

CNQX – 22 конформации при энергии докинга – 14 ккал/моль и 23 конформации при энергии докинга – 18 ккал/моль; DNQX – 22 конформации при энергии докинга – 14 ккал/моль; ODAР – 28 конформации при энергии докинга – 14 ккал/моль и 22 конформации при энергии докинга – 18 ккал/моль.

Анализ результатов молекулярного докинга для исследуемых веществ. Среди производных 2-Benzoylamino-benzamide наиболее низкую энергию докинга, а значит и наибольшее сродство с рецептором показали:

2-Benzoylamino-N-(4-Brom-phenil)-benzamide – –8,6 ккал/моль;

2-Benzoylamino-N-(4-nitro-phenil)-benzamide – –7,64 ккал/моль;

Среди производных 2,6-Diethyl-5-phenyl-1H-pyrimidin-4-one наиболее низкую энергию докинга, а значит и наибольшее сродство с рецептором показали:

2,6-Diethyl-1-(4-Brom-phenil)-5-phenyl-1H-pyrimidin-4-one – –21,13 ккал/моль;

2,6-Diethyl-1-(4-nitro-phenil)-5-phenyl-1H-pyrimidin-4-one – –8,99 ккал/моль;

Среди производных 2,6-Dimethyl-5-phenyl-1H-pyrimidin-4-one наиболее низкую энергию докинга, а значит и наибольшее сродство с рецептором показали:

2,6-Dimethyl-1-(4-Brom-phenil)-5-phenyl-1H-pyrimidin-4-one – –20,44 ккал/моль;

2,6-Dimethyl-1-(4-nitro-phenil)-5-phenyl-1H-pyrimidin-4-one – –15,99 ккал/моль;

Среди производных quinazolin-4-one наиболее низкую энергию докинга, а значит и наибольшее сродство с рецептором показали:

3-Nitro-2-phenyl-3H-quinazolin-4-one – –15,99 ккал/моль;

3-Brom-2-phenyl-3H-quinazolin-4-one – –22,1 ккал/моль;

Выводы

1. Бром и нитро группа повышает энергию докинга, то есть усиливает связь вещество-рецептор.

2. Ациклических предшественники обладают меньшим сродством в рецептору чем циклические.

3. Энергия докинга веществ лидеров близка к энергии докинга веществ сравнения.

4. Исследуемые соединения – перспективные объекты для биологических исследований ноотропной и противоишемической активности.

Список литературы

1. Фармакологическая активность новых веществ и препаратов в эксперименте / А.В. Арлыт, А.В. Сергиенко, Г.В. Масликова, И.А. Савенко, М.Н. Ивашев // International Journal on Immunorehabilitation (Международный журнал по иммунореабилитации). – 2009. – Т. 11. – №1. – С. 142-142.

2. Биологическая активность соединений, полученных синтетическим путем / М.Н. Ивашев и др. // Фундаментальные исследования. – 2012. – № 7. – Ч.2. – С. 441-444.

Физико-математические науки

ГРУППА ПРЕОБРАЗОВАНИЙ В СОЗДАНИИ НАНОСТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Арапов Б., Каденова Б., Арапов Т., Садырова М.

*Ошский государственный университет, Ош,
e-mail: baish-arapov@yandex.ru*

В работе групповым методом исследуются структура совокупности наноструктурных электронных центров окраски и центров свечения в NaCl-Ag. Они характеризуются матрицей (E_m^x, I, S) . Матрицы преобразований $\Delta E_m^x, \Delta I, \Delta S$ этих наноструктурных дефектов друг в друга образуют аддитивную группу. На основе установления дискретной группы преобразований электронных центров окраски и свечения, определен состав различных наноструктурных центров в NaCl-Ag.

Определение состава наноструктурных центров окраски и свечения в кристаллах представляют важную задачу в теоретическом и практическом отношении.

Из наноструктурных электронных центров окраски в беспримесных щелочно-галогидных кристаллах (ЩГК) в достаточной степени достоверно электронный состав установлен только для более простых F-, M-, R-центров, а также $E(Ag_c^0)$ и $V(Ag_a^-)$ – центров в ЩГК, активиро-

ванных серебром. Прямое экспериментальное определение состава более сложных наноструктурных центров окраски (ЦО) и центров свечения (ЦС) является весьма трудной задачей.

