

Генбач А.А., Бондарцев Д.Ю.

Билік капиллярлық-кеуекті құрылымдарда түрлі жылу шарттарын зерттеу үшін қондырғылар.

Түйіндеме: әзірленген және капиллярлық-кеуекті салқындату жүйесін (орташа) жылу алмасу сипаттамаларын интеграцияланған эксперименттік қондырғыларды оқыған: өлшеуіш тізбектер, құбырлы артериялар, перфорацияланған қысым кестесінде және микро артериялар бар салқындату элементі құрылғының жұмыс істеуін және әдістерін көрсетеді. түрлі факторлар: жылу алмасу бетінің биіктігі, күйе қабырғаға және фитилей дейін салқындату жүйесінде қысым.

Түйінді сөздер: Эксперименттік капиллярлық-кеуекті салқындату жүйесінің ажырамас жылу алмасу сипаттамаларын анықтау үшін орнату, жылу алмасу бетінің биіктігі, жылыту бетінің бағдар, жылу дағдарыс.

Genbach A.A , Bondartsev D.Y

Installations for the study of different heat transfer conditions in the capillary-porous structures of power.

Summary: developed and studied experimental installations integrated (average) heat exchange characteristics of the capillary-porous cooling system: shows the functioning and methods of measurement circuit, the cooling element device with tubular arteries, perforated pressure plate and micro arteries. The different factors: the height of the heat exchange surface, the pressure in the cooling system until burnout wall and wicks.

Keywords: Experimental setup for the determination of integral heat exchange characteristics of the capillary-porous cooling system, the height of the heat exchange surface, the orientation of the heating surface, the heat transfer crisis.

ӘОЖ 539.2

А. Дробышев, А. Алдияров, А. Тычenguлова, Б. Рахат, А. Бауржан

(Өл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,

Алматы, Қазақстан, , E-mail: Abdurahman.Aldiarov@kaznu.kz)

АСҚЫН АҚҚЫШ ГЕЛИЙДІҢ БЕТІНДЕ КОНДЕНСИРЛЕНГЕН ЭТАНОЛ МОЛЕКУЛАЛАРЫНЫҢ ӨЗДІГІНЕН ҰЙЫМДАСТЫРЫЛУЫ МЕХАНИЗМІ

Аңдатпа: Тербелмелі спектроскопия – макромолекулалардың химиялық құралуын және құрылымдық ерекшеліктерін, сонымен қатар, олардың термодинамикалық және физикалық қасиеттерімен байланысын зерттейтін ең көп таралған физикалық әдістердің бір түрі. Заттың макроскопиялық қасиеттері мен молекулалық деңгейде құрылымдарының арасындағы байланысты инфрақызыл спектроскопия әдістерімен орнатудың іргелі мәселелер аясында өзінің артықшылықтары бар және көп атомды молекулалардың тербелмелі спектрлерінің теориялық әдістерімен зерттеу сұранысқа ие болып табылады. Күрделі молекулалардың құрылымын және спектрлерін есептеудің соңғы уақытта қолданылатын тура кванттық-механикалық әдістері көп уақыт шығынын талап етеді. Қазіргі заманғы компьютерлерді қолдана отырып гармоникалық жуықтауда 4 көп атомды молекулаларды тербелмелі спектрлердің теория әдістерімен есептеулер лезде орындалады және квантты-механикалық талдаудың нәтижелерімен жақсы сәйкес келетін атомдардың тепе-теңдік орнынан ауытқуының мәндерін береді. Бұл әдіс көптеген тапсырмаларды шешу үшін классикалық механиканың қарапайым жуықтауларын қолдануға, соның ішінде, осы жұмыста берілген есептерді шешуге мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: конденсация, этанол молекулалары, инфрақызыл спектроскопия, сұйық гелий.

Кіріспе

Сұйық гелийде 2.2 К температурада екінші текті фазалық ауысу жүреді. Осы температурадан төмен температурада гелийдің макроквантты қасиеті болып табылатын асқын аққыштыққа ие болады. Бұл ретте Де Бройльдік толқын ұзындықтары сұйық гелий молекуласының атомаралық қашықтығының ұзындығымен шамалас болады [1].

Не-II дәлдігі жоғары заттардың молекулаларын спектроскопиялық зерттеу үшін матрицаның жұмсақ элементі болып табылатындығы қазіргі уақытта белгілі. Ол асқын аққыш гелийге түсе отыра, ілгерілемелі еркіндік қасиеттерін жоғалтады. Сондай-ақ, бұл қасиеттері әр түрлі молекулалардан құралған күрделі жүйелерге де қатысты [2]. Әдістемелік жағынан осындай жүйелерді спектроскопиялық зерттеу элементінің ғылыми зертханаларында бұрыннан бері қойылған. Оған мысал ретінде асқын аққыш гелийдің нанотамшыларының ішіндегі молекулалардың спектрлерін зерттеу әдістемесінің әзірлемесі және олардың көмегімен алынған нәтижелерді келтіруге болады. Осы әдіспен өте төмен температурада тұрақсыз молекулалардың дәлдігі жоғары спектрлерін алуға болады. Сонымен қатар, мұндай әдістер спектроскопиялық деңгейде гелийдің асқын аққыштық қасиеттеріне қол жеткізуге және

шекті төмен температурадағы атомдық-молекулалық деңгейде жүретін көптеген физика-химиялық процестерді зерттеуге үлкен мүмкіндіктер береді [3,4]. Көрсетілген әдістер сұйық асқын аққыш гелийдегі ерекше қызығушылық тудыратын биологиялық маңызды молекулалар жағдайында полярлы молекулалардың белгілі бір түрде бағдарланған ұзын тізбектерінің нәтижелерін көрсетуге мүмкіндік береді. Және де осы әдістермен асқын аққыш гелий кластерлеріндегі элементар козуларды тікелей спектроскопиялық бақылауды жүзеге асыруға болады.

