ot-C}_4\text{H}_9$) и изомерных N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов путем построения изодесмических реакций и реакций изомеризации. Методология расчетов, разработанная нами ранее, представлена в работе [5]. Проведены также расчеты относительных энергий Гиббса таутомерных форм и изомеров в водном растворе.

Квантовохимические расчеты проводили с использованием программного пакета Gaussian-09 [6]. Энтальпии образования рассчитывались с использованием следующих уровней теории:

V3LYP/6-311+G(d,p)//V3LYP/6-31G(d). Расчеты проводили в рамках теории DFT (функционал V3LYP [7]). Оптимизацию геометрии и расчет энергии нулевых колебаний выполняли в базисе 6-31G(d). Полные энергии (E) рассчитывали с использованием базисного набора 6-311+G(d,p);

G3 [8]. В рамках данного метода оптимизация геометрии и расчет энергии нулевых колебаний выполняется с использованием RHF/6-31G(d) уровня теории. Затем производится оптимизация геометрии с использованием уровня теории MP2(Full)/6-31G(d). При расчетах полной энергии энергия электронной корреляции учитывается в рамках метода MP4;

G3MP2 [9]. Модифицированный метод G3, в котором используется MP2 уровень теории (вместо MP4) для учета влияния увеличения базисного набора на величину полной энергии, что позволяет существенно сократить время расчета.

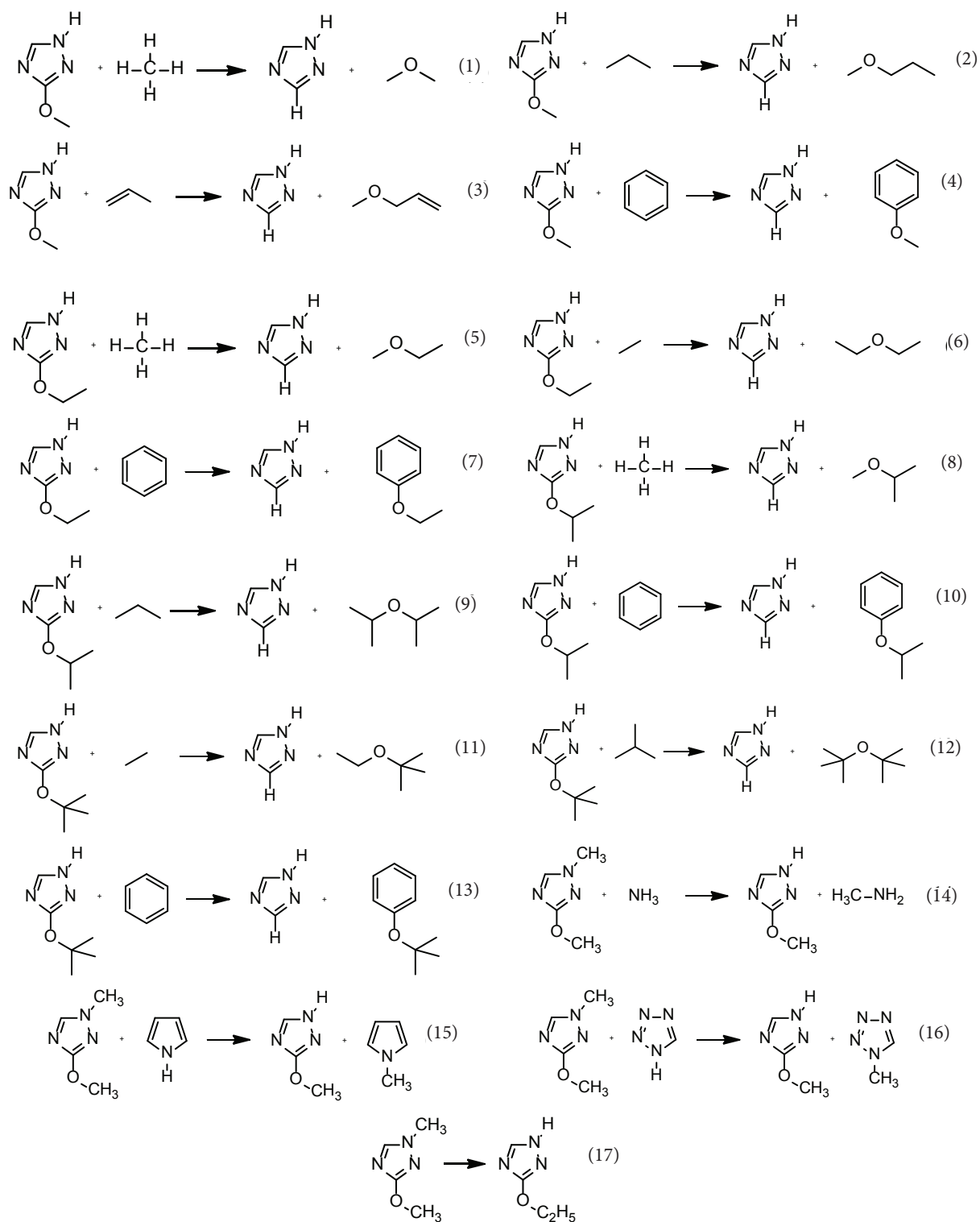
Энергию Гиббса сольватации ($\Delta_{\text{solv}}G$) рассчитывали с использованием континуумной модели растворителя РСМ [10] со стандартными параметрами для воды. Для проведения расчетов использовали геометрии, оптимизированные для изолированных молекул методом V3LYP/6-31G(d), а энергии рассчитывали с использованием V3LYP/6-311+G(d,p) уровня теории. В рамках континуумных методов растворитель рассматривается как изотропная среда, характеризующаяся некоторыми физическими константами (величиной статической диэлектрической проницаемости ϵ и т. д.). Молекула растворенного вещества помещается в полость, которая образуется в этой сплошной среде. Ранее нами было показано, что использование континуумных моделей позволяет правильно описывать влияние растворителя на относительную устойчивость N-замещенных тетразолов [11], таутомерных и протонированных форм тетразола, 1,2,3-триазола и их производных [5; 12–14]. Процедура расчета относительных энергий Гиббса таутомерных форм и изомеров описана в работе [5].

Стандартные энтальпии образования 1*H*-3-алкокси-1,2,4-триазолов и 1-метил-3-метокси-1,2,4-триазола в газовой фазе вычисляли исходя из расчетных значений стандартных энтальпий изодесмических реакций и реакций изомеризации (схема 1).

Энтальпии образования 1*H*-5-алкокси- и 4*H*-3-алкокси-таутомерных форм и соответствующих N-метилзамещенных соединений вычисляли исходя из рассчитанных значений стандартных энтальпий изомеризации и величин $\Delta_f H_{298}^0(\text{r})$ 1*H*-3-алкокси-1,2,4-триазолов и 1-метил-3-метокси-1,2,4-триазола. Эффективность такого подхода ранее показана нами на примере производных С-нитро-1,2,3-триазола [5]. Так, полученное в работе [5] расчетное значение $\Delta_f H_{298}^0(\text{r})$ 2-метил-4-нитро-1,2,3-триазола, равное 233,5 кДж/моль, хорошо согласуется с соответствующей экспериментальной величиной $228,7 \pm 3,5$ кДж/моль.

Расчетные значения энтальпий изодесмических реакций и энтальпий образования 1*H*-3-алкокси-1,2,4-триазолов и 1-метил-3-метокси-1,2,4-триазола в газовой фазе приведены в табл. 2.

Для ароматических соединений важно не только сохранение в изодесмической реакции числа химических связей каждого вида, но и ароматического фрагмента. Соблюдая последнее условие, мы выбрали в качестве эталонного соединения 1*H*-1,2,4-триазол и составляли изодесмические реакции таким образом, чтобы в ходе реакции 1,2,4-триазольный фрагмент не разрушался. Одним из недостатков метода изодесмических реакций является то, что для вычисления энтальпии образования соединения требуются экспериментальные значения энтальпий образования эталонных веществ. В то же время не для всех эталонных веществ имеются надежные экспериментальные данные. Кроме того, при расчетах тепловых эффектов изодесмических реакций также возникают ошибки. Чтобы частично компенсировать ошибки, обусловленные особенностями конкретной изодесмической реакции, для каждого из исследованных соединений было рассмо-



тено не менее трех различных изодесмических реакций (схема 1) и энтальпия образования определялась как среднее значение величин энтальпий образования, вычисленных из всех изодесмических реакций.

Значения стандартной энтальпии образования исследуемых веществ, рассчитанные методами G3 и G3MP2 с использованием различных изодесмических реакций, очень близки, что свидетельствует о корректности данных подходов (табл. 2). Наиболее сильно различаются величины энтальпий образования 1*H*-3-изопропокси-1,2,4-триазола, вычисленные по реакциям **8** и **9**

Т а б л и ц а 2. Расчетные значения энтальпии изодесмических реакций ($\Delta_f H^0_{298}$) и стандартной энтальпии образования ($\Delta_f H^0_{298}$) 1*H*-5-алкокси-1,2,4-триазолов и 1-метил-3-метокси-1,2,4-триазола (кДж/моль)

Реакция	B3LYP/6-311+G(d,p)//B3LYP/6-31G(d)		G3	
	$\Delta_f H^0_{298}$	$\Delta_f H^0_{298}$	$\Delta_f H^0_{298}$	$\Delta_f H^0_{298}$
1	49,19	34,46	58,57	25,08
2	29,52	29,16	33,56	25,12
3	36,81	28,23	41,04	24,00
4	11,31	23,56	11,06	23,81
5	49,52	1,83	59,18	-7,83
6	28,89	-3,52	33,83	-8,46
7	11,89	-10,32	10,16*	-8,59*
8	51,87	-36,12	59,76*	-44,01*
9	24,04	-45,34	20,33*	-41,63*
10	15,12	-41,05	16,78*	-42,71*
11	29,41	-65,84	31,58*	-68,01*
12	46,12	-81,02	31,15*	-66,05*
13	19,42	-74,75	13,30*	-68,63*
14	32,46	19,79	42,25	5,65
15	12,13	11,52	11,64	7,66
16	-4,13	21,58	-0,44	13,54
17	-18,20	14,20	-16,88	8,58

П р и м е ч а н и е. * – рассчитано с использованием G3MP2 уровня теории.

(-44,01 и -41,63 кДж/моль соответственно), однако эти различия не выходят за рамки экспериментальных погрешностей определения энтальпий образования эталонных веществ, использованных для построения изодесмических реакций. Существенное отличие величины энтальпии образования 1-метил-3-метокси-1,2,4-триазола, вычисленной методом G3 по реакции **16**, от значений, полученных из реакций **14**, **15**, и **17**, видимо, обусловлено ошибками, допущенными при экспериментальном определении энтальпии образования тетразола и/или его метильного производного.

Отметим, что значение энтальпии образования 1-метил-3-метокси-1,2,4-триазола, вычисленное из реакции изомеризации (8,58 кДж/моль), хорошо согласуется с величинами, рассчитанными на основе изодесмических реакций **14** и **15**. Таким образом, использование принципиально различных подходов приводит к близким результатам, что свидетельствует о корректности применяемых методов.

При использовании метода B3LYP/6-311+G(d,p)//B3LYP/6-31G(d) рассчитанные исходя из различных изодесмических реакций значения стандартной энтальпии образования исследуемых веществ в некоторых случаях существенно различаются (табл. 2). Наиболее сильные отличия наблюдаются для величин энтальпии образования 1*H*-3-*трет*-бутоксид-1,2,4-триазола, вычисленных по реакциям **11** и **12** (-65,84 и -81,02 кДж/моль соответственно), что, видимо, обусловлено недостатками B3LYP/6-311+G(d,p)//B3LYP/6-31G(d) метода. В то же время величины относительных энергий таутомерных форм и изомеров (табл. 3), вычисленные методом B3LYP/6-311+G(d,p)//B3LYP/6-31G(d), хорошо согласуются с результатами G3 и G3MP2 расчетов.

Рассчитанное значение энтальпии образования 1*H*-3-метокси-1,2,4-триазола значительно ниже энтальпии образования 1*H*-1,2,4-триазола ($192,9 \pm 0,8$ [15]). При увеличении числа углеродных атомов в алкоксигруппе на единицу, рассчитанное значение энтальпии образования соответствующего вещества уменьшается в среднем более чем на 30 кДж/моль (табл. 3). В то же время при переходе от *N*-незамещенных *C*-метокси-1,2,4-триазолов к соответствующим метильным производным расчетные величины энтальпии образования уменьшаются только на 10–18 кДж/моль (табл. 3).

*N*₂-Таутомерные формы и *N*₂-изомеры *C*-алкокси-1,2,4-триазолов характеризуются наименьшими значениями энтальпии образования, тогда как *N*₄-формы наименее устойчивы в газовой

Т а б л и ц а 3. Расчетные значения стандартной энтальпии образования ($\Delta_f H^0_{298}$) таутомерных форм С-алкокси-1,2,4-триазолов и изомерных N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов и энтальпии изомеризации ($\Delta_f H^0_{298}$, кДж/моль)

Соединение	B3LYP/6-311+ G(d,p)//B3LYP/6-31G(d)		G3	
	$\Delta_f H^0_{298}$	$\Delta_f H^0_{298}$	$\Delta_f H^0_{298}$	$\Delta_f H^0_{298}$
1-Н-3-метокси-1,2,4-триазол	28,85	0,0	24,50	0,0
2-Н-3-метокси-1,2,4-триазол	21,58	-7,27	18,83	-5,67
4-Н-3-метокси-1,2,4-триазол	51,16	22,31	46,85	22,35
1-Н-3-этоксид-1,2,4-триазол	-4,00	0,0	-8,30	0,0
2-Н-3-этоксид-1,2,4-триазол	-11,58	-7,58	-14,20	-5,90
4-Н-3-этоксид-1,2,4-триазол	18,02	22,02	13,79	22,09
1-Н-3-изопропокси-1,2,4-триазол	-40,84	0,0	-42,79*	0,0*
2-Н-3-изопропокси-1,2,4-триазол	-50,66	-9,82	-50,66*	-7,87*
4-Н-3-изопропокси-1,2,4-триазол	-21,00	19,84	-23,21*	19,58*
1-Н-3-трет-бутоксид-1,2,4-триазол	-73,87	0,0	-67,56*	0,0*
2-Н-3-трет-бутоксид-1,2,4-триазол	-86,11	-12,24	-77,75*	-10,18*
4-Н-3-трет-бутоксид-1,2,4-триазол	-57,01	16,86	-51,03*	16,54*
1-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	15,17	0,0	7,29	0,0
2-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	8,48	-6,69	1,17	-6,13
4-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	43,02	27,86	36,56	29,27

П р и м е ч а н и е. Рассчитано с использованием G3MP2 уровня теории.

фазе (табл. 3). Увеличение электронодонорных свойств заместителя приводит к большей стабилизации N_2 -таутомерной формы по сравнению с соответствующей N_1 -формой (табл. 3). Подобная закономерность наблюдается и для таутомерных форм С-замещенных тетразолов [16].

Известно, что растворитель может оказывать существенное влияние на относительную устойчивость изомерных гетероциклов. Увеличение полярности растворителя способствует смещению равновесия в сторону образования более полярного изомера и может приводить к обращению относительной устойчивости изомеров по сравнению с газовой фазой [11; 13].

Относительные энергии таутомерных форм С-алкокси-1,2,4-триазолов и изомерных N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов в водном растворе приведены в табл. 4.

Т а б л и ц а 4. Расчетные значения относительной энергии Гиббса ($\Delta_f G_s$) таутомерных форм С-алкокси-1,2,4-триазолов и изомерных N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов в водном растворе (кДж/моль)

Соединение	$\Delta_f G_s$
1-Н-3-метокси-1,2,4-триазол	0,0
2-Н-3-метокси-1,2,4-триазол	1,72
4-Н-3-метокси-1,2,4-триазол	14,98
1-Н-3-этоксид-1,2,4-триазол	0,0
2-Н-3-этоксид-1,2,4-триазол	1,30
4-Н-3-этоксид-1,2,4-триазол	14,44
1-Н-3-изопропокси-1,2,4-триазол	0,0
2-Н-3-изопропокси-1,2,4-триазол	-0,34
4-Н-3-изопропокси-1,2,4-триазол	13,46
1-Н-3-трет-бутоксид-1,2,4-триазол	0,0
2-Н-3-трет-бутоксид-1,2,4-триазол	-1,88
4-Н-3-трет-бутоксид-1,2,4-триазол	12,03
1-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	0,0
2-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	2,66
4-метил-3-метокси-1,2,4-триазол	21,69

Согласно выполненным расчетам, в водном растворе N_1 - и N_2 -таутомерам и изомерам соответствуют близкие значения энергии. При этом, в отличие от газовой фазы, для С-метокси- и С-этоксид-1,2,4-триазолов и N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов N_1 -производные становятся не-

сколько более устойчивыми, чем N₂-изомеры. Таким образом, под действием полярной среды происходит обращение относительной устойчивости N₁- и N₂-производных по сравнению с газовой фазой. Это объясняется тем, что молекулы N₁-таутомерных форм 3-алкокси-1,2,4-триазола и N₁-изомеров N-алкил-3-алкокси-1,2,4-триазолов являются более полярными, чем молекулы соответствующих N₂-соединений. Например, расчетные значения дипольных моментов молекул N₁-, N₂- и N₄-таутомерных форм 3-метокси-1,2,4-триазола равны соответственно 3,31, 2,56 и 4,44 D. Как и в газовой фазе, в водном растворе N₄-производные являются наименее устойчивыми (табл. 3, 4).

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект X12CO-011).

Литература

1. Pharmaexpert [Electronic resource]. – Mode of access: <http://pharmaexpert.ru/passonline>.
2. Певзнер М. С., Самаренко В. Я., Багал Л. И. // Химия гетероциклических соединений. 1970. № 4. С. 568–571.
3. Nagao Y., Sano Sh., Ochiai M. // Tetrahedron. 1990. Vol. 46. P. 3211–3232.
4. Суханов Г. Т., Суханова А. Г., Филиппова Ю. В. и др. // Ползуновский Вестн. 2013. № 1. С. 24–26.
5. Matulis Vadim E., Ivashkevich O. A., Gaponik P. N. et al. // J. Mol. Struct. (Theochem). 2008. Vol. 854. P. 18–25.
6. Frisch M. J. et al. // Gaussian 09, Revision A.02. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
7. Becke A. D. // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98. P. 5648–5652.
8. Curtiss L. A., Raghavachari K., Redfern P. C. et al. // J. Chem. Phys. 1998. Vol. 109. P. 7764–7776.
9. Curtiss L. A., Redfern P. C., Raghavachari K. et al. // J. Chem. Phys. 1999. Vol. 110. P. 4703–4709.
10. Cancas M. T., Mennucci B., Tomasi J. // J. Chem. Phys. 1997. Vol. 107. P. 3032–3041.
11. Ивашкевич О. А., Гапоник П. Н., Матулис Вит. Э. и др. // ЖОХ. 2003. Т. 73. С. 296–303.
12. Ивашкевич О. А., Матулис Вадим Э., Гапоник П. Н. и др. // ХГС. 2008. № 12. С. 1816–1828.
13. Wong M. W., Leung-Toung R., Wentrup C. // J. Am. Chem. Soc. 1993. Vol. 115. P. 2465–2472.
14. Mazurek A. P., Sadlej-Sosnowska N. // Chem. Phys. Lett. 2000. Vol. 330. P. 212–218.
15. Jimenez P., Roux M. V., Turrion C. // J. Chem. Thermodyn. 1989. Vol. 21. P. 759–764.
16. Trifonov R. E., Alkorta I., Ostrovskii V. A. et al. // J. Mol. Struct. (Theochem). 2004. Vol. 668. P. 123–132.

Vadim E. MATULIS, Y. V. GRIGORIEV, G. T. SUKHANOV, I. A. KRUPNOVA, O. A. IVASHKEVICH

matulisvad@bsu.by; azole@bsu.by; admin@ipcet.ru; irinka-krupnova@mail.ru; nauka@bsu.by

STANDARD GAS-PHASE FORMATION ENTHALPIES AND RELATIVE STABILITY OF C-ALKOXY-1,2,4-TRIAZOLES TAUTOMERIC FORMS AND ISOMERIC N-METHYL-C-METOXY-1,2,4-TRIAZOLES: QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS

Summary

The formation enthalpies of tautomeric forms of C-alkoxy-1,2,4-triazoles (alkoxy = OCH₃, OC₂H₅, Oi-C₃H₇, Ot-C₄H₉) and isomeric N-methyl-C-methoxy-1,2,4-triazoles have been calculated by means of designed isodesmic and isomerisation reactions. The relative Gibbs energies for their tautomeric forms and isomers in aqueous solution have been calculated. N₂-tautomers and isomers of C-alkoxy-1,2,4-triazoles were found to have the smallest values of formation enthalpy whereas N₄-forms are less stable in gaseous phase. Increasing of electron donor properties of substituent leads to the stabilization of N₂-tautomers in comparison with N₁-tautomers. N₁- and N₂-tautomers and isomers have similar values of Gibbs free energy in aqueous solution. In contrast to gaseous phase, N₁-derivatives of C-methoxy- and C-ethoxy-1,2,4-triazoles as well as N-methyl-C-methoxy-1,2,4-triazoles are more stable than corresponding N₂-derivatives. This is due to higher polarity of N₁-isomers in comparison with N₂-ones. N₄-derivatives are less stable in gaseous phase as well as in aqueous solution.

УДК 546.824-31:539.216.2

А. Е. СОЛОМЯНСКИЙ, В. С. БЕЗРУЧЕНКО, академик В. Е. АГАБЕКОВ,

ФОРМИРОВАНИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СВЕТОРАССЕИВАЮЩИХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ ЧАСТИЦ ДИОКСИДА ТИТАНА

Институт химии новых материалов НАН Беларуси, Минск

Поступило 06.08.2014

Создание и использование тонкопленочных покрытий, селективно рассеивающих видимое излучение, является актуальной задачей современного материаловедения, ее решение позволит улучшить качество устройств отображения информации и систем светодиодного освещения [1; 2]. Одним из способов формирования таких покрытий на твердых подложках и гибкой полимерной основе является метод Ленгмюра–Блоджетт (ЛБ) [3; 4]. Композиционные ленгмюровские слои амфифильных соединений с неорганическими частицами представляют собой плотноупакованные структуры, сформированные на водной поверхности, которые после их переноса на твердую подложку методом ЛБ образуют бездефектные моно- и мультислойные пленки [3–5]. Ограничения метода связаны с конструкционными особенностями коммерческих установок ЛБ, не позволяющими выделять пленки на площадях, превышающих несколько десятков см². Для устранения данного недостатка разработано устройство, позволяющее формировать покрытия с помощью «рулонных» технологий [5; 6].

Цель работы – сформировать покрытия из частиц диоксида титана (TiO₂) и исследовать их оптические свойства.

Выбор диоксида титана в качестве материала для формирования покрытий обусловлен его свойствами – эффективно рассеивать свет во всем видимом спектральном диапазоне при размере частиц 0,15–0,2 мкм [7].

Экспериментальная часть. Получение слоев TiO₂ (размер частиц ~150 нм, Aldrich) с помощью «рулонных» технологий осуществляли на установке LT 201 [5] следующим образом: на вращающийся цилиндр – барьер (ВБ), который одновременно служит для разделения ванны ЛБ на два отсека, закрепляли стеклянную подложку, площадью 6 см², фиксировали его между линейно перемещающимися барьерами и заполняли рабочий объем ванны дистиллированной водой. Затем на ее поверхность в отсеки слева (отсек А) и справа (отсек Б) от ВБ наносили пипет-дозатором по 100 мкл суспензии частиц TiO₂ в хлороформе. Затем ленгмюровские слои TiO₂ сжимали при помощи линейных барьеров. При достижении поверхностного давления ~30 мН/м автоматически запускался ВБ. В процессе вращения ВБ происходило формирование покрытия TiO₂ на стекле, при этом датчики поверхностного натяжения контролировали поверхностное давление, которое поддерживалось постоянными за счет сжатия ленгмюровских слоев TiO₂ линейными барьерами при увеличении времени формирования покрытия [6]. Количество оборотов ВБ: 5, 10 и 25 при скорости его вращения 0,3 оборота в минуту. Направление движения ВБ – против часовой стрелки. Скорость сжатия ленгмюровского слоя TiO₂ составляла 1 мм/с. Монослой ЛБ формируется за 0,5 оборота ВБ. Для получения стабильной суспензии частиц TiO₂ в хлороформе использовали стеариновую кислоту (СК) и поливинилкарбазол (ПВК) с $M_w \sim 1050$ кДа. Массовое соотношение компонентов в ней 1 : 1 : 0,5 для ПВК, СК и TiO₂ соответственно. Концентрации ПВК и СК в хлороформе составляли ~0,5 мг/мл. Изотерму сжатия ленгмюровского слоя TiO₂ регистрировали при скорости движения линейных барьеров 0,3 мм/с и температуре субфазы 20 °С, используя установку LT 201 [5].

Морфологию сформированных покрытий исследовали методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на сканирующем зондовом микроскопе Nanoscope IIIA (Veeco, США). Условия сканирования: скорость – 3–5 Гц; кантилевер из нитрида кремния с константой жесткости 0,12 Н/м. Плотность информации составляла 512×512 точек. Полученные АСМ изображения обрабатывали, используя программное обеспечение «Nanoscope 5.31r1».

Спектры пропускания и отражения образцов получали на спектрофотометре MayaPro2000 (Ocean Optics, США) в диапазоне от 300 до 700 нм.

Для оценки эффективности светорассеяния в спектральном диапазоне (400–700 нм) использовали интегральный параметр S . В случае отсутствия поглощения света в видимом диапазоне он характеризует процент световых потерь, связанных с рассеянием, а также отражением света и определяется как [2]

$$S = \left(1 - \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} f(x) dx}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} f(x_0) dx} \right) \times 100 \%,$$

где $f(x)$ и $f(x_0)$ – спектры пропускания исследуемого образца и немодифицированного стекла соответственно, а $\lambda_1 = 400$ нм и $\lambda_2 = 700$ нм – длины волн, ограничивающие видимый диапазон спектра.

Результаты и их обсуждение. Формирование мультислойной пленки ЛБ частиц TiO_2 из обоих отсеков возможно только при поверхностном давлении свыше 27 мН/м, когда их ленгмюровские слои находятся в фазовом состоянии «твердая» пленка (рис. 1). О переносе частиц TiO_2 на стекло из обоих отсеков при формировании мультислоя ЛБ свидетельствует изменение поверхностных давлений в отсеках (рис. 2), которое обусловлено, с одной стороны, их расходом за счет переноса на подложку, и, с другой стороны, поддержанием поверхностного давления постоянным ~ 30 мН/м при сжатии ленгмюровских слоев TiO_2 линейными барьерами.

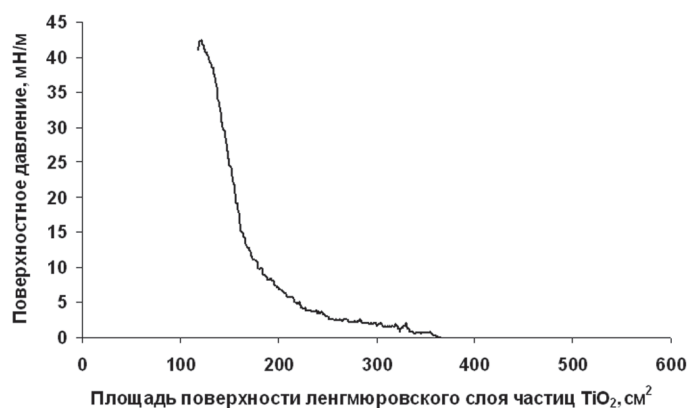


Рис. 1. Изотерма сжатия ленгмюровского слоя частиц TiO_2

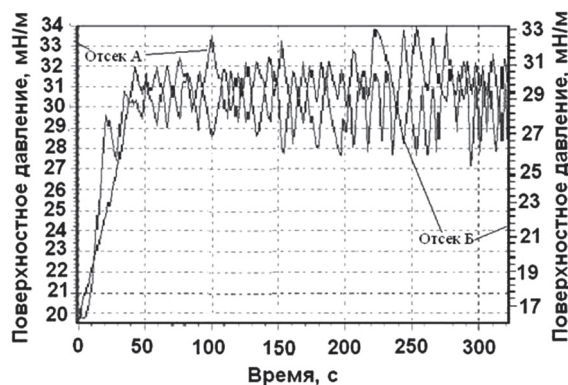


Рис. 2. Изменение поверхностных давлений в процессе переноса частиц TiO_2 на стеклянную подложку из двух отсеков (А и Б)

Суспензия TiO_2 в хлороформе поглощает свет в УФ области спектра (рис. 3), вследствие чего светопотери в видимой области спектров пропускания слоев из TiO_2 обусловлены его рассеянием и отражением [2]. Для покрытия из TiO_2 , содержащего 10 слоев, параметр S составляет 26 % (рис. 4, а, кривая 2). При увеличении количества слоев рассеивание света возрастает, S равно 39 (рис. 4, а, кривая 3) и 51 % (рис. 4, а, кривая 4) для покрытий состоящих из 20 и 50 слоев TiO_2 соответственно. Отраженный образцами свет составляет не более 13 %, независимо от количества слоев TiO_2 (рис. 4, б). Рассеяние света покрытиями TiO_2 связано с его дифракцией на агрегатах частиц TiO_2 , размеры которых $\sim 200\text{--}500$ нм (рис. 5) сопоставимы с длинами волн падающего излучения.