Поэтому при изучении наноструктуры и состава центров окраски начали применять различные косвенные методы, в частности идеи метода квазичастиц [1]. Согласно этого метода, электронные центры окраски могут рассматриваться как электронно-ионные квазичастицы. К этим квазичастицам можно применить идеи и методы, развитые для элементарных частиц (см., напр., [2, 3]).

В данной работе предпринята, попытка применить групповой подход к исследованию состава сложных наноструктурных электронно-ионных квазичастиц в кристаллах NaCl-Ag. В качестве однозначной характеристики центров окраски и центров свечения было выбрано спектральное положение максимума поглощения оптического поглощения соответствующих центров E_m^{ac} , определяющее энергию центров электронно-ионных квазичастиц. Такой выбор основывается тем, что энергия изучаемых систем непосредственно связана с их нано и микро структурой и симметрией, причем состояния с меньшей энергией имеют более простую структуру и симметрию.

Таблица 1

Обозначения невозбужденных центров	λ_m^{ac} (нм)	E_m^{ac} (эВ)	ΔE_m^{ac} (эВ)			
Ag_-^+	210	5,90	} 0,55	}	} 0,90	
A-	245	5,00				
B-	275	4,45				
C_4^-	315	3,90	} 0,35	}	} 0,90	
D-	345	3,55				
E-	365	3,35	} 0,35	} 0,55		
K-	410	3,00				
F-	465	2,65	} 0,35	} 0,60		
R-	600	2,05				
M-	725	1,70	} 0,35	} 0,65	} 0,90	} 0,90
N-	850	1,45				
O-	1150	1,10	} 0,35			
P-	1450	0,85				
Q-	2500	0,50	} 0,35			} 0,90

В табл. 1 приведены значения E_m^{ac} для некоторых центров окраски и свечения в NaCl-Ag, возбужденным рентгеновскими лучами. Здесь приведены также некоторые значения ΔE_m^{ac} соответствующие изменениям E_m^{ac} , при переходе от одного типа к другим. Как видно из табл. 1 по значениям ΔE_m^{ac} центры окраски и центры свечения можно объединить в мультиплеты с постоянными значениями $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,90-0,95$ эВ, $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,55-0,60$ эВ, $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,35$ эВ. Из табл. 1 видно F-, R-, N-, P-центры в чистых кристаллах, а также E-, C-, B-, A-центры в активированных кристаллах образуют два квартета со значением $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,55-0,60$ эВ. Кроме того M-, O-, Q- центры образуют триплет с $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,60$ эВ, а D- и K- центры образуют дублет $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,55$ эВ. F- и M-, R- и O-, N- и Q-, Ag_-^+ и A-; B- и D₁-; C₄- и K-центры образуют дублеты с $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,90-0,95$ эВ. M- и R-, O- и N-, Q- и P-, E- и K-, C- и D-центры также образуют дублеты со значением $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,35$ эВ. По-видимому, можно рассмотреть и другие мультиплеты центров, в том числе и с другими значениями ΔE_m^{ac} .

Существование энергетических мультиплетов в совокупности нано центров окраски и свечения может свидетельствовать о том, что должны существовать определенные преобразования, переводящие центры одного типа в центры другого типа внутри данного мультиплета. Если найти эти преобразования и операторы этих преобразований, то зная состав и структуру определенного типа центров, можно установить состав и структуру других

типов центров, входящих в соответствующие мультиплеты.

Рассмотрим более простые центры окраски F-, M-, R-, входящие в дублеты центров F- и M-, M- и R- со значениями $\Delta E_m^{\text{ac}} = 0,95$ эВ и $\Delta E_m^{\text{ac}} = +0,35$ эВ, соответственно. Как известно, F- центры представляют собой $(V_a^+e^-)$, M-центры – $(V_a^+e^-)_2$, R-центры – $(V_a^+e^-)_3$.