Есептеу экспериментін орындау әдістемесі.

Конформациялық полиморфизмді теориялық зерттеуде және эксперименттік нәтижелерді талдау және негіздеу барысында МАҚ (молекула аралық қатынас) маңызды роль атқарады. Эксперимент болмағанда немесе оны жасау мүмкін болмаған жағдайда олардың мәні артады. Реттілігіне қарай теориялық әдістер үш топқа бөлінеді: 1. Классикалық молекулалық механикаға негізделетін және эксперименттік зерттеулердің параметрлеріне сүйене отырып, күрделі химиялық жүйелер туралы сапалы ақпаратты жылдам алуға мүмкіндік беретін эмпирикалық зерттеу әдістері; 2. Кванттық механикаға негізделген жартылай эмпирикалық әдістер, оларда қандай да бір эксперименттік мәліметтерге қиыстыру жолы арқылы анықталатын параметрлерді қолдана отырып әр түрлі жуықтаулар пайдаланылады; 3. Эмпирикалық емес әдістер, (лат. ab initio – басынан бастап) Шредингер ұсынған молекуладағы ядролар мен электрондардың қозғалысын сипаттайтын толқындық теңдеуді шешуге негізделген квантмеханикалық әдістер [5, 6]. Осы әдістерде есептеулерді орындау үшін тек фундаментальды физикалық тұрақтылар қолданылады. (Тығыздық функционалының теориясы, Хартри-Фок әдісі, молекулалық динамика әдісі).

Молекулалық тербелістердің механикалық есептемесін кванттық механика және классикалық механика әдістерімен шешуге болады. Көпатомды молекулаларды квантхимиялық әдістермен есептеулердің барлығы атомдардың қозғалысына арналған Шредингер теңдеуінің шешімдеріне негізделген [7]. Бұл теңдеудің ең кең таралған шешімі – әр түрлі молекулалық қозғалыстарды сипаттайтын модельдік гамильтониандарды тұрғызу арқылы теңдеуді қарапайым түрге келтіру, яғни интегралдық қатарларды есептеулердің орнына эмпирикалық параметрлерді қою арқылы алмастырылады (жартылай эмпирикалық әдістер). Эмпирикалық емес есептеулер (ab initio) фундаментальды физикалық тұрақтылардан басқа ешқандай эксперименттік параметрлерді қабылдамайтын Шредингер теңдеуінің нақты шешімдеріне негізделген [8,9]. Алайда осындай есептеулерді жүргізуге машиналық уақыт көп шығындалады. Классикалық механика осы есептердің көрнекі шешімін және квантмеханикалық нәтижелерге жуық нәтижелер береді [10].

Әр түрлі молекулалардың i және j атомдарының арасындағы молекулааралық Ван-дер-Ваальс потенциалы Леннард-Джонс потенциалы мен нүктелік зарядтардың электрстатикалық өзара әрекеттесуінің потенциалының қосындысы ретінде алынады. Леннард-Джонс потенциалының σ_{ij} және ϵ_{ij} параметрлері AMBER моделіне (Assisted Model Building and Energy Refinement) сәйкес алынған [11].

AMBER моделіндегі валенттік тербелістерінің байланысының функциялық түрі төмендегідей көрсетіледі:

$$E_{bond} = \sum_{bonds} K_r (r - r_0)^2$$

Деформациялық тербелістердің байланыстарының функционалдық түрі:

$$E_{bondangle} = \sum_{angels} K_\theta (\theta - \theta_0)^2$$

Ван-дер-Ваальстік өзара әрекеттесудің функционалдық түрі:

$$E_{vanderwaals} = \sum_{ijvdW} \left[\frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^6} \right]$$

Электрстатикалық өзара әрекеттесудің функционалдық түрі:

$$E_{electrostatic} = \sum_{ijelectrostatic} \left[\frac{q_i q_j}{\epsilon R_{ij}} \right]$$

AMBER моделінде біз модификациялаған жүйедегі сутекті байланыстардың потенциалдары келесі өрнек түрінде есептелінеді:

$$E_{H-bonded} = \sum_{ij \in H-bond} \left[\frac{C_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{D_{ij}}{R_{ij}^{10}} \right]$$

Бұл жерде C_{ij} және D_{ij} коэффициенттері әрбір сәйкес донор-акцептор жұбы үшін параметрлер файлында беріледі және зерттеушімен оңтайландырылады.