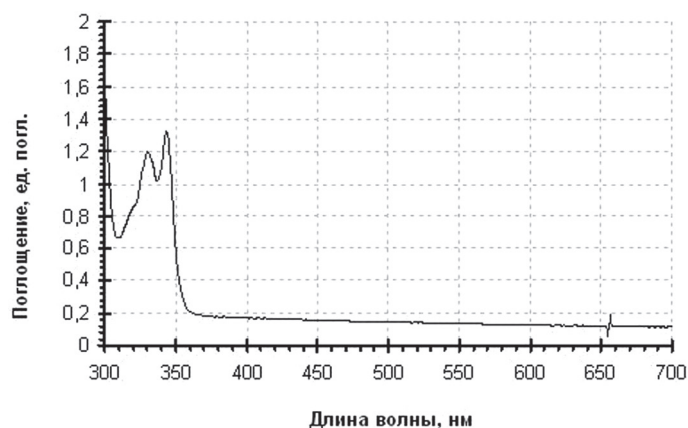
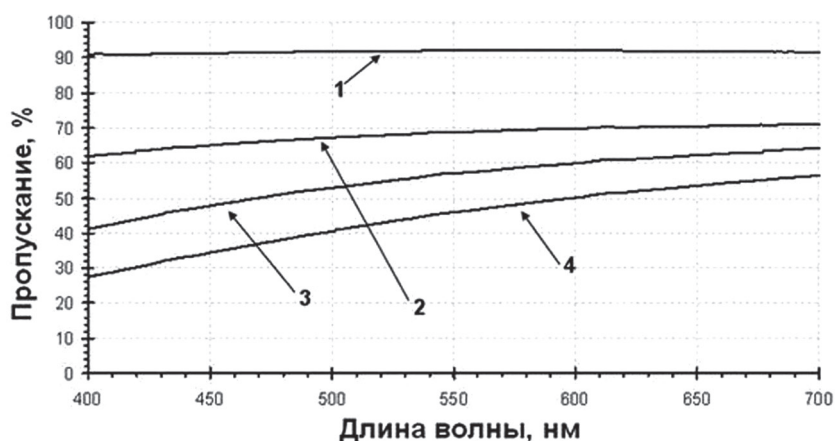
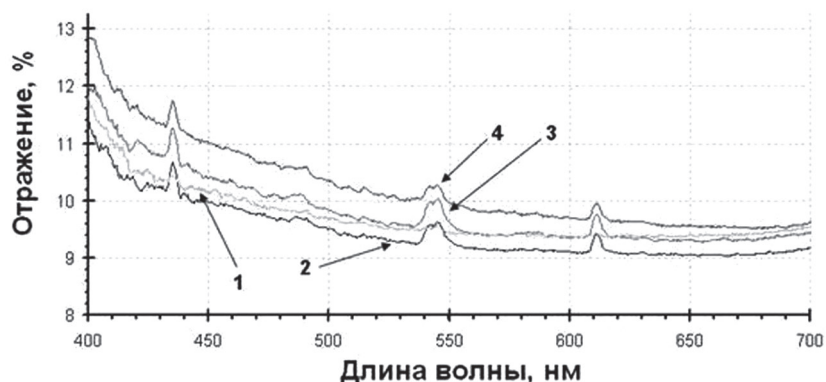


Рис. 3. Спектр поглощения суспензии частиц TiO_2 в хлороформе



а



б

Рис. 4. Спектры пропускания (а) и отражения (б) пленок TiO_2 при числе слоев: 1 – 0 (немодифицированная стеклянная подложка), 2 – 10, 3 – 20, 4 – 50

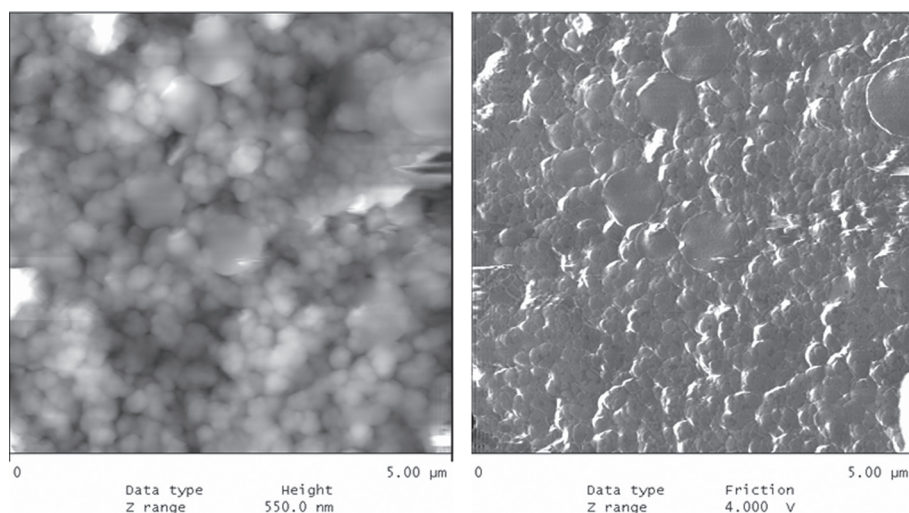


Рис. 5. АСМ изображение покрытия TiO_2 , состоящего из 50 слоев

Заключение. Методом ЛБ на стеклянной поверхности сформированы покрытия из частиц TiO_2 , рассеивающих свет в видимой области спектра. Показано, что эффективность светорассеяния зависит от количества слоев TiO_2 в пленке и при 50 слоях достигает 51 %. Полученные материалы могут быть использованы в устройствах отображения информации и системах светодиодного освещения.

Литература

1. Park M. S., Kon J. K. // *Langmuir*. 2005. Vol. 21. P. 11404–11408.
2. Куликовская В. И., Муравский А. А., Агабеков В. Е. // *ДАН*. 2011. № 6. С. 72–76.
3. Склизкова В. П., Гайнутдинов Р. В., Толстихина А. Л. и др. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2013. № 9. С. 5–12.
4. Murzina T. V., Khomutov G. B., Nikulin A. A. et al. // *J. Optical Society of America B*. 2000. Vol. 17, Iss. 1. P. 63–67.
5. Устройство для получения на твердой поверхности моно- или мультислойных пленок амфифильных соединений: Патент РФ № 15411 / Г. К. Жавнерко, В. Е. Агабеков, А. Е. Соломянский и др. Опубл. 27.10.2011.
6. Соломянский А. Е., Жавнерко Г. К., Каратай Н. В. и др. // *Материалы, технологии, инструменты*. 2014. Т. 19, № 2. С. 23–26.
7. Dunlop P. S. M., Byrne J. A., Manga N., Eggins B. R. // *J. Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. 2002. Vol. 148. P. 365–374.

A. E. SALAMIANSKI, V. S. BEZRUCHENKO, V. E. AGABEKOV

solasy@mail.ru

FORMATION AND OPTICAL PROPERTIES OF LIGHT SCATTERING COATINGS FROM PARTICLES OF TITANIUM DIOXIDE

Summary

Thin-film coatings efficiently (to 51 %) scattering light in the visible spectrum were obtained from particles of titanium dioxide by roll-to-roll technology on the rotating cylinder with glass substrate which separates the Langmuir–Blodgett trough into two compartments with linear barriers.

УДК 541.15

Ю. И. МАТУСЕВИЧ

**ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ МАТЕРАЛЫ НА ОСНОВЕ
ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА, МОДИФИЦИРОВАННОГО СОПОЛИМЕРИЗАЦИЕЙ
С ОРГАНИЧЕСКИМИ КИСЛОТАМИ**

(Представлено академиком А. И. Лесниковичем)

Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ, Минск

Поступило 15.10.2014

Введение. В современных оптических информационных технологиях в качестве носителей информации часто используют голографические изображения, записанные в специальных регистрирующих средах в виде фазовых голографических решеток. Основой таких сред в ряде случаев служит полиметилметакрилат (ПММА) [1–3], содержащий в качестве фоточувствительной добавки 9,10-фенантренхинон (ФАХ). Под воздействием лазерного излучения, используемого для записи голографического изображения, химическая структура фоточувствительной добавки изменяется, в результате чего происходит химическое взаимодействие добавки с макромолекулами полимера. В месте воздействия светового излучения образуется полимерный материал, который отличается по химической природе от исходного ПММА и имеет другой оптический показатель преломления. Это позволяет при записи голографического изображения в системе ПММА–ФАХ получить периодическую амплитудную модуляцию указанного параметра. На возникшей периодической структуре (голограмме) свет дифрагирует как на дифракционной решетке. Записанная в таком фоточувствительном материале голографическая решетка при нагреве сохраняется вплоть до 140 °С. Однако в ряде случаев, например, при совмещении с многослойным триплексным стеклом, фоточувствительный материал (регистрирующая среда) может испытывать длительное воздействие более высоких температур, в результате чего записанное в ней голографическое изображение может искажаться [4; 5]. Это ограничивает область применения системы ПММА–ФАХ в качестве оптической регистрирующей среды [6]. Кроме того, ПММА обладает низкой адгезией к поверхности стекол, что отрицательно сказывается на возможности его совмещения с другими оптическими материалами. В связи с этим возникает необходимость в одновременном повышении термической устойчивости этого полимера и в улучшении его адгезии к силикатному стеклу.

Решить первую из поставленных задач можно путем включения в структуру макромолекул ПММА мономерных звеньев более термически стойких полимеров, способных в то же время оказывать влияние на его межмолекулярное взаимодействие. ПММА – аморфный полимер с неупорядоченной на надмолекулярном уровне структурой и, в результате этого, слабым межмолекулярным взаимодействием. Любое увеличение взаимодействия между его макромолекулами за счет введения модифицирующих звеньев будет ограничивать их подвижность и, тем самым, способствовать повышению теплостойкости полимера, т. е. сохранению его исходной формы. Одновременно с увеличением межмолекулярного взаимодействия можно ожидать ограничения доступа кислорода внутрь полимера, что, в свою очередь, должно препятствовать термоокислительной деструкции и, тем самым, содействовать дополнительному повышению термостойкости полимера. Присутствие же в модифицирующих мономерных звеньях полярных химических групп, способных физически взаимодействовать с поверхностью силикатного стекла, позволит решить вторую задачу – повысить адгезию регистрирующей среды к нему.

Одним из путей одновременного решения указанных задач может быть сополимеризация метилметакрилата (ММА) с полярными мономерами, образующими при гомополимеризации полимеры, более тепло- и термостойкие по сравнению с ПММА, обладающие при этом высокой адгезией к стеклу [7]. Для этого в предыдущих наших работах [6; 8–10] предложено в качестве сомономера использовать полярные мономеры акриловой (АК) и метакриловой (МАК) кислот. Гомополимеры этих соединений обладают подобными свойствами. В указанных работах изучался состав этих сополимеров (СП). Была установлена зависимость мольной доли в СП звеньев полярных сомономеров (β) от их мольной доли в исходной смеси мономера (α), использовавшейся при сополимеризации. С помощью термомеханического анализа [6] было показано, что такое модифицирование ПММА АК и МАК способствует усилению в нем межмолекулярного взаимодействия и, как следствие, повышению температур релаксационных переходов. В частности, температура течения (T_T) у СП с мольными долями АК и МАК, равными 0,34 и 0,4, соответственно на 62 и 70 °С выше, чем у гомополимера ММА. Это позволяет сохранять исходную форму и размер полимерного материала вплоть до 200 °С. Было установлено, что термоокислительные процессы в этих СП, изученные нами с помощью совмещенного ДСК/ТГ анализа [10; 11], начинаются при температурах, превышающих 200 °С. Присутствие в макромолекулах СП ММА с АК и МАК функциональных карбоксильных групп, склонных к образованию водородных связей с гидроксильными группами на поверхности силикатного стекла, способствует их более высокой адгезии к силикатному стеклу по сравнению с гомополимером ММА. При оптимальном составе СП система силикатное стекло–СП ММА с АК или МАК адгезионная прочность клеевого соединения соответственно в 7,5 и 3,4 раза превосходит значение этого показателя, относящееся к клеевому соединению силикатное стекло–ПММА [12].

На основе СП ММА с АК и МАК созданы новые полимерные материалы, предназначенные для записи фазовых голограмм, отличающиеся повышенной формоустойчивостью и высокой адгезией к силикатному стеклу [13]. В их состав входит 94,2–94,5 мас. % сополимера ММА с АК или МАК (содержание карбоксилсодержащих звеньев 15–35 %) и 5,5–5,8 мас. % ФАХ. Введение карбоксилсодержащих звеньев в состав макромолекул акрилового полимера обеспечивает повышение важнейшей характеристики формоустойчивости материала (температуры течения) на 40–90 °С, а также увеличение адгезии к силикатному стеклу в 2–8 раз по сравнению с гомополимером ММА или СП ММА с этилметакрилатом или пропиленметакрилатом, используемыми для записи голографических изображений (таблица).

Термические и адгезионные параметры полимерных основ голографического материала

Состав акрилового сополимера /мол. %/	T_T , °С	σ , МПа
Полиметилметакрилат	168	0,35
Поли(ММА /85/ -со- этилметакрилат /15/)	159	0,31
Поли(ММА /65/ -со- этилметакрилат /35/)	148	0,28
Поли(ММА /85 /-со- изопропилметакрилат /15/)	164	0,36
Поли(ММА /65/ -со- изопропилметакрилат /35/)	151	0,39
Поли(ММА /85/ -со- АК /15/)	212	2,15
Поли(ММА /65/ -со- АК /35/)	230	2,28
Поли(ММА /85/ -со- МАК /15/)	221	0,75
Поли(ММА /65/ -со- МАК /35/)	238	0,90

Ниже на примере СП ММА с АК оценивается возможность записи голографических изображений в регистрирующих средах на основе этих СП, а также термическая устойчивость записанных изображений.

Материалы и методы исследования. ПММА и его СП синтезировали в соответствии с методикой, приведенной в [10; 11]. Для записи голографических изображений использовали их пленочные образцы размером 10 × 15 мм, содержащие ФАХ. ФАХ в количестве 6 мол. % вводили в раствор полимера в процессе получения пленок. Мольная доля полярного сомономера АК в смеси с ММА равнялась 0,5 и соответствовала оптимальному с точки зрения его термической

стойкости составу СП. Аналогичная мольная доля МАК в СП, оптические свойства которого исследовались в работе [14], составляла 0,3.

Запись и воспроизведение голографических решеток осуществлялись в соответствии со схемой, предложенной в [6]. В качестве источника монохроматического света при записи решеток использовался аргоновый лазер (514 нм). Интенсивности двух интерферирующих лучей на входе были одинаковыми и составляли по 30 мВт/см² каждая. Изменение решетки во времени при ее записи контролировалось детектором. Дифракционная эффективность (ДЭ) записанной в среде голографической решетки рассчитывалась как отношение интенсивности луча после дифракционной решетки, фиксируемой на детекторе, к интенсивности входящего луча, попадающего на решетку.

Результаты и их обсуждение. Результаты измерений эффективности дифракции голографических решеток, записанных в изучаемых системах, включающих ФАХ в качестве фоточувствительной добавки, свидетельствуют о том, что введение в макромолекулу ПММА чужеродных кислотных звеньев не препятствует записи и воспроизведению голографических изображений (рис. 1). Экспериментально фиксируемая дифракционная решетка появляется в фоточувствительном ПММА с момента начала ее записи, и максимум ее ДЭ достигается через 90 с (рис. 1, *a*).

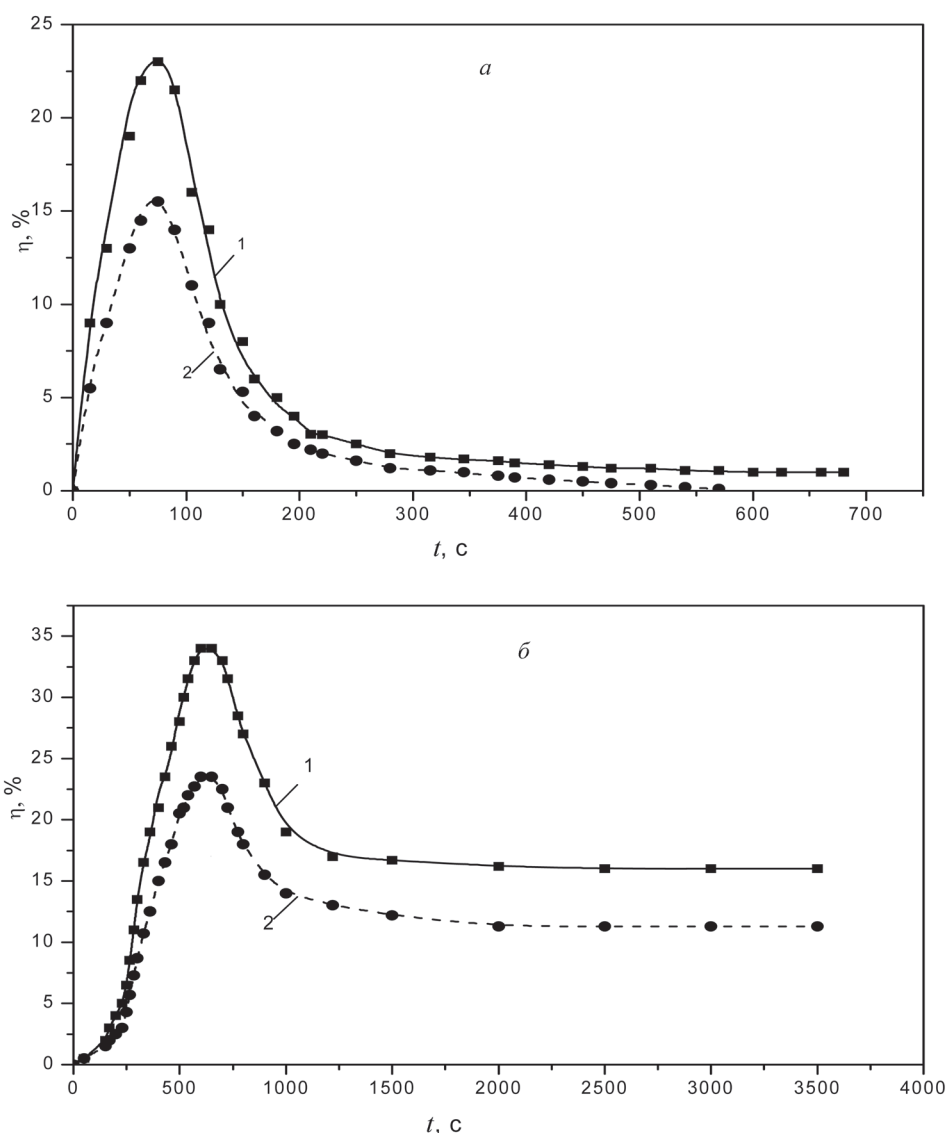


Рис. 1. Зависимость ДЭ голографических решеток с периодом 576 нм, записанных при комнатной температуре с помощью аргонового лазера в ПММА (*a*) и в СП ММА с АК (*б*), от времени. Воспроизведение голографической решетки: 1 – с помощью аргонового лазера (514 нм); 2 – с помощью гелий-неонового лазера (633 нм)

Далее величина этого показателя экспоненциально снижается практически до нуля, т. е. решетка, фиксируемая экспериментально, полностью разрушается. Максимум экспериментально измеряемой ДЭ голографической решетки, записываемой в СП ММА с МАК, имеющем оптимальный, с точки зрения эффективности записи, состав, достигался за более продолжительный промежуток времени – 150 с [14]. При записи решетки в фоточувствительном СП ММА с АК оптимального состава дифракция возникает через 60 с с начала записи, и в течение 600 с ее эффективность возрастает до максимального значения, в 1,5 раз более высокого, чем аналогичный показатель решетки, записанной в гомополимере (рис. 1, б). В течение последующих 1000 с величина ДЭ снижается практически в два раза до стабильного уровня, примерно в 15 раз более высокого, чем в случае ПММА.

Динамика формирования голографической решетки при ее записи в фоточувствительной полимерной среде на основе ПММА и его СП определяется, главным образом, двумя диффузионными процессами [15]. Первый из них связан с диффузией свободных молекул фоточувствительной добавки, второй – с диффузией сегментов макромолекул полимера, химически связанных с ней. Оба процесса напрямую зависят от межмолекулярного взаимодействия в полимерной среде. Изменяя, даже незначительно, взаимодействие между макромолекулами в исходном полимере, можно изменять качество и скорость формирования голографического изображения. В результате процесс образования экспериментально фиксируемой дифракционной решетки в фоточувствительном СП ММА с АК, обладающем наиболее сильным межмолекулярным взаимодействием, длится значительно дольше. Но при этом могут быть достигнуты более высокие значения ДЭ записанной голографической решетки.

Введение в ПММА полярных сомономеров, существенно повышающее его термическую стойкость, должно отражаться на термической устойчивости записываемых в нем голографических изображений. Для подтверждения этого полимерные пленки, содержащие в качестве сомономера АК, в которых были записаны дифракционные решетки, подвергали термической обработке при разных температурах, вплоть до 200 °С (рис. 2). Начальные значения экспериментально фиксируемых ДЭ решеток соответствовали максимальным значениям, достигаемым при их записи, и приняты за единицу.

В процессе нагрева при 100 °С экспериментально фиксируемая ДЭ фазовой решетки, записанной в ПММА, изменяется экстремальным образом, достигая максимума через 15 мин с начала термообработки (рис. 2, а). Увеличение ДЭ на начальной стадии термического воздействия может быть вызвано ослаблением межмолекулярного взаимодействия в полимерной матрице и повышением в результате этого подвижности свободных молекул ФАХ. Свободные молекулы фоточувствительной добавки, не связавшиеся химически с полимером при записи решетки, вступают в химическое взаимодействие с ним. ДЭ решетки, фиксируемая экспериментально, возрастает в несколько раз, достигая своего максимума. К этому моменту практически все молекулы ФАХ оказываются химически связанными с полимером [15]. Их пространственное движение как свободных молекул завершается. Формирование решетки также прекращается. При более длительном термическом воздействии на ДЭ решетки оказывает влияние уже подвижность молекул ФАХ, химически связанных с полимером. Их диффузия вместе с присоединенными звеньями макромолекул ПММА, разрушающая дифракционную решетку, происходит значительно медленнее. В результате ее ДЭ снижается постепенно.

Экспериментально фиксируемые значения ДЭ дифракционной решетки, записанной в фоточувствительных СП ММА с АК, при нагревании при температуре 100 °С изменяются под воздействием тех же процессов, что и в фоточувствительном ПММА. Однако малая подвижность сегментов макромолекул СП, вызванная более сильным межмолекулярным взаимодействием, ограничивает диффузию свободных молекул ФАХ и, тем самым, замедляет процессы усиления решетки, формируемой продуктами химического взаимодействия ФАХ с полимером. В результате экспериментально фиксируемая ДЭ решеток, записанных в СП ММА с АК, достигает своего максимума при более продолжительном нагреве в течение примерно 60 мин (рис. 2, а). Аналогичным образом, за более длительный промежуток времени достигается максимум ДЭ у решетки, записанной и в СП ММА с МАК. Наблюдаемое ослабление экспериментально фиксируемой

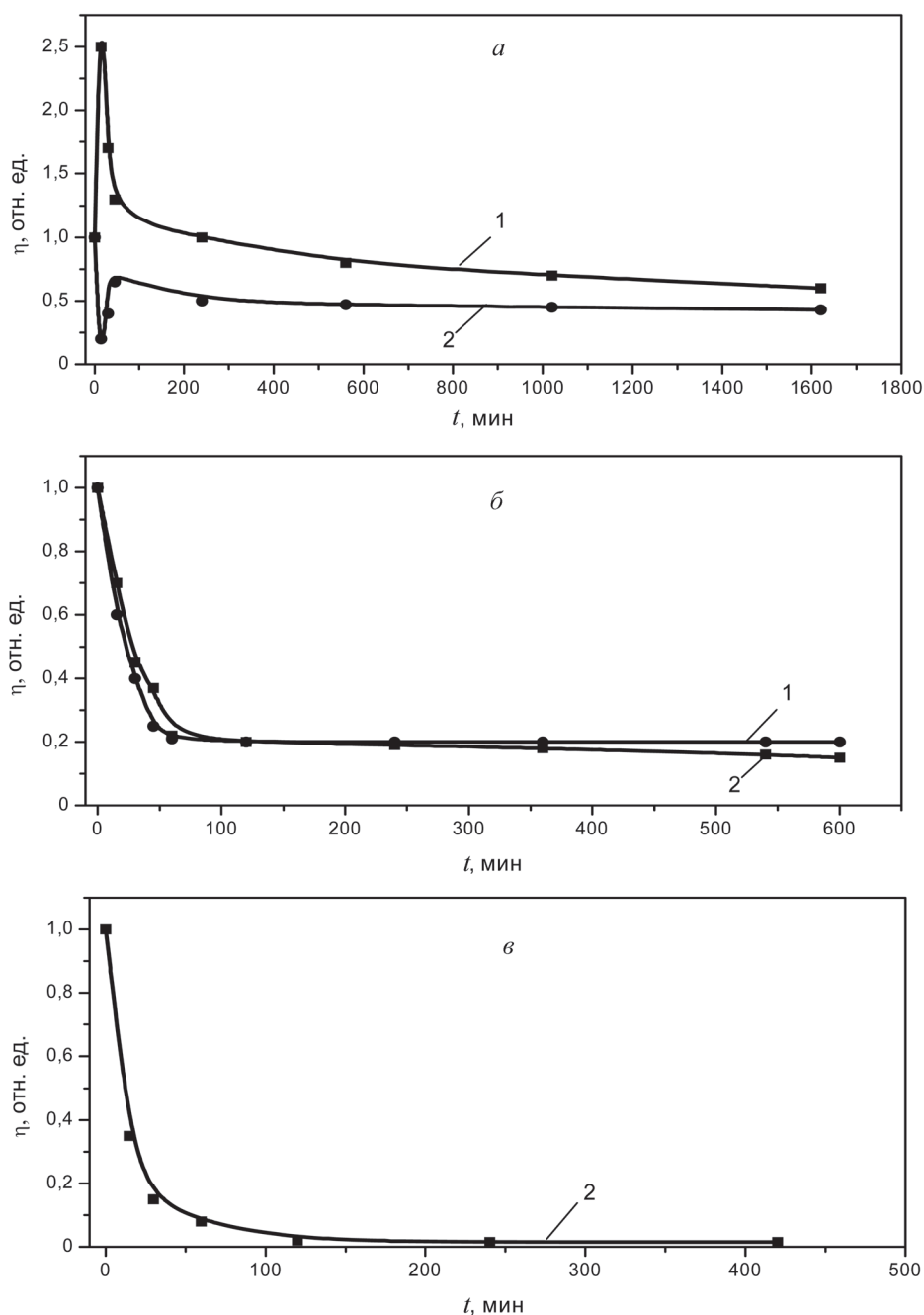


Рис. 2. Зависимость нормализованной ДЭ ПММА+ФАХ (1) и сополимера ММА сАК+ФАХ (2) от времени термообработки при температурах 100 °С (а), 160 °С (б) и 200 °С (в)

ДЭ решетки, записанной в СП, при непродолжительном нагреве (рис. 2, а) может быть результатом появления и последующего разрушения решетки, формируемой свободными молекулами ФАХ. Последние формируют нестабильную дифракционную решетку, находящуюся в противофазе к решетке, образованной ФАХ, химически связанным с полимером [15].

При температуре 160 °С ПММА и его СП переходят в вязкотекучее состояние, в результате чего межмолекулярное взаимодействие в них резко ослабевает, а процессы, связанные с диффузией свободных молекул ФАХ, значительно ускоряются. В результате уже через 15 мин термического воздействия на ПММА и СП ММА с АК (рис. 2, б) в эксперименте достигается величина параметра η , соответствующая далекому процессу разрушения дифракционной решетки, образованной ФАХ, химически связанным с полимером. За 60–120 мин экспериментально фиксируемая ДЭ снижается до минимально возможного значения (рис. 2, б). При этом зависимо-

сти ДЭ от времени, относящиеся к ПММА и СП ММА с АК, практически накладываются друг на друга. Примерно за такое же время при 160 °С до состояния насыщения снижается ДЭ решетки, записанной в фоточувствительном СП ММА с МАК [14]. Следует отметить, что при этой же температуре наблюдается химическая деструкция ПММА, которая проявляется в потемнении пленок и появлении в них пузырей.

При температуре 200 °С дифракционная решетка, присутствующая в ПММА, быстро разрушается и через 15 мин нагрева (первая точка измерения ДЭ при нагреве) уже не фиксируется. В более термостойком фоточувствительном СП ММА с АК только при 200 °С проявляются некоторые признаки деструкции, а дифракционная решетка фиксируется даже после 360 мин термообработки (рис. 2, в). При этой же температуре в образцах из фоточувствительного СП ММА с МАК голографическая решетка, хотя и менее продолжительно, но тоже фиксируется.

Заключение. Установлена возможность использования СП ММА с АК и МАК, содержащих добавку ФАХ, в качестве фоточувствительного материала, предназначенного для записи и хранения голографических изображений. На их основе созданы новые полимерные материалы для записи фазовых голограмм, отличающиеся повышенной формоустойчивостью и высокой адгезией к силикатному стеклу. Время записи голографических изображений в рассмотренных фоточувствительных материалах в значительной степени определяется их межмолекулярным взаимодействием. Процесс образования экспериментально фиксируемой ДЭ в фоточувствительном СП ММА с АК, обладающем более сильным межцепным взаимодействием по сравнению с фоточувствительным ПММА, длится значительно дольше, но при этом может быть достигнута более высокая ДЭ решетки. Высокая термическая устойчивость СП ММА с АК и МАК позволяет сохранять записанную в них информацию в технологических процессах, сопровождающихся нагревом до температур порядка 200 °С.

Литература

1. Steckman G. J., Solomatine I., Zhou G., Psaltis D. // Opt. Lett. 1998. Vol. 23, N 16. P. 1310–1312.
2. Kar Ajoy K. // Polym. Adv. Technol. 2000. Vol. 11, N 8–12. P. 553–559.
3. Veniaminov A. V., Bartsch E. // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 2002. Vol. 4, N 4. P. 387–392.
4. Krul L. P., Matusevich V., Hoff D. et al. // Optics express. 2007. Vol. 15, N 14. P. 8543–8549.
5. Tolstik E., Winkler A., Matusevich V. et al. // IEEE Photonics Technology Letters. 2009. Vol. 21, N 12. P. 784–786.
6. Круль Л. П., Матусевич Ю. И., Якимцова Л. Б., Бутовская Г. В. // Химические проблемы создания новых материалов и технологий: Сб. ст. Вып. 3 / под ред. О. А. Ивашкевича. Минск: БГУ, 2008. С. 422–446.
7. Kuo S.-W., Kao H.-C., Chang F.-C. // Polymer. 2003. Vol. 44. P. 6873–6882.
8. Krul L. P., Matusevich Yu. I., Matusevich V. Yu. et al. // STEPI 7. 7th European Technical Symposium on Polyimides and High Performance Functional Polymers. France, Montpellier, 2005. 2 S.T.L. P. 163.
9. Круль Л. П., Матусевич Ю. И., Матусевич В. Ю. и др. // Материалы Междунар. конф. по органической химии «Органическая химия от Бутлерова и Бейльштейна до современности». Санкт-Петербург, 2006. С. 192–193.
10. Якимцова Л. Б., Егорова Е. Л., Мурашко Е. А. и др. // ЖПХ. 2008. Т. 81, вып. 4. С. 632–635.
11. Круль Л. П., Якимцова Л. Б., Егорова Е. Л. и др. // ЖПХ. 2011. Т. 84, вып. 1. С. 830–837.
12. Якимцова Л. Б., Егорова Е. Л., Яценко В. С. и др. // ЖПХ. 2011. Т. 84, вып. 12. С. 2043–2046.
13. Полимерный материал для записи фазовых голограмм: Патент РБ № 15381 / Л. П. Круль, Ю. И. Матусевич, Г. В. Бутовская, Л. Б. Якимцова, Е. Л. Егорова, А. Ю. Матусевич; заявитель НИИ ФХП БГУ – № 20100641, заявл. 28.04.2010; опубл. 07.10.2011 // Афіцыйны бюл. / Нац. Цэнтр інтэлектуал. уласнасці. 2012. № 1. С. 157–158.
14. Tolstik E., Egorova E., Hoff D. et al. // J. Polym. Res. (2012) 19:9742 DOI 10.1007/s10965-011-9742-z.
15. Матусевич Ю. И., Круль Л. П. // ЖПХ. 2013. Т. 86, вып. 8. С. 1288–1293.

Yu. I. MATUSEVICH

polymer@bsu.by

PHOTOSENSITIVE OPTICAL MATERIALS BASED ON THE METHYLMETHACRYLATE, MODIFIED BY COPOLYMERIZATION WITH ORGANIC ACIDS

Summary

A new photosensitive optical materials based on methylmethacrylate, modified organic acids, and phenanthrenequinone is obtained and investigated. The possibility of the recording of holographic gratings in this material is shown. Chemical conditions for the formation of holograms are discussed. Thermal and adhesive properties were improved with the aim of expanding the range of polymer application and generating of diffractive elements with long term stability and high optical quality.

