

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования «Барановичский государственный университет»
Студенческое научное общество БарГУ

СОДРУЖЕСТВО НАУК. БАРАНОВИЧИ-2016

Материалы XII Международной
научно-практической конференции
молодых исследователей

(Барановичи, 19—20 мая 2016 года)

В трёх частях

Часть 2

Барановичи
БарГУ
2016

В части 2 сборника материалов XII Международной научно-практической конференции молодых исследователей «Содружество наук. Барановичи-2016» представлены результаты исследований в области физики и математики, а также рассмотрены актуальные проблемы в области информационных систем и технологий в образовании, науке и технике. Особое внимание уделено современным тенденциям в технологиях и материалах машиностроительного и сельскохозяйственного производств, а также экономическим аспектам развития предприятия, региона.

Сборник адресован научным работникам, аспирантам, магистрантам и студентам инженерных и экономических специальностей учреждений высшего образования.

Редакционная коллегия:

А. В. Никишова (гл. ред.), Ю. Е. Горбач, В. Н. Кременевская (отв. секретари), Е. Н. Кирюхова,
О. И. Наранович, А. К. Гавриленя, М. В. Нерода, В. Н. Познякевич, Г. Я. Житкевич

Рецензент

кандидат технических наук, заведующий лабораторией механофизики гетерогенных систем
Государственного научного учреждения «Физико-технический институт
Национальной академии наук» А. М. Милюкова

Научное издание

СОДРУЖЕСТВО НАУК.
БАРАНОВИЧИ-2016

Материалы XII Международной
научно-практической конференции
молодых исследователей

(Барановичи, 19—20 мая 2016 года)

На русском, белорусском, английском языках

В трёх частях

Часть 2

Ответственный за выпуск Е. Г. Хохол
Технический редактор А. Ю. Сидоренко
Компьютерная вёрстка С. М. Глушак
Корректор Н. Н. Колодко

Подписано в печать 04.10.2016. Формат 60 × 84 ¹/₈. Бумага ксероксная.

Отпечатано на копировально-множительной технике. Усл. печ. л. 28,00. Уч.-изд. л. 25,10. Тираж 9 экз. Заказ 681.

Учреждение образования «Барановичский государственный университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя № 1/424 от 09.09.2016.
Ул. Войкова, 21, 225404 г. Барановичи. Тел. 8 (0163) 45 46 28, e-mail: rio@barsu.by .

Что же касается Республики Беларусь, то собственных месторождений РЗМ выявлено не было, поэтому для того, чтобы использовать РЗМ в своих промышленных целях, приходится их закупать в ближайших странах. В век бурно развивающихся нанотехнологий и наноматериалов, которые вскоре станут составной частью нашей повседневной жизни, применение и использование РЗМ в промышленном комплексе Республики Беларусь позволит выйти на новый уровень научно-технического развития.

Список цитируемых источников

1. Петлицкая Т. С. Резонанс Абрикосова—Сула и изоструктурное фазовое превращение в церии // XVI Респ. науч.-практ. конф. молодых учёных, Брест, 16 мая 2014 г. : в 2 ч. / М-во образования Респ. Беларусь, Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина ; под общ. ред. В. В. Здановича. Брест : БрГУ, 2014. Ч. 1. С. 49—50.
2. Handbook on the physics and chemistry of rare earths / ed.: Karl A. Gschneidner, LeRoy Eyring. Vol. 1: Metals. Amsterdam [etc.] : North-Holland, 1982. P. 337—377.
3. Петлицкая Т. С. Резонанс Абрикосова—Сула и изоструктурное фазовое превращение в церии. С. 49—50.
4. Сплавы редкоземельных металлов / Е.М. Савицкий [и др.]. М. : Изд-во Академии наук СССР, 1962. 269 с.
5. Вялых Д. В. Гибридизация электронных состояний и особенности тонкой структуры зон в твердотельных системах : дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 01.04.07. СПб, 2012. 167 с.
6. Станцо В. В., Черненко М. Б. Популярная библиотека химических элементов. М. : Наука, 1983. Ч. 2. С. 125—131.
7. Редкоземельные элементы. Технология и применение : пер. с англ. / под ред. Ф. М. Виллани. М. : Metallurgia, 1985. С. 65—81.
8. Станцо В. В., Черненко М. Б. Популярная библиотека химических элементов. С. 125—131.
9. Михайленченко А. И., Михлин Е. Б., Патрикеев Ю. Б. Редкоземельные металлы. М. : Metallurgia, 1987. С. 210—220.
10. Станцо В. В., Черненко М. Б. Популярная библиотека химических элементов. С. 125—131.
11. Редкоземельные элементы. Технология и применение. С. 65—81.
12. Михайленченко А. И., Михлин Е. Б., Патрикеев Ю. Б. Редкоземельные металлы. С. 210—220.
13. Станцо В. В., Черненко М. Б. Популярная библиотека химических элементов. С. 125—131.