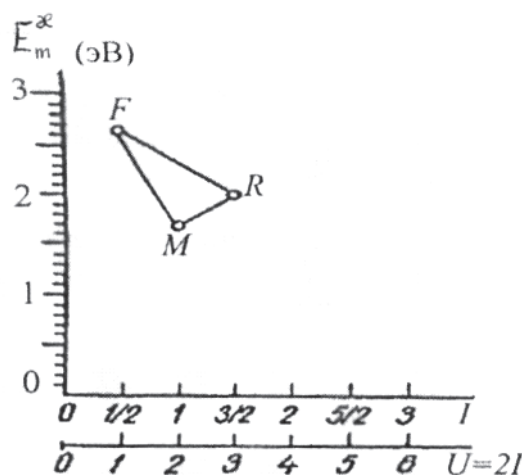


Рис. 1. Графическое изображение F, M и R-центров в координатах E_m^{ac} и $U = 2$ в NaCl-Ag

Для описания электронного состава центров окраски и свечения, а также закономерности преобразования одних центров в другие введем понятие изочетности центров U, соответствующее числу электронов в центре, и понятие

квантового числа I изотности, определяющего значение величины U обычным образом, $U = 2I$. Тогда для F-центров окраски $U = 1$, $I = 1/2$; для M-центров окраски $U = 2$, $I = 1$; для R-центров окраски $U = 3$, $I = 3/2$. Тогда F-, M-, R-центры можно изобразить графически в координатах E_m^{∞} и I следующим образом (рис. 1). F-центру соответствуют координаты (2,65; 1/2); M-центру соответствуют координаты (1,70; 1); R-центру соответствуют координаты (2,05; 3/2). Тогда преобразование центров $F \rightarrow M$ в координатах $(\Delta E_m^{\infty}, \Delta I)$ можно записать как $(-0,95; +1/2)$, $M \rightarrow R$ – как $(+0,35; +1/2)$, $F \rightarrow R$ – как $(-0,60; +1)$.

Учитывая электронный состав F-, M-, R-центров, можно сделать следующие заключения о соответствиях между преобразованиями $(\Delta E_m^{\infty}, \Delta I)$ и изменениями состава центров:

1. Преобразованию $(-0,95; +1/2)$ соответствует добавление к F-центру квазичастицы $(V_a^+e^-)$.

2. Преобразованию $(-0,60; +1)$ соответствует добавление к F-центру квазичастицы $(V_a^+e^-)_2$.

3. Преобразованию $(+0,35; +1/2)$ соответствует добавление к F-центру окраски квазичастицы $(V_a^+e^-)_3$.

Если E-центры окраски, содержащие, также как и F-центры, один электрон с некомпенсированным спином, характеризовать квантовым числом изотности $I = 1/2$, то путем последовательного выполнения преобразований $(\pm 0,95; +1/2)$, $(\pm 0,60; +1)$, $(\pm 0,35; +1/2)$ и получить все центры, приведенные в табл. 1. В координатах (E_m^{∞}, I) данные центры изображены на рис. 2.

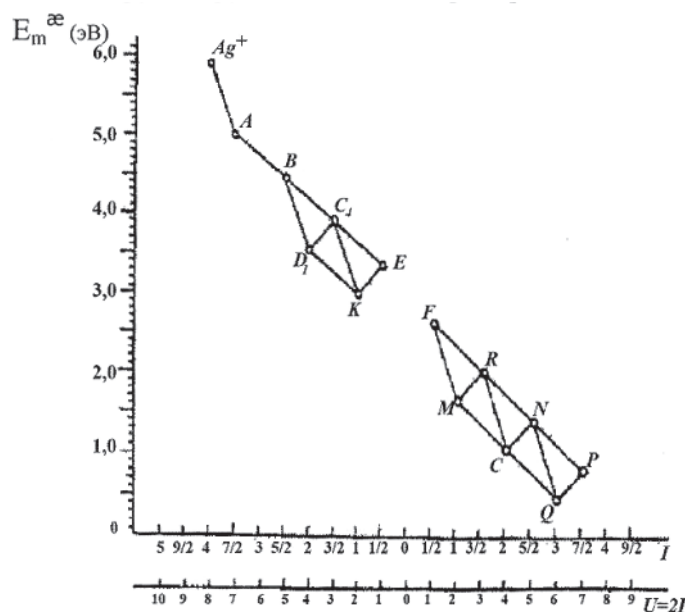


Рис. 2. Графическое изображение активационных и собственных электронных центров в NaCl-Ag

Таким образом, большое количество различных типов центров окраски и центров свечения могут быть преобразованы друг в друга с помощью преобразований вида $(\Delta E_m^{\infty}, \Delta I)$. Это может позволить определить состав и структуру различных типов центров окраски и центров свечения, переходящих друг в друга с помощью указанных выше преобразований.