БИОЛОГИЯ

УДК 635.342:631.523

М. Н. ШАПТУРЕНКО¹, А. В. ЯКИМОВИЧ², Ю. М. ЗАБАРА², академик Л. В. ХОТЫЛЁВА¹ВКЛАД МОЛЕКУЛЯРНО-ГЕНЕТИЧЕСКОЙ ДИВЕРГЕНЦИИ
КАПУСТЫ БЕЛОКОЧАННОЙ
В РЕАЛИЗАЦИЮ ПРОДУКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА ГИБРИДОВ F₁¹Институт генетики и цитологии НАН Беларуси, Минск²Институт овощеводства НАН Беларуси, Минск

Поступило 22.09.2014

Введение. В мировом овощеводстве капуста белокочанная (*Brassica oleracea* L. var. *capitata* L. f. *alba* DC) занимает важное место как ценный источник питательных и биологически активных компонентов [1; 2]. К настоящему времени селекция этой культуры сконцентрирована на использовании феномена гетерозиса, который обуславливает значимое превосходство гибридов F₁ над родителями по ряду показателей (продуктивность, скорость роста, экологическая пластичность, устойчивость к стрессу и др.) за счет более эффективного гомеостаза и сбалансированного метаболизма гибридных растений [3]. Существует несколько гипотез относительно природы гетерозиса, однако ни одна из них не объясняет этот феномен в полной мере [4; 5].

Ключевым моментом при селекции на гетерозис является отбор комбинаций с высоким гетеротическим потенциалом. Однако даже при умеренном числе исходных линий, осуществить полевые испытания всех потенциальных гибридных комбинаций не представляется возможным [6]. И если в F₁ простые признаки можно предсказать на основе средней величины родителей, эффективность предсказания полигенных признаков значительно снижается из-за неаддитивных эффектов генов [7].

Теоретически вероятность получения гетерозиса в F₁ увеличится, если в скрещиваниях используются генетически отдаленные формы, так как число сегрегирующих локусов оптимизируется [8]. Основываясь на этом предположении, предприняты попытки поиска прогностического критерия, который мог бы обеспечить альтернативный подход использования геномной информации в селекционном решении. В результате таких исследований были предложены некоторые методические подходы для предсказания гетерозисного преимущества и создания гетеротических групп [9–11].

В настоящем исследовании изучены перспективы предсказания продуктивного потенциала гибридов F₁ на основе скрининга полиморфизма анонимных последовательностей ДНК у капусты белокочанной.

Материалы и методы исследования. Для отбора пар скрещиваний оценивали молекулярно-генетическую разнородность капусты белокочанной различного эколого-географического происхождения (28 образцов из коллекции Института овощеводства НАН Беларуси) на основе RAPD (Random Amplified Polymorphic DNA) и ISSR (Inter Simple Sequence Repeats). Использовали 40 произвольных (RAPD) праймеров, синтезированных по аналогам фирмы Oregon Technology: OPA (n 01–03, 06–20), OPB (n 03, 04, 06, 08, 20), OPC (n 01, 03), OPW (n 01, 03, 05–07, 09, 11–13, 15, 17–20), OPE01; и 9 ISSR праймеров к микросателлитным повторам: (AC)₈AG, (AC)₈TA, (AC)₈AA, (AC)₈TC, (ATG)₆, (CTC)₆, (CTC)₆AA, (GAA)₆, (GACA)₄. Праймеры отбирали по способности выявлять межлинейный полиморфизм *Brassica oleracea* L. Полимеразную цепную реакцию проводили в стандартном режиме.

Анализ ДНК полиморфизма включал составление бинарных матриц, в которых отмечали присутствие (1) или отсутствие (0) фрагментов с одинаковой молекулярной массой. Генетические дистанции (GD) рассчитывали по Nei and Li (1979) [12]:

$$GD_{ij} = 1 - 2N_{ij} / (N_i + N_j),$$

где N_{ij} – число общих фрагментов i -го и j -го образцов; N_i и N_j – число фрагментов каждого из образцов. Кластеризацию экспериментального материала осуществляли методом UPGMA с помощью программного пакета Treeconw (версия 1.3b).

Отобранные линии капусты белокочанной изучали в системе полного диаллельного скрещивания (5×5). Опыление осуществляли вручную. Оценивали гибридное потомство F_1 и родительские линии в открытом грунте опытного поля Института овощеводства. Анализировали основные количественные признаки: вегетативную массу растения, массу наружной кочерыги, среднюю массу, плотность и объем кочана, отношение массы кочана к массе розетки.

Оценку общей (ОКС) и специфической (СКС) комбинационной способности проводили по методу I Griffing [13]. Относительный гипотетический гетерозис рассчитывали как превышение F_1 над средней величиной обеих родительских линий, истинный – как превышение F_1 над лучшим родителем. Если показатель гибрида F_1 оказывался хуже худшего родителя, гетерозис считали как отклонение гибрида от худшего родителя. В этом случае величина истинного гетерозиса была отрицательной [14].

Результаты и их обсуждение

Оценка молекулярно-генетической дивергенции образцов капусты белокочанной. При изучении молекулярно-генетической разнородности коллекции образцов капусты белокочанной различного происхождения рассмотрено 333 RAPD ампликона в диапазоне распределения 200–1500 п. н. Полиморфизм выявлен при амплификации с 37 из 40 использованных произвольных праймеров. Рассмотрено 230 полиморфных ДНК-фрагментов, в т. ч. уникальные. Уровень детектируемого полиморфизма составил 69,1 %.

На основе полученных данных подсчитаны генетические дистанции и выполнена иерархическая дифференциация образцов посредством кластерного анализа (рис. 1, а). В результате обнаружено значительное генетическое разнообразие среди экспериментальных форм. Большинство генотипов (21 из 28) топологически объединены в общий кластер с тремя субкластерами и диапазоном дистанций 7,05–19,0. Остальные 7 образцов составляют иерархию более высокого порядка (GD 15,1–21,3), поскольку характеризуются наличием набора уникальных и полиморфных ДНК-локусов, не свойственных основной части коллекции.

Полученные результаты свидетельствуют о высокой генетической разнородности коллекции и хороших перспективах использования представленного разнообразия для селекции капусты белокочанной.

По результатам молекулярно-генетической оценки отобраны как потенциальные компоненты гибридизации 5 образцов (Alfredo, Rotonda, Rd4, Invento, Semko) с различным уровнем GD (7.11–17.01) и отвечающих селекционным требованиям (наличие комплекса ценных признаков, сходные сроки цветения, высокая перекрестная совместимость).

После размножения для отбора генетически выровненного материала в самоопыленном потомстве образцов Alfredo, Rotonda, Semko, Invento, Rd4 и оценки межлинейного полиморфизма дополнительно проведен ISSR-скрининг (рис. 1, б). Исследование аллельного состава индивидуальных растений выявило высокий уровень внутрисортного полиморфизма только в потомстве Alfredo, Rotonda, Semko, тогда как Invento и Rd4 характеризовались высоким генетическим сходством. Основываясь на полученных данных, отобраны и включены в гибридизацию по схеме диаллельного скрещивания растения, выровненные по фенотипу и аллельному составу ISSR-локусов.

В целом использование ISSR подхода оказалось высокоэффективным для идентификации внутри- и межлинейной гетерогенности капусты белокочанной, так как воспроизводимый результат был получен при использовании небольшого набора информативных маркеров с применением малозатратного протокола. Из рассмотренных 47 ISSR-локусов, 23 являются специфичными и могут использоваться для типирования генотипов капусты белокочанной.

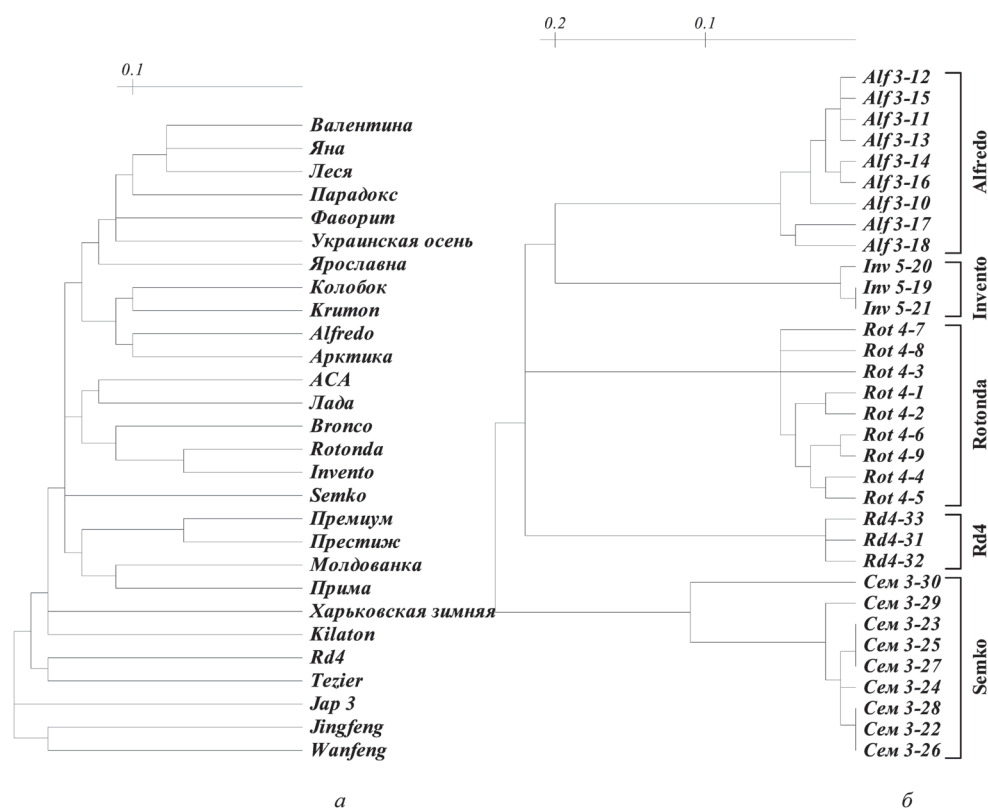


Рис. 1. Кластерный анализ, выполненный по результатам скрининга RAPD- (а) и ISSR-полиморфизма (б) образцов капусты белокочанной

Анализ гибридов F_1 и их родительских линий. При проведении дисперсионного анализа основных количественных признаков гибридов F_1 и их родительских линий были обнаружены достоверные различия между генотипами по всем анализируемым показателям.

Испытания показали, что большинство гибридов значимо превосходят родителей и стандарт Белорусская 85 по основным компонентам продуктивности (табл. 1). Гибриды, полученные в комбинации Alf3×Rot4, обладали наибольшими показателями значений вегетативной массы, массы и объема кочана. Гибрид Сем3×Rot4 при высоких показателях массы маточника и товарного кочана имел наибольшее отношение массы кочана к массе розетки и характеризовался высокой плотностью кочана.

В целом по абсолютным значениям выражения признаков лучшими оказались гибриды F_1 от комбинаций скрещивания линий Alf3 и Rot4, Alf3 и Сем3, Rot4 и Сем3.

Испытания в системе диаллельных скрещиваний 5×5 также позволили выявить комбинации с высокой степенью гетерозиса по элементам продуктивности (табл. 1). Так, по признаку вегетативная масса растения, гибриды показали высокие (>12 %) эффекты гипотетического гетерозиса в 17 комбинациях. Наибольшее превосходство над средней родителей отмечено в F_1 Inv5×Rd4 (89,9 %) и Rot4×Rd4 (70,8 %). Значения гипотетического гетерозиса превышали 50 % в 8 гибридных комбинациях (Alf×Inv, Alf×Rot4, Inv×Alf, Inv×Rd, Inv×Rot4, Rd4×Alf, Rd4×Inv, Rot4×Rd4). Значимое превосходство над лучшим родителем на 17,2–48,3 % по вегетативной массе растения выявлено также в восьми комбинациях скрещивания.

По признаку средняя масса кочана, который определяет урожайную ценность селекционных форм, выделены комбинации с высоким уровнем гетерозиса. Величина гипотетического гетерозиса была положительной и превосходила среднюю обоих родителей во всех комбинациях скрещивания за исключением Сем3×Alf3. Восемь гибридов из двадцати превосходили родителей более чем на 50 %. Наибольшая величина гетерозиса отмечена у Inv5×Rd4, родительские формы которого характеризуются невысокими значениями средней массы кочана.

Т а б л и ц а 1. Характеристика диаллельных гибридов капусты белокочанной и их родительских форм по некоторым селекционно-значимым признакам, уровню генетической дивергенции (GD), истинного (ИГ) и гипотетического (ГГ) гетерозиса

Генотип	Признак																	
	GD			Вегетативная масса растения			Масса кочана, кг			Объем кочана			Плотность кочана, г/см ³			Отношение масса кочана/масса розетки		
	общая	RAPD	ISSR	х, кг	ГГ, %	ИГ, %	х, кг	ГГ, %	ИГ, %	х, куб.л.	ГГ, %	ИГ, %	х, куб.л.	ГГ, %	ИГ, %	х	ГГ, %	ИГ, %
Alf3				3,88			2,47			2,77			0,89			0,685		
Alf3×Inv5	14,5	11,7	14,7	5,26	62,8*	48,9*	3,68	62,8*	48,9*	4,34	76,7*	56,1*	0,85	-5,03	-4,5	0,73	2,1	-
Alf3×Rd4	18	17,1	9,37	4,51	46,0*	11,7	2,76	63,3*	11,8	3,39	45,7*	22,2*	0,81	-3,8	-	0,659	13,8	2,9
Alf3×Rot4	17,9	13,8	23,9	7,01	67,0*	41,5*	5,01	66,8*	41,3*	5,83	53,4*	20,7*	0,86	0,1	-	0,744	8	7,2
Alf3×Сем3	19,5	15,7	26,1	5,13	26,0*	6,78	3,78	26,0*	6,8	4,42	31,2*	11,6	0,86	-3,4	-3,4	0,784	9,9	5,4
Inv5				2,9			2,05			2,27			0,9			0,745		
Inv5×Alf3	14,5	11,7	14,7	4,77	52,6*	39,7*	3,45	52,7*	39,6*	4,09	62,0*	47,4*	0,84	-5,6	-5,6	0,758	62,9*	1,3
Inv5×Rd4	16,6	13,8	12,9	5,49	89,9*	75,1*	3,59	113,7*	75,1*	4,15	99,8*	82,8*	0,86	-8,7	-	0,69	11,3	-
Inv5×Rot4	14	7,1	15,9	5,01	51,5*	-	3,39	21,1*	-	4,12	16,0	-	0,82	1,2	-	0,707	-1,4	-
Inv5×Сем3	17	14,9	17,5	4,28	12,9	11	3,15	12,9	-	3,55	13,8	-	0,89	-0,6	-	0,773	3,3	2,7
Rd4				2,98			1,32			1,88			0,7			0,488		
Rd4×Alf3	18	17,1	9,4	5,68	60,3*	22,7*	3,03	60,3*	22,5*	3,8	63,2*	36,9*	0,8	1,3	-	0,583	0	-
Rd4×Inv5	16,6	13,8	12,9	4,54	60,8*	48,3*	3,04	80,9*	48,2*	3,68	77,2*	61,8*	0,83	3,7	-	0,715	14,5	-
Rd4×Rot4	16,3	11	23,1	5,24	30,4*	-	3,17	30,5*	-	3,77	12,4	-	0,84	17,5*	15,1	0,646	10,2	-
Rd4×Сем3	20,7	17	18,6	5,3	38,7*	-	3,37	38,8*	-	4,23	44,9*	6,8	0,8	5,2	-	0,699	13,8	-
Rot4				5,33			3,54			4,83			0,73			0,689		
Rot4×Alf3	17,9	13,8	23,9	5,36	29,3*	9,6	3,88	29,3*	9,6	6,16	62,1*	27,5*	0,63	-22,2*	-13,7	0,761	10,9	10,1
Rot4×Inv5	14	7,1	15,9	5,62	44,1*	13,6	4,02	43,6*	13,5	4,77	34,3*	-	0,84	3,7	-	0,747	4,2	-
Rot4×Rd4	16,3	11	23,1	6,47	70,8*	17,2	4,15	70,8*	-	4,99	48,9*	3,3	0,83	16,1*	13,7	0,677	15,2	-
Rot4×Сем3	17,6	12	15,1	5,77	3,1	3,11	4,22	19,2	19,1	5,25	19,4*	8,7	0,8	-1,23	-	0,769	3,5	-
Сем3				5,1			3,54			3,96			0,89			0,739		
Сем3×Alf3	19,5	15,7	26,1	4,04	1,0	-	3,03	1,01	-	3,41	1,2	-	0,89	0	-	0,798	12,7	8,1
Сем3×Inv5	17	14,8	17,5	4,61	26,2*	-	3,52	28,5*	-	4,64	48,7*	17,2	0,76	-15,1	-14,6	0,795	6	5,3
Сем3×Rd4	20,7	17	18,6	4,92	37,9*	-	3,35	37,9*	-	4,25	45,5*	7,3	0,79	4,6	-	0,741	4,1	-
Сем3×Rot4	17,6	12	15,1	5,84	38,1*	38,1*	4,89	38,1*	38,2*	5,91	34,4*	22,4*	0,83	2,5	6,8	0,877	23,1*	18,9
Ошибка средней				0,05			0,05			0,07			0,01			0,03		

Пр и м е ч а н и е: «-» промежуточное наследование; * – значимо при $P < 0,05$.

Статистически значимые и положительные значения истинного гетерозиса по признаку средняя масса кочана обнаружены в восьми комбинациях скрещивания и их величина варьирует от 13,5 до 75,1 %.

По большинству анализируемых признаков наилучшими оказались гибридные комбинации, в которых в качестве одного из компонентов гибридизации была использована линия Alf3 (за исключением Сем3×Alf3).

Оценка линий на комбинационную способность выявила существенную изменчивость ОКС (\hat{g}_i) и СКС (σ_{si}^2) по большинству изученных признаков. Положительные значения ОКС по анализируемым признакам характеризуют Сем3 и Alf3, что говорит о высокой ценности этих линий во всех гибридных комбинациях, полученных с их участием (табл. 2).

По признаку средняя масса кочана эффекты ОКС линий Rot4, Сем3, Alf3 превосходили варианты СКС, следовательно, в реализации генетического потенциала этих генотипов при гибридизации основное значение имели аддитивные взаимодействия генов. Для линий Inv5 и Rd4 значения σ_{si}^2 превосходили \hat{g}_i , что свидетельствует о преимущественном значении доминирования и эпистатических эффектов.

По признаку плотность кочана положительной ОКС при низких значениях σ_{si}^2 обладали Inv5, Alf3, Сем3, что подтверждает стабильную передачу данного признака потомству F_1 .

Т а б л и ц а 2. Эффекты общей (\hat{g}_i) и варианты специфической (σ^2_{si}) комбинационной ценности селекционных линий капусты белокочанной по основным компонентам урожая

Линия	Признак					
	Средняя масса кочана		Плотность кочана		Отношение массы кочана к массе розетки	
	\hat{g}_i	σ^2_{si}	\hat{g}_i	σ^2_{si}	\hat{g}_i	σ^2_{si}
Rot4	0,864	0,613	-0,74	1,094	0,153	0,326
Sem3	0,239	-0,434	0,058	-0,702	0,946	-0,852
Alf3	0,105	-1,003	0,458	-0,287	0,04	0,447
Inv5	-0,472	0,805	0,729	0,494	0,232	0,347
Rd4	-0,737	0,023	-0,505	-0,601	-1,372	-0,266

Важным селекционным признаком является соотношение массы кочана к массе розетки, который отражает эффективность протекания процессов фотосинтеза – генотипы с высоким индексом соотношения формируют крупный кочан при относительно небольшой листовой массе розетки. Наибольшей ценностью при селекции на данный признак обладает Сем3, которая характеризуется высокой общей комбинационной способностью.

Связь генетической дивергенции родительских линий с продуктивным потенциалом F_1 . Идентификация высокоурожайных гетерозисных гибридов требует проведения многочисленных скрещиваний. После испытания большинство комбинаций выбраковываются. Применение молекулярных маркеров может повысить результативность отбора комбинаций с высоким потенциалом для селекции [15].

В нашем исследовании анализ сопряженности генетических дистанций с абсолютными значениями хозяйственно важных признаков гибридов F_1 позволил обнаружить тесные связи для ряда показателей (табл. 3, рис. 2). Так, общая GD, оцененная на основе двух подходов (ISSR, RAPD), была позитивно ассоциирована с массой, объемом и плотностью кочана. Наиболее тесные связи обнаружены для признака отношение массы кочана к массе розетки, в формирование которого вклад дивергенции родительских форм ($R = r^2$) составил 38,4 %. При этом наибольшее значение для реализации генетического потенциала F_1 имела дивергенция RAPD-локусов, тогда как ISSR полиморфизм не оказывал статистически значимого влияния (табл. 3). Вероятно, формирование высокопродуктивного гетерозисного генотипа не настолько связано с общей гетерогенностью гибридного генома, как с полиморфизмом в отдельных специфических локусах, которые обуславливают высокую экспрессию признаков в F_1 .

Т а б л и ц а 3. Коэффициенты корреляции между GD родительских линий капусты белокочанной и показателями продуктивности их диаллельных гибридов F_1

GD		Признак			
		Вегетативная масса растения	Масса кочана	Объем кочана	Масса кочана/ масса розетки
общая GD	все гибриды	0,42	0,56**	0,54*	0,62**
	прямые гибриды	0,64*	0,82**	0,75**	0,84**
	реципрокные гибриды	0,16	0,22	0,26	0,29
RAPD GD	все гибриды	0,41	0,51*	0,50*	0,55*
	прямые гибриды	0,65*	0,80**	0,74*	0,79**
	реципрокные гибриды	0,09	0,1	0,14	0,15
ISSR GD	все гибриды	0,11	0,23	0,21	0,32
	прямые гибриды	0,08	0,21	0,16	0,32
	реципрокные гибриды	0,06	0,12	0,16	0,18

П р и м е ч а н и е. * – $P < 0,05$, ** – $P < 0,01$.

Поскольку при анализе F_1 были выявлены значимые реципрокные эффекты, которые свидетельствуют о влиянии цитоплазматических факторов материнского генотипа на реализацию продуктивного потенциала F_1 , мы провели раздельную оценку связи генетической дивергенции

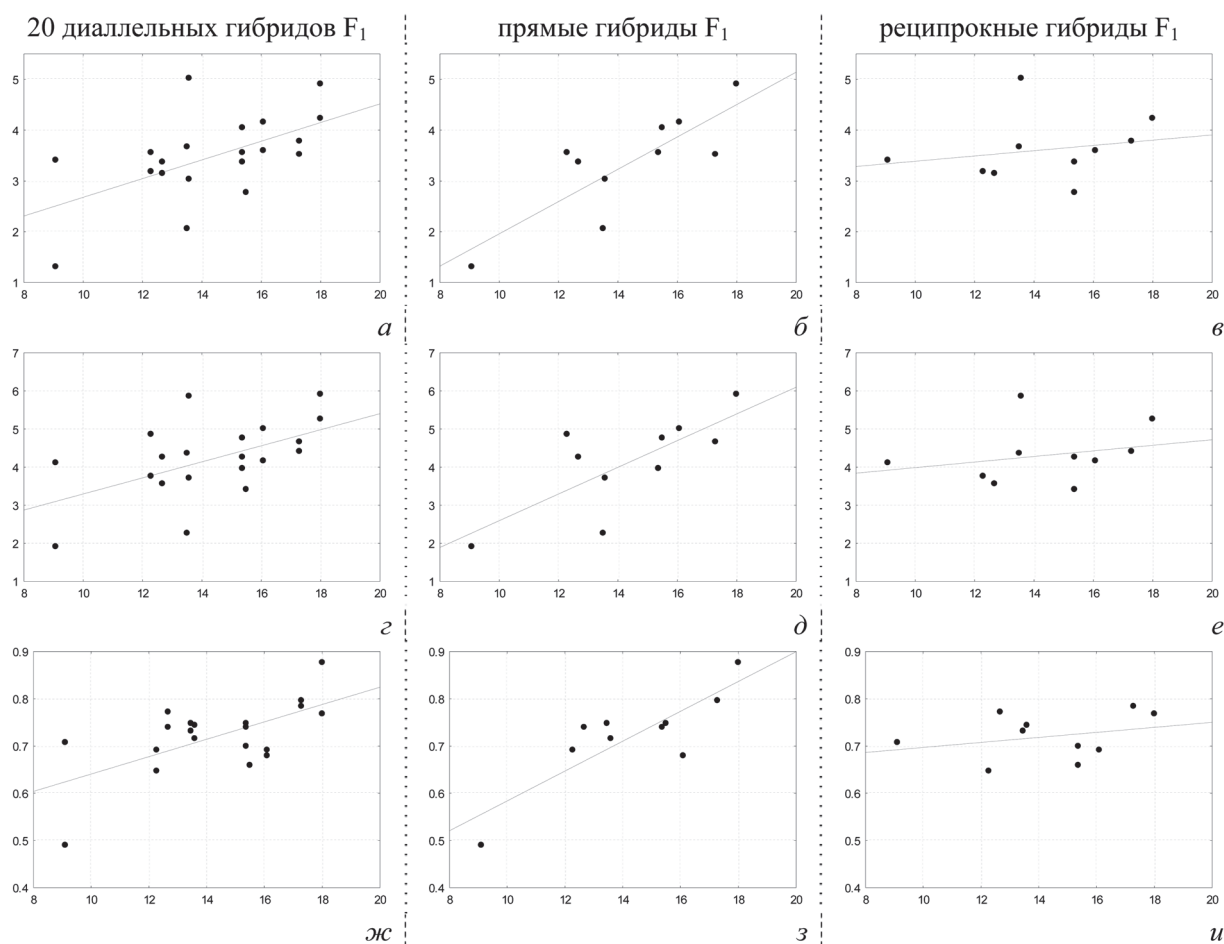


Рис. 2. Регрессионный анализ связи общей генетической дивергенции линий капусты белокочанной, оцененной на основе ISSR и RAPD подходов, с некоторыми показателями продуктивности их гибридов F_1 : ось OX – генетические дистанции (GD); ось OY – показатели продуктивности, выраженные в абсолютных величинах: a – $в$ – масса кочана, $г$ – $е$ – объем кочана, $ж$ – $и$ – масса кочана/масса розетки

с показателями продуктивности прямых и реципрокных гибридов. В результате было обнаружено, что характер связи общей GD значительно изменяется для всех исследованных признаков. Сила сопряженности возрастает у прямых гибридов в сравнении с реципрокными (табл. 3). Тесные связи ($r > 0,7$) выявлены между величиной GD и признаками масса кочана, объем кочана, отношение массы кочана к массе розетки. Коэффициент детерминации (R^2) перечисленных признаков достигает 67,2, 56,2, 70,6 % соответственно. Достоверные корреляции существуют между величиной общей дивергенции и вегетативной массой растений. В данном случае RAPD-полиморфизм также имеет преимущественное значение для реализации генетического потенциала прямых гибридов F_1 в сравнении с ISSR GD, предопределяя продуктивность растений на 64 % (табл. 3).

Заключение. Полученные данные свидетельствуют, что анализ молекулярно-генетической дивергенции исходного материала капусты белокочанной, наряду с классическими селекционными подходами, может быть полезен, так как позволяет выделить ту часть изменчивости в селекционных коллекциях, которая не имеет фенотипического проявления, но может быть использована при создании перспективных гибридов F_1 . Вместе с тем применение молекулярных подходов требует доработки для широкого применения в селекционных программах, так как потенциальные ДНК-маркеры должны предоставлять объективную информацию при подборе исходного материала, независимо от используемого генетического пула. Предъявляя требования к ДНК-маркерам как прогностическому инструменту для гибридной селекции, следует также учитывать сложную природу количественных признаков и, собственно, феномена гетерозиса, в связи с полигенным контролем, многосторонними аспектами жизненного цикла растений и условиями среды.

Литература

1. Snowdon R. J. // Chromosome Research. 2007. Vol. 15. P. 85–95.
2. Cardoza V., Stewart C. N. // *In Vitro* Cellular and Developmental Biology. 2004. Vol. 40. P. 542–551.
3. Milborrow B. V. // J. Exp. Botany. 1998. Vol. 49. P. 1063–1071 (doi: 10.1093/jxb/49.324.1063).
4. Kaeppler Sh. // ISRN Botany. 2012. Article ID 682824 (doi: 10.5402/2012/682824).
5. Sanghera G. S., Wani Sh. H., Hussain W. et al. // Nature and Science. 2011. Vol. 9(11). P. 42–53.
6. Longin F. H., Liu W., Ranc N. et al. // Maydica. 2011. Vol. 56. P. 227–232.
7. Reif C. R., Zhao Y., Würschum T. et al. // Plant Breeding. 2013. Vol. 132. P. 107–114.
8. Melchinger A. E. // The genetics and exploitation of heterosis in crops. Madison, 1999. P. 99–118.
9. Frisch M., Thiemann A., Fu J. et al. // Theor. Appl. Genet. 2010. Vol. 120. P. 441–450.
10. Gärtner T., Steinfath M., Andorf S. et al. // PLoS ONE. 2009. Vol. 4(4). e5220.
11. Schrag T. A., Möhring J., Melchinger A. E. et al. // Theor. Appl. Genet. 2010. Vol. 120. P. 451–461.
12. Nei M., Li M. H. // Proc. Natl. Acad. Sci. 1979. Vol. 76. P. 5269–5273.
13. Турбин Н. В., Хотылёва Л. В., Тарутина Л. А. Диаллельный анализ в селекции растений. Минск, 1974.
14. Мазер К., Джинкс Дж. // Биометрическая генетика. М., 1985. С. 156–163.
15. Crossa J., Campos G., Pérez P. et al. // Genetics. 2010. Vol. 186. P. 713–724 (doi: 10.1534/genetics.110.118521).

M. N. SHAPTURENKO, A. V. YAKIMOVICH, Y. M. ZABARA, L. V. KHOTYLEVA

M.Shapturenko@tut.by

THE CONTRIBUTION OF MOLECULAR-GENETIC DIVERGENCE TO F₁ HYBRID PERFORMANCE OF WHITE CABBAGE

Summary

The prediction efficiency of white cabbage F₁ hybrid performance based on ISSR and RAPD markers was carried out. In result molecular-genetics evaluation of white cabbage collection, five divergent lines were selected and tested by full diallel (5×5) mating design. Through analysis relationship genetic divergence of parental lines and F₁ hybrid performance the significant correlations ($r > 0.5$) were found for the main yield components. Yield potential of half-diallel F₁ hybrids was predetermined total GD by 67.2 % ($R = r^2$), whereas no significant associations were found for reciprocal F₁. Consequently, heterotic response does not simply result from the overall genetic diversity within a hybrid, but is likely only diversity at some specific loci causing the formation of superior F₁ genotype with high expression of the traits.