Әр температура мен қысымдағы молекула динамикасы және жүйенің сутекті байланысын есептеу NVT каноникалық ансамблінің стандартты алгоритмінің көмегімен зерттелінді (яғни бөлшектердің, жүйе көлемі мен температурасының тұрақты мәнінде). Зерттелінетін жүйе $N = 3-20$ этанол молекулаларынан тұрады. Олардың өлшемі есептеу барысында талап етілетін тығыздыққа сәйкес өзгеріп отырған негізгі кубтық ұяшықта орналасқан.

Беттік және шеткі-өлшемдік эффектiлердiң алдын алу үшiн периодты шекаралық шарттар қолданылды. Қозғалыс теңдеулерiн интегралдау 0,1 фс уақыттық қадаммен Верле алгоритмінің негiзiнде жүргiзiлдi. Периодты шекаралық шарттарда қолданылған этанол молекулалары Йоргенсен моделi бойынша таңдалынған және ТПЗР потенциалының функциясымен сипатталған 216 этанол молекулаларынан тұратын тепе-теңдiктегi ұяшықты сипаттайды [12]. Бұл ұяшық кубтық болып табылады және оның қабырғасының ұзындығы 18,70 Å құрайды.

HyperChem бағдарламалық пакетiнде молекулалардың тербелiстерi әрқайсысы тепе-теңдiк (оңтайландырылған) жағдайдың маңайында тербелетiн N нүктелiк массалардан (атом ядролары) тұратын жиынтық ретiнде модельденедi. Тепе-теңдiк жағдайлары электрондар үшiн Шредингер теңдеуiн шешу кезiнде анықталған. Одан кейiн массалық-өлшенiп жылжытылған q_i Картезиандық модельдерi және T классикалық кинетикалық энергия анықталды:

$$q_i = m_i^{-\frac{1}{2}} (x_i - x_i^b)$$

$$T = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{dq_i}{dt} \right)^2$$

Тербелiстердiң потенциалды энергиясы электрондар энергиясы мен ядролық ығыстыру энергиясының қосындысы болып табылады:

$$U = U(q_1, \dots, q_{3N})$$

Сонымен бiрге, тербелiстердiң потенциалды энергиясы атомдардың әр тепе-теңдiк жағдайы үшiн Тейлор қатарының көмегiмен өрнектелуi мүмкiн:

$$U = U_b + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{dU}{dq_i} \right)_b q_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j} \right)_b q_i q_j + \dots$$

Молекуланың тепе-теңдiк геометриясы үшiн U минимальды және градиент жойылады:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial q_i} \right)_e = 0$$

Кiшкентай тербелiстерде (мысалы, төмен температурада, байланыстың қатты жүйесiнде) жоғары реттi мүшелердi ескермеуге болады. Осылайша, потенциалды энергия келесi түрге дейiн қарапайымданады:

$$U = U_e + \sum_{i=1}^{3N} u_{ij} q_i q_j$$

Тербелмелi қозғалыс үшiн классикалық механиканың мiндетiн Ньютонның екiншi заңының көмегiмен шешуге болады. i -шi атомның X құраушысындағы күш:

$$F_{i,x} = m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = - \frac{\partial U}{\partial x_i}$$

Соңғы теңдеудi, массалық-өлшенген координаталарға түрлендiре отырып, $3N$ сызықты дифференциал теңдеулер құрамы түрiнде жазуға болады:

$$m \frac{d^2 q_i}{dt^2} + \frac{\partial U}{\partial q_i} = m \frac{d^2 q_i}{dt^2} + \sum_{i=1}^{3N} u_{ij} q_j$$

Алынған теңдеулер $3N$ сызықты дифференциалды теңдеулер мен q_j белгісізімен $3N$ жүйесі болып табылады. Егер массалық-өлшенген координаталарды q_i келесі түрде жазатын болсақ, олар матрицалық түрге түрленуі мүмкін:

$$q_i = A_i \sin(\lambda^2 t + b)$$

$i=1,2,\dots,3N$ үшін, бұл жерде λ және b – тұрақтылар. Осыдан кейін теңдеудің матрицалық түрі келесі түрге ие болады:

$$UL = L\Lambda$$

бұл жерде, U матрица – u_{ij} элементтерімен Гессе массалық-өлшенген матрицасы, L және Λ – осы матрицаның жеке векторлары және сәйкесінше жеке мәндері.

Массалық-өлшенген күштік матрицаның жеке векторлары және жеке мәндері теңдеуді диагональдау әдісімен анықталуы мүмкін. Осылайша, әрбір жеке мәні оның қалыпты Q_k координатасына сәйкес келеді:

$$Q_k = \sum_k^{3N} 1_{ki} Q_k$$

Q_k қалыпты координаталарын қолдана отырып, теңдеуді мына түрге келтіруге болады:

$$\frac{q^2 Q_k}{dt^2} + \lambda_k Q_k = 0$$

Қалыпты координатаның бойындағы қозғалысы әр атомның тербелісімен бірдей жиіліктегі фазада сипатталады. ν тербеліс жиілігі λ жеке мәндерімен келесі өрнек арқылы байланысады:

$$\nu = \frac{\lambda_i^2}{2\pi}$$

ИҚ-спектрлерді есептеу. Жарық сәулесінің осцилляциялаушы электрлік диполі молекуладағы осцилляциялаушы электрлік дипольдің айналық кескінін проекциялайды (ауыспалы диполь). Егер энергетикалық шұңқырдағы жарық жиілігі молекула деңгейлерінің арасында бір-біріне жақын сәйкес келсе, онда молекула мен жарық сәулесі бір-бірімен өзара энергия (фотондармен) алмасады.