Однако, прежде чем перейти к решению этого вопроса, рассмотрим подробнее приведенные выше преобразования центров, выражаемые матрицами $(-0,95; +1/2)$, $(-0,60; +1)$, $(+0,35; +1/2)$. Нетрудно убедиться в том, что эти преобразования образуют аддитивную группу.

Действительно, сумма любых двух преобразований, например $(-0,95; +1/2)$ и $(+0,35; +1/2)$ дает третье преобразование $(-0,60; +1)$. Каждому преобразованию вида $(\Delta E_m^{\infty}, \Delta I)$ соответствует обратное преобразование $(-\Delta E_m^{\infty}, -\Delta I)$; существует единичное преобразование $(0; 0)$. Поэтому

любое из рассмотренных преобразований можно применить к каждому типу центров окраски и центров свечения из данной совокупности.

Если применить преобразование $(+0,35; +1/2)$ к F – центру с матрицей $(+2,65; +1/2)$, что соответствует добавлению к F-центру окраски квазичастицы $(V_a^+e^-)$, мы не получим M-центр, а получаем новый центр, характеризующийся матрицей $(+3,00; +1)$, хотя преобразование, выражаемое матрицей $(-0,95; +1/2)$, примененное к F-центру и соответствующее также добавлению к центру квазичастицы $(V_a^+e^-)$, приводит к образованию M-центра с матрицей $(1,70; +1)$. По-видимому, существует две различные квазичастицы $(V_a^+e^-)$, добавление которых к F-центру соответствует различным преобразованиям $(+0,35; +1/2)$ и $(-0,95; +1/2)$ и приводит к различным изменениям энергии центров окраски E_m^{∞} . Естественно предположить, что это различие в квазичастицах $(V_a^+e^-)$, приво-

дыщее к различным преобразованиям центров, может быть связано с различными значениями спина S электронов e^- , входящих в состав различных электронно-ионных квазичастиц вида $(V_a^+e^-)$. При параллельных спинах электрона F-центра ($\pm 1/2$) и электрона добавляемой квазичастицы $(V_a^+e^-)$ ($\pm 1/2$) изменение спина при преобразовании центра будет составлять ($\pm 1/2$) и спин конечного центра будет ± 1 . При антипараллельных спинах этих электронов ($\pm 1/2$ и $\mp 1/2$ соответственно) изменение спина при преобразовании центра составит $\mp 1/2$, а спин конечного центра будет 0. Поэтому преобразование $(+0,35; \pm 1/2)$ будет соответствовать изменению полного спина электронов центра на величину $\Delta S = \pm 1/2$ (знаки \pm соответствуют знакам спина не спаренного электрона преобразуемого центра). Преобразование $(-0,95; \mp 1/2)$ будет соответствовать изменению полного спина электронов центра на величину $\Delta S = \mp 1/2$ (знаки \mp в этом случае противоположны знакам не спаренного спина электрона преобразуемого центра).

Тогда матрицы преобразований центров $(\Delta E_m^{\infty}, \Delta I)$ должны быть дополнены еще одним числом ΔS и будут записаны в виде $(\Delta E_m^{\infty}, \Delta I, \Delta S)$.

С учетом изменения полного спина электронов рассмотренные выше матрицы преобразований центров $(\Delta E_m^{\infty}, \Delta I)$ переписываются следующим образом:

1. Преобразование центров, связанное с добавлением квазичастиц $(V_a^+e^-)$ со спином электрона параллельным некомпенсированному спину электрона преобразуемого центра, будет описываться матрицей преобразования $(+0,35; +1/2; \pm 1/2)$.

2. Преобразование центров, связанное с добавлением квазичастиц $(V_a^+e^-)$ со спином электрона, антипараллельным некомпенсированному спину электрона преобразуемого центра окраски, будет описываться матрицей преобразования $(-0,95; +1/2, \mp 1/2)$.

3. Преобразование центров, связанное с добавлением квазичастицы $(V_a^+e^-)$, с антипараллельным и с компенсированными между собой спинами электронов будет описываться матрицей преобразования $(-0,60; +1,00)$. Преобразования, описываемые матрицами $(-0,95; +1/2; \mp 1/2)$, $(-0,35; +1/2; \mp 1/2)$, $(-0,60; +1,0)$ также образуют аддитивную группу. Результаты применения этой группы преобразований к F- и E-центрам представлены на рис. 3.