УДК 575.13:575.17:630*165

Д. И. КАГАН, А. И. СИДОР, Т. С. МАРКЕВИЧ

**ГЕНЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПОПУЛЯЦИЙ *PICEA ABIES* (L.) KARST. В БЕЛАРУСИ
(ПО ДАННЫМ ПОЛИМОРФИЗМА МИТОХОНДРИАЛЬНОЙ ДНК)**

(Представлено академиком В. И. Парфеновым)

Институт леса НАН Беларуси, Гомель

Поступило 02.07.2014

Введение. Естественное становление и развитие ареала ели европейской (*Picea abies* (L.) Karst.) связано с геологической и палеогеографической историей вида. В настоящее время на формирование популяционной структуры данного вида, помимо природно-экологических, оказывают влияние и антропогенные факторы, которые не только вызывают изменение границ произрастания *P. abies*, но и определяют современную и будущую популяционную динамику [1]. При этом одним из недостаточно исследованных процессов на территории Беларуси, связанных с изменением растительного покрова, является миграционный. Установление особенностей распространения *P. abies* позволит более обоснованно и эффективно подойти к проблеме воспроизводства, рационального использования и лесовосстановления еловых насаждений.

Результаты исследований по изучению филогении рода *Picea* с использованием нуклеотидных последовательностей хлоропластного, митохондриального и ядерного геномов показали, что в древности *P. abies* на территории Европы была представлена сплошным ареалом, разделившись в доледниковый период, вследствие увеличения сезонной амплитуды температур и засушливости климата, на южную и бореальную области произрастания [2]. В дальнейшем распространение *P. abies* на территорию Беларуси происходило со стороны двух центров: Северо-Балтийского (тупочешуйчатые формы) и Карпатского (острочешуйчатые формы) [3]. В настоящее время это находит свое отражение на уровне формового разнообразия фитоценозов: в направлении с севера на юг долевое участие тупочешуйчатых форм в еловой формации Беларуси уменьшается, а острочешуйчатых увеличивается. Наиболее часто такие «исторические» особенности насаждений и их изменения во времени можно определить при наличии семеносящих особей вида (по генеративным органам). Однако *P. abies*, «несущая информацию» из различных исторических регионов, может иметь отличия и на молекулярно-генетическом уровне [4; 5]. Изучение процессов формирования генетической структуры вида в настоящее время проводится не только на основе морфологических признаков, но и при использовании ДНК-маркеров. У голосеменных наиболее удобными для данных целей являются локусы, локализованные в митохондриальной ДНК, что обусловлено их относительным постоянством (вследствие низкого уровня рекомбинации) и путем передачи наследственной информации только по материнской линии [6].

Цель работы – анализ гаплотипов митохондриальной ДНК *P. abies* для установления географической локализации зоны миграционных потоков данного вида на территории Беларуси.

Материалы и методы исследований. Сбор экспериментального материала проведен в 37 еловых насаждениях естественного происхождения в пределах всех областей Беларуси.

Выделение ДНК выполнено модифицированным СТАВ-методом из хвои и/или почек от 10–15 деревьев из каждого насаждения [7]. Генетический анализ осуществлен по митохондриальному локусу *mt15-D02* (номер в GenBank AY897577) с использованием праймеров со следующими нуклеотидными последовательностями F: 5'-TATCTGACTTGCCTTATC-3' и R: 5'-ATCCGAATACATACACC-3'. Выбор локуса *mt15-D02* объясняется тем, что обнаруженный для него полиморфизм позволяет отразить особенности расселения *P. abies*, начиная с постледникового периода [4; 5; 8].

Полимеразная цепная реакция (ПЦР) проведена в соответствии со следующими условиями: длительная денатурация – 10 мин, 94 °С; 40 циклов – денатурация 1 мин, 94 °С, отжиг 1 мин, 54 °С, элонгация 2 мин, 72 °С; длительная элонгация – 10 мин, 72 °С.

Электрофоретическое фракционирование продуктов амплификации выполнено в электрофоретических камерах с использованием 2 %-ных агарозных гелей с последующим окрашиванием в растворе этидия бромида [7].

Результаты и их обсуждение. В работах зарубежных исследователей показано, что выявляемая по локусу *mt15-D02* амплифицируемая зона размером 1249 п. н. (п. н. – пар нуклеотидов) соответствует карпатскому митотипу, 1117 п. н. – альпийскому, 753 п. н. – бореальному [5]. Распространение карпатского и альпийского митотипов отражает южные постледниковые миграционные потоки *P. abies*, происходящие соответственно из Карпатского и Альпийского рефугиумов, бореального – северный миграционный поток с территории Русской равнины (Северо-Центральная часть России).

Для всей совокупности проанализированных нами деревьев *P. abies*, произрастающих на территории Беларуси, были обнаружены два размерных варианта (аллеля) амплифицируемых ПЦР-продуктов: 1249 п. н. и 753 п. н. (номер в GenBank HM047107). Выявленный полиморфизм митохондриальной ДНК *P. abies* свидетельствует о том, что в исследуемых ельниках произрастают особи вида различного исторического происхождения, в частности, карпатского и бореального.

Установлено, что на большей части Беларуси в насаждениях *P. abies* встречается бореальный митотип (таблица). Его удельная доля в составе практически всех ельников пяти областей (Витебская, Могилевская, Минская, Гомельская и Гродненская) составила 100 %, и лишь в одном на территории Гродненской области (Волковысский лесхоз) была равна 80 %. В свою очередь, карпатский митотип обнаружен только в насаждениях Брестской области и в одном Гродненской области. Его частота встречаемости снижается в северо-восточном направлении от 100 % (островные насаждения юго-запада Беларуси) до 20 % (популяции южной границы бореальной области сплошного распространения *P. abies*).

Если проследить распространение митотипов в зависимости от ареалогических зон произрастания *P. abies* в пределах страны [9], то видно, что для основной (центральной) и средней зон характерно распространение бореального митотипа. В периферийной (граница сплошного произрастания *P. abies*) и краевой (область островного произрастания *P. abies*) – встречаются оба митотипа. При этом в восточной части этих зон (Гомельская область) обнаружен только бореальный митотип, а в западной (Брестская область) – преимущественно карпатский. Установленная нами географическая локализация карпатского и бореального митотипов *P. abies* на территории Беларуси свидетельствует о том, что контакт двух постледниковых миграционных потоков вида произошел в юго-западной части страны (рисунок).

Впервые с использованием ДНК-маркеров (локус *mt15-D02*) нами получены результаты о месте перекрытия миграционных потоков *P. abies* на территории Беларуси, дополнившие опубликованные ранее сведения о существовании такой зоны в западной части Украины и примыкающей к ней территории Польши [8]. Наши данные подтверждают результаты спорово-пыльцевого анализа, свидетельствующие о том, что в среднем голоцене на территории Полесской низменности (Беларусь и Украина) и Мазовецко-Подлясской низменности (Польша) произошло перекрытие карпатского и бореального миграционных потоков *P. abies* [10; 11]. В то же время полученные нами данные опровергают точку зрения некоторых ученых, основанную на результатах палинологических исследований, об отсутствии миграции *P. abies* из Карпат в Беларусь [12].

Установленное нами географическое распределение митотипов *P. abies* в Беларуси позволило уточнить и обобщить имеющиеся в литературе сведения о миграции вида, полученные на основании эколого-фитоценологических и палеогеографических исследований. Так, ранее показано, что распространение бореального происхождения *P. abies* происходило в среднем голоцене в направлении восток → Центральная Европа → юго-запад Европы [10], охватывающем, по нашим данным, практически всю территорию изученного в данном исследовании региона.

Реконструкция исторических возможных путей распространения *P. abies* карпатского происхождения на территорию Беларуси [9; 11] показала, что наиболее вероятным является юго-запад-

Частота встречаемости митотипов *Picea abies* (L.) Karst. (локус *mt15-D02*)

Лесхоз, лесничество	Возраст, лет	Состав насаждения	Частота встречаемости митотипов <i>mt15-D02</i> , %	
			1249 г. н. э.	753 г. н. э.
<i>Брестская область</i>				
Брестский, Меднянское	110	4Е3С2Олч1Д	100	0
Брестский, Каменецкое	80	6Е4С	80	20
Малоритский, Малоритское	75	7Е2Ос1Олч	100	0
Малоритский, Пожежинское	90	6Е3Ос1Б	90	10
Малоритский, Великоритское	115	9С1Е+Б	100	0
Пружанский, Ружанское	100	9Е1С+Б,Д,Е	60	40
Пружанский, Березковское	–	–	100	0
Дрогичинский, Антопольское	75	8Е1Б1Олч+Д	100	0
Пинский, Бродницкое	75	6Е2С1Б1Ос	60	40
Столинский, Столинское	30	8Е2Б+Д,С	100	0
<i>Гродненская область</i>				
Щучинский, Дембровское	90	8Е2Ос	0	100
Волковысский, Волковыское	95	9Е1С+Б,Д,Е	20	80
Лидский, Лидское	90	5Е4С1Ос	0	100
Дятловский, Гезгаловское	80	8Е2С	0	100
Сморгонский, Сморгонское	75	8Е1Ос1Б	0	100
<i>Минская область</i>				
Молодечненский, Молодечненское	70	8Е1С1Б	0	100
Любанский, Сосновское	80	7Е1С1Ос1Б	0	100
Слуцкий, Жилин-Бродское	60	7Е1С2Б+Ос	0	100
Логойский, Каменское	90	8Е2С	0	100
<i>Гомельская область</i>				
НП «Припятский», Симоничское	80	6Е3С1Б	0	100
Лельчицкий, Замошское	65	7Е1Б2Ос	0	100
Житковичский, Милевичское	70	5Е2С2Ос1Б	0	100
Петриковский, Лучицкое	65	5Е5С	0	100
Октябрьский, Шкавское	–	–	0	100
Калинковичский, Клинское	85	6Е1С2Олч1Б	0	100
Речицкий, Бело-Болотское	95	6Е2С2Д+Ос	0	100
Чечерский, Чечерское	60	8Е2С	0	100
<i>Могилевская область</i>				
Жорновская ЭЛБ ИЛ НАН Беларуси	70	5Е3Б2Ос+Г,Д	0	100
Кличевский, Кличевское	60	6Е2С2Б+Ос,Д	0	100
Бельничский, Кругловичское	65	7Е1С1Б1Ос+Д	0	100
Быховский, Ворониновское	100	6Е4С+Б,Ос	0	100
Горецкий, Темнолесское	55	8Е2Д+С,Ос	0	100
Костюковичский, Костюковичское	–	–	0	100
<i>Витебская область</i>				
Полоцкий, Полоцкое	70	4Е3С3Б+Ос	0	100
Полоцкий, Туровлянское	75	9Е1Олч+С,Б	0	100
Ушачский, Плинское	55	9Е1Б+Е,Ос,С	0	100
Городокский, Езерищенское	60	7Е1Б2Ос+Олч	0	100

ный миграционный путь, который имел направление из Восточных Карпат через Волыно-Подольскую возвышенность в Полесье. По В. Зерницкой [11], юго-западное ответвление пути (в сторону Беловежской пуши) также осуществлялось и через Люблинскую возвышенность.

Распространение многих горных карпатских видов в восточном направлении также происходило еще и по западному миграционному пути, исходящему из альпийско-судето-западнокарпатского центра двумя потоками через Северо-Германскую и Польскую низменности [9]. Подобное проникновение *P. abies* на территорию Беларуси является маловероятным, несмотря на ее произрастание по всей судетско-карпатской дуге. Во-первых, в проанализированных нами ель-

никах не был выявлен альпийский митотип, который обнаружен в насаждениях *P. abies* на близлежащих к западу от Беларуси территориях, что, по мнению некоторых авторов, связано не с естественной миграцией, а с искусственным лесовосстановлением [5]. Во-вторых, результаты палинологических исследований *P. abies* на территории Польши показали, что после последнего оледенения популяции *P. abies*, происходящие из Карпатского рефугиума, сначала мигрировали на север в сторону Волыни и южного Полесья, а затем в юго-западном направлении на территорию Мазовецко-Подлясской низменности (Польша) [10]. След такой миграции *P. abies* из Карпат на север сохранился до настоящего времени в Полесье в виде произрастающих здесь островчатых форм *P. abies*, характерных для природных популяций Восточных Карпат [13].



Распространение митотипов *Picea abies* (L.) Karst. в Беларуси (локус *mt15-D02*); митотип: черный цвет – бореальный; серый цвет – карпатский

Что касается современного распространения карпатского митотипа *P. abies* в Беларуси, то оно осуществляется, по нашему мнению, согласно выявленным В. И. Парфеновым северо-восточному и юго-западному регрессивным миграционным путям [9]. Возможность современной миграции генетического материала *P. abies* из Польши и его включения в состав еловой формации юго-западной части Беларуси представляется нам маловероятной, вследствие уже изложенных выше результатов об отсутствии альпийского митотипа в составе проанализированных нами еловых насаждений, в том числе и подроста.

Следует отметить, что установленное нами распределение бореального и карпатского митотипов дополняет общую картину о происхождении *P. abies* в Европе. Так, в странах, расположенных на севере и северо-востоке от Беларуси (Латвия, Норвегия, Швеция, Финляндия, Эстония, северо-запад России), обнаружен только бореальный митотип [8; 14]. На территории Польши встречаются все три митотипа – бореальный, карпатский и альпийский [5], а в странах Юго-Восточной и Центральной Европы (Австрия, Германия, Румыния, Украина) выявлены карпатский и альпийский митотипы [4; 8].

Заключение. Генетический анализ митохондриальной ДНК (локус *mt15-D02*) *P. abies* показал, что в составе еловой формации Беларуси встречаются бореальный и карпатский митотипы. Первый из них обнаружен практически на всей территории страны, и его удельная доля в составе ельников центральной и средней зон ареала *P. abies* составляет 100 %. Второй концентрируется в юго-западной части Беларуси. При этом его частота встречаемости снижается в северо-вос-

точном направлении от 100 % (островные ельники краевой зоны) до 20 % (популяции периферийной зоны).

Показано, что распространение карпатского происхождения *P. abies* на территорию Беларуси осуществлялось по юго-западному миграционному пути, а проникновение по западному миграционному пути являлось маловероятным. Установлено, что юго-запад Беларуси является частью гибридной зоны, которая была сформирована в результате перекрытия путей миграции *P. abies* южного и северного происхождения. Полученные нами результаты с использованием ДНК-маркеров согласуются с ранее проведенными эколого-фитоценологическими исследованиями, основанными на изучении остро- и тупочешуйчатых форм *P. abies*.

Работа выполнена в рамках проекта № Б14М-127 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований и задания 06 Государственной программы «Создание Национального банка генетических ресурсов растений для выведения новых сортов и гибридов сельскохозяйственных культур, сохранения и обогащения культурной и природной флоры Беларуси».

Литература

1. Парфенов В. И., Блажевич Р. Ю. // Докл. АН СССР. 1978. Т. 22, № 11. С. 1030–1032.
2. Lockwood J. D., Aleksić J. M., Zou J. et al. // Mol. Phyl. Evol. 2013. Vol. 69. P. 717–727.
3. Юркевич И. Д., Голод Д. С., Парфенов В. И. Типы и ассоциации еловых лесов (по исследованиям в БССР). Минск, 1971.
4. Maghuly F., Nittinger F., Pinsker W. et al. // Tree Genet. Genomes. 2006. Vol. 3. P. 199–206.
5. Litkowiec M., Dering M., Lewandowski A. // Dendrology. 2009. Vol. 61. P. 65–71.
6. Duminil J. // Molecular Plant Taxonomy: Methods and Protocols. New York, 2014. P. 121–140.
7. Падутов В. Е., Баранов О. Ю., Воронаев Е. В. Методы молекулярно-генетического анализа. Минск, 2007.
8. Dering M., Mistorny A., Lewandowski A., Korczyk A. // Eur. J. Forest Res. 2012. Vol. 131. P. 381–387.
9. Парфенов В. И. Обусловленность распространения и адаптация видов растений на границах ареалов. Минск, 1980.
10. Boratyński A. // Biology and Ecology of Norway Spruce. Poznan, 2007. P. 37–47.
11. Зерницкая В. П. // Палеогеография Белорусского Полесья в позднеледниковье и голоцене (по данным спорово-пыльцевого анализа): автореф. дис. ... канд. геогр. наук. Минск, 1991.
12. Latalowa M., Van der Knaap W. O. // Quat. Sci. Rev. 2006. Vol. 25. P. 2780–2805.
13. Юркевич И. Д., Парфенов В. И. // Бюл. ГБС АН СССР. 1967. Вып. 64. С. 41–48.
14. Sahid Md. H. // Mitochondrial DNA phylogeography of Norway spruce (*Picea abies*) in Northern Europe: student thesis. Uppsala, 2012.

D. I. KAGAN, A. I. SIDOR, T. S. MARKEVICH

quercus-belarus@mail.ru

GENETIC STRUCTURE OF POPULATIONS OF *PICEA ABIES* (L.) KARST. IN BELARUS (ACCORDING TO MITOCHONDRIAL DNA POLYMORPHISM)

Summary

The results of the genetic structure's study of the spruce formation of Belarus is according to mitochondrial DNA polymorphism (locus *mt15-D02*). The formation of the genetic structure of plants with particularly *Picea abies* (L.) Karst. is various due to their historical origin – Carpathian and Boreal. It's revealed that Boreal mitotype occurs almost throughout the territory of Belarus, while the Carpathian is concentrated in the south-western part. Firstly, using DNA markers it's shown the existence of the overlapping area of migration flows *P. abies* in the south-west of the country. The most probable way of their distribution on the territory of Belarus is in the postglacial period, as well as modern trends in migration in the investigated region.

УДК 634.11:631.524.86

О. Ю. УРБАНОВИЧ¹, П. В. КУЗМИЦКАЯ¹, З. А. КОЗЛОВСКАЯ²ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО РАЗНООБРАЗИЯ СОРТОВ СЛИВ
С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАРКЕРОВ SSR-ТИПА

(Представлено академиком Л. В. Хотылёвой)

¹Институт генетики и цитологии НАН Беларуси, Минск²Институт плодоводства, Самохваловичи

Поступило 15.09.2014

Введение. Слива домашняя и слива диплоидная относятся к роду *Prunus* (Rosaceae) подсемейства Prunoideae Focke (сливовые). Они адаптированы ко многим климатическим условиям и получили распространение в Европе, Азии и Америке. Успешно выращиваются сливы и в Беларуси [1].

Сливы диплоидные имеют базовое число хромосом $8 (2n = 16)$. Среди слив есть тетраплоидные виды, например, терн – $2n = 32$. Слива домашняя (*P. domestica* L.) является гексаплоидом – $2n = 48$. В диком виде она не встречается. Вопрос о ее происхождении окончательно не решен. Предполагается, что слива домашняя появилась в результате гибридизации алычи (*P. cerasifera* Ehrh) и тетраплоидного терна (*P. spinosa* L.). Данные анализа хлоропластной ДНК показывают, что *P. domestica* ближе к *P. cerasifera*, чем к *P. spinosa* [2].

Так называемые диплоидные сливы составляют особую группу. В последнее время они все больше используются в питании человека и успешно конкурируют с сортами сливы домашней. Их еще называют гибридными, так как в формировании сортов принимают участие разные виды. Современные сорта диплоидных слив созданы на основе гибридизации алычи (*P. cerasifera*), сливы китайской (*P. salicina* Lindl.) и ее подвидов – сливы уссурийской или маньчжурской (*subsp. mandschurica* или *ussurialis*), американской (*P. Americana* Marsh.) и других видов слив. Некоторые гибридные сорта диплоидных слив объединяют под названием русские сливы.

Геном сливовых достаточно консервативен. Сравнительное картирование геномов диплоидных видов показало их высокую коллиниарность [3; 4]. Многие специфичные молекулярные маркеры, выделенные из генома одного вида *Prunes*, находят аналогичные сайты связывания в геноме других представителей этого рода и даже подсемейства сливовых [3; 5]. При этом молекулярные маркеры оказываются расположены в гомологичных областях. Данное свойство расширяет возможность изучения геномов представителей рода *Prunes* молекулярными методами.

Цель исследования – анализ генетического разнообразия сортов слив, выращиваемых в Беларуси, и сравнение степени генетической удаленности видов друг от друга. Работу проводили с привлечением молекулярных маркеров SSR-типа.

Материалы и методы исследования. Исследование осуществляли среди сортов и видов слив, выращиваемых в Беларуси. В коллекцию были включены сорта, внесенные в Государственный реестр, а также образцы, представляющие интерес для селекционного процесса. Подбирались генотипы как близкие по происхождению, так и генетически отдаленные. В общей сложности сформированная коллекция была представлена 50 образцами.

Для анализа были использованы SSR-маркеры серии EMPA, разработанные для генома черешни сорта Наполеон и серии ВРРСТ, первоначально разработанные для персика [6; 7]. В общей сложности в исследовании были использованы 20 пар маркеров. SSR-маркеры были выбраны на основании их расположения в геноме черешни, сливы и персика таким образом, чтобы были охвачены разные хромосомы.

Маркеры были сгруппированы в наборы по 4 пары с учетом имеющихся сведений об их размерах в геноме видов, для которых они первоначально были получены. В каждом наборе праймеры были мечены разными красителями таким образом, чтобы можно было проводить анализ продуктов амплификации, полученных в результате реакции мультиплекса.

Препараты ДНК были получены из фрагментов листьев каждого отдельного растения. Выделение ДНК проводили с помощью Genomic DNA Purification Kit фирмы Thermo scientific (ЕС) согласно рекомендованному протоколу.

Реакционная смесь для ПЦР объемом 20 мкл содержала 40 нг ДНК, 75 мМ трис-НСl (рН 8,8 при 25 °С), 20 мМ (NH₄)₂SO₄, 0,01 % Tween 20, 1,5 мМ MgCl₂, 0,2 мМ dNTP, 200 мкМ каждого праймера, 1 ед. Таq-полимеразы.

Амплификацию с праймерами серии EMPA проводили в следующих условиях: 1-й этап: 1 цикл: 94 °С – 90 с; 2-й этап: 10 циклов: 94 °С – 30 с; 60 °С – 90 с (–1 °С на цикл); 72 °С – 60 с; 3-й этап: 25 циклов: 94 °С – 30 с; 50 °С – 90 с; 72 °С – 60 с; 1 цикл: 72 °С – 8 мин.

Амплификацию с праймерами серии ВРРСТ проводили в условиях: 1-й этап: 1 цикл: 94 °С – 90 с; 35 циклов: 94 °С – 45 с; 57 °С – 45 с; 72 °С – 2 мин; 1 цикл: 72 °С – 4 мин.

Продукты амплификации разделяли на секвенаторе Genetic Analyzer 3500 (Applied Biosystems, США). В качестве стандарта молекулярного веса использовали внутренний стандарт S450 (Синтол, Россия).

Дискриминационная сила маркера (PD) была рассчитана по формуле:

$$PD = 1 - \sum(g_i)^2$$

где g_i – частота встречаемости i -го генотипа [8].

Доля уникальных генотипов была рассчитана как отношение количества уникальных генотипов к общему количеству исследованных генотипов. При этом под уникальными считались генотипы, содержащие уникальный состав SSR-аллелей.

Дендрограмма генетического сходства сортов была получена с помощью программы Treescop методом UPGMA, основываясь на коэффициенте генетического сходства Nei и Li [9; 10].

Результаты и их обсуждение. Состав аллелей локусов микросателлитных последовательностей определяли для 26 образцов сливы домашней, 24 образцов сливы диплоидной и тетраплоидных видов из коллекционного сада РУП «Институт плодородства».

Т а б л и ц а 1. Размер и количество SSR-аллелей, количество уникальных генотипов, доля уникальных генотипов, дискриминационная сила маркера (PD), рассчитанные для генотипов сливы диплоидной

Название праймера	Размер аллелей в п. н.	Количество аллелей	Количество уникальных генотипов	Доля уникальных генотипов	PD
EMPA001	116–180	13	19	0,795	0,9311
EMPA005	215–307	15	19	0,795	0,9311
EMPA018	99–129	7	13	0,542	0,8925
EMPA026	184–238	17	22	0,917	0,9522
EMPA004	163	1	1	0,042	0,0
EMPA006	104–149	4	3	0,125	0,5838
EMPA010	125–163	9	11	0,458	0,7468
EMPA007	171–216	12	11	0,458	0,7886
EMPA015	172–281	19	12	0,5	0,8199
EMPA019	105–152	13	13	0,542	0,8269
ВРРСТ039	118–180	16	18	0,75	0,9347
ВРРСТ016	87–102	5	9	0,375	0,5794
ВРРСТ040	96–162	17	20	0,833	0,9417
ВРРСТ004	175–209	13	15	0,625	0,9033
ВРРСТ017	166–227	14	19	0,792	0,9191
ВРРСТ025	152–196	19	21	0,875	0,9452
ВРРСТ032	164–214	10	13	0,542	0,8529
ВРРСТ005	129–132	2	2	0,083	0,0865
ВРРСТ026	134–186	17	20	0,833	0,9452
ВРРСТ027	239–245	3	4	0,167	0,2293
Среднее значение		11,3	13,3	0,552	0,7405

Все 20 SSR-маркеров, отобранных для исследования, имели сайты связывания в геноме исследуемых видов. Количество и размер выявляемых аллелей представлен в табл. 1 и 2. Как видно из представленных данных, диапазон длины SSR-аллелей, детектируемый с помощью 20 маркеров, колебался от 58 п. н. для маркера ВРРСТ016 до 335 п. н. для маркера ЕМРА005. Размер аллелей, выявляемый с помощью одного маркера, не различался значительно в геноме разных видов слив. Например, в локусах маркера ЕМРА001 длина аллелей среди сортов как сливы диплоидной, так и сливы домашней находилась в пределах 116–180 п. н. Наличие сайтов связывания для выбранных SSR-маркеров в геноме всех анализируемых видов и соответствие размеров идентифицированных аллелей указывает на то, что виды слив генетически близки. Дивергенция отдельных областей генома среди видов низкая.

Т а б л и ц а 2. Размер и количество SSR-аллелей, количество уникальных генотипов, доля уникальных генотипов, дискриминационная сила маркера (PD), рассчитанные для генотипов сливы домашней

Название маркера	Размер аллелей в п. н.	Количество аллелей	Количество уникальных генотипов	Доля уникальных генотипов	PD
ЕМРА001	116–180	20	25	0,962	0,9585
ЕМРА005	226–335	13	13	0,5	0,8639
ЕМРА018	58–158	20	24	0,923	0,9556
ЕМРА026	188–242	21	24	0,923	0,9556
ЕМРА004	163	1	1	0,038	0,0
ЕМРА006	101–149	6	7	0,269	0,6657
ЕМРА010	125–201	16	20	0,769	0,9260
ЕМРА007	167–228	14	23	0,885	0,9527
ЕМРА015	211–287	32	26	1,0	0,9615
ЕМРА019	77–137	10	11	0,423	0,8535
ВРРСТ039	128–179	26	25	0,962	0,9585
ВРРСТ016	87–102	5	10	0,385	0,7119
ВРРСТ040	96–159	20	25	0,962	0,9585
ВРРСТ004	177–201	12	22	0,846	0,9552
ВРРСТ017	155–231	22	21	0,808	0,9493
ВРРСТ025	155–213	23	23	0,885	0,9522
ВРРСТ032	161–232	24	25	0,962	0,9585
ВРРСТ005	127–132	3	3	0,115	0,5742
ВРРСТ026	127–171	17	25	0,962	0,9585
ВРРСТ027	239–245	2	3	0,115	0,1420
Среднее значение		15,4	17,7	0,681	0,8106

SSR-маркеры различались по информативности. Как диплоидные сорта сливы, так и сорта сливы домашней оказались не полиморфны по маркеру ЕМРА004. Среди сортов сливы диплоидной и сливы домашней с помощью маркера ВРРСТ005 было обнаружено только 2 и 3 полиморфных аллеля соответственно. Но в целом количество полиморфных аллелей, детектируемых среди образцов слив, велико. Максимальное количество полиморфных аллелей составило 26 среди 26 сортов сливы домашней. Среднее значение количества аллелей среди образцов сливы домашней и сливы диплоидной было определено как 15,4 и 11,3 соответственно.

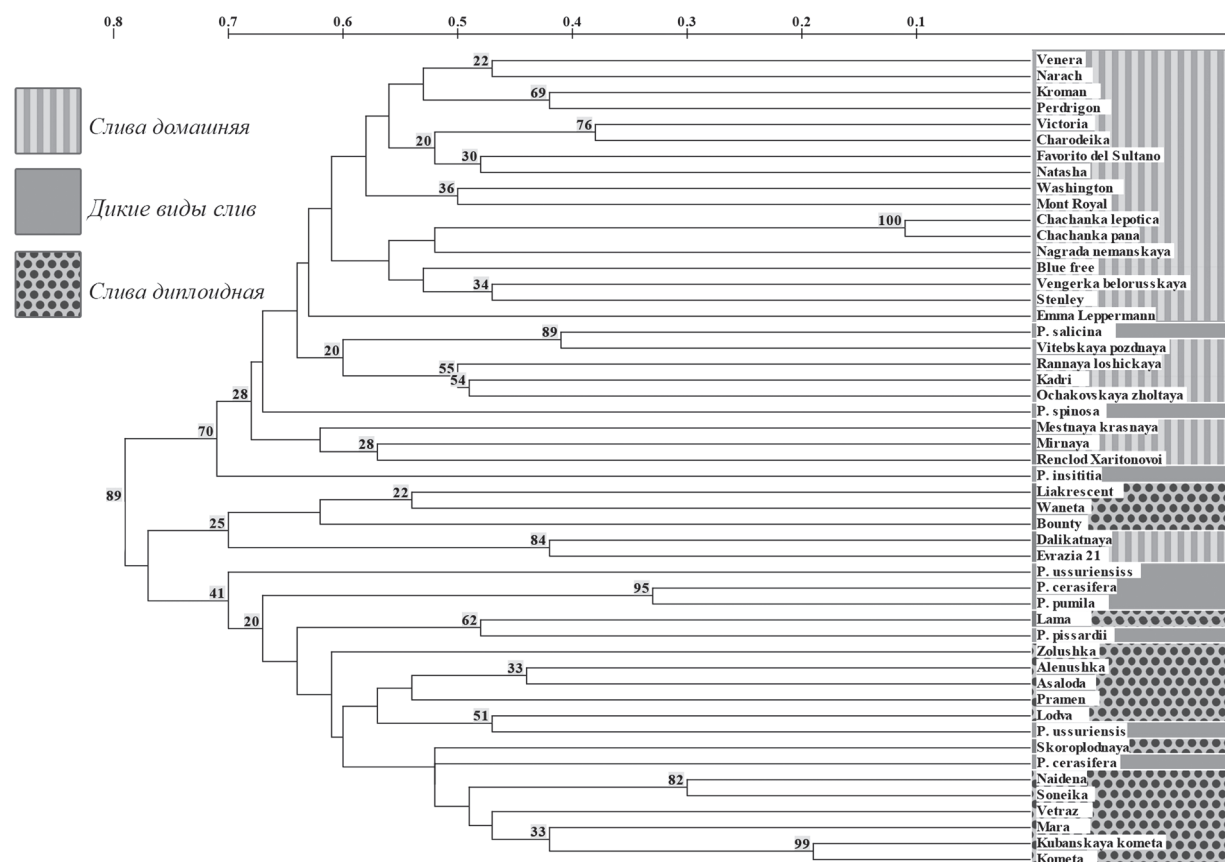
Результаты, полученные другими авторами, также указывают на большое генетическое разнообразие локусов макросателлитных последовательностей среди сортов слив. Среднее значение количества аллелей на локус, выявляемых с помощью SSR-маркеров, среди 29 сортов сливы диплоидной составило 12,1 [11]. Ahmad с соавт. обнаружили среди 20 сортов слив в среднем 4,3 аллеля [12]. Мпејја с соавт. среди 8 сортов диплоидных слив выявили в среднем 5,7 аллелей [13]. У сливы домашней аналогичный показатель составил 8,25 [14]. На среднее значение аллелей оказывают влияние не только видовая принадлежность сортов, но и несколько других факторов. Среди них количество использованных в исследовании маркеров, уровень информативности и полиморфизма отдельного маркера, который может значительно различаться для каждого локуса и зависеть от типа повтора. Немаловажное значение имеет объем выборки анализируемых

генотипов. Чем она больше, тем выше вероятность обнаружения новых аллелей. Значение имеет также степень генетической удаленности или близости образцов.