ΔE ауысу энергиясы мен ν жиілік арасындағы байланыс Эйнштейннің классикалық формуласымен сипатталады:

$$\Delta E = h\nu$$

ИҚ сәулелену молекула арқылы өткенде электрондар осцилляциялаушы дипольмен емес тұрақты электр өрісімен соқтығысады. Басқа сөзбен айтқанда, ИҚ сәулелендіру электрондарды поляризациялай алмайды. Сандық тұрғыдан, біз қалыпты моданың индукцияланған дипольдерінің шамасын қарастыра отырып, ИҚ сәулелендіру әсерінен оның қаншалықты «тербелмелі» болатындығын жаза аламыз.

$$\mu = \mu_0 + \left(\frac{d\mu}{dq} \right)_0 q + \left(\frac{q^2 \mu}{dq^2} \right)_0 q^2 + \dots$$

Тек сызықты мүшені қалдырып, ауысудың дипольдік моделін мына түрде жазуға болады:

$$\langle \mu_{fi} \rangle = \left(\frac{d\mu}{dq} \right)_f \int (\Psi_f^{vib} q \Psi_i^{vib} dq)$$

Іріктеу ережесі бойынша ИҚ жұтылу үшін тербелістің осы модасы үшін $q\Psi_i^{vib}$ симметриясы $q\Psi_f^{vib}$ симметриясымен бірдей болу керектігі шығады. Сандық жағынан ауысудың дипольдік моменті қалыпты $\frac{d\mu}{dq}$ мода бойынша дипольдің туындысына пропорционал.

Негізгі моданың κ^{vib} жиілігі үшін ИҚ спектрдің интеграцияланған жолағының қарқындылығы келесі формула бойынша анықталады [13]:

$$A_k = \frac{1}{CL} \int \left(\ln \frac{I_0}{I} \right) dv$$

бұл жерде C – концентрация (литрге мольмен), L – жолдың оптикалық ұзындығы (см), I_0 және I – сәйкесінше түсетін және өтетін жарықтың қарқындылықтары. Электрлік және механикалық үйлесімділікті болжай отырып, A_k келесі түрге апроксимациялауға болады:

$$A_k = \frac{\pi N_A g_k}{3000c^2} \left| \frac{\partial \mu}{\partial Q_k} \right|^2$$

бұл жерде N_a – Авогадро саны (моль⁻¹), c – жарық жылдамдығы, g_k – төмендеу факторы, және $\frac{\partial \mu}{\partial Q_k}$ Q_k қалыпты координатаның κ^{vib} қатысты диполь моменттің туындысы.

Гармоникалық жуықтауда біз гармоникалық осцилляторлардың $3N$ жүйесіне жүйе тербелістерінің қалыпты модаларын апроксимациялаймыз, сондықтан Q таралу функциясы жеке модалар үшін q_i таралу функциялары арқылы өрнектелуі мүмкін. Қалыпты модалардың үздіксіз таралуы үшін Q таралу функциясы $DoS(Q)$ көмегімен төмендегі өрнек бойынша көрсетіледі:

$$\ln Q = \int_0^{\infty} DoS(Q) W(Q) dQ$$

бұл жерде $W(Q)$ – сәйкес салмақты функция. Біздің жағдайымызда $DoS(Q)$ автокорреляциялық функциялардың атомды жылдамдықтары үшін Фурье түрлендіруінен келесі түрде анықталады:

$$DoS(Q) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{2kT} \int_{-\tau}^{\tau} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^3 m_j \langle g_j^k(t+\tau) \cdot g_j^k(t) \rangle$$

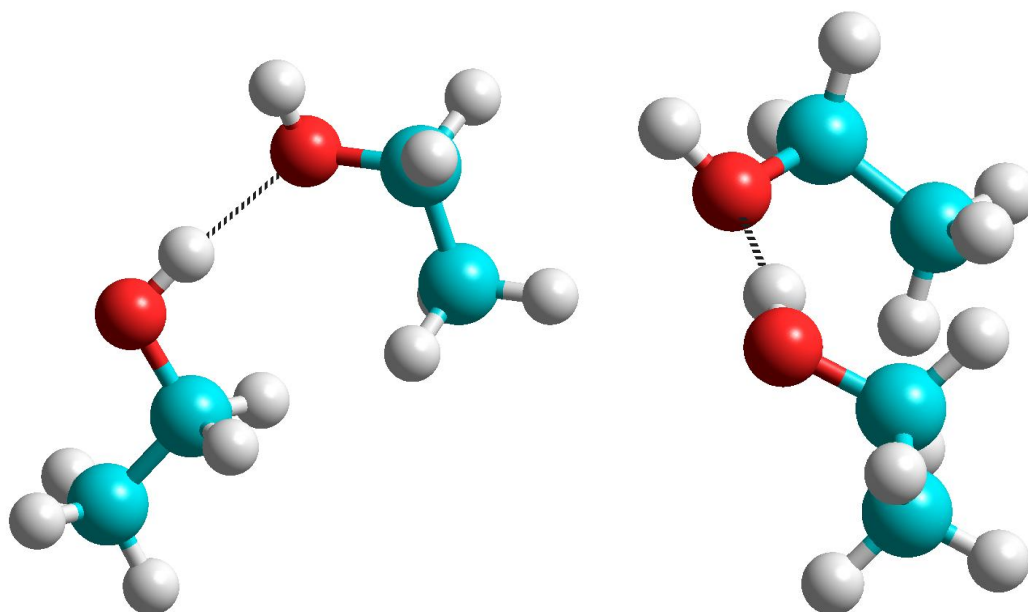
бұл жерде $\langle g_j^k(t+\tau) \cdot g_j^k(t) \rangle$ t уақытта j атомның автокорреляциялық функция жылдамдығының κ^{vib} құраушысы болып табылады. Физикалық тұрғыдан $DoS(Q)$ Q жиіліктегі жүйенің қалыпты модаларының тығыздығы болып табылады.