УДК [[539.19:539.2:539.6]:535.21]:620.3]-022.532

А. Л. Полох, Г. В. Качкар

Учреждение образования «Барановичский государственный университет», Барановичи

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ПРИВОД ЛИНЕЙНОГО ПЕРЕМЕЩЕНИЯ НА ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛАХ С ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫМ ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА

Введение. В статье предложен один из возможных способов управляемого перемещения отдельных молекул с помощью энергии светового излучения. Речь идёт о возможности перемещать линейную молекулу со специальной структурой за счёт изменения поляризации отдельных участков (атомных группировок) благодаря перераспределению электронной плотности при поглощении световых квантов (внутримолекулярного переноса заряда (далее — ВПЗ)).

В ходе работы с литературой выяснилось, что по теме молекулярных двигателей есть несколько публикаций и отдельные практические результаты. В обзорно-аналитической статье [1] перечислено более 1 600 публикаций по темам, связанным с молекулярными и супрамолекулярными системами и устройствами. Среди них не оказалось статей по теме оптических молекулярных приводов линейного перемещения. По линейному приводу на химической энергии есть одна публикация [2], по вращательным оптическим молекулярным моторам — четыре [3], около двадцати работ по молекулярным моторам с химическими источниками энергии. Из анализа публикаций можно сделать вывод, что тема фотоуправления движением молекул развивается, хотя и относительно медленно.

Пока ещё нет эффективных молекулярных приводов линейного перемещения на световой энергии, но есть отдельные результаты по другим фотозависимым молекулярным системам (ротаторам, челнокам, переключателям), на основании которых можно утверждать, что такой принцип перемещения может быть практически реализован, хотя детали его реализации нуждаются в дальнейшем уточнении.

Основная часть. В предыдущем докладе был назван только общий принцип движения молекулы за счёт ВПЗ при поглощении световых квантов без уточнения деталей структуры молекул и способа управления перемещением. В ходе дальнейшего изучения проблемы рассмотрено несколько типов полимеров, в основном ароматических, которые могут оказаться пригодными для создания рабочих молекул. Здесь мы приведём один вариант, который предполагает наиболее простую структуру молекулы.

Идея предлагаемого способа перемещения молекул очень проста. В его основе лежит широко известное явление фотополяризации с ВПЗ [4], т. е. перераспределения электрического заряда между частями одной молекулы (отдельными атомами или атомными группировками) в результате перехода электрона при оптическом возбуждении с орбиталей одной локальной системы, выступающей в роли донора, на орбитали другой системы (группировки), играющей роль акцептора. Как правило, в роли доноров электронов могут выступать группы $-\text{NH}_2$, $-\text{NH}$, некоторые гетероароматические циклы, а в роли акцепторов группы $-\text{CO}$ -, $-\text{H}_3\text{CO}$ -, $-\text{COOR}$ -, $-\text{CN}$ -, $-\text{Cl}$ -, $=\text{S}$ -, $-\text{SH}$ и другие, связанные с соседними атомами углерода или через цепочку π -связей, чаще всего с участием арома-

тической или гетероатомной группировки, причём эффективность ВПЗ существенно повышается, если донором или акцептором электрона служит неальтернативная система («неразмечаемая» система, т. е. с нечётным количеством сопряжённых π -связей, например пятичленный цикл), и особенно если указанная система сопряжена с гетероатомной группировкой.

К сожалению, такие системы не поддаются точному количественному расчёту. Для отдельных молекул, содержащих соответствующие группы атомов, частоты поглощения, связанные с ВПЗ, установлены экспериментально, но при их соединении в одну длинную молекулу неизбежно возникнет сложное взаимное влияние соседних группировок, которое может значительно изменить положение и интенсивность всех полос поглощения. Тем не менее мы можем сделать некоторые предположения о том, какой должна быть структура молекул, способных проявлять нужные свойства.