Среди исследованных образцов наблюдался высокий уровень генетического разнообразия. В частности, у сливы диплоидной при амплификации с маркером EMPA026 обнаружено 22 уникальных генотипа из 24. Интересный результат был получен для сливы домашней. Маркер EMPA015 позволил получить уникальный набор аллелей для всех сортов этого вида. В данном случае большое значение имела и гексаплоидная природа сливы домашней. У многих сортов одновременно детектировалось до 6 аллелей. Среди сортов сливы домашней выявлено максимальное среднее количество уникальных генотипов – 17,7. Соответственно доля уникальных генотипов и дискриминационная сила маркеров также была выше у этого вида – 0,681 и 0,8106 соответственно. Сорта сливы диплоидной уступали по данным показателям гексаплоидным сортам сливы домашней. Среднее количество уникальных генотипов среди них составило 13,3. Доля уникальных генотипов среди диплоидных слив была равна 0,552, PD – 0,7405.

В целом представленные нами результаты, равно как и литературные данные, говорят о том, что виды слив характеризуются большим генетическим разнообразием [11; 13]. Например, высокий уровень генетической вариабельности сливы диплоидной был отмечен для 29 сортов, среди которых были и межвидовые гибриды [11]. В этом отношении сорта, выращиваемые в Беларуси, не уступают сортам мирового генофонда. Поддержанию генетического разнообразия способствует перекрестное опыление, характерное для этих видов. Кроме того, в селекции косточковых культур широко используется межвидовая гибридизация, что благоприятствует увеличению генетического разнообразия сортов [11].

Данные о составе аллелей, выявляемых с помощью 20 SSR-маркеров, были использованы для построения дендрограммы генетического сходства видов косточковых культур (рисунок). Сорта, относящиеся к сливе домашней и сливе диплоидной, в основном разделились на два от-



Дендрограмма генетического сходства образцов слив. Цифры на дендрограмме отражают значения бутстрэпа. На шкале сверху отмечено генетическое расстояние между образцами

дельных кластера. Генетические расстояния между сортами слив как диплоидных, так и гексаплоидных, находятся в пределах около 0,34–0,75. Только два близких по происхождению чешских сорта сливы домашней Чачанска лепотика и Чачанска рана расположены на минимальном расстоянии 0,1. Они получены от одной комбинации скрещивания – Стенли × Ruth Gerstetter. Общий с ними кластер формируют родительский сорт Стенли и его потомки Блюффри (Стенли × Президент) и Венгерка белорусская (Стенли × Венгерка донецкая ранняя). В этот же кластер вошел белорусский сорт Награда Неманская, происхождение которого неизвестно. Возможно, в его формировании принимали участие генетически близкие к Стенли сорта или он сам.

В одну группу входят сорт Нарач и его потомок сорт Венера (Нарач × Вангенхейм). Вместе группируются также сорт народной селекции Очаковская желтая и его потомки – белорусский сорт Ранняя Лошицкая (Очаковская желтая св. оп) и эстонский сорт Кадри (Очаковская желтая × Suhkruploom). Другие сорта сливы домашней не связаны общим происхождением и распределены в разных кластерах.

В общий кластер с сортами сливы домашней вошел вид тетраплоидного терна *P. spinosa*, который, как предполагается, вместе с алычой *P. cerasifera* сформировал ее генотип. Имеющиеся в литературе сведения, полученные при изучении хлоропластной ДНК, говорят о том, что сорта сливы домашней могут формировать общий кластер с образцами *P. cerasifera* [2; 15]. В результате анализа региона хлоропластной ДНК было показано, что гексаплоидные виды слив генетически удалены от видов с другим уровнем пloidности [15]. В представленном исследовании образцы, относящиеся к *P. cerasifera*, вошли в состав кластера диплоидных слив. Они оказались ближе к ним по составу аллелей микросателлитных последовательностей. В общий с диплоидными сливами кластер вошли также следующие виды: алыча краснолистная *P. pissardii* (*P. cerasifera* var. *pissardii*), слива карликовая *P. pumila*, слива уссурийская *P. ussuriensis*. Генетически близок этим видам белорусский сорт Лама, полученный в результате свободного опыления сеянца 9-250.

Полученный результат говорит о слабой дифференциации видов диплоидных слив. Считается, что в ботаническом отношении сливовые являются очень молодым родом, и процессы формообразования продолжают у него и в настоящее время. Виды диплоидных слив не только близки по составу аллелей локусов микросателлитных последовательностей, но и достаточно хорошо скрещиваются между собой. Происхождение ряда видов связано с межвидовой гибридизацией. Не исключается образование межвидовых гибридов в естественных условиях. Большую роль в образовании новых форм играет человек. Он целенаправленно получает межвидовые гибриды сливовых в результате селекции, существенно улучшая мировой сортимент. Появились сорта, в родословных которых представлены несколько видов сливовых. В частности, генетически близок видовым сливам сорт Евразия 21 (рисунок). Это сложный межвидовой гибрид, полученный от спонтанной гибридизации диплоидного сорта Лакресцент, выведенного в США профессором Ольдерменом. Сорт был отобран из сеянцев гексаплоидной группы от свободного опыления ($6x = 48$). В формировании генотипа Евразия 21 принимали участие диплоидные виды ($2x = 16$) восточно-азиатской, американской сливы, сливы Симона, китайской сливы, алыча и домашняя слива ($6x = 48$). Сорт Лакресцент вошел в ту же группу. В ней представлен также американский сорт Ванета, относящийся к сливе китайской *P. salicina*, американский сорт Баунти и сорт, отнесенный к сливе домашней Даликатная, полученный в результате скрещивания Евразия 21 × Венгерка ажанская.

Минимальное генетическое расстояние наблюдается между сортами диплоидной сливы Комета и Кубанская комета, которые были получены от одной комбинации скрещивания – Скороплодная × Пионерка. Важно, что при этом удалось различить по составу SSR-аллелей такие близкородственные сорта. Общую группу с ними образует родительский сорт Скороплодная и другие сорта, полученные на его основе – Найдена (Скороплодная × Десертная) и Ветразь (18-1 × Скороплодная). В эту же группу вошел сорт Мара, полученный в результате свободного опыления гибридного сеянца F_2 (*P. cerasifera* × *P. salicina* var. *ussuriensis*) и Сонейка, полученный в результате свободного опыления сорта Мара. Возможно, опылителем сорта Мара был сорт Скороплодная либо близкий к нему сорт.

В целом можно заключить, что генофонд слив, выращиваемых в Беларуси, достаточно разнообразен. Сорты как сливы домашней, так и сливы диплоидной характеризуются высоким уровнем полиморфизма локусов микросателлитных последовательностей. При этом между видами наблюдается высокая гомология отдельных регионов SSR-локусов. Эти свойства генома можно использовать для разработки методов ДНК-идентификации сортов и видов слив.

Литература

1. Самусь В. А. // Наука и инновации. 2012. Т. 112. С. 4–6.
2. Horvath A., Balsemin E., Barbot J.-C. et al. // *Scientia Horticulturae*. 2011. Vol. 129. P. 283–293.
3. Dirlwanger E., Graziano E., Joobeur T. et al. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2004. Vol. 101, N 26. P. 9891–9896.
4. Jung S., Jiwan D., Cho I. et al. // *BMC Genomics*. 2009. Vol. 10, N 76. P. 1–17.
5. *Genome Mapping and Breeding in Plants: Fruits and Nuts*. Berlin; Heidelberg, 2007. – 370 p.
6. Dirlwanger E., Cosson P., Tavaud M. et al. // *Theor. Appl. Genet.* 2002. Vol. 105. P. 127–138.
7. Clarke J. B., Tobbutt K. R. // *Mol. Ecol. Notes*. 2003. Vol. 3. P. 578–580.
8. Kloosterman A. D., Budowle B., Daselaar P. // *Int. J. Leg. Med.* 1993. Vol. 105. P. 257–264.
9. Nei M., Li W. H. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 1979. Vol. 76. P. 5269–5273.
10. Van de Peer Y., De Wachter R. // *Comput. Applic. Biosci.* 1993. Vol. 9. P. 177–182.
11. Carrasco B., Diaz C., Moya M. et al. // *Ciencia Investigation Agrara*. 2012. Vol. 39, N 3. P. 533–543.
12. Ahmad D. D., Potter D., Southwick S. M. // *Hort. Science Biotech*. 2004. Vol. 79. P. 164–169.
13. Mnejja M., Garcia-Mas J., Howad W. et al. // *Molecular Ecology Notes*. 2004. Vol. 4. P. 163–166.
14. Öz M. H., Vurgun H., Bakir M. et al. // *Genetics and Moleculr Research*. 2013. Vol. 12, N 4. P. 5310–5320.
15. Reales A., Sargent D. J., Tobbutt K. R. et al. // *Tree Genet. and Genom*. 2010. Vol. 6. P. 37–45.

O. Yu. URBANOVICH, P. V. KUZMITSKAYA, Z. A. KAZLOUSKAYA

O.Urbanovich@igc.bas-net.by

INVESTIGATION OF PLUM VARIETY DIVERSITY USING SSR MARKERS

Summary

Genetic diversity of the 50 plum accessions (species and varieties) cultivated in Belarus was studied by the SSR analysis using 20 markers. On the average 17.7 and 13.3 alleles were identified among domestic and diploid plum accessions respectively. Percentage of the unique genotypes were 0.681 and 0.552 and discrimination power levels were 0.811 and 0.741 for domestic and diploid plum accessions respectively. Cluster analysis allowed division of almost all accessions into two big groups according to their ploidy level. Genetic distances between the diploid plum varieties belonging to different species or interspecific hybrids were similar to the distances between intraspecific ones that indicates on low interspecific differentiation of diploid plum.

МЕДИЦИНА

УДК 546.17:576.8.097.29:612.56-0.92.4

*В. В. ЛОБАНОВА, член-корреспондент Ф. И. ВИСМОНТ***ОБ УЧАСТИИ МОНООКСИДА АЗОТА
В МЕХАНИЗМАХ РЕАЛИЗАЦИИ ВЛИЯНИЯ ТРИЙОДТИРОНИНА
НА ПРОЦЕССЫ ДЕТОКСИКАЦИИ И ТЕМПЕРАТУРУ ТЕЛА У КРЫС***Белорусский государственный медицинский университет, Минск**Поступило 04.06.2014*

Введение. Известно, что ведущим универсальным звеном в патогенезе нарушений жизнедеятельности при экстремальных состояниях организма и различных заболеваниях как инфекционной, так и неинфекционной природы является токсинемия, выраженность которой во многом определяется активностью детоксикационной функции печени [1; 2]. Показано, что от функционального состояния печени зависит активность процессов метаболизма йодсодержащих гормонов щитовидной железы [3; 4], обладающих многочисленными биологическими эффектами и участвующих в регуляции температуры тела и процессов детоксикации в норме и при патологии [5; 6].

Рядом авторов выявлено, что изменение уровня тиреоидных гормонов в крови тесно коррелирует с продукцией в организме монооксида азота (NO) [7; 8], который, являясь высокоэффективным регулятором метаболизма, участвует в механизмах терморегуляции [9]. Это позволяет предположить, что NO может участвовать в реализации биологических эффектов тиреоидных гормонов, в частности, их влияния на процессы детоксикации и теплообмена.

Цель исследования – выяснение роли NO в механизмах реализации влияния трийодтиронина на процессы детоксикации и температуру тела.

Материалы и методы исследования. Опыты выполнены на 97 взрослых ненаркотизированных беспородных белых крысах самцах массой 160–220 г. Животные до постановки эксперимента в течение двух недель адаптировались к условиям вивария. Температура воздуха в виварии поддерживалась на уровне 20–24 °С, что находится в пределах термoneйтральной зоны крыс. Соблюдались световой и шумовой режимы. Животные получали полноценный пищевой рацион в соответствии с нормами содержания лабораторных животных. Экспериментальный гипертиреоз у животных воспроизводили при помощи синтетического гормона трийодтиронина гидрохлорида (Lyothyronine, Berlin-Chemie, Германия). Препарат вводили в полость желудка на 1 %-ном крахмальном растворе с помощью металлического зонда (диаметр 2,0 мм) с оливой в течение 20 дней в дозе 30 мкг/кг. Глубина погружения зонда – 5,0–6,0 см, в зависимости от веса животного. Скорость подачи гормона – 3,0 мл/мин.

Взятие для исследований крови и ткани печени у животных проводилось сразу после декапитации. Кровь после декапитации собирали в охлажденные центрифужные пробирки с добавлением гепарина и центрифугировали 10 мин (5000g при 4 °С). Полученную плазму отбирали пипеткой и использовали в дальнейшем для определения содержания «средних молекул» и степени токсичности крови. О процессах химической терморегуляции у экспериментальных животных судили по таким показателям, как количество потребляемого кислорода, активность дыхательных ферментов печени – сукцинатдегидрогеназы (СДГ) и цитохром-с-оксидазы (ЦО). Митохондрии печени выделяли методом дифференциального центрифугирования на холоде в триссахарозной среде. Активность СДГ и ЦО оценивали колориметрически на ФЭК-56 по методике, раз-

работанной Ф. Е. Путилиной, Н. Д. Ещенко [10] и В. И. Малюк [11] соответственно. Потребление животными кислорода определяли камерным способом, описанным О. Н. Елизаровой [12].

О детоксикационной функции печени, степени эндогенной интоксикации судили по продолжительности наркотического сна (ПНС), концентрации в плазме крови фракции «средних молекул» (СМ) и степени токсичности крови (СТК). Определение содержания СМ производили методом кислотного-этанольного осаждения, разработанным В. М. Мойным с соавт. [13], СТК-способом, предложенным О. А. Радьковой с соавт. [14]. О ПНС у крыс (гексенал 100,0 мг/кг, внутривентриально) судили по времени нахождения животных в боковом положении [15].

Для выяснения роли NO в изучаемых процессах использовали неселективный блокатор NO-синтазы – L-NAME (метилвый эфир N^G-нитро-L-аргинина, Acros Organics, США), который инъецировали крысам внутривентриально в дозе 25 мг/кг за 30 мин до введения в организм трийодтиронина.

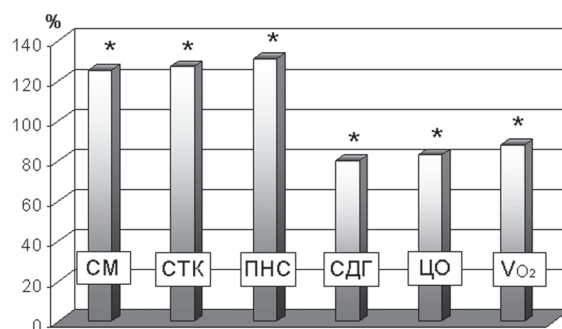
Все наблюдения производились в термонеutralных условиях (20–22 °С). Ректальную температуру измеряли с помощью электротермометра ТПЭМ-1.

Все полученные данные обработаны при помощи общепринятых методов вариационной биологической статистики с использованием критерия Стьюдента.

Результаты и их обсуждение. В опытах на крысах установлено, что через 20 дней после ежедневного интрагастрального введения экзогенного трийодтиронина (Т₃) в дозе 30 мкг/кг у гипертиреоидных животных активируются процессы теплопродукции и энергетического обмена. Температура тела у крыс в этих условиях повышалась на 0,7 °С ($p < 0,05$, $n = 10$). У гипертиреоидных животных отмечалось возрастание активности дыхательных ферментов митохондрий печени – СДГ и ЦО на 30,4 % ($p < 0,05$, $n = 7$) и 22,5 % ($p < 0,05$, $n = 7$) соответственно. Активность СДГ и ЦО митохондрий печени у крыс контрольной группы ($n = 7$), которым в течение указанного срока вводили интрагастрально 1 %-ный раствор крахмала, составляла $21,3 \pm 0,28$ мкмоль/мг/час и $407 \pm 17,5$ нмоль/мг/мин. Количество потребляемого животными кислорода увеличивалось на 27,9 % ($p < 0,05$, $n = 7$), а именно, с $36,5 \pm 2,81$ до $46,7 \pm 4,13$ мл/кг/мин.

Было установлено, что наряду с активацией процессов теплопродукции и энергетического обмена, у крыс в условиях гипертиреоза имеет место повышение детоксикационной функции печени. Так, ПНС (гексенал 100 мг/кг внутривентриально) в этих условиях сокращалась на 27,2 % ($p < 0,05$, $n = 8$) по отношению к контролю (эутиреоидные животные, получавшие в течение 20 дней 1 %-ный крахмальнй раствор интрагастрально ежедневно) и составляла $20,5 \pm 2,92$ мин, содержание в плазме крови СМ снижалось на 23,5 % ($p < 0,05$, $n = 8$), а степень ее токсичности уменьшалась на 19,2 % ($p < 0,05$, $n = 8$) и составляли соответственно $0,56 \pm 0,011$ г/л и $1,1 \pm 0,13$ ед.

В специальной серии исследований выявлено, что введение экзогенного Т₃ в условиях угнетения в организме синтеза NO (L-NAME, 25 мг/кг, внутривентриально за 30 мин до введения трийодтиронина гидрохлорида) не приводит к активации процессов детоксикации, повышению температуры тела, количества потребляемого животными кислорода и активности дыхательных



Изменение содержания «средних молекул» (СМ), степени токсичности (СТК) плазмы крови, продолжительности наркотического сна (ПНС), количества потребляемого кислорода (V_{O_2}), а также активности СДГ и ЦО печени у крыс (в % к контролю, принятому за 100 %) через 20 дней после ежедневного интрагастрального введения животным трийодтиронина гидрохлорида в дозе 30 мкг/кг, предварительно за 30 мин до введения гормона, получавших L-NAME (25 мг/кг); * – изменения достоверны по отношению к контролю (принятому за 100 %) – интрагастральное введение животным трийодтиронина гидрохлорида в дозе 30 мкг/кг ($p < 0,05$)

ферментов печени (рисунок). В контрольной группе животных (получавших вместо L-NAME физраствор) наблюдалось повышение температуры тела, имела место активация процессов теплопродукции и энергетического обмена.

Так, у опытных животных, предварительно получавших L-NAME (25 мг/кг), а затем через 30 мин синтетический T₃ (30 мкг/кг) ежедневно в течение 20 дней, через 12 часов после последнего интрагастрального введения крахмального раствора трийодтиронина гидрохлорида активность СДГ и ЦО митохондрий печени составляла $22,3 \pm 0,28$ мкмоль/мг/ч ($n = 8$) и $411 \pm 16,3$ нмоль/мг/мин ($n = 7$) соответственно, а количество потребляемого крысами ($n = 8$) кислорода было равным $37,5 \pm 3,52$ мл/кг/мин. У животных, получавших T₃ (30 мкг/кг) в течение 20 дней, которым предварительно за 30 мин до введения гормона делали внутривентриальную инъекцию физраствора активность СДГ и ЦО митохондрий печени была равной $28,1 \pm 0,37$ мкмоль/мг/ч ($n = 7$) и $512 \pm 17,3$ нмоль/мг/мин ($n = 7$), а количество потребляемого кислорода составляло $44,6 \pm 3,82$ мл/кг/мин ($n = 6$).

Интрагастральное введение в течение 20 дней трийодтиронина гидрохлорида (30 мкг/кг) крысам, предварительно за 30 мин до инъекции T₃ получавшим внутривентриально физраствор, приводило к повышению у животных ректальной температуры на $0,8$ °C ($p < 0,05$, $n = 8$), а в условиях действия ингибитора NO-синтазы (L-NAME, 25 мг/кг) действие T₃ у животных ($n = 8$) не вызывало достоверных изменений температуры тела.

ПНС (гексенал 100 мг/кг внутривентриально) у крыс опытной группы, получавших в течение 20 дней T₃ в условиях угнетения активности NO-синтазы L-NAME, через 12 часов после последнего интрагастрального введения гормона увеличивалась на $28,7$ % ($p < 0,05$, $n = 7$) по сравнению с животными в контроле. Длительность наркотического сна у крыс в контроле (интрагастральное введение T₃ в дозе 30 мкг/кг в течение 20 дней и физиологического раствора внутривентриально за 30 мин до введения гормона) составляла $20,4 \pm 2,51$ мин ($n = 7$).

Наряду с увеличением ПНС, у гипертиреозидных крыс, предварительно получавших L-NAME, наблюдалось также повышение, по сравнению с животными контрольной группы, содержания в плазме крови СМ на $22,7$ % ($p < 0,05$, $n = 7$). Показатель токсичности крови у опытных крыс по сравнению с таковыми в контроле был выше на $24,3$ % ($p < 0,05$, $n = 6$).

Результаты исследований свидетельствуют о том, что в условиях действия в организме ингибитора NO-синтазы L-NAME, трийодтиронин не оказывает своего характерного активирующего влияния на процессы детоксикации и термогенеза.

Выводы. Результаты проведенных исследований свидетельствуют, что интрагастральное введение животным экзогенного T₃ в условиях действия в организме ингибитора NO-синтазы L-NAME не приводит к изменениям в процессах детоксикации и температуры тела, характерным для гипертиреоза, а именно, в этих условиях не отмечалось снижения ПНС, уровня СМ, СТК, а также не наблюдалось повышения температуры тела, активности СДГ и ЦО в митохондриях печени и количества потребляемого животными кислорода. Полученные данные дают основание заключить, что NO участвует в реализации биологических эффектов тиреоидных гормонов, в частности, их влияния на процессы детоксикации и температуру тела.

Литература

1. Яковлев М. Ю. // Успехи современной биологии. 2003. Т. 123, № 1. С. 31–40.
2. Яковлев М. Ю. // Бюл. эксперим. биологии и медицины. 2003. Т. 29, № 4. С. 98–109.
3. Kelly G. S. // Altern. Med. Rev. 2000. Vol. 4. P. 306–333.
4. Туракулов Я. Х., Таикоджаева Т. П., Артыкбаева Г. М. // Пробл. эндокринологии. 1991. Т. 37, № 4. С. 44–46.
5. Степанова Н. А., Висмонт Ф. И. // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. биол. наук. 2003. № 1. С. 36–41.
6. Acheson K. J., Burger A. G. // Clin. Endocrinol. and Metab. 1980. Vol. 51, N 1. P. 84–89.
7. Quesada A., Sainz J., Wangenstein R. et al. // Eur. J. Endocrinology. 2002. Vol. 147. P. 117–122.
8. Fernandez V., Cornejo P., Tapia G., Videla L. A. // Nitric Oxide. 1997. N 6. P. 463–468.
9. Gerstberger R. // News Physiol. Sci. 1999. Vol. 14, N 2. P. 30–36.
10. Путилина Ф. Е., Ещенко Н. Д. // Вестн. Ленинград. ун-та. Сер. Биология. 1969. Вып. 4, № 21. С. 74–78.
11. Малюк В. И. // Вопр. мед. химии. 1965. Т. 2, № 4. С. 243–246.
12. Елизарова О. Н. Определение пороговых доз промышленных ядов при пероральном введении. М.: Медгиз., 1962.

13. Способ определения веществ группы средних молекул в биологических жидкостях: а. с. 1520445 СССР, VRB F 01 № 33/50 / В. М. Моин [и др.]. – №4323421/28-14; заявл. 02.11.87; опубл. 07.11.89 // Открытия. Изобретения. 1989. № 41. С. 415.

14. Способ определения токсичности биологических жидкостей: а. с. 1146570 СССР, МКИ б ОI № 1/28 / О. А. Радькова [и др.]. – № 3458007/28-13; заявл. 18.06.84; опубл. 23.03.85 // Открытия. Изобретения. 1985. № 11. С. 2.

15. *Парк Д. В.* Биохимия чужеродных соединений. М.: Медицина, 1973.

V. V. LOBANOVA, F. I. VISMONT

vismont@bsmu.by

**PARTICIPATION OF NITRIC MONOXIDE IN REALIZATION MECHANISMS OF TRIIODOTHYRONINE
INFLUENCE ON THE DETOXICATION PROCESSES AND BODY TEMPERATURE IN RATS**

Summary

In experiments on rats, it was found that hyperthyrosis is accompanied by activation of the detoxication processes and a rise in body temperature. Inhibition of the NO-synthase activity by methyl ester N^G-nitro-L-arginine diminishes the typical changes in detoxication processes and body temperature induced by the action of exogenous triiodothyronine.

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 537.241

*Член-корреспондент О. Г. ПЕНЯЗЬКОВ, В. И. САВЕРЧЕНКО, С. П. ФИСЕНКО***РЕЖИМЫ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ
ФЕМТОЛИТРОВЫХ КАПЕЛЬ РАСТВОРОВ НА ПОДЛОЖКУ-ЭЛЕКТРОД
ПРИ Пониженном Давлении***Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск**Поступило 25.08.2014*

Введение. Процесс осаждения фемтолитровых капель растворов на плоскую подложку из натекающего на нее ламинарного газового потока активно изучается и применяется во многих разделах прикладной физики. Исключительно важен этот процесс на финальной стадии высокоэффективного метода получения твердых наночастиц из капель растворов, так называемого распылительного пиролиза в условиях пониженного давления [1; 2] (по-английски – Low Pressure Spray Pyrolysis (LPSP)). При атмосферном давлении надежным методом увеличения эффективности осаждения микронных твердых частиц и капель является использование электростатического поля [3–6]. Однако при пониженном давлении необходимо дополнительное исследование целого ряда возникающих проблем. Прежде всего, для эффективного проведения электростатического осаждения необходимо передать движущимся вместе с газовым потоком каплям достаточно большой заряд. Зарядка фемтолитровых капель при помощи коронного разряда является многофакторным и стохастическим процессом [7; 8]. Важную роль в этом процессе для нашей экспериментальной установки играет, в частности, такой канал обратной связи, как рассеивание потока электронов между электродами, заряженными фемтолитровыми каплями [4]. В настоящее время многие детали зарядки капель количественно можно исследовать только экспериментально, особенно при пониженном давлении.

Отметим, что для успешного проведения распылительного пиролиза важно не только осадить капли из газового потока на подложку, но и максимально уменьшить при этом их агломерацию на подложке. Естественно, что осаждение капель на подложку определяется не только их зарядом q и напряженностью электростатического поля E , но и средней скоростью u_0 и диаметром d набегающего газового потока, а также физико-химическими свойствами подложки-электрода. В частности, как показали наши эксперименты, наблюдается гидродинамическое и электростатическое влияние ранее осажденных капель на процесс осаждения последующих.

Цель работы – представить основные результаты исследования электростатического осаждения фемтолитровых гетерогенных капель, внутри которых находятся наночастицы [1; 2], на электрод-подложку при пониженном давлении. Отметим, что результаты работы могут быть также использованы для создания многокомпонентных покрытий с помощью аэрозолей [9].

Экспериментальные и теоретические результаты. В наших экспериментах для зарядки фемтолитровых капель, которые несет ламинарный газовый поток, использовался коронный разряд [3]. Основной электрод коронатора был сделан в виде иглы, в качестве второго электрода использовалась металлическая подложка [4]. Результаты измерения вольтамперной характеристики коронного разряда в нашей установке представлены на рис. 1. Символами отмечены зоны существования коронного разряда. Видно, что при понижении давления эти зоны существенно сокращаются, что связано с увеличением средней длины свободного пробега электронов при понижении общего давления в системе [3].

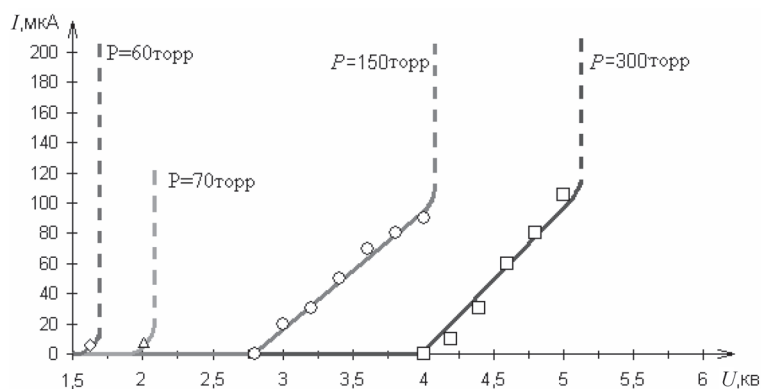


Рис. 1. Зависимость тока разряда от напряжения на коронаторе при межэлектродном расстоянии 1 см

Для применения электростатических методов осаждения важно иметь максимально возможный заряд q_m на каждой капле. Оценка, основанная на приравнивании средней кинетической энергии электрона потенциальной энергии кулоновского отталкивания от заряженной капли, дает следующее выражение для q_m [4]:

$$q_m = 4\pi\epsilon\epsilon_0 E\lambda R, \quad (1)$$

где R – радиус капли; E – напряженность электростатического поля в коронаторе; λ – средняя длина свободного пробега электронов; ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость среды, которую для наших полуколичественных оценок будем считать равной 1; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. Численная оценка на основе (1) для капли с радиусом 1 мкм показывает, что при давлении 60 торр и $E = 10^6$ В/м максимальный заряд q_m равен $2000e$, где e – заряд электрона. Отметим, что средняя длина свободного пробега электронов λ зависит как от состава газовой смеси, так и от общего давления [3]. Как показали наши эксперименты и расчеты, характерное время зарядки фемтолитровой капли в коронаторе составляет около 10^{-7} с [4], что существенно меньше других характерных времен в задаче об осаждении капли.

Схема движения заряженной капли вблизи подложки-электрода показана на рис. 2. Можно показать на основе гидродинамического анализа обтекания подложки-электрода, что эффективность электростатического осаждения капель высока, если справедливо неравенство

$$\frac{dR\mu u_0}{\epsilon_0 E^2 \lambda L} \ll 1, \quad (2)$$

где μ – вязкость воздуха, не зависящая от давления. Как следует из выражения (2), которое получено для стоксового обтекания капли газовым потоком, при увеличении давления или увеличении радиуса капель, при неизменных других параметрах в системе, эффективность электростатического осаждения падает. Анализ экспериментальных результатов подтверждает этот вывод. В наших экспериментах при $u_0 = 0,1$ м/с, $R \approx 1$ мкм, $E = 10^6$ В/м и при полном давлении $P = 60$ торр в реакторе левая часть неравенства (2) составляет 10^{-4} , так что можно ожидать, что при таких параметрах практически все заряженные капли должны оседать на подложке.

Измерения показали, что эффективность электростатического осаждения, определяемая как отношение массы осажденного вещества к массе растворенного вещества в растворе, который был пропущен через реактор, составляет примерно 90 %. Так как несколько процентов растворенных компонент испаряется в процессе распылительного пиролиза, то эффективность электростатического осаждения в нашей установке несколько выше. Представляется также, что заряд некоторых капель в силу стохастичности процесса существенно меньше принятого нами среднего значения $1000e$, что влияет на возможность отклонить капли электростатическим полем от линий тока газового потока.