Нәтижелер мен талқылаулар. Молекулалардың үлкен өлшемдерінің болуы, сонымен қатар, конформды күйдің екі тұрақты күйінің болуымен (транс және гош) байланысты компьютерлік есептеулер қиындақтар тудыратын болатындықтан, этанол кешендерін зерттеуге арналған теориялық зерттеулер көп емес.

Алдыңғы жұмыстардағы [14] судың қасиеттерін есептеу үшін компьютерлік модельдеуді өте сәтті қолдану үлгісінде біз осы жұмыста этанолдың оптикалық және құрылымдық қасиеттерін зерттеу үшін сол әдістерді қолдандық. Біз тепе-теңдік геометрияны, гармоникалық тербеліс жиіліктерін, сонымен бірге ИҚ жұтылудың қарқындылығын анықтадық. Барлық жүргізілген есептеулер HyperChem 8.0. бағдарламалық кешенінің ab initio молекулалық динамика пакетін қолданылып жүзеге асырылды.

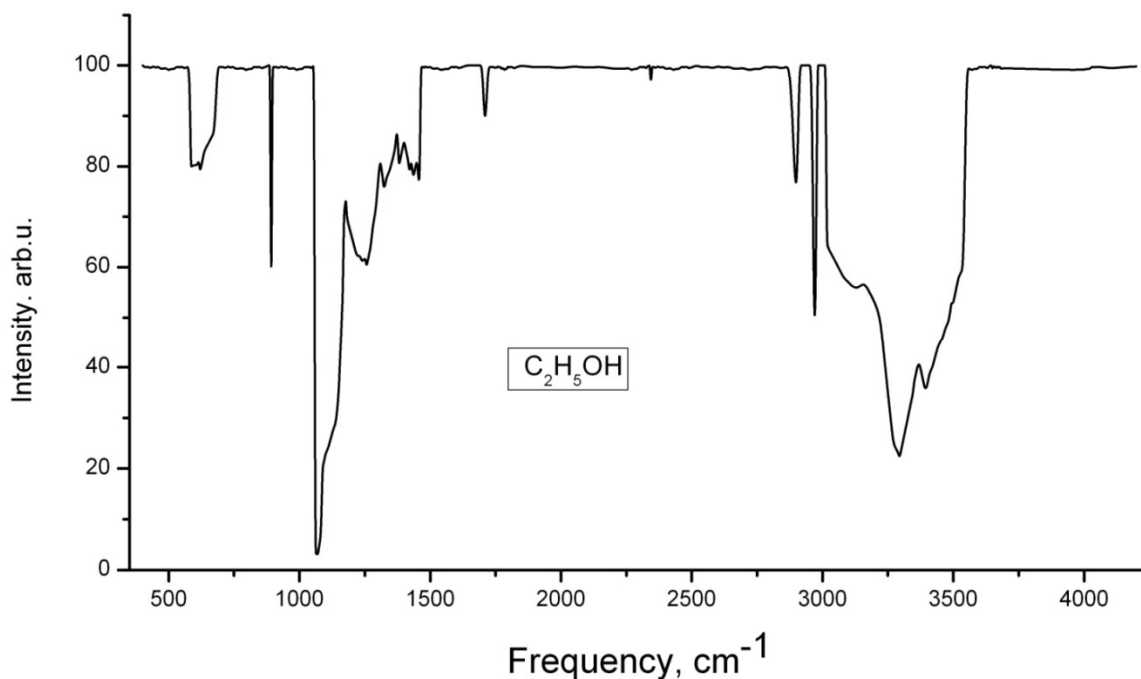
Жүйені модельдеу нәтижесінде 1926 гармоникалық жиілігі алынды, олардың 274 жалған болып табылады, себебі PW91/6-31G базистік жиынтықты қолданып бірінші принциптерден есептеулерде тепе-теңдік күйге толық жете алған жоқ. Алайда жалған жиіліктердің саны аз және зерттелініп отырған жүйеде алынған спектрінде үлесі елеусіз, себебі олардың көпшілігі біз қарастырмайтын 400 см⁻¹ төмен аумақта жатады.

Кластерлердің құрылымдарының тұрақты геометриясы этанол димерлерінің молекулалары түзілгенде пайда болатындығы анықталды, олардың кейбіреулері 1 суретте көрсетілген.