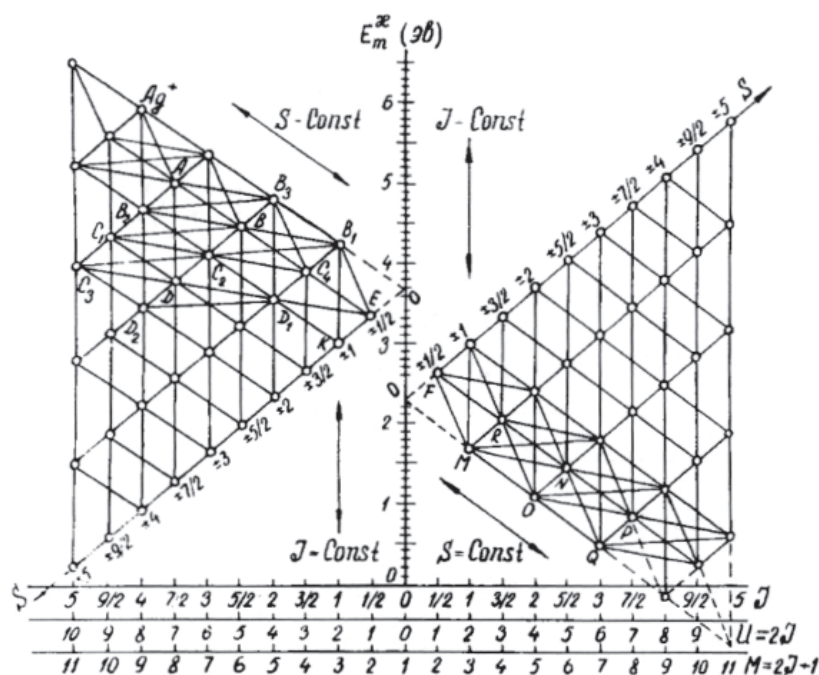


Рис. 3. Группа преобразований электронных E и F – центров в NaCl–Ag

Из рассмотрения этих данных можно сделать заключение:

1. Между центрами возможны преобразования, инвариантные относительно I ($\Delta I = 0$). Эти преобразования симметричны относительно S . Единичная матрица такого преобразования записывается следующим образом $(+1,30; 0; \pm 1)$. При этих преобразованиях центров их состав

не изменяется; преобразования связаны с переориентацией спина одного из электронов центра ($S = \pm 1$). Здесь следует отметить, что трудно представить изменение энергии центра на величину 1,30 эВ только вследствие переориентации спина электрона этого центра. По-видимому, переворачивание спина электрона сопровождается последующим изменением структуры центра

окраски. Например, вследствие перебрасывания этого электрона от квазичастицы $2(\text{Ag}_c^+e^-)$, входящей и состав активаторных центров, на квазичастицу $2(\text{V}_a^+)$ или наоборот, от $2(\text{V}_a^+e^-)$ на $2(\text{Ag}_c^+)$, в зависимости от знака величины $\Delta E_m^{\text{э}}$.

Аналогичная ситуация может быть и для совокупности центров, начинающихся с F-центра. Тогда структура F-центра окраски должна быть вида $(\text{Na}_c^+e^-)$, т.е. электрон данного центра может распределяться между Na_c^+ и V_a^+ или находиться на ионе Na, расположенном рядом с V_a^+ .

2. Между центрами возможны преобразования, инвариантные относительно S ($\Delta S = 0$). Эти преобразования симметричны относительно I . Единичная матрица таких преобразований $(-0,60; +1; 0)$.

3. Путем последовательных различных преобразований из E-центров могут быть получены D-, D_1 -, D_2 -, C_1 -, C_2 -, C_3 -, B_1 -, B_2 -, а также ряд других центров, наблюдавшихся в работах [4-6] по спектрам поглощения. Состав соответствующих активаторных центров окраски и свечения приведены в табл. 2.

Таблица 2

Обозначения центров	Энергия $\Delta E_m^{\text{э}}$ (эВ)	Состав центров	Матрицы центров ($