Будем полагать, что молекула свободно плавает в полярном растворителе. Для управляемого перемещения линейной молекулы достаточно, чтобы она содержала не менее трёх регулярно чередующихся оптически активных участков, поляризация которых существенно изменяется при поглощении световых квантов различной частоты. Соответственно, это вызовет изменение сил электростатического (диполь-дипольного) взаимодействия с молекулами растворителя. Если последовательно (через небольшие промежутки времени порядка 10^{-8} с) изменять поляризацию на нескольких соседних участках, то полярные молекулы растворителя будут увлекаться электростатическими силами вслед за возникающими участками с сильной поляризацией, постепенно перемещаясь вдоль всей молекулы на значительное расстояние и создавая внешнюю силу, способную вызвать движение в противоположном направлении. Правда, для этого необходимо, чтобы расстояние между соседними оптически поляризуемыми группами было сравнимо с радиусом силовой «чувствительности» молекул растворителя. Кроме того, эффективность силового взаимодействия молекулы с окружением будет зависеть от размеров молекул растворителя, их формы, подвижности, количества полярных групп и степени их полярности, но в простейшем случае эффект будет проявляться в любом полярном растворителе с достаточно крупными молекулами.

Существует достаточно много молекулярных структур, способных проявлять фотополяризацию. С заметным изменением дипольного момента ВПЗ может проявляться в комплексных ионах, в частности, в комплексах целлюлозы с металлами. Также ВПЗ возможен в гетероароматических молекулах, содержащих донорные и акцепторные группировки. Для примера рассмотрим ароматический полимер, который может иметь нужные свойства.

Предположим, что длинная молекула состоит из оптически активных центров (например, ароматических ядер, связанных с атомными группировками, которые могут выступать в роли донора или акцептора электрона). Есть несколько вариантов подобных структур и способов их получения (ароматические поли-амиды, -изоцианаты, -бензимидазолы, -бензоксазолы, -бензтиазолы, -фенилхиноксалины и др.). Например, в [5] показан способ синтеза линейных структур из ароматических ядер за счёт стереоспецифических реакций соединения (рисунок 1). Если модифицировать исходные молекулы, добавив к ним пятичленные гетероциклы и соответствующие радикалы, то можно получить структуру, которая при определённом сочетании заместителей, по-видимому, может проявлять переменную поляризацию под действием световых квантов соответствующей частоты (рисунок 2).

Такая линейная структура имеет большую жёсткость и обеспечивает расположение всех электронно-акцепторных групп с одной стороны молекулярной цепочки на равном расстоянии (около 0,5 нм), что важно для эффективного силового взаимодействия поляризуемых групп с молекулами растворителя. В качестве электронно-акцепторной группировки могут выступать HCO- , $\text{CH}_3\text{CO-}$, в качестве донорных — -NH_2 , -NH- . Пятичленный цикл может содержать гетероатомы и иметь до четырёх разных заместителей, что создаёт широкое многообразие возможных свойств, в частности, позволяет получать группировки со сходными свойствами фотополяризуемости, но заметно различающимися частотами поглощения.

При этом надо учитывать, что из-за наличия в данной молекуле протяжённой системы сопряжённых π -связей взаимное влияние состояний оптически активных центров друг на друга и на соответствующие частоты поглощения может оказаться очень значительным, что нежелательно и может затруднить подбор частот управляющего излучения. Это позволяет в широких пределах регулировать частоты поглощения путём модификации исходной молекулы, что с учётом сольватохромных сдвигов в разных растворителях [6] в принципе даёт возможность подобрать молекулярную

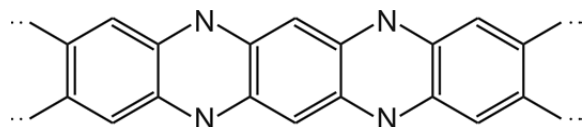


Рисунок 1 — Прямая линейная цепочка из ароматических ядер

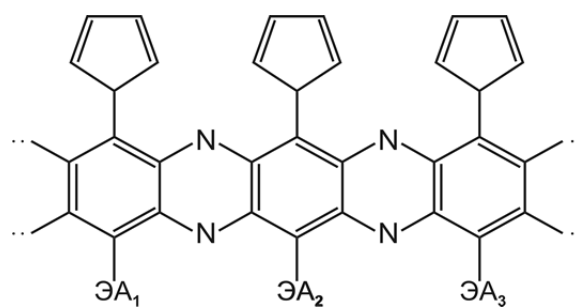


Рисунок 2 — Линейная цепочка из оптически активных структур

структуру с любыми частотами поглощения. В случае, если взаимное влияние оптически активных центров в поликонденсированных цепях окажется слишком сильным, можно взять другие линейные молекулы, поскольку существует достаточно большой выбор (например, на основе молекул целлюлозы).