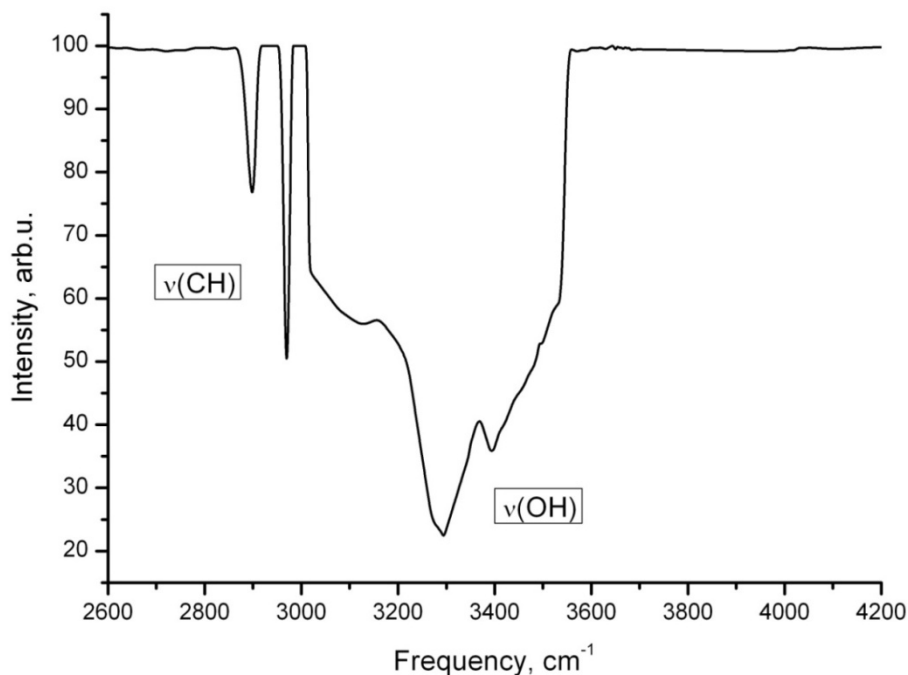
1-сурет. Этанол димерлері

2 суретте көрсетілген $400 - 1100 \text{ cm}^{-1}$ спектрлер аумағы этанол-матрица жүйесі үшін бұрын алынған эксперименттік мәліметтерімізге жақсы сәйкес келеді [15]. $500 - 600 \text{ cm}^{-1}$ аумақтағы жолақ ССО байланысы бойынша деформациялық тербеліске сәйкес келеді. $880 - 900 \text{ cm}^{-1}$ жиіліктер интервалындағы жұтылу жолағы ССО валентті тербелістерге, метил және метил тобының айналмалы тербелістерінің жиынтықтарына жатқызылады.



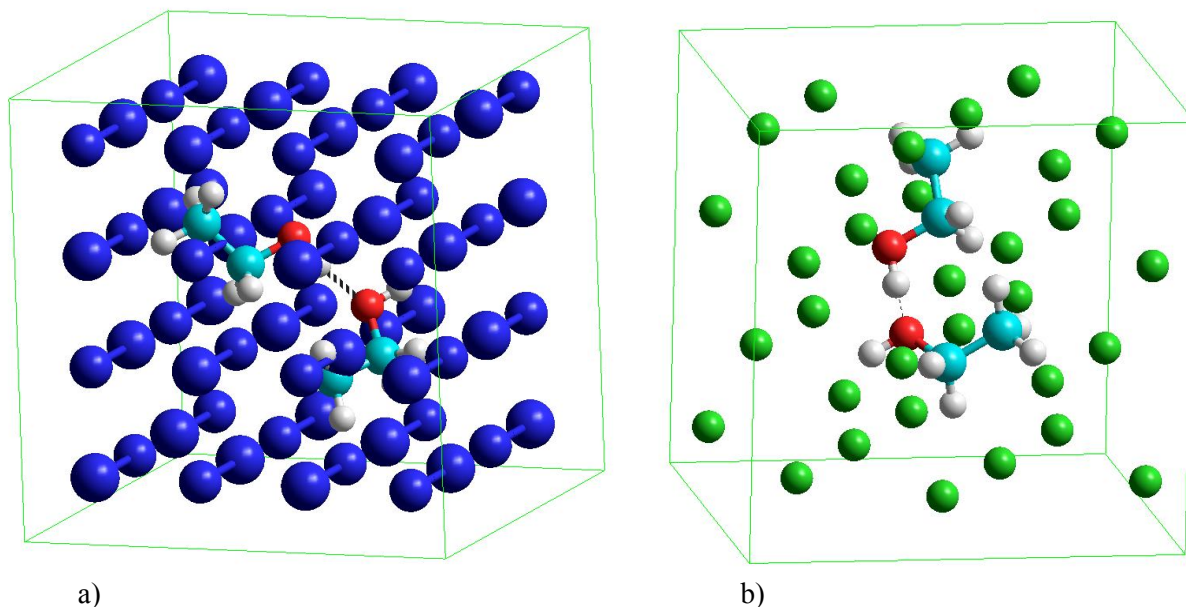
2-сурет. $T_c = 2 \text{ K}$ температурада түзілген РМЗ әдісі пайдаланылып есептелінген этанол кластерлерінің жұтылуының сызықты тербелмелі спектрі.