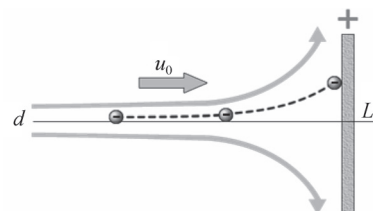


Рис. 2. Схема осаждения заряженной капли на подложку-электрод: L – ширина электрода, d – ширина набегающего потока

При осаждении капель на подогреваемую до 60 °С металлическую подложку наблюдалось формирование конической пористой структуры из материала, находящегося внутри осажденных капель. Отметим, что время испарения фемтолитровой капли на такой подложке порядка 10^{-2} с. Диаметр основания конуса из осажденного материала примерно равен $2d$, а его высота зависела от длительности эксперимента. Центр конической структуры совпадал с осью газового потока. Очевидно, что образование конуса связано с неустойчивостью роста плоской поверхности осажденного материала при натекании на нее газового потока с каплями.

Скорость роста толщины покрытия h , как можно показать, используя развитые выше представления, зависит от следующих факторов:

$$\frac{dh}{dt} \sim \frac{\rho_d n R_d^2 q_m E}{\rho_c \mu},$$

где ρ_d – массовая плотность растворенной соли в капле; ρ_c – массовая плотность растворенного материала; n – число капель в единице объема потока, натекающего на подложку. Характерное время образования покрытия τ_d соответственно равно

$$\tau = \rho_c \mu / \rho_d n R_d^2 q_m E.$$

При достаточно низких давлениях, когда числа Кнудсена для капель достаточно велики, выражения для скорости роста толщины покрытия и характерного времени роста могут быть получены и в свободномолекулярном приближении.

Специально были проведены эксперименты, в которых металлический электрод покрывался кремниевой пластиной толщиной 1 мм. Фото осажденного материала из высохших капель на диэлектрической подложке, полученное при увеличении $\times 200$, показано на рис. 3. Как видно, конической структуры из наночастиц не образуется, а за одинаковое время эксперимента каплями покрывается площадь подложки, которая существенно больше πd^2 . Причина этого отличия, очевидно, медленное стекание заряда с капли после ее столкновения с диэлектрической подложкой. В результате движущаяся с потоком заряженная капля вблизи поверхности чувствует кулоновское отталкивание от заряженных капель на поверхности. Можно отметить также, что распределение осажденных капель несколько неоднородно по подложке (см. рис. 3). Наиболее плотное распределение осажденного материала наблюдается вблизи оси газового потока.

Если на диэлектрическую подложку осело достаточно большое количество капель, то напряженность эффективного электростатического поля E_{ef} вблизи подложки уменьшается и примерно равна [10]

$$E_{ef} \approx E - n_s q_m / \epsilon_0, \quad (3)$$

где n_s – число заряженных капель на единице площади подложки. Как следует из приближенного равенства (3), возникает своеобразный эффект «саморегулирования» при осаждении заряжен-

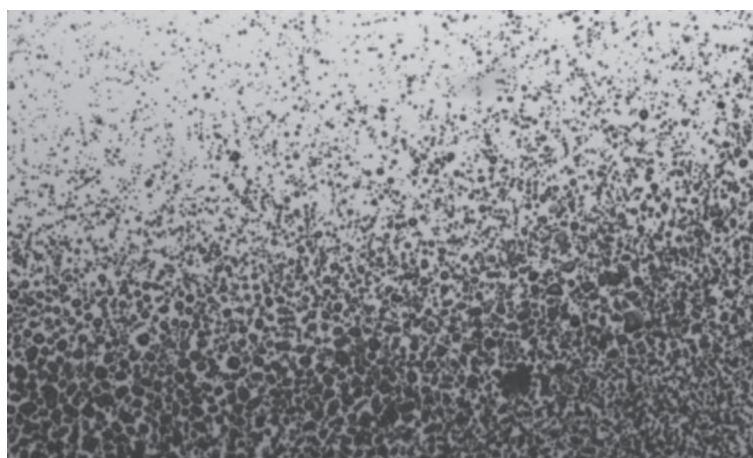


Рис. 3. Оптическое фото высушенных капель на диэлектрической подложке

ных капель на диэлектрическую подложку. Действительно, чем больше осело капель в локальной области подложки, тем меньше величина эффективного электростатического поля около него. Тогда в силу неравенства (2) в данном месте падает эффективность осаждения капель. Капли оседают в других частях подложки, вблизи которых эффективное электростатическое поле для осаждения больше. В результате «саморегулирования» резко увеличивается площадь подложки, занятая одним и тем количеством капель по сравнению с осаждением на металлической подложке. В свою очередь, расширение площади ведет к снижению агломерации наночастиц, находящихся внутри капель и собираемых с подложки.

Характерное время заполнения диэлектрической подложки τ_{ds} каплями можно оценить как

$$\tau_{ds} \sim \left(\frac{L}{d}\right)^2 \frac{\mu}{nq_m ER}.$$

Для фиксированного размера диэлектрической подложки L величина τ_{ds} обратно пропорциональна произведению трех параметров ($d^2 n R$), при этом массовый расход небулайзера прямо пропорционален произведению nR^3 . При $n = 10^{12} \text{ м}^{-3}$ и $R \approx 1 \text{ мкм}$, $E = 10^6 \text{ В/м}$ имеем

$$\tau_{ds} \approx 5 \cdot 10^{-2} (L/d)^2.$$

Другими словами, если $L/d \sim 10$, то диэлектрическая подложка за несколько секунд покрывается фемтолитровыми заряженными каплями.

Заключение. На основании наших экспериментальных данных и результатов теоретического исследования проанализированы особенности зарядки и электростатического осаждения фемтолитровых капель при пониженном давлении из ламинарного газового потока на плоские подложки различной природы. В экспериментах были проведены измерения в диапазоне давлений 60–300 торр, напряженность электрического поля была около 10^6 В/м .

При электростатическом осаждении капель, внутри которых находятся наночастицы, на металлической подложке-электроде обнаружено формирование пористых конических структур из наночастиц. При этом капли испаряются за несколько сотых долей секунды. При одном и том же массовом расходе капель при их электростатическом осаждении на диэлектрические подложки на электроде обнаружено формирование более равномерного и более тонкого покрытия на значительно большей площади, что связано с кулоновским отталкиванием между заряженными каплями. Этот эффект важно учитывать при нанесении тонких пленок на подложку при помощи аэрозолей [9]. Получено выражение для оценки времени нанесения покрытия.

Как показал наш анализ, пониженное давление в аэрозольном реакторе сказывается на следующих процессах: при понижении давления увеличивается скорость испарения капель на подложке; при этом увеличивается максимальный заряд капли q_m и одновременно уменьшается диапазон устойчивой работы устойчивости коронного разряда.

Необычные физико-химические аспекты распылительного пиролиза при пониженном давлении при синтезе наночастиц на примере фемтолитровых капель водного раствора NiCl_2 представлены в наших работах [11; 12].

Литература

1. Wang W.-N., Lenggoro I. W., Okuyama K. // Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology / ed. H. S. Nalwa. American Scientific Publishers, 2009. Vol. X.
2. Пенязьков О. Г., Саверченко В. И., Фисенко С. П. // Письма в Журн. техн. физики. 2013. Т. 39, № 3. С. 56–62.
3. Raiser Yu. P. The Physics of Gaseous Discharges. New York: Springer, 1992.
4. Пенязьков О. Г., Саверченко В. И., Фисенко С. П., Ходыко Ю. А. // Журн. техн. физики. 2014. Т. 84, № 8. С. 93–101.
5. Kubo M., Ishihara Y., Mantani Y., Shimada M. // Chem. Eng. J. 2013. Vol. 232. P. 221–227.
6. Gen M., Ikawa S., Sagawa Sh., Lenggoro I. W. // e-Journal Surface Science and Nanotechnology. 2014. Vol. 12. P. 238–241.
7. D'Addio L., Carotenuto C., Balachandran W. et al. // Chem. Eng. Sci. 2014. Vol. 102. P. 222–230.
8. Mazumder M. K., Sims R. A., Biris A. S. et al. // Chem. Eng. Sci. 2006. Vol. 61. P. 2192–2211.
9. Nikravech M., Baba K., Leneindre B., Rousseau F. // Chemical Papers. 2012. Vol. 66. P. 502–510.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. – 621 с.

11. *Fisenko S. P., Khodyko J. A., Penyazkov O. G., Saverchenko V. I.* // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures: Proceeding of Intern. Conference “Nanomeeting-2013” / eds. V. E. Borisenko, S. V. Gaponenko, V. S. Gurin, C. H. Kam. Singapore, 2013. P. 378–380.

12. *Пенязьков О. Г., Саверченко В. И., Фисенко С. П.* // Инженерно-физ. журн. 2014. Т. 87, № 4. С. 772–777.

O. G. PENYAZKOV, V. I. SAVERCHENKO, S. P. FISENKO

fsp@hmti.ac.by

**MODES OF ELECTROSTATIC DEPOSITION
OF FEMTOLITER DROPLETS ON ELECTROD-HOLDER**

Summary

For reduced pressure 60–300 Torr experimental results and theoretical estimates of electrostatic deposition of femtoliter droplets, containing inside nanoparticles, from the gas stream on substrate-electrode are presented. It is shown that the corona discharge with a stream of droplets is stable in a limited range of currents and voltages. Similarity criterion of the process of electrostatic deposition is obtained. It was found that the use a thin dielectric substrate, covering the electrodes, significantly reduces agglomeration of charged droplets due to Coulomb repulsion.

УДК 620.92.002.68;621.1.016;544.47

О. С. РАБИНОВИЧ, А. И. МАЛИНОВСКИЙ

УСТОЙЧИВОСТЬ ПЛОСКОГО ФРОНТА ФИЛЬТРАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ ТВЕРДОГО ТОПЛИВА

(Представлено членом-корреспондентом О. Г. Пенязьковым)

Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск

Поступило 06.10.2014

Введение. Фильтрационное горение твердых (конденсированных) топлив (ФГТТ) является основой многих перспективных технологий. К таким технологиям относятся сжигание, газификация и термохимическая конверсия местных видов топлива (биомассы, сланцев, отходов лесной и деревообрабатывающей промышленности), добыча сильно связанной с грунтом нефти методом внутрислового горения, регенерация сорбентов, очистка грунтов от органических загрязнений и др.

Практическая реализация фильтрационного сжигания твердых топлив в спутной волне горения¹ с инверсной структурой² сталкивается с проблемой неустойчивости [1–3]: плоский фронт, располагавшийся первоначально перпендикулярно направлению фильтрации газа, перестраивается в наклонный либо распадается на отдельные очаги и впоследствии погасает. Развитие неустойчивости приводит к неполному сгоранию твердого топлива, образованию в реакторе перегретых зон, неэффективному использованию продуваемого газового потока.

Аналогичное неустойчивое поведение демонстрируют и спутные волны фильтрационного горения газов [4–6], имеющие такую же тепловую структуру. Неустойчивость рассматриваемого типа получила название тепло-гидродинамической, поскольку основной механизм роста возмущений плоского фронта горения связан с обратной зависимостью фильтрационной проницаемости слоя от температуры. При пространственном возмущении плоского фронта горения происходит перестройка поля фильтрации в окрестности этого возмущения так, что в области пониженной температуры поток газообразного реагента возрастает, а в области повышенной температуры – убывает. В результате участки фронта с большим локальным расходом распространяются быстрее, и возмущение растет. Факторами, препятствующими росту возмущения и сглаживающими температурную неоднородность, являются теплопроводность и увеличение тепловыделения на участках фронта с повышенным расходом газообразного реагента. В случае горения твердого топлива возможность его неполного сгорания значительно усложняет характер развития указанной неустойчивости.

В основе рассмотренной в работе тепло-гидродинамической неустойчивости ФГТТ лежит единая для всех фильтрационных процессов зависимость проницаемости пористой среды от температуры. В настоящей работе не рассматриваются другие, более специфические, особенности фильтрационного горения, связанные с изменением структуры пористого слоя. Также

¹ Спутная волна горения распространяется в направлении продувки (фильтрации) газа.

² Инверсная структура спутной волны горения – структура, в которой исходное твердое топливо прогрето до температуры горения, а сгоревшая часть пористого слоя охлаждена входящим газовым потоком до его начальной температуры. В спутной волне с нормальной структурой прогреты продукты сгорания, а исходный пористый материал имеет начальную температуру.

определенные ограничения на общность излагаемых результатов накладывает использованная в работе двумерная постановка проблемы. По-видимому, в трехмерном случае возможны более сложные типы динамического поведения волны горения в результате развития неустойчивости.

Цель исследования – определить критические условия, при которых возникает тепло-гидродинамическая неустойчивость ФГТТ, а также исследовать сценарии развития неустойчивости. Решение поставленной задачи осуществлялось методом численного моделирования в терминах безразмерных переменных, что позволило сформулировать результаты исследования в общем виде.

Постановка задачи о тепло-гидродинамической устойчивости спутных волн ФГТТ. В основе излагаемого ниже анализа устойчивости лежат модели одномерных режимов фильтрационного горения твердого топлива, предложенные в [7–9]. Рассматриваются спутные волны ФГТТ в однотемпературном приближении, т. е. в условиях высокоинтенсивного теплообмена между газовым потоком и пористым каркасом.

Используются следующие упрощающие допущения: объемная теплоемкость пористой среды $c_{p,s}^V$ в результате сгорания твердого топлива не изменяется; при вычислении объемной теплоемкости системы пренебрегается теплоемкостью газа по сравнению с теплоемкостью конденсированной фазы; молярная плотность ρ_g^m и молярная теплоемкость газа $c_{p,g}^m$ не зависят от его состава; фильтрация газа описывается законом Дарси, а проницаемость пористой среды обратно пропорциональна вязкости газа, меняющейся с температурой; эффективная теплопроводность системы λ_{ef} постоянна; химическая реакция между твердым топливом и газообразным окислителем имеет нулевой порядок по обоим реагентам и зависит от температуры по Аррениусу; в результате реакции не происходит изменения молярного расхода газа.

В указанных предположениях система безразмерных уравнений для рассматриваемой задачи имеет вид:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + \delta(\Gamma \tilde{\nabla} \Theta) = \tilde{\nabla}^2 \Theta + \frac{1}{\gamma^2} \Omega, \quad (1)$$

$$\tilde{\nabla}(\Gamma \xi) = -\frac{\Omega}{\gamma}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \frac{\Omega}{\gamma}, \quad (3)$$

$$\Omega = \begin{cases} \exp\left(\frac{\Theta}{1 + \beta \Theta}\right) & \text{при } 0 < \eta < 1, \xi > 0; \\ 0 & \text{при } \eta = 1 \text{ или } \xi = 0, \end{cases} \quad (4)$$

$$\tilde{\nabla}(\Gamma) = 0; \quad \Gamma = -\chi \tilde{\nabla} \pi, \quad (5)$$

$$\chi(\Theta) = \left(\frac{1 + \beta \Theta_0}{1 + \beta \Theta}\right)^{5/2} \frac{1 + \beta \Theta + \tilde{C}_A}{1 + \beta \Theta_0 + \tilde{C}_A}. \quad (6)$$

В системе уравнений (1)–(6) использованы следующие обозначения безразмерных переменных: $\Theta = (T - T_*) / \Delta T_*$ – температура; $\tau = t / t_*$ – время; η – степень конверсии твердого топлива; ξ – концентрация газообразного реагента; $\Gamma = G / G_*$ – плотность потока газа; $\Omega(\Theta, \eta, \xi)$ – скорость реакции; χ – фильтрационная проницаемость; π – давление; \tilde{C}_A – постоянная Сазерленда; $\tilde{\nabla}$ – безразмерный оператор «набла».

Безразмерные параметры δ, γ, β определяются как

$$\gamma = \frac{\Delta T_* c_{p,s}^V}{Q(\rho_{s,1}^m)^0} = \frac{\Delta T_*}{q}; \quad \beta = \frac{\Delta T_*}{T_*}; \quad \delta = \frac{\nu c_{p,g}^m \zeta^0}{\xi_0 c_{p,s}^m},$$

где Q – тепловой эффект на 1 моль твердого топлива; $(\rho_{s,1}^m)^0$ и ζ^0 – его исходная молярная плотность и относительная молярная доля в пористом слое; ν – стехиометрический коэффициент по газообразному реагенту; $c_{p,g}^m$ и $c_{p,s}^m$ – молярные теплоемкости газа и твердого материала.

Представленные ниже численные расчеты проводились при заданном расходе фильтруемого газа – условии, которое наиболее часто реализуется на практике.

Результаты моделирования тепло-гидродинамической неустойчивости ФГТТ. *Границы тепло-гидродинамической неустойчивости ФГТТ.* Численное моделирование проводилось на основе метода контрольных объемов. При моделировании использовались безразмерные параметры, характерные для сверхадиабатических режимов горения кокса в инертной засыпке (оксид алюминия, шамот): $\gamma = 0,2$, $\beta = 0,077$, $\delta = 1,5$. При выбранном значении δ перепад температур в одномерной спутной волне ФГТТ с инверсной структурой и полным потреблением газообразного реагента оказывается в два раза больше адиабатического разогрева системы.

В работе рассматривается распространение спутных волн ФГТТ в двумерной прямоугольной области, вытянутой в направлении фильтрации. Основным предметом исследования являлось влияние двух свободных параметров задачи – Γ_0 и H – на устойчивость плоского фронта горения.

Шаг пространственной сетки составлял $0,05$ – $0,10x_*$, интегрирование по времени производилось с шагом $\Delta\tau = 0,005$.

Для всех значений исследованных параметров процесс горения инициировался заданием в начальный момент прогретой поперечной зоны пористого слоя вблизи входной границы газового потока. В зависимости от профиля температуры на передней, по отношению к направлению газового потока, границе прогретой зоны реализовывались различные пространственные типы возмущения плоского фронта горения, приводившие к развитию новых неоднородных структур волны горения. Представленные далее примеры демонстрируют как происходит перестройка плоского фронта горения в зависимости от вида начальных условий и значения параметра H (средний удельный расход газа через слой Γ_0 постоянен).

Численное моделирование спутных волн ФГТТ позволило выявить следующие закономерности для исследованной области безразмерных параметров ($2 < H < 28$; $0,5 < \Gamma_0 < 3,0$, $\delta = 1,5$):

спутные волны ФГТТ с нормальной структурой устойчивы по отношению к указанному способу инициирования горения и возбуждения неустойчивости;

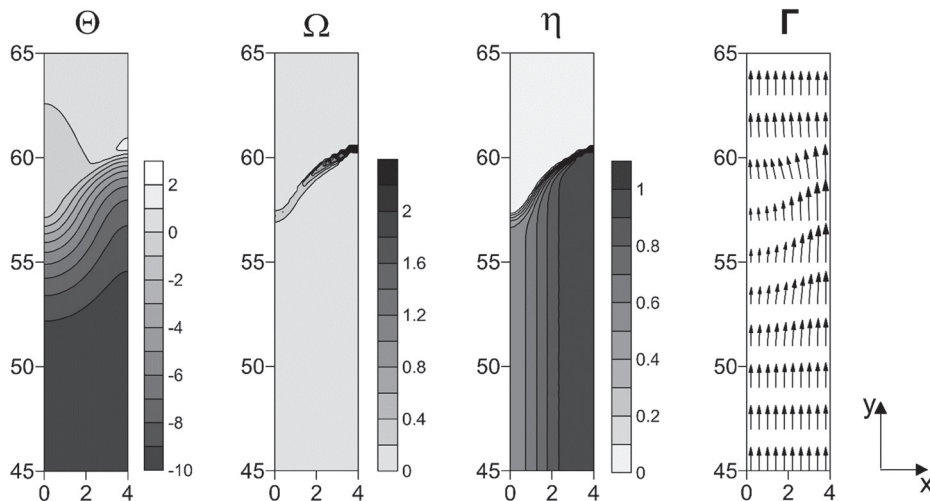


Рис. 1. Структура стационарного наклонного фронта ФГТТ вблизи порога неустойчивости плоской спутной инверсной волны: Θ – поле температуры; Ω – скорость реакции; η – конверсия твердого топлива; Γ – фильтрационные потоки. Расчетные безразмерные параметры: $\gamma = 0,2$, $\beta = 0,077$, $\delta = 1,5$, $\Gamma_0 = 2,0$, $H = 4,0$

спутные волны ФГТТ с инверсной структурой проявляют неустойчивость в определенной области безразмерных параметров Γ_0 и H (при фиксированных γ , β и δ);

если параметры системы соответствуют области неустойчивости плоского фронта волны горения с инверсной структурой, то пороговое возмущение, приводящее к развитию неустойчивости, чрезвычайно мало: даже в отсутствие искусственного возмущения неустойчивость развивается. Однако при приближении к параметрической границе этой области время развития неустойчивости становится очень большим (по-видимому, стремится к бесконечности).

В области неустойчивости, вблизи ее границы, происходит установление стационарного наклонного фронта спутной инверсной волны горения, структура которой представлена на рис. 1. Характерные поля температуры, скорости реакции, конверсии твердого топлива и потоков фильтрации иллюстрируют природу тепло-гидродинамической неустойчивости. В окрестности наклонного фронта происходит перестройка потоков фильтрации, вызванная снижением фильтрационного сопротивления в области, где фронт горения продвинул дальше по потоку. Это приводит к увеличению скорости подачи газообразного реагента в указанную область, повышению в ней тепловыделения и порождает поперечный градиент температуры. В результате перераспределения потоков фильтрации количество газообразного реагента, поступающего в отстающую часть фронта, уменьшается, и скорость распространения фронта горения в этом месте снижается, так что лидирующая часть фронта еще больше опережает отстающую. Конкурирующим эффектом, стабилизирующим наклонный фронт, является теплопроводность, стремящаяся выровнять поперечные градиенты температуры.

Практический интерес представляет область безразмерных параметров, в которой распространение плоского фронта спутной инверсной волны ФГТТ неустойчиво. Результат параметрического исследования наклонной неустойчивости для рассматриваемого случая изображен на рис. 2. В качестве характеристик отклонения фронта горения от плоского, перпендикулярного боковым стенкам, реактора выбран угол его наклона (рис. 2, а) $\alpha_f = \arctg[(x_{f,r} - x_{f,l})/H]$, где $x_{f,r}$ – x -координата опережающей части фронта; $x_{f,l}$ – x -координата его отстающей части, а также средняя конверсия твердого топлива для установившегося наклонного фронта $\langle \eta \rangle$ (рис. 2, б). На рис. 2 видно, что с увеличением H критическое (минимальное) значение удельного расхода газа Γ_0 , при котором возникает рассматриваемая неустойчивость, падает.

Важной особенностью неустойчивости плоского фронта фильтрационного горения твердого топлива, отличающей этот тип горения от фильтрационного горения газов, является значительное снижение полноты сгорания твердого топлива. Это отрицательное с технологической точки зрения явление требует особого внимания при проектировании реакторов для сжигания и газификации твердых топлив.

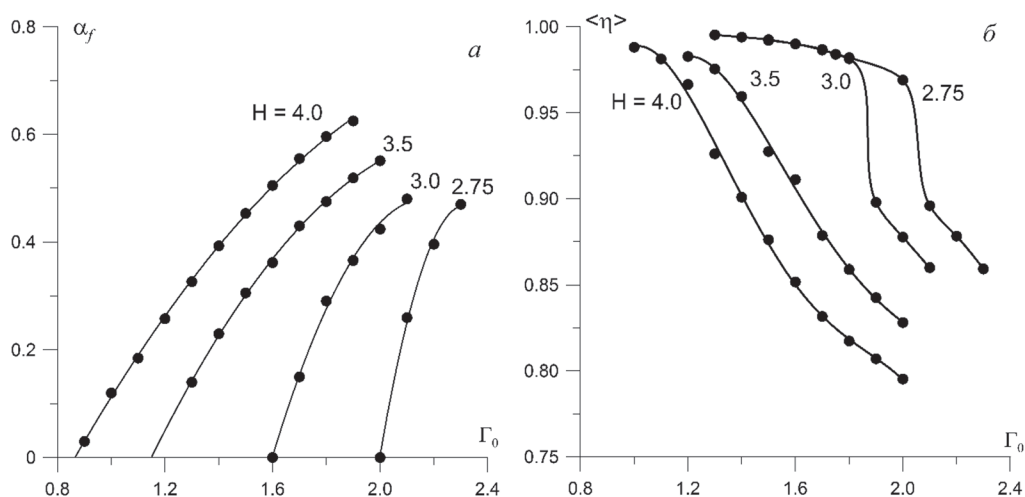


Рис. 2. Зависимости угла наклона фронта α_f (а) и средней конверсии твердого топлива $\langle \eta \rangle$ (б) от безразмерного удельного расхода газа Γ_0 для различной безразмерной ширины слоя. Расчетные безразмерные параметры: $\gamma = 0,2$, $\beta = 0,077$, $\delta = 1,5$

Сценарии развития двумерной неустойчивости спутных инверсных волн ФГТТ. Численное моделирование показало, что эволюция неустойчивого плоского фронта горения зависит от двух факторов: от степени удаленности параметров процесса от границы устойчивости и от характера возмущения, инициирующего перестройку фронта горения. Ниже этот вывод иллюстрируется примерами, в которых рассматриваются различия в развитии неустойчивости при фиксированном удельном расходе газа Γ_0 и возрастающих значениях ширины пористого слоя H .

Как было показано выше, при переходе H в область неустойчивости происходит установление стационарного наклонного фронта горения (рис. 1). Для безразмерного удельного расхода $\Gamma_0 = 2,0$ критическая ширина слоя $H \approx 3,5$. Эту величину можно рассматривать как минимальную ширину наклонного фронта при данных параметрах. Вблизи границы области неустойчивости результат перестройки плоского фронта горения не зависит от вида начального возмущения. По мере дальнейшего увеличения ширины пористого слоя наклон установившегося после перестройки фронта горения увеличивается. Начиная с $H \approx 6$, фронт наклоняется настолько сильно, что его стационарное распространение с постоянным наклоном становится невозможным и возникает осциллирующий режим (рис. 3, *a*). Механизм этих осцилляций можно описать следующим образом. При большом наклоне теплопроводность не может обеспечить равенство скоростей распространения опережающей и отстающей областей фронта горения. Из-за этого наклон фронта постепенно растет, в результате чего образуется достаточно узкая протяженная вертикальная область слоя с несгоревшим твердым реагентом и более высокой температурой по отношению к средней температуре по данному горизонтальному сечению (на рисунке – слева). В результате основной поток газа протекает по более холодной части сечения слоя и скорость реакции в соседней прогретой части сечения падает. Соответственно, протяженность фронта в вертикальном направлении возрастает. По мере приближения потока газа к лидирующей области фронта вновь происходит выравнивание потока по сечению, поступление газа в область неполного сгорания топлива увеличивается, происходит ускорение горения твердого топлива в ней. Фронт горения искривляется и формирует в рассматриваемой области новый очаг. За счет периодического пропуска не полностью сгоревшей области происходит компенсация постоянной разности скоростей частей фронта. Таким образом, нижняя граница фронта движется рывками, оставляя после себя характерную дорожку из пятен с низкой конверсией твердого топлива (см. рис. 3, *a*, $H = 8,0$).

Когда ширина слоя более чем в два раза превышает минимальное значение ширины наклонного фронта ($H = 8,0$), установление наклонного фронта является не единственным возможным результатом развития неустойчивости. При симметричном возмущении начальных условий образуется куполообразная структура волны горения, состоящая из двух наклонных фронтов, смыкающихся на оси слоя своими опережающими частями (рис. 3, *б*).

Дальнейшее увеличение ширины пористого слоя приводит к появлению структур волны горения, являющихся различными комбинациями описанных выше элементов фронта. Так, при $H = 12,0$ возможно существование как стационарной куполообразной двухфронтной структуры с лидирующей центральной частью (так же как на рис. 3, *б*), так и неустойчивой двухфронтной структуры с отстающей центральной частью, которая затем распадается на два очага горения. Как показал опыт численных расче-

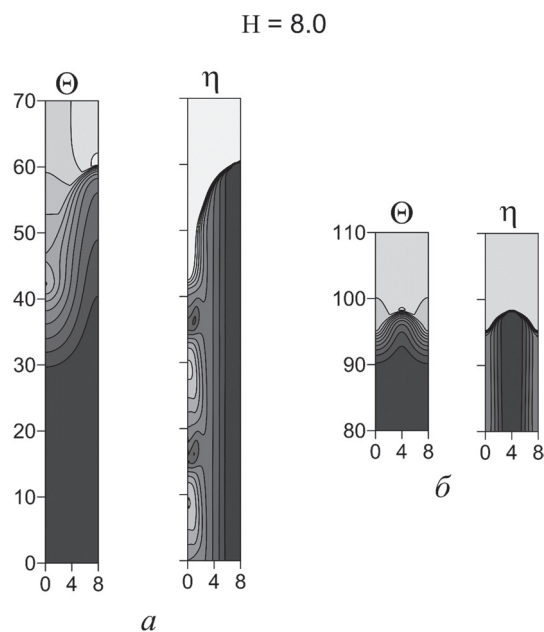


Рис. 3. Осциллирующий наклонный фронт горения (*a*) и куполообразная структура, образованная двумя наклонными фронтами, смыкающимися лидирующими зонами на оси слоя (*б*). Расчетные безразмерные параметры: $\gamma = 0,2$, $\beta = 0,077$, $\delta = 1,5$, $\Gamma_0 = 2,0$

$H = 24.0$

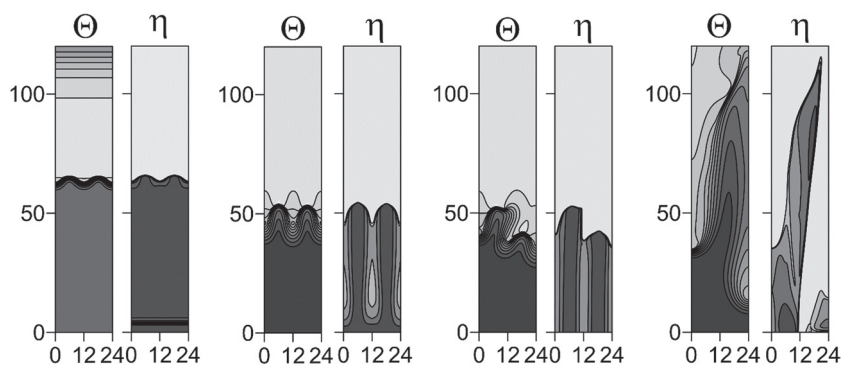


Рис. 4. Иллюстрация распада волнообразного фронта ФГТТ в случае широкого пористого слоя. Расчетные безразмерные параметры: $\gamma = 0,2$, $\beta = 0,077$, $\delta = 1,5$, $\Gamma_0 = 2,0$, $H = 24,0$

тов в широком диапазоне параметров, вариант двухволновой структуры с лидирующей центральной частью обладает существенно большей устойчивостью, чем вариант с лидирующими краями. В случае осциллирующих отстающих областей фронта последний вариант ведет к распаду фронта на отдельные очаги горения и последующему погасанию.