Заключение. Возможности применения фотодинамических молекулярных структур чрезвычайно многообразны. Это обусловлено преимуществом данного способа управления нанообъектами: использованием универсального переносчика управляющих сигналов — светового излучения, которое может генерироваться макрообъектами и непосредственно воздействовать на целевой нанообъект.

Список цитируемых источников

1. Попов В. Ю. ДНК наномеханические роботы и вычислительные устройства // Всерос. конкурс. отбор обзорно-аналит. ст. по приоритет. направлению «Информационно-телекоммуникационные системы», 2008. 210 с.
2. Linear Artificial Molecular Muscles / Liu Y. [et al.] // J. Am. Chem. Soc. 2005. V. 127. P. 9 745.
3. Koumura N., Zijlstra R. W. J., van Delden R. A., Harada N., Feringa B. L. Light-driven unidirectional molecular rotor // Nature. 1999. V. 401. P. 152—155; Molecular machines: Nanomotor rotates microscale objects / Eelkema R [et al.] // Nature. 2006. V. 440. P. 163; Toward a switchable molecular rotor / Schoevaers A. M. [et al.] // J. Org. Chem. 1997. V. 62. P. 4 943—4 948; Unidirectional rotation in a mechanically interlocked molecular rotor / Altieri A. [et al.] // J. Am. Chem. Soc. 2003. V. 125. P. 8 644.
4. Рубин А. Б. Биофизика : учеб. в 2 т. Т. 1. Теоретическая биофизика. 2-е изд. М. : МГУ, 1999. 448 с.
5. Regulating Molecular Recognition with C-Shaped Strips Attained by Chirality-Assisted Synthesis / Liu X. [et al.] // Angew. Chem. Int. Ed. 43/2015. P. 12 518.
6. Райхардт К. Растворители и эффекты среды в органической химии / пер. с англ. М. : Мир, 1991. 763 с.

УДК 517.538.52+517.538.53

М. В. Сидорцов

Учреждение образования «Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины», Гомель

АСИМПТОТИКА МНОГОЧЛЕНОВ ЭРМИТА—ПАДЕ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

Введение. Многочленами Эрмита—Паде 1-го рода для системы экспонент $\left\{e^{\lambda_p z}\right\}_{p=0}^k$ будем называть многочлены $A_n^p(z)$, $\deg A_n^p \leq n-1$, $p=0, 1, \dots, k$, один из которых тождественно не равен нулю, удовлетворяющие условию $\sum_{p=0}^k A_n^p(z) \cdot e^{\lambda_p z} = O(z^{kn+n-1})$, $z \rightarrow 0$.

Многочлены $\left\{A_n^p(z)\right\}_{p=0}^k$ введены в рассмотрение Эрмитом [1] в связи с исследованием арифметических свойств числа e .

Мы хотим найти асимптотику таких многочленов, когда в системе экспонент $\left\{e^{\lambda_p z}\right\}_{p=0}^k$ множители в показателях экспонент выбраны следующим образом: $\lambda_0 = 0$, а остальные λ_p являются корнями уравнения $\xi^k = 1$.

Заметим, что при произвольных действительных параметрах λ_p асимптотика многочленов Эрмита—Паде 1-го рода для системы экспонент $\left\{e^{\lambda_p z}\right\}_{p=0}^3$ описана в работе [2].

Основная часть. Справедлива следующая теорема.

Теорема 1. Для каждого фиксированного $z \in \mathbb{C}$ и $n \rightarrow \infty$ $A_n^0(z) = \sum_{j=1}^3 B_n(z_j) e^{(z_j - \lambda_j)z} (1 + O(1/n))$,
 $A_n^p(z) = -B_n(z_p) e^{(z_p - \lambda_p)z} (1 + O(1/n))$, $p=1, 2, 3$, где z_j , $j=1, 2, 3$ корни уравнения $(k+1)\xi^k = 1$.

$$B_n(z_j) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{-2\pi}{nS''(z_j)}} e^{nS(z_j)}, \quad j=1, 2, 3.$$