1500 – 2800 cm^{-1} аумағындағы эксперименттік ангармоникалық «фон» теориялық есептеулерде жандандырылмайды, себебі Фурье кері түрлендіру барысында және МД-модельдеу мәліметтерін талдағанда ала алмаймыз. 3 суретте толығырақ қарастырылған 3000 – 3700 cm^{-1} жиіліктер интервалы валентті ОН-байланысқа сәйкес келеді, ол қарастырылып отырған жүйенің тербелістерінің қалыпты модельдерін динамикалық визуалдағанда расталды. Молекулалық динамика барысында 2800 – 3000 cm^{-1} жиіліктер интервалында СН-байланыстың валентті тербелістері бақыланды. Алынған мәліметтер біз бұрын жасаған болжаулармен және алынған эксперименттік спектрлермен жақсы сәйкес келеді [16].



3-сурет. $T_c = 2 \text{ K}$ температурада түзілген РМЗ әдісі пайдаланылып есептелінген этанол кластерлерінің жұтылуының сызықты тербелмелі спектрі.

4 суретте зерттеген жүйенің біз қолданған моделінің геометриялық визуализациясы келтірілген.



4-сурет. Криоматрицадағы этанол димерлері.

ҚОРЫТЫНДЫ

Асқын аққыш гелиймен зерттеулер физика мен химияны байланыстыратын өте қызықты және қарқынды дамып келе жатқан бағыт. Эксперименттік және теориялық зерттеулердің көлемділігі мен маңызы және алынған нәтижелер физика мен химияда, атап айтқанда, спектроскопия мен конденсирленген ортада үлкен даму болып табылады.

Гелий қоспасынан асқын аққыш гелий бетіне конденсациялау барысында судың ауыр молекулаларының өздік ұйымдастыру процестерінің кейбір ерекшеліктері алынды, сонының ішінде, ұсақ дисперленген нанобөлшектердің вандервальстік кешендерінің түзілуін автоматты реттеу механизмі зерттелінді. Судың құрылымдық күйінің индикаторлары болып табылатын ауыр судың жұтылуының ($\nu=3330 \text{ см}^{-1}$, $\nu=2462 \text{ см}^{-1}$) валентті, ($\nu=1663 \text{ см}^{-1}$, $\nu=1476 \text{ см}^{-1}$) деформациялық, ($\nu=757 \text{ см}^{-1}$, $\nu=544 \text{ см}^{-1}$) либрациялы сияқты негізгі сипаттамалары асқын аққыш гелийде мультиплексті жолақтар түзеді. Егер ауыр судың молекулалары сұйық гелийде төмен өлшемді кластерлер түзеді деп болжасақ, ыдырау мәліметтері мүмкін болады.

Этанолдың молекулалық тербелістері туралы механикалық есеп кванттық механика мен классикалық механика әдістерімен шешілді. Квантхимиялық әдістермен этанол молекулаларының атомдарының қозғалысы үшін Шредингер теңдеуі есептелінді. Жүйені модельдеу нәтижесінде 1926 гармоникалық жиілігі алынды, олардың 274 жалған болып табылады, себебі BPW91/6-31G базистік жиынтықты қолданып бірінші принциптерден есептеулерде тепе-теңдік күйге толық жете алған жоқ. Алайда жалған жиіліктердің саны аз және зерттелініп отырған жүйеде алынған спектрінде үлесі елеусіз, себебі олардың көпшілігі біз қарастырмайтын 400 см^{-1} төмен аумақта жатады.

Осылайша, біз жүргізген зерттеулер негізінде этанол молекулаларының кластерлерінің құрылымының тұрақты геометриясы димерлер болады деген болжам жасаймыз. Бұл кезде метил және метил топтарының арасындағы сутекті байланыстар түзілетін циклдық димерлер ең тұрақты күй болып табылады.