Идея сведения сложной структуры волны фильтрационного горения после развития неустойчивости плоского фронта к суперпозиции нескольких простых наклонных фронтов является достаточно плодотворной. В частности, это иллюстрирует ситуация спонтанного развития неустойчивости плоского фронта горения широкого пористого слоя ($H = 24,0$, рис. 4). В результате потери устойчивости образуется волнообразный фронт горения, состоящий из четырех наклонных фронтов, причем два центральных наклонных фронта образуют V-образную конфигурацию, смыкаясь вблизи оси слоя своими отстающими зонами. Выше отмечалось, что такая конфигурация является в большинстве случаев неустойчивой. Анализируя результаты расчетов можно прийти к выводу, что для достаточно широких пористых слоев спутная инверсная волна ФГТТ оказывается практически всегда неустойчивой – независимо от начальных условий волна горения распадается на погасающие очаги.

Заключение. В работе качественно определены типы развития тепло-гидродинамической неустойчивости плоского фронта спутных волн ФГТТ в зависимости от основных безразмерных параметров процесса – удельного расхода газа и ширины пористого слоя; показано, что результатом развития неустойчивости может быть простой наклонный фронт, наклонный фронт с осциллирующей отстающей зоной, а также различные суперпозиции указанных случаев; для широких пористых слоев потеря устойчивости плоского фронта горения чаще всего приводит к распаду волны горения на очаги и погасанию; на тип эволюции волны горения может влиять симметрия начального возмущения плоского фронта горения; фильтрационное горение твердых топлив в области с неустойчивым плоским фронтом приводит либо к значительному снижению конверсии топлива, либо к полному прекращению процесса.

Литература

1. Манелис Г. Б., Глазов С. В., Салганский Е. А., Лемперт Д. Б. // Успехи химии. 2012. Т. 81, № 9. С. 855–873.
2. Салганская М. В., Кислов В. М., Глазов С. В., Салганский Е. А. // XXIV научная конференция стран СНГ «Дисперсные системы», 20–24 сент. 2010, Украина, Одесса. Одесса, 2010. С. 251–252.
3. Салганская М. В., Кислов В. М., Глазов С. В. и др. // Третья конференция по фильтрационному горению, 18–21 июня, 2013, Черногоровка. Черногоровка, 2013. С. 112–115.
4. Минаев С. С., Потытняков С. И., Бабкин В. А. // ФГВ. 1994. № 1. С. 49–54.
5. Kennedy L. A., Fridman A. A., Saveliev A. V. // J. Fluid Mech. Research. 1996. Vol. 22, N 2. P. 1–26.
6. Dobrego K. V., Zhdanok S. A., Zaruba A. I. // Int. J. Heat Mass Transfer. 2001. Vol. 44. P. 2127–2136.
7. Алдушин А. П., Сеплярский Б. С. // Докл. АН СССР. 1978. Т. 241, № 1. С. 72–75.
8. Алдушин А. П., Сеплярский Б. С. // Докл. АН СССР. 1979. Т. 249, № 3. С. 585–588.
9. Алдушин А. П., Мержанов А. Г. // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах: сб. науч. тр. / отв. ред. Ю. Ш. Матрос. Новосибирск: Наука, Сиб. отд., 1988. С. 9–52.

O. S. RABINOVICH, A. I. MALINOUSKI

orabi@hmti.ac.by

STABILITY OF PLANE FRONT OF SOLID FUEL FILTRATION COMBUSTION

Summary

Analysis of thermal-hydrodynamic instability of plane filtration combustion front of solid fuel is performed. The boundaries of stable region for co-flow combustion wave are determined by numerical modeling. Possible scenarios of plane combustion front evolution to new steady-state or oscillating structures are investigated. The results are expressed in terms of dimensionless parameters.

СОЦИАЛЬНО-ГУМАНИТАРНЫЕ НАУКИ

УДК 821.161.3'04.091:81'25«14/16»

С. Л. ГАРАНІН

ПЕРАКЛАДЫ РЭЛІГІЙНАЙ ЛІТАРАТУРЫ Ё XVI СТ. У ВКЛ*(Прадстаўлена акадэмікам У. В. Гніламёдавым)**Цэнтр даследаванняў беларускай культуры, мовы і літаратуры НАН Беларусі, Мінск**Паступіла 16.06.2014*

У канцы XIV–XVI ст. актывізацыя перакладчыцкай і пісьмовай справы на ўсходнееўрапейскім культурным арэале, у рэчышчы якой не толькі адбываецца дзейнасць Ф. Скарыны, С. Буднага, В. Цяпінскага, але і ствараецца поўны тэкст царкоўнаславянскай Бібліі (1499 і 1581 гг.), звязваецца або з Другім паўднёславянскім уплывам, што паслужыў імпульсам для ажыўлення літаратурнага працэсу ў XIV–XV стст. [1; 2; 7], або з уздзеяннем на Беларусь заходнееўрапейскай гуманістычнай і рэфармацыйнай традыцыі, якая, як лічыцца, пераважна ўплывала на грамадскую думку краіны ў XVI ст. [3–6]. Інтэнсіўнасць уздзеяння гэтых процілеглых напрамкаў развіцця славеснай культуры на кананічную і ўвогуле на рэлігійную літаратуру была, вядома, неаднолькавай і найперш залежала ад канфесійнай прыналежнасці перакладчыкаў, мэт перакладу ці задач, пастаўленых замоўшчыкамі кніг. Тым не менш варта мець на ўвазе, што прыцыпы перакладу і рэдагавання кананічных тэкстаў у праваслаўным асяроддзі ВКЛ зазнавалі на працягу XV–XVI стст. пэўныя змены, абумоўленыя не толькі ўзорам заходнееўрапейскіх тэкстаў, але і пэўнымі трансфармацыямі самой кніжнай традыцыі Slavia Orthodoxa, якая налічвала да гэтага часу каля сямі стагоддзяў гісторыі. Да сённяшняга часу старабеларускія пераклады кананічных тэкстаў, выкананыя ў XVI ст., не сістэматызаваны адносна свайго гнэсеалагічнага зместу і прыналежнасці да агульнахрысціянскіх традыцый біблейскіх перакладаў.

Ужо пачынаючы з канца XIV ст. ажыццяўляюцца новыя або рэдагуюцца ранейшыя пераклады агіяграфічных і павучальных твораў, выпраўляюцца ў адпаведнасці са старажытнымі ўзорамі тэксты багаслужбовых кніг і да т. п. Аднак у дачыненні да Бібліі ўсходнеславянскія паслядоўнікі тырнаўскай кніжнай рэформы рэалізуюць толькі адну з існуючых канцэпцый перапісвання свяшчэннага тэксту.

Сапраўды, узнікненне Бібліі і фарміраванне канону з самага пачатку суправаджалася, як мінімум, дзвюма асноўнымі тэндэнцыямі ў развіцці грамадскай – ці, датычна нашай тэмы, рэлігійна-філалагічнай – думкі. Яшчэ ў IV ст. епіскап Ульфіла (прыхільнік арыянства) пераклаў Біблію на гоцкую, «варварскую», мову. У 405–406 гг. армянскі манах-асветнік Месроп Маштоц ажыццявіў пераклад Бібліі на старажытную армянскую мову, а да канца VI ст. Біблія была перакладзена ўжо болей чым на пяцьсот «варварскіх» моў. Гэтую тэндэнцыю можна ўмоўна назваць «асветніцкай». Яна ўзыходзіла да старажытнаіўдзейскіх таргумаў – перакладаў-тлумачэнняў сакральных тэкстаў, чым правамоцнасць гэтай традыцыі і абгрунтоўвалася. Як правіла, пераклады рабіліся ў неправаверным асяроддзі (арыянамі, нестарыянамі і інш.). У выніку недакладнасцей перакладаў і недасканаласці «варварскіх» моў сутнасць свяшчэннага тэксту скажалася. Таму ўжо ў 600 г. у Заходняй Еўропе выкарыстанне перакладных тэкстаў Бібліі было абмежавана Вульгатай, а пасля практычна забаронена. Вядома, забарона не была канчатковай і паслядоўнай,

часам Касцёл дазваляў рабіць пераклады (у XIII ст. Парыжскі пераклад на французскую мову, у XV ст. пераклады Нікола дэ Малербі на італьянскую, Анджэя з Яшовіц на польскую і інш.). Аднак актывізацыя «асветніцкай» тэндэнцыі падчас позняга Сярэднявечча і перадрэнесансу ў Еўропе была, несумненна, звязана з ерасямі. Развіццё аналітычнага мыслення, рацыяналізму, з'яўленне перадрэфармацыйных рухаў і абуджэнне самасвядомасці асобы вялі да спроб рабіць аўтарскія пераклады Бібліі яшчэ да пачатку Рэфармацыі (1380 г. Англіійская Біблія Дж. Вікліфа, Чэшская Біблія, Біблія Эразма Ратэрдамскага 1516 г. і інш.). У кантэксте нашага даследавання адзначым толькі два важныя аспекты: калі раннія пераклады Бібліі на «варварскія» мовы служылі прычынай ерасяў, то познія – самі з'яўляліся іх вынікамі, а з іншага боку, пашырэнне перакладаў на нацыянальныя мовы было звязана з фарміраваннем еўрапейскіх нацый і станаўленнем нацыянальнай самасвядомасці еўрапейскіх народаў.

Калі на Захадзе хрысціянізацыя адбывалася даволі рана і, па меншай меры, ужо з IX ст. без прамой залежнасці ад таго, былі кананічныя тэксты даступны масе веруючых ці не, то на Усходзе моўны фактар адыгрываў істотную ролю ў распаўсюджанні хрысціянства. Усходняя царква не забараняла рабіць пераклады кананічных кніг Бібліі на мовы, зразумелыя насельнікам Усходняй Еўропы. Так узніклі стараславянскі, грузінскі і іншыя пераклады. Аднак дазваленне на пераклад не азначала непасрэднага права на пераклад усяго тэксту Бібліі. Тэксты, рэкамендаваныя да перакладу, абмяжоўваліся тым фондам, які адлюстравалася ў славянскіх і старажытнарускіх апракасных Евангеллях і Псалтыры, Парамійніку, Палеі, некаторых дыдактычных зборніках, а таксама цытатах, уключаных у жыцці святых ці ў творы айцоў Царквы, служачы для патрэб набажэнства і элементарнага павучання веруючых. Верагодна, што візантыйцы не лічылі тэксты Бібліі не на старагрэчаскай мове «паўнацэннымі». Напрыклад, пры Васіліі II Балгарабойцы візантыйцы палілі стараславянскія кнігі, нягледзячы, што гэтыя кнігі належалі адзінаверцам. Магчыма, стараславянская мова дапускалася Канстанцінопальскім патрыярхам для перакладу Бібліі ў якасці, так бы мовіць прамежкавай, прызначанай для акармлення і павучання «немаўлят у веры», якім адрасаваўся толькі мінімум звестак. Зразумела, што з «асветніцкай» тэндэнцыяй хрысціянскага Захаду гэты падыход меў мала агульнага.

Таксама і старажытная Русь не атрымала поўнага спісу вялікай Кнігі. Варта здзіўлення і ўдумлівага асэнсавання тое, што рэлігійная культура ўсходнеславянскага Сярэднявечча, згодна з уяўленнямі якой свяшчэнныя тэксты ўтрымлівалі ўсе даступныя пазнанню звесткі пра вышэйшую ісціну, а сам Сусвет, яго мінулае, яго цяперашняе і будучае разумеліся толькі ў біблейным кантэксте – гэтая тэацэнтрычная па самой сваёй сутнасці культура не ведала поўнага тэксту Бібліі на даступнай мове болей за пяцьсот гадоў свайго існавання!

Зразумела, што паколькі з'яўленне самой Септуагінты было ахутана легендай і лічылася вынікам Боскага Адкрыцця, то іншыя пераклады такой святасці не мелі, і ніякія доказы адносна Боскага паходжання любых, у тым ліку і Кірыла-Мяфодзіўскага, перакладаў прымацца да ведама не маглі. Царква чакала Адкрыцця... І, мусіць, ужо толькі пасля Грыгорыя Паламы тырнаўцы ўсё сур'ёзнай пачалі меркаваць і верыць, што і старажытныя, з іх погляду, славянскія тэксты таксама з'явіліся ў выніку асаблівага Боскага дабрадару. Не будзе перабольшаннем сказаць, што яўфіміеўская рэформа была ў многіх адносінах кансервацыяй асвячонах традыцыяй тэкстаў з усімі адпаведнымі наступствамі (дарэчы, не адпаведнымі асновам ісіхасцкага вучэння) і містычнай сакралізацыяй самой мовы, на якой гэтыя тэксты былі напісаны.

Як вядома, ісіхасты былі схільнымі да абмежавання кампетэнцыі разумовых здольнасцей пазнаннем тварнага свету. Ісціна, сапраўдныя веды, Фаворскае святло адкрываліся «па веры», а не ў выніку разумовага аналізу тэксту. Ад праваслаўнага чалавека на ўсходзе Еўропы патрабавалася моцная вера, а не якое-небудзь рацыянальнае веданне пра Бога, атрыманае ва ўніверсітэце ці ў школе. Паколькі веры і ісціне нельга навучыцца (бо яны даюцца ў сінергіі, у «працы духоўнай» і ў Адкрыцці), то ўрэшце і ўся пісьменнасць, кніжнасць, рэлігійная навука зрабіліся ў справе выратавання душы дапаможным, а пасля і зусім не галоўным сродкам. Ад праваслаўнага свяшчэнніка патрабавалася верыць і служыць, а не разумець і тлумачыць. Веды, рацыяналізм, філасофія ды і ўсякая «свецкая» навука асацыяваліся з элінскай і д'ябальскай хітрасцю, вучэнне – з дзёрзкай і самачыннай дзейнасцю без Бога і ўрэшце супраць Бога. Уласныя разважанні пра

веру, Царкву і чалавека аказваліся непатрэбнымі дзеля выратавання. У выніку ў праваслаўным асяроддзі развілася знявага да адукацыі, недавер да эмпірычных ведаў, у тым ліку і багаслоўскіх. Даволі хутка многія праваслаўныя свяшчэннікі сталі непісьменнымі; да 30–50-х гадоў XVI ст. непісьменнасць сярод духавенства ВКЛ мела ўжо амаль татальны характар, што пагаршалася ўнутрыпалітычнымі акалічнасцямі. У Расіі справы абстаялі не лепей. Аднак Ферара-Фларэнтыйская ўнія, падзенне Візантыі, вызваленне ад мангола-татарскай навалы, укараненне тэорыі “Масква – трэці Рым”, няспраўджанне эсхаталагічных чаканняў і іншае вывелі былую ўскраінную мітраполію на лідуючыя пазіцыі ў праваслаўным свеце. У XV ст. Масква атрымала абсалютна законнае права самастойна меркаваць адносна рэлігійных пытанняў. Але галоўнага тэксту яна так і не мела, хаця магла самастойна вырашаць, патрэбны ён, ці не. Пачалі выкарыстоўвацца розныя спосабы выпраўлення кніг і ажыццяўлення перакладаў. Прыгадаем імя Максіма Грэка, які стварыў па тым часе цэлую (дарэчы, вельмі слушную) тэорыю перакладу, гісторыю стварэння Генадзьеўскай Бібліі. Пры гэтым трэба мець на ўвазе, што пераклад рабіўся на царкоўнаславянскую, а не на старажытнарускую мову. Праўда, царкоўнаславянская і ў XV і ў XVI ст. была добра зразумелай як па прычыне сваёй агульнаславянскай асновы, так і ў выніку яе паслядоўнага выкарыстання ў Рускай царкве і ў пісьменстве Русі на працягу стагоддзяў. Ва ўсім гэтым адлюстроўвалася традыцыя ашчаднага стаўлення да біблейскага тэксту, падыход да яго як да святыні, чаканне Богага Адкрыцця, малітва аб ім і спадзяванне на яго – традыцыя, характэрная для ўсяго ўсходняга хрысціянства, якая наўрад ці можа быць суаднесена з “ахоўнай” традыцыяй каталіцкага Захаду.

Але з’яўленне ерасей на Русі выклікала тыпова іншае стаўленне да біблейскага тэксту: ён стаў прадметам аналізу, сродкам пацверджання ўласных думак пра свет і наваколле, аб’ектам смелага перакладу і вытлумачэння. Ератыкі не пакінулі ў Расіі значнага сляда, бо іх сачыненні за рэдкім выключэннем былі знішчаны яшчэ ў XV ст. Але на тэрыторыі ВКЛ яны маглі адносна вольна распачаць сваю філалагічную дзейнасць, не тоесную, але суадносную з “асветніцкай” традыцыяй перакладаў Бібліі ў Заходняй Еўропе. Каля другой паловы XV ст. у гуртках рэлігійных вальнадумцаў, што абаснаваліся на Украіне, ажыццяўляліся першыя спробы перакладу Бібліі на ўкраінскую мову. Найранейшы з вядомых зараз стараўкраінскіх тэкстаў датуецца 1489 г., і напрыканцы стагоддзя з украінскіх перакладаў пачалі рабіцца даўнябеларускія спісы. У сярэдзіне – другой палове XVI ст. пераклады і рэдагаванне тэкстаў рабілася свецкімі людзьмі і дробнымі клірыкамі розных, пераважна пратэстанцкіх, вызнанняў на «руську мову» – старабеларускую і стараўкраінскую, якія ўступілі ў канкурэнцыю з царкоўнаславянскай. Беларускія перакладчыкі ажыццяўляюць наноў пераклад асобных тыпаў Псалтыра, нагледзячы на разначытанні ў саміх псалмах; Сергій Кімбар “переглаживал и прилагал” Евангелле на мову, блізкую да народнай і г. д.

Але ў дзейнасці даўнябеларускіх бібліеістаў паралельна развіваліся два працэсы: пераклады некаторых тэкстаў на беларускую мову (што называлася перакладчыкамі “рускай”) і пераклады на царкоўнаславянскую (якую называлі “славенской”) з улікам выпрацоўкі беларускага варыянта апошняй. У царкоўнаславянскіх тэкстах таго часу нярэдка сустракаюцца беларускія глосы, што сведчыць пра адноснае ўзаемадзеянне дадзеных тэндэнцый, бо калі філалагічныя прынцыпы былі рознымі, то гнасеалагічныя ў многім супадалі. Напрыклад, у 1502–1507 гг. у Вільні і ў Супрасльскім манастыры па замове пісара вялікага князя літоўскага Фёдара Янушкевіча ствараецца “Дзесятаглаў” Мацея Іванавіча. Вядома, Мацей Дзясяты выступіў як перапісчык і часткова рэдактар і ілюстратар кодэкса. Нягледзячы, што тэкст Мацея Дзясятага – даволі дасканалы царкоўнаславянскі, праца, праведзеная ім, сведчыць пра змену самога стаўлення да свяшчэннага тэксту. Біблія яшчэ разумеецца старабеларускім кніжнікам як кніга Боскага паходжання, але Адкрыццё, змешчанае ў ёй, павінна быць патлумачана, раскрыта асобным дасведчаным чалавекам для іншых, малаадукаваных людзей. Вось чаму Мацей змяшчае ў “Дзесятаглаве” вялікае аўтабіяграфічнае паведамленне, быццам абгрунтоўваючы сваё асабістае права на рэдагаванне і перапрацоўку тэксту (абсалютна недапушчальную стагоддзем раней). Паводле шчырага прызнання Мацея, здольнасць да стварэння кніг дадзена яму звыш, але матыў яго дзейнасці ўжо ў многім антрапацэнтрычны (“*восхоте* напісати своею рукою”). Ісціна выступае адной вялікай загадкай,

адгадку на якую перапісчык ведае і паслядоўна выкладае яе на зразумелай пісьменным людзям мове. Змест гэтай “адгадкі” па-большасці маральна-этычны, у нечым блізкі да народнай жыццёвай мудрасці, зафіксаванай у прыказках і прымаўках. Нездарма Мацей змяшчае ў кодэксе разам з Бібліяй “Кнігу Менандра”. Запаветы Хрыста і мудрасць Менандра нібыта ўраўнаважаны. Тым самым свяшчэнны тэкст выступае ўжо не аб’ектам пакланення і шчырай веры, а шараговай, хаця і вельмі аўтарытэтай і карыснай кнігай – аб’ектам аналізу і вытлумачэння “па частках”, г. зн. у нечым дэсакралізуецца.

Натуральна, што ў гнесеалагічных адносінах перакладчыцкія пачынанні Францыска Скарыны адпавядалі дадзенай тэндэнцыі стаўлення да біблейскага тэксту, прыносячы ў дадзеную тэндэнцыю гуманістычна-рэнесансавы складнік. А ў адносінах філалагічных Ф. Скарына аб’ядноўваў імкненне адных перакладаць на “рускую мову” і імкненне іншых пісаць “словенскім языком”.

Спроба адрадзіць даўнюю традыцыю *Slavia Orthodoxa* не магла быць ажыццёўлена ў межах вызначанай вышэй тэндэнцыі, хаця і ўплывала на яе. Спадчына старажытнай Русі выкарыстоўвалася тут толькі як матэрыял у большым ці меншым адрыве ад гнесеалагічных пачаткаў, якімі абумоўлівалася ўзнікненне самога гэтага матэрыялу. Вядома, зварот да айчыннай старажытнасці таксама быў па сутнасці з’явай адраджэнскай, але напрамак гэтага адраджэння быў іншым, чым на Захадзе. Мяркуем, што працяг Кірыла-Мяфодзіўскай традыцыі перакладу Бібліі быў звязаны з апасродкаванай уплывам Максіма Грэка своеасаблівай спробай “рэстаўрацыі” раннесярэднявечнага разумення сутнасці, межаў і напрамку творчасці і належаў А. М. Курбскаму і К. К. Астрожскаму.

Ужо першыя сутыкненні праваслаўных з католікамі і пратэстантамі, сведкам якіх стаў маскоўскі бягляк, адкрылі яму гаротнае становішча царкоўнаславянскай адукацыі і кніжнасці. А. Курбскі паспрабаваў знайсці праваслаўных знаўцаў царкоўнаславянскай мовы і лаціны, аднак яго пошукі не далі станоўчых вынікаў: ён стасавалася з ератыком старцам Арцеміем, сабраў некалькі адносна пісьменных людзей, а пасля сам у саракагадовым узросце засеў за вывучэнне лацінскай мовы і іншых гуманітарных навук пад кіраўніцтвам выпускніка Кракаўскага ўніверсітэта Амброжыя. У прадмове да «Новага Маргарыта» князь Андрэй сфармуляваў свае перакладчыцкія прынцыпы, якія фактычна паўтаралі перакладчыцкую тэорыю Максіма Грэка, паслядоўнікам якога А. Курбскі сябе лічыў. Менавіта рэкамендацыямі Максіма ён кіраваўся ў падборы твораў для перакладу, і таму «Новы Маргарыт» не меў амаль што нічога агульнага са старым, старажытнарускім «Маргарытам». Тым часам А. Курбскі накіраваў у Кракаў, а пасля ў Італію яшчэ аднаго рускага эмігранта – князя Міхаіла Андрэевіча Абаленскага-Нагаткова. Вяртанне М. Абаленскага дазволіла А. Курбскаму вызваліцца з-пад апёкі Амброжыя і актывізавала новыя пераклады. Не пазней за 1577 г. на царкоўнаславянскую мову было перакладзена «Багаслоўе» Іаана Дамаскіна, адрэдагавана па лацінскім спісе «Аповесць пра Варлаама і Іасафа», а пасля заўчаснай смерці маладога папчэчніка – «Дыялектыка», першая частка «Крыніцы ведаў», трактат «Аб сілагізме» пратэстанта Іагана Спангенберга. Нарэшце, у маёнтку Мілянавічы ўзнік скрыпторый (Ст. Вайшэўскі, пратапоп Сіла і інш.), у якім на мяжы 70–80-х гадоў XVI ст. быў перакладзены або адрэдагаваны цэлы корпус жыццёвай і павучальнай літаратуры, што належаў рэдакцыі візантыйскага пісьменніка Сімяона Метафраста і рэкамендаваўся для чытання Максімам Грэкам. Пераклад Сімяона Метафраста ўзнік паралельна з кнігай Пятра Скаргі «Жыцці святых» і стаў фактычна раўнаважным адказам праваслаўных каталіцкаму аўтару, прычым, як і Скарга, А. Курбскі ажыццяўляў пераклад з лацінамоўнага тэксту каталіцкага аўтара Лаўрэнція Сурыя.

Па смерці князя Андрэя і яго скрыпторый, і ўтвораны гурток кніжнікаў, і адукацыйныя пачынанні праіснавалі нядоўга, але гэта была першая спроба стварыць адукацыйны асяродак з пэўнай асветніцкай мэтай і канкрэтнай праграмай дзейнасці. Набыткі маскоўскай літаратурна-філалагічнай школы архіепіскапа Генадзія і Максіма Грэка, узбагачоныя дзякуючы элементам заходняй адукацыі, увайшлі пасля А. Курбскага ў дзейнасць Астрожскага гуртка, а таксама Віленскага і Львоўскага брацтваў, якія мелі свае друкарні.

Менавіта ў гэтым асяроддзі не толькі ажыццяўляліся пераклады кананічных тэкстаў, вяршыняй якіх стала стварэнне Астрожскай Бібліі 1581 г., але і ўзнікла «Граматыка» Мялецця Смятрыцкага (1617 г.), якая працяглы час служыла галоўным падручнікам па мове ва Усходняй Еўропе. Сваё завяршэнне дадзеная тэндэнцыя знайшла ў дзейнасці Кіева-Магілянскай акадэміі ўжо ў XVII ст. Гэта азначае, што абноўленая традыцыя *Slavia Orthodoxa* выступіла адным з напрамкаў развіцця перакладчыцкай справы ў ВКЛ – напрамкам, які па сваіх прынцыпах супрацьстаяў і ранейшым спробам перакладаў на “простую мову”, што рабіліся рэлігійнымі вальнадумцамі і гуманістамі (нават, калі пераклады ажыццяўляліся на царкоўнаславянскую мову), і перакладам, ажыццёўленым у рэчышчы рэфармацыйных школ Захаду (С. Будны і інш.).

Літаратура

1. *Алексютовіч М. А.* Скарына, яго дзейнасць і светапогляд. Мінск, 1969. – 152 с.
2. *Анічэнка У. В., Жураўскі А. І.* Беларуска-іншаславянскі сінкрэтызм мовы выданняў Францыска Скарыны. Мінск, 1988. – 36 с.
3. *Галенчанка Г. Я.* Францыск Скарына – беларускі і ўсходнеславянскі першадрукар. Мінск, 1993. – 280 с.
4. *Конан У. М.* // Гісторыя беларускай літаратуры XI–XIX стагоддзяў: У 2 т. Т. 1: Даўняя літаратура: XI – першая палова XVIII стагоддзя / навук. рэд. тома В. А. Чамярыцкі. 3-е выд., выпр. Мінск, 2010. С. 283–308.
5. *Немировский Е. Л.* Франциск Скорина: Жизнь и деятельность белорусского просветителя. Минск, 1990. – 597 с.
6. *Падокшын С. А.* Філасофская думка эпохі Адраджэння ў Беларусі: Ад Францыска Скарыны да Сімяона Полацкага. Мінск, 1990. – 288 с.
7. *Яскевіч А.* Падзвіжнікі і іх святыні: Духоўная культура старажытнай Беларусі / навук. рэд. Ул. П. Вялічка. Мінск, 2001. – 368 с.

S. L. HARANIN

hs65_2011@mail.ru

TRANSLATIONS OF RELIGIOUS LITERATURE IN THE XVI CENTURY IN GRAND DUCHY OF LITHUANIA

Summary

Different ontological and epistemological principles of understanding the source text form the basis of religious literature translations in the Grand Duchy of Lithuania. In the community of religious freethinkers they were the subject of analysis, individual interpretation and exemplary retelling based on a variety of sources. Striving of the representatives of official religious denominations (Maciej X, deacon Fyodor) who understood the translated text as revelatory for a consistent explanation of the truths contained therein embodied in the translation into Church Slavonic and other Slavic languages. Representatives of the major currents of Reformation used the canonical texts as a means of confirming their theories and propaganda and resorted to simplified translations. Abundance and imperfections of the texts arising in the XVI century pushed A. Kurbsky, K. Ostrozhsy and other Orthodox translators to search and attempt to revive the translation tradition of Cyril and Methodius which was substantially updated and developed in the XV century by Maxim the Greek.

UDC 947.6“1941/1944”:930.1(420+73)

Ya. P. BEZLEPKIN

THE HISTORY OF BELORUSSIA DURING THE GREAT PATRIOTIC WAR IN AMERICAN AND BRITISH HISTORIOGRAPHY

(Communicated by Academician M. P. Kostyuk)

The Institute of History, Minsk

Received on 16.06.2014

The history of the Great Patriotic War always interested historians, but such world processes as the liberal relation to neo-fascist ideology, increased popularity of nationalism, the weapon used as a means of interstate problems solution – all of these made the subject urgent. So the development of a historiography of the USA and Great Britain concerning the history of Belorussia during the period of 1941–1944 is of great interest in this context.

Since the beginning of the 1950s a lot of works of the former German generals with real fighting experience on the Soviet-German front in 1941–1944 were published under the auspices of US State department, the CIA and the Air Force. Besides, the American army published some collections, prepared by the former German generals and officers, about events on the Eastern Front and in rear army areas, about activity of partisan and anti-partisan operations. The first authors were the former Wehrmacht generals who had a first-hand experience of participation in military operations, or took high military rank in the Nazi Germany (W. Varlimont, H. Guderian, A. Kesselring, E. Manstein, O. Skorzeny, K. Tip-pelskirch, etc.) [1, p. 29]. These works reflected mainly personal assessment of separate aspects (an assessment of military decisions of Hitler, planning and carrying out combat actions, material support in fronts, comparison of ratios of human and material resources of the Red Army and Wehrmacht, etc.). Cooperation of leading American military establishments and the former generals of the Wehrmacht made decisive impact on the subsequent assessment of a contribution of the USSR, as well as Belorussian contribution to the victory over fascism. For the first time in western historiography the German generals also voiced thought of minor influence of the Soviet-German front on the general course of World War II.

Works of 150 former generals and officers of the German General Staff under the auspices of historical department of the American army in Europe (EUCOM) and the US army Center for military history in Washington, aspiration of the western powers, first of all the USA and Great Britain, to admit Federal Republic of Germany to the military-political block of NATO (it was done on May 9, 1955), fight against dissent in the USA, the so-called “McCarthyism” – all this push studying of the role of the USSR (and Belorussia as one of the republics) in World War II, influence of fights on the Soviet-German front on the general course of war to the background. Actually it laid the foundation for a germanocentric position of all English-speaking historiography of the USA and Great Britain on the history of Belorussia during the Great Patriotic War.

It should be noted, that in 1948 the British military theorist major general J. Fuller published “World War II history, 1939–1945. Strategic and tactical history” in which the author perspicaciously warned about danger of excessive trust to reports and memoirs of the German generals and officers, and criticized concepts which only arose inside the American military establishments and the so-called “think tanks” (the group of experts which represents the ideas concerning political, social and economic problems) [2, p. IV].

Today these preventions of J. Fuller, who didn't share sympathy for the USSR, can be called as the historiographic forecast, because concepts about Hitler's preventive war against the USSR, “the theory

of decisive battles”, the theory about decisive influence of climatic factors on a course of operations in the east, “the totalitarian theory” and a number of others had considerable impact on the formation of theoretical and methodological bases of the historiography of the USA and Great Britain concerning the research of the Belorussian history during the Great Patriotic War.