ӘДЕБИЕТТЕР

- [1] Тилли Д.Р., Тилли Дж. *Сверхтекучесть и сверхпроводимость*. М.: Мир.1977.
- [2] P. Huang, Heather D. Whitley, and K. Birgitta Whaley. Structure and Energetics of Helium Adsorption on Nanosurfaces. arXiv.org>physics>arXiv: physics/0311085v1.
- [3] GoyalS,SchuttDL,ScolesGPhys.Rev.Lett.69933(1992)
- [4] HartmannMetal.Phys.Rev.Lett.751566(1995)
- [5] HartmannMetal.Science2721631(1996)
- [6] P. Savich and A. Shalnikov, J. Phys. USSR 10(3), 299 1946
- [7] Межов-Деглин Л.П. Об академике Александрове Иосифовиче Шальникове // УФН. – 1998. – Т. 168, № 10. – С. 1083-1116.
- [8] Ефимов В.Б., Изотов А.Н., Левченко А.А., Межов-Деглин Л.П., Хасанов С.С. Структурные превращения в ледяных образцах при низких температурах и малых давлениях. Письма в ЖЭТФ, том94, вып. 8, с. 662-667.
- [9] Баррон Р.Ф. Криогенные системы. Энергоатомиздат. 1989.
- [10] Tursi A.J., Nixon E.R. Matrix-isolation study of the water dimer in solid nitrogen // J. Chem. Phys. - 1970 – v. 52 – p. 1521.
- [11] Cornell et.al., J. Am. Chem. Soc. 117, 5179-5197 (1995).
- [12] W.L. Jorgensen. J. Chandrasekhar, J.D. Madura, R.W. Impey. and M.L. Klein, J. Chem. Phys. 79, 926 (1983).
- [13] W.B. Person and K.C. Kim // J. Chem. Phys. 69. 1764 (1978)
- [14] A. Tychengulova, A. Aldiyarov, and A. Drobyshev // Molecular dynamics simulation of thermodynamic and transport properties of H-bonded low-temperature substances. Low Temperature Physics. Fizika Nizkikh Temperatur, 2015, v. 41, No. 6, pp. 582–587.
- [15] А. Алдияров, М. Арюткина, А. Дробышев, В. Курносов // ИК-спектроскопия этанола в криоматрице азота при различных концентрационных соотношениях. Физика низких температур, 2011, т. 37, № 6, с. 659–669.
- [16] А. Алдияров, А. Дробышев, Е. Коршиков, В. Курносов, Д. Соколов // К вопросу о существовании переохлажденной жидкой фазы у криовакуумных конденсатов этанола. Физика твердого тела, 2012, том 54, вып. 7, стрю1387-1391.

Дробышев А., Алдияров А., Тыченгулова А., Рахат Б., Бауржан А.

Механизм самоорганизации молекул этанола конденсированных на поверхности сверхтекучего гелия.

Резюме: Колебательная спектроскопия - самый распространенный физический метод исследования химического строения и структурных особенностей макромолекул, изучения их связи с термодинамическими и физическими свойствами. В рамках фундаментальной проблемы установления связи между макроскопическими свойствами веществ и его структурой на молекулярном уровне методами инфракрасной спектроскопии, не уступают своих позиций и остаются востребованными исследованиями колебательных спектров методами теории колебательных спектров многоатомных молекул. Прямые квантово-механические методы расчета структуры и спектров сложных молекул, используемые в последнее время, требуют больших временных затрат. Расчеты методами теории колебательных спектров 4 многоатомных молекул в гармоническом приближении, при использовании современных компьютеров, выполняются почти мгновенно и дают значения частот и смещений атомов из положения равновесия, хорошо совпадающие с результатами квантово-механического анализа. Это позволяет использовать простые приближения классической механики для решения многих задач, в том числе и задач, поставленных в данной работе.

Ключевые слова: конденсация, молекулы этанола, инфракрасная спектроскопия, жидкий гелий.

Drobyshev A., Aldiyarov A., Tychengulova A., Rakhat B., Baurzhan A.

The self-Assembly mechanics of molecules of ethanol are condensed on the surface of superfluid helium.

Summary. Oscillation spectroscopic is the most common physical method of investigation of chemical structure and structural features of macromolecules and to study their connection with thermodynamic and physical properties. In the framework of the fundamental problems of establishing a link between macroscopic properties of matter and its structure at the molecular level by methods of infrared spectroscopy do not yield their positions and remain in demand studies of the vibrational spectra using the theory of vibrational spectra of polyatomic molecules. Direct quantum mechanical methods of calculation of structure and spectra of complex molecules used in recent times, require time-consuming. Calculations using the theory of vibrational spectra of 4 polyatomic molecules in the harmonic approximation, when using modern computers, are executed almost instantly and give the values of the frequencies and displacements of atoms from equilibrium positions, in good agreement with the results of quantum-mechanical analysis. This allows you to use a simple approximation of classical mechanics for the solution of many tasks, including tasks set in this work.

Key-words: condensation, molecules of ethanol, infrared spectroscopy, fluid helium.

УДК 631.14:338.43

¹Т. Калыбеков, ²Ы. Жакыпбек, ²А.С. Әбен

(¹Центрально-Азиатский университет,

²Казахский национальный исследовательский технический университет, имени К.И. Сатпаева,

Алматы, Республика Казахстан,

t.kalybekov@mail.ru, moldir_09@mail.ru)

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЛАНИРОВАНИЯ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ЗЕМЕЛЬ

Аннотация. Приведены особенности планирования сельскохозяйственных земель с целью обеспечения максимальной пользы для общества при землепользовании и природоохранных методах ведения сельского хозяйства. Отмечается разделение фермерских или свободных земель на массивы и земельные участки в ходе развития территорий осуществлять с учетом размера и формы кварталов, ширины и длины улиц, строительных норм и правил размещения дорог, водопроводных магистралей, тротуаров, пешеходных дорожек. Предложено проводить долгосрочное управление земельными ресурсами на основе экологического подхода, учитывающего равновесие между охраной и использованием природных ресурсов. Принудительное изъятие земель рекомендуется проводить после предварительного согласования землевладельцем всех условий, обеспечения полной гласности и предоставления нового участка, удовлетворяющего владельца. Рекомендовано изменение целевого использования и границы своего участка земли производить с разрешения местных властей и землеустроительного органа. Строительство объекта на земельном участке необходимо осуществлять по утвержденным планам, градостроительным, архитектурно-планировочным требованиям населенного пункта.

Ключевые слова: планирование, использование, земельный ресурс, организация, изъятие.