The Nazi occupational regime and collaboration as its component, as well as the Soviet partisan movement were among the most important subjects in the works of Western researchers. What was the reason, that ideology influenced a lot on researches on these subjects? The answer was given by the known American researcher, a professional historian and a politician, an employee of strategic services of the USA in the years of World War II, and later a professor of the Columbia University and a special adviser to the president J. Kennedy A. Schlesinger-Jr. “...big “cold war” – between communism and democracy – generated small “cold war” – between historians” [3, p. 237].

The specific place in the Anglo-American historiography is taken by work of the British researcher, in the past – the foreign affairs journalist A. Werth “Russia in war 1941–1945” (1964) [4]. Within one book the author managed to give an exhaustive idea of background of World War II with its diplomatic games, the Great Patriotic War course, patriotism of the Soviet people in the Home Front and at the front line, the due attention was paid also to wartime events in the territory of Belorussia. In this work A. Werth combined macro- and microhistory that allowed him to avoid a fragmentariness, which is the weak point of the modern historiography of the USA and Great Britain on the subject of the Great Patriotic War, as well as Belorussian history. Later the tendency on gradual refusal of germanocentric views and approaches was continued in works of British military historians A. Clark [5] and A. Seaton [6]. These authors devoted much attention to the analysis of the Red Army offensive operations in 1943–1944 in the occupied territory of Belorussia.

Fundamental changes in studying of combat actions in the territory of Belorussia in the second half of 1943–1944 are connected with the name of the well-known British military historian J. Erickson. The major factors which prevented the American and English researchers from studying the Great Patriotic War, were the ignorance of the Russian language and lack of access to the Soviet archival materials. The access of this researcher to the Soviet archives was considered by the Soviet authorities, and after studying of his work “The Soviet Supreme command: political and military history, 1918–1941” J. Erickson received permission. A long-term work on the received Soviet archival materials resulted in fundamental works published in 1975 and 1983 accordingly [7; 8]. These facts from the scientific biography are not only the description of important milestones in life of one researcher, but in fact – the evidence of origin of the new period in development of an Anglo-American historiography on Soviet history 1941–1945. For the first time after A. Werth’s book the works written not from germanocentric positions in the West were published.

The work “The road to Berlin. Stalin war with Germany” by J. Erickson is atypical example of the academic publication on military history. Unlike the previous authors, this researcher gives a panoramic picture of military events on the Soviet-German front, skillfully combining the German and Soviet documentary sources and memoirs of military leaders; British, American, German and Soviet monographs. The operation “Bagration” is considered by the author from the moment of its planning, practical preparation and a real embodiment.

“One week after the opening of the Soviet offensive, the first phase of the battle for Belorussia ended; with the fall of Vitebsk, Orsha, Moghilev and Bobruisk, the German defensive system of the central sector of the Soviet-German front had cracked wide open”, – the author emphasized importance of this operation and its influence on a further course of operations for liberations of countries of Eastern Europe [8, p. 224]. “When Soviet armies shattered Army Group Centre, they achieved their greatest single military success on the Eastern Front. For the German army in the east it was a catastrophe of unbelievable proportions, greater than that of Stalingrad”, – J. Erickson concluded [8, p. 228].

D. Glantz, an American researcher, continued a tendency on wider use of the Soviet sources and the critical view concerning the tendentious German concepts. It is characteristic, that both J. Erickson and D. Glantz once were cadremen, both read lectures in military colleges and army schools of Great Britain and the USA respectively, both knew Russian perfectly well, both entered an editorial board of “The Journal of Slavic Military Studies”, both were lucky to work with the Soviet archives.

During Gorbachev and Yeltsin era many archival establishments of the USSR and later the Russian Federation provided services in search, copying, processing of the Soviet archival materials on a commercial basis. Under such circumstances after collapse of the USSR D. Glantz, earlier the head of US Army Soviet Military Studies Office in Leavenworth, Kansas, got access to previously secret documentary sources. From 1990s this American historian became the largest expert in the West on the Great Patriotic War history. His works became widely known on both sides of Atlantic for the introduction of a big number of factual information [10; 11].

Nevertheless, D. Glantz took the vast majority of the facts from the Soviet sources (monographs, scientific collections, memoirs, archives). His work “Belorussia 1944: The Soviet General Staff Study”, published at the same time in the USA and Great Britain in 2001 (2nd edition in 2004) [11], was the translation of the Soviet edition under a signature stamp “confidentially” “Research of the Soviet General Staff No. 18” (1944) which was intended only for official duties of the Soviet military staff.

The western historians also paid much attention to the Soviet partisan movement. Among the most important works by N. Vakar, A. Dixon, O. Heilbrunn, A. Dallin, R. Mavrogordato and E. Ziemke, B. Shepherd, J. Megargee, E. Howell, K. Slepian.

It should be noted, that the collection “Soviet Partisans in World War II” [12], edited by J. Armstrong, published on materials of the “Alexander” project by the Columbia University and the US Air Force, had a strong ideological component. The authors of the collection used the methodology of political sociology according to which partisan movement was considered as one of subjects of the Soviet system in the occupied territory of the USSR. The most part of the book was devoted to the analysis of the Soviet partisan movement as system of political control of the population. For this reason the analysis of partisan movement on the example of the Polotsk lowland contains not enough information on military progress of the Belarusian partisans and scales of their activity in Belorussia.

The work “The Soviet partisan movement, 1941–1944» by E. Howell was devoted to general offensive of the Red Army and coordination of the activity between partisan formations [13]. The main attention was paid to the analysis of combat actions throughout 1943 and January – June, 1944. What concerns the beginning of 1943, the author noted, that the greatest number of partisan formations was concentrated in three areas: the region of Polotsk swamps, the big forest area to the west from the line of Mogilev-Orsha-Vitebsk and Orel-Bryansk. By the end of March, 1943, according to this author, there was whole line created from partisan groups in the area of Bryansk–Orel–Vitebsk–Orsha–Bobruisk–Gomel. Based on the German sources, the author counted 34 separate partisan groups on lines Gomel–Orel 28 thousand people in total. To the west from Gomel there were 26 smaller groups with 7500 people in total. In the area of Orsha–Vitebsk–Nevel 37 partisan groups, 31 thousand, conducted combat actions. As a whole according to the German documents there were about 57800 partisans in an operational zone of German Army Group Centre by March 15, 1943. [13, p. 147–148].

It should be noted, that E. Howell’s work about a role of the Soviet partisan movement was one of the few works of such kind which was released by US Army and was distributed for obligatory studying in the American fighting divisions, military schools and establishments for training of the American officers in tactics and strategy of irregular forces, conducting war of nerves against the enemies («truth campaigns» – as it called in the USA), including analysis of the Soviet partisan movement in Belorussia during the Great Patriotic War.

In 1988 US army Major R. Glenn published the monograph «Soviet Partisan Warfare: Integral to the Whole « [14]. The value of this work is connected with system approach to the study of the Soviet partisan movement role, first of all during the Belarusian offensive «Bagration». According to the American author, «partisan activity in Belorussia had been evident as early as July 5, 1941 (this day M.F. Shmyrev’s first partisan group was created in Vitebsk region, however some days before it on June 28, 1941, there was the first fight with Germans of partisan group «Komarova» under the command of V. Z. Korzh – the remark by the author)» [14, p. 25]. Based on previously published documentary materials and monographs, R. Glenn came to a conclusion that on the eve of June 23, 1944 «partisan strength in Belorussia was approximately 140,000 (the calculation technique is not explained – the remark of author) in 150 brigades and 49 separate detachments... 90 % of all partisans in the Soviet Union [14, p. 26].

Estimating a general meaning of activity of the Belorussian partisans, R. Glenn came to a conclusion that «The partisans in Operation Bagration were integral to the force that crushed Army Group Center» [14, p. 33].

The Belorussian partisans participated not only in combat operations against the German invaders. The British historian B. Shepherd gave examples in his book «War in the wild East: the German army and Soviet partisans» when partisans successfully ruined economic plans of Nazis in Gomel region (areas near Korma and Chechersk) [15]. According to the reports of the German 221st Security Division (it fought in Belorussia during wartime period) from US National Archive, the supply points could be protected from partisan attacks only in the main towns [15, p. 181]. Nazis plans for labor export to Germany were also ruined. B. Shepherd gave excerpt from the report of Intelligence Sector of the 221st Security Division: «...despite every conceivable propaganda effort by the division itself, the population's resistance [to labor service] was so strong that the recruitment in July 1943 of the 1925–1926 year groups was a total failure in most areas of the division's jurisdiction» [15, p. 182].

In 1994 at the university of Michigan (USA) K. Slepian defended the dissertation «The people's avengers»: Soviet partisans, Stalinist society and the politics of resistance, 1941–1944» [16], 9 years later the same author published a research «Why they fought: motivation, legitimacy and the Soviet partisan movement» [17]. Works by K. Slepian destroy the stereotypes approved in a historiography of the USA and Great Britain about motivation, the purposes and tasks of the Soviet partisans, scales of their activity. Analyzing the reasons of emergence of the Soviet partisan movement, the American author came to a conclusion: «They did not recognize that the partisans fought for a variety of reasons, and that for many, the very presence of the Germans in their country, was reason enough to fight» [17, p. 29].

The similar idea was expressed recently by the American military historian R. Reese in «The Journal of Slavic Military Studies» when he noted, that «perhaps the most fundamental reason why Soviet citizens fought was that their country had been invaded. ... People could then justify fighting for their homes, villages, towns, cities, the very soil of Belorussia, Ukraine, and Russia against a foreign invader. ... It is impossible to gauge how many people actually thought about their relation to the state, but recent works of social history make it clear that many did» [18, p. 268]. The author came to a conclusion that «Soviet patriotism was real, but for many it did not equate with support for the Stalinist system...» [18, p. 282].

The opinions, expressed by K. Slepian and R. Reese, are naturally determined as these authors knew about the latest foreign, Soviet and modern Russian works on patriotism. The American and British researchers for last decades analysed the various aspects of activity of the Belorussian partisans – from military (A. Dixon, O. Heilbrunn, E. Howell, R. Glenn) and political (J. Armstrong, R. Mavrogordato, E. Ziemke) to economic (B. Shepherd) and patriotic (K. Slepian, R. Reese). One of the most prominent American archivists T. Mulligan used the expression «the partisan republic» concerning partisan zones in the territory of Belorussia [19, p. 142].

There are also cardinal different views at modern historiography of the USA and Great Britain. For example, the American historian, the graduate of Russian Institute at Harvard University, and the teacher of the Central European university in Budapest (Hungary) A. Rieber tried to present the Great Patriotic War events as «the Soviet civil wars 1941–1947» [20, p. 162]. There are a lot of similar examples.

To sum it up, the historiography of the USA and Great Britain had a difficult evolutionary way which was characterized by influence of both scientific, and extra scientific factors in the history of Belorussia of the Great Patriotic War period. The strongest positions were held by researchers who support a germanocentric position. From 1960s there were the Western historians, representatives of so-called «Soviet school of a military historiography in the West» who had neutral views. «War» between historians of these different views still determines a scientific landscape of an English-speaking historiography concerning the history of Belorussia during 1941–1945.

Literatura

1. *Rzheshesky O. A.* Voina i istoriya: burzhuaznaya istoriografiya SShA o vtoroy mirovoy voine. M.: Mysl', 1984. – 333 p.
2. *Fuller J. F. C.* The Second World War, 1939–1945. A strategical and tactical history. London: Eyre & Spottiswoode, 1948. – 431 p.

3. *Shlezinger A. M.* Tsikly amerikanskoy istorii. M.: Progress-Akademiya, 1992. – 688 p.
4. *Werth A.* Russia at War 1941–1945. London, 1964. – 1100 p.
5. *Clark A.* Barbarossa. The Russian-German conflict, 1941–1945. New York: William Morrow and Company, 1965. – 468 p.
6. *Seaton A.* The Fall of Fortress Europa, 1943–1945. London, 1981. – 628 p.
7. *Erickson J.* The road to Stalingrad. Stalin's war with Germany. New York: Harper Row, 1975. – 594 p.
8. *Erickson J.* The road to Berlin. Stalin's war with Germany. London: Weidenfeld a. Nicolson Ltd, 1983. – 877 p.
9. *Glantz D., House J. M.* When Titans Clashed. How the Red Army Stopped Hitler. Lawrence, 1995.
10. *Glantz D.* Colossus reborn: the Red Army at war, 1941–1943. Kansas: University University Press of Kansas, 2005. – 807 p.
11. *Glantz D., Orenstein H.* Belorussia 1944: The Soviet General Staff Study. London: Frank Cass, 2001.
12. Soviet Partisans in World War II / ed. J. Armstrong. Madison: The University of Wisconsin Press, 1964. – 792 p.
13. *Howell E.* The Soviet Partisan Movement 1941–1944. Washington: Department of the Army, 1956. – 217 p.
14. *Glenn R.* Soviet Partisan Warfare: Integral to the Whole. School of Advanced Military Studies U.S. Army Command and General Staff College, 1988. – 47 p.
15. *Shepherd B.* War in the Wild East: the German Army and Soviet Partisans. Cambridge, 2004. – 300 p.
16. *Slepyan K.* «The people's avengers»: Soviet partisans, Stalinist society and the politics of resistance, 1941–1944: thesis of dis. Ann Arbor, 1994. – 539 p.
17. *Slepyan K.* Why they fought: motivation, legitimacy and the Soviet partisan movement. Washington: The Nat. Council for Eurasian a. East Europ. Research, 2003. – 31 p.
18. *Reese R. R.* Motivations to Serve: The Soviet Soldier in the Second World War // The J. of Slavic Military Studies. 2007. N 2. P. 263–282.
19. *Mulligan T.* The Politics of Illusion and Empire. German Occupation Policy in the Soviet Union 1942–1943. New York: Praeger, 1988. – 206 p.
20. *Rieber A. J.* Civil Wars in the Soviet Union // Kritika: Explorations in Russian a. Eurasian History. 2003. Vol. 4, N 1. P. 129–162

Ya. P. BEZLEPKIN

byazlepkin@gmail.com

THE HISTORY OF BELORUSSIA DURING THE GREAT PATRIOTIC WAR IN AMERICAN AND BRITISH HISTORIOGRAPHY

Summary

The article is devoted to the evolution of historiography of the USA and Great Britain concerning the history of Belorussia during the Great Patriotic War. The most important subjects in English-speaking researches are shown. The scientific and extra scientific factors which influenced on the western scientific works are noted. The author analyzed approaches of various scientific schools, their strong and weak sides.

РЕФЕРАТЫ

УДК 512.542

Ядченко А. А. **О факторизации π -разрешимых неприводимых линейных групп** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 5–11.

В работе доказано наличие определенных факторизаций конечных π -разрешимых абсолютно неприводимых линейных групп степени $n < 2|H|$ над полем нулевой характеристики с π -холодовой TI -подгруппой H непримарного нечетного порядка, не являющейся нормальной.

Библиогр. – 14 назв.

УДК 519.6+517.983.54

Забрейко П. П., Матысик О. В. **Теорема М. А. Красносельского и некорректные линейные задачи с самосопряженным оператором** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 12–17.

В сообщении показано, как теорема М. А. Красносельского о сходимости последовательных приближений для уравнений с самосопряженными операторами с некоторыми естественными дополнениями содержит в себе основные результаты об итерационных методах приближенного решения некорректных линейных задач в гильбертовом пространстве.

Библиогр. – 13 назв.

УДК 519.63

Матус П. П., Туен В. Т. К., Гаспар Ф. Ж. **Монотонные разностные схемы для линейного параболического уравнения с граничными условиями смешанного типа** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 18–22.

Построены монотонные схемы для параболических уравнений со смешанными условиями. Кроме того, для них устанавливается важное следствие принципа максимума, на основании которого можно сделать вывод об устойчивости алгоритма в равномерной норме. В основе конструкции лежит идея использования полущелых узлов в граничных точках задания краевых условий второго или третьего рода. Полученные результаты обобщаются на построенные аналогичные алгоритмы для одномерных уравнений пороупругости.

Ил. 1. Библиогр. – 7 назв.

УДК 513.51

Ровба Е. А., Дирвук Е. В. **Об одной квадратурной формуле интерполяционно-рационального типа по узлам Чебышева–Маркова** // Докл. НАН Беларуси. Т. 58, № 5. С. 23–29.

В настоящей работе рассматривается квадратурная формула, построенная на основании квази-интерполирования рациональными функциями типа Эрмита–Фейра, ортогональных на отрезке $[-1, 1]$ по весу $1/\sqrt{1-x^2}$. Найдены явные выражения для коэффициентов рассматриваемой квадратурной формулы типа Лобатто. Изучены некоторые свойства построенных квадратурных формул, в частности, получена оценка скорости приближения рассматриваемой квадратурной формулы. Сравнение скорости приближения различными видами квадратурных формул проиллюстрировано на конкретном примере.

Табл. 1. Библиогр. – 6 назв.

УДК 517.986

Антоневич А. Б., Глаз А. Н. **Квазипериодические алгебры, инвариантные относительно линейного отображения** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 30–35.

В работе рассмотрена следующая задача. Пусть \mathcal{A}_0 есть некоторая квазипериодическая подалгебра в алгебре почти периодических функций на \mathbb{R}^m и $\alpha: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\alpha(x) = Mx$, – линейное отображение, задаваемое квадратной матрицей размера m . Существует наименьшая замкнутая подалгебра \mathcal{A}^+ , содержащая \mathcal{A}_0 и инвариантная относительно α , и существует наименьшая замкнутая подалгебра \mathcal{A} , содержащая \mathcal{A}_0 , инвариантная относительно α и α^{-1} . В работе получены условия на линейное отображение α , при которых эти подалгебры являются квазипериодическими.

Библиогр. – 8 назв.

УДК 517+530.1

Жестков С. В. **Новый анзац и точные решения обобщенной нелокальной оптической системы** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 36–39.

На основе прямого метода построены солитонные решения нелокальной оптической системы с постоянными и переменными коэффициентами.

Библиогр. – 4 назв.

УДК 621.762:71; 539.216; 538.951-405

Комаров Ф. Ф., Климович И. М., Зайков В. А., Пилько В. В. **Контролируемое нанесение Ti-Al-N покрытий методом реактивного магнетронного распыления** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 40–43.

Изучено влияние режимов нанесения покрытий Ti-Al-N, полученных методом реактивного магнетронного распыления, на их состав, структуру и механические свойства. Методом резерфордовского обратного рассеяния, растровой электронной микроскопии установлено значительное влияние условий осаждения на элементный состав и структуру покрытий. Доказано, что на них значительно влияют условия осаждения. Установлено, что наилучшими механическими свойствами обладают покрытия с глобулярной структурой стехиометрического состава.

Табл. 2. Ил. 2. Библиогр. – 7 назв.

УДК 539.12, 530.145

Курочкин Ю. А., Рыбак И. Ю., Шёлковый Д. В. **Когерентные состояния на орисфере трехмерного пространства Лобачевского** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 58, № 5. С. 44–48.

Показано, что благодаря разделению переменных в операторе Лапласа–Бельтрами (гамильтониане свободной квантовомеханической частицы) в орисферических и квазидекارتтовых координатах трехмерного пространства Лобачевского возможно введение стандартных когерентных состояний. Рассмотрены некоторые задачи (осциллятор на орисфере, заряженная частица в аналоге постоянного однородного магнитного поля, определенного в вышеупомянутых системах координат), введение когерентных состояний, для решения которых является особенно адекватным методом.

Библиогр. – 15 назв.

УДК 519.6

Белов М. А., Крылов Г. Г. **Полевое управление когерентным квантовым транспортом заряда в неупорядоченных нанопроволоках** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 49–53.

Рассматривается когерентный квантовый транспорт электрического заряда в модели изогнутой неупорядоченной нанопроволоки, в частности, вопрос управления проводимостью посредством приложения внешнего однородного электрического поля. Нанопроволока имеет изогнутую форму, вытянутую в направлении приложения продольного компонента поля. Для описания транспорта заряда используется модель Кронига–Пенни с неупорядоченным потенциалом рассеивающих центров и потенциалом внешнего электрического поля. В результате численного моделирования установлено, что коэффициент пропускания цепочки зависит экспоненциально как от продольного, так и от поперечного компонентов электрического поля в случае, когда соответствующая величина превышает некоторый пороговый уровень. При этом сам пороговый уровень для величины поперечного поля находится в линейной зависимости от величины продольного поля. Результаты проведенного численного моделирования открывают возможность использования электронных ключей, основанных на рассмотренном эффекте.

Ил. 5. Библиогр. – 15 назв.

УДК 535.37

Поведайло В. А., Яковлев Д. Л. **Спектры возбуждения флуоресценции струйно охлажденных оксалилгаллидов** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 54–61.

Изучены спектры возбуждения флуоресценции струйно охлажденных оксалилгаллидов (COF)₂ и (COCl)₂ и проведено сравнение с их спектрами поглощения в газовой фазе. Установлены особенности в динамике возбужденных состояний этих соединений: высокая эффективность флуоресценции молекул оксалилфторида, возбужденных на колебательные уровни b_g симметрии, и высокая эффективность безызлучательных переходов молекул, возбужденных на колебательные уровни a_g симметрии. В спектре оксалилхлорида обнаружена высокой интенсивности горячая полоса $7_0^2 8_0^1$.

Табл. 4. Ил. 5. Библиогр. – 18 назв.

УДК 530.1

Гончаренко А. М. **Распространение световых пучков в отрицательных селфоках** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 62–63.

Исследованы особенности распространения света в отрицательных селфоках. Характерной особенностью распространения света в отрицательных средах является обратное направление распространения фазового фронта.

Библиогр. – 7 назв.

УДК 547.792.4+544.15+544.18

Матулис Вадим Э., Григорьев Ю. В., Суханов Г. Т., Крупнова И. А., Ивашкевич О. А. **Стандартные энтальпии образования в газовой фазе и относительная устойчивость таутомерных форм С-алкокси-1,2,4-триазолов и изомерных N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов: квантовохимическое исследование** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 64–69.

С использованием современных методов квантовой химии выполнены расчеты стандартных энтальпий образования в газовой фазе таутомерных форм С-алкокси-1,2,4-триазолов (алкокси = OCH_3 , OC_2H_5 , $\text{Oi-C}_3\text{H}_7$, $\text{Oi-C}_4\text{H}_9$) и изомерных N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов путем построения изодесмических реакций и реакций изомеризации. Проведены расчеты относительных энергий Гиббса таутомерных форм и изомеров в водном растворе. Показано, что N_2 -таутомерные формы и N_2 -изомеры С-алкокси-1,2,4-триазолов характеризуются наименьшими значениями энтальпии образования, тогда как N_4 -формы наименее устойчивы в газовой фазе. Увеличение электронодонорных свойств заместителя приводит к большей стабилизации N_2 -таутомерной формы, по сравнению с соответствующим N_1 -таутомером. В водном растворе N_1 - и N_2 -таутомерам и изомерам соответствуют близкие значения энергии Гиббса. При этом, в отличие от газовой фазы, для С-метокси- и С-этокси-1,2,4-триазолов и N-метил-С-метокси-1,2,4-триазолов N_1 -производные становятся несколько более устойчивыми, чем N_2 -соединения, т. е. под действием полярной среды происходит обращение относительной устойчивости N_1 - и N_2 -производных по сравнению с газовой фазой. Это объясняется тем, что молекулы N_1 -таутомерных форм 3-алкокси-1,2,4-триазола и N_1 -изомеров N-алкил-3-алкокси-1,2,4-триазолов более полярны, чем молекулы соответствующих N_2 -соединений. Как и в газовой фазе, в водном растворе N_4 -производные являются наименее устойчивыми.

Табл. 4. Библиогр. – 16 назв.

УДК 546.824-31:539.216.2

Соломянский А. Е., Безрученко В. С., Агабеков В. Е. **Формирование и оптические свойства светорассеивающих покрытий на основе частиц диоксида титана** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 70–73.

На стеклянной поверхности с помощью «рулонных» технологий – за счет согласованного движения вращающегося цилиндра разделяющего ванну Ленгмюра–Блоджетт на два отсека и линейных барьеров, получены тонкопленочные покрытия из частиц диоксида титана, эффективно (до 51 %) рассеивающие свет в видимой области спектра.

Ил. 5. Библиогр. – 7 назв.

УДК 541.15

Матусевич Ю. И. **Фоточувствительные оптические материалы на основе метилметакрилата, модифицированного сополимеризацией с органическими кислотами** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 74–79.

Установлена возможность использования сополимеров метилметакрилата с акриловой и метакриловой кислотами, содержащих добавку 9,10-фенантренина, в качестве фоточувствительного материала, предназначенного для записи и хранения голографических изображений. Показано, что процесс образования экспериментально фиксируемой дифракционной решетки в таком материале длится значительно дольше, но при этом может быть достигнута более высокая дифракционная эффективность решетки. Высокая термическая устойчивость сополимеров позволяет сохранять записанную в них информацию в технологических процессах, сопровождающихся нагревом до температур порядка 200 °С. На их основе созданы новые полимерные материалы для записи фазовых голограмм, отличающиеся повышенной формоустойчивостью и высокой адгезией к силикатному стеклу.

Табл. 1. Ил. 2. Библиогр. – 15 назв.

УДК 635.342:631.523

Шантуренко М. Н., Якимович А. В., Забара Ю. М., Хотылёва Л. В. Вклад молекулярно-генетической дивергенции капусты белокочанной в реализацию продуктивного потенциала гибридов F₁ // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 80–86.

Проведено изучение эффективности предсказания продуктивного потенциала гибридов F₁ капусты белокочанной на основе оценки генетической дивергенции исходных форм, величину которой рассчитывали с использованием ISSR- и RAPD-маркеров. В результате молекулярно-генетического исследования селекционной коллекции отобрали 5 линий, которые прошли испытание в системе полного диаллельного скрещивания. Гибриды F₁ в большинстве комбинаций достоверно превосходили родителей по основным хозяйственно ценным признакам. Анализ сопряженности дивергенции родительских форм с компонентами урожая F₁ показал, что существуют достоверные корреляции ($r > 0,5$) между уровнем GD и основными компонентами продуктивности. При этом продуктивный потенциал прямых гибридов F₁ на 67,2 % ($R = r^2$) предопределен общей GD родительских форм, тогда как для рецiproкных F₁ статистически значимых связей не обнаружено. Вероятно, формирование высокопродуктивного гетерозисного генотипа не настолько связано с общей гетерогенностью гибридного генома, как с полиморфизмом в отдельных специфических локусах, которые обуславливают высокую экспрессию признаков в F₁.

Табл. 3. Ил. 2. Библиогр. – 15 назв.

УДК 575.13:575.17:630*165

Каган Д. И., Сидор А. И., Маркевич Т. С. Генетическая структура популяций *Picea abies* (L.) Karst. в Беларуси (по данным полиморфизма митохондриальной ДНК) // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 87–91.

Приводятся результаты изучения генетической структуры еловой формации Беларуси по данным полиморфизма митохондриальной ДНК (локус *mt15-D02*). Установлено, что формирование генетической структуры насаждений осуществляется особями *Picea abies* (L.) Karst. различного исторического происхождения – карпатского и бореального. Выявлено, что бореальный митотип встречается практически по всей территории Беларуси, в то время как карпатский – концентрируется в ее юго-западной части. Впервые с использованием ДНК-маркеров показано существование зоны перекрытия миграционных потоков *P. abies* на юго-западе страны. Определены наиболее вероятные пути их распространения на территорию Беларуси в постледниковый период, а также современные направления миграции вида в исследованном регионе.

Табл. 1. Ил. 1. Библиогр. – 14 назв.

УДК 634.11:631.524.86

Урбанович О. Ю., Кузмицкая П. В., Козловская З. А. Исследование генетического разнообразия сортов слив с помощью молекулярных маркеров SSR-типа // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 92–97.

Генетическое разнообразие 50 образцов сортов и видов слив, выращиваемых в Беларуси, было исследовано методом SSR-анализа с помощью 20 маркеров. Среди образцов сливы домашней выявлено в среднем 17,7 аллеля, сливы диплоидной – 13,3. Значение доли уникальных генотипов среди образцов сливы домашней составило в среднем 0,681, сливы диплоидной – 0,552, дискриминационной силы маркера – 0,8106 и 0,7405 соответственно. Кластерный анализ позволил разделить образцы, за небольшим исключением, на две большие группы в соответствии с их уровнем плоидности. Генетические расстояния между сортами сливы диплоидной, относящимися к разным видам или являющимися межвидовыми гибридами, сходны с внутривидовыми, что указывает на низкую межвидовую дифференциацию диплоидных слив.

Табл. 2. Ил. 1. Библиогр. – 15 назв.

УДК 546.17:576.8.097.29:612.56-0.92.4

Лобанова В. В., Висмонт Ф. И. Об участии монооксида азота в механизмах реализации влияния триптофанина на процессы детоксикации и температуру тела у крыс // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 98–101.

В опытах на крысах установлено, что гипертиреозидизм сопровождается активацией процессов детоксикации и повышением температуры тела. Депрессия активности NO-синтазы метиловым эфиром N^G-нитро-L-аргинина препятствует развитию характерных изменений в процессах детоксикации и температуры тела на действие экзогенного триптофанина.

Ил. 1. Библиогр. – 15 назв.

УДК 537.241

Пенязьков О. Г., Саверченко В. И., Фисенко С. П. **Режимы электростатического осаждения фемтолитровых капель растворов на подложку-электрод при пониженном давлении** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 102–106.

Представлены экспериментальные результаты и теоретические оценки осаждения при пониженном давлении 60–300 торр фемтолитровых капель, содержащих внутри наночастицы, из газового потока на подложку-электрод. Показано, что коронный разряд с потоком капель устойчив в ограниченном диапазоне токов и напряжений. Установлен параметр подобия процесса электростатического осаждения. Обнаружено, что осаждение на диэлектрическую подложку, закрывающую электрод, существенно уменьшает агломерацию капель за счет кулоновского отталкивания.

Ил. 3. Библиогр. – 12 назв.

УДК 620.92.002.68:621.1.016:544.47

Рабинович О. С., Малиновский А. И. **Устойчивость плоского фронта фильтрационного горения твердого топлива** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 107–113.

Проведен анализ тепло-гидродинамической неустойчивости плоского фронта фильтрационного горения твердого топлива. С использованием численного моделирования определены границы области устойчивых режимов для спутных волн горения. Исследованы возможные сценарии перестройки плоского фронта горения в новые стационарные или колебательные структуры. Результаты сформулированы в терминах безразмерных параметров.

Ил. 4. Библиогр. – 9 назв.

УДК 821.161.3'04.091:81'25«14/16»

Гаранин С. Л. **Переводы религиозной литературы в XVI в. в ВКЛ** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 114–118.

Исследуются онтологические и гносеологические принципы понимания канонических текстов белорусскими книжниками XVI в. и переводы Библии в ВКЛ.

Библиогр. – 7 назв.

УДК 947.6 “1941/1944”: 930.1(420+73)

Безлепкин Я. П. **История Беларуси периода Великой Отечественной войны в американской и британской историографии** // Докл. НАН Беларуси. 2014. Т. 58, № 5. С. 119–123.

Сообщение посвящено эволюции историографии США и Великобритании по истории Беларуси периода Великой Отечественной войны. Показаны наиболее важные темы, которые нашли отражение в англоязычных исследованиях. Названы научные и вненаучные факторы, в наибольшей степени влиявшие на западные научные работы. Изучены подходы различных научных школ, их сильные и слабые стороны.

Библиогр. – 20 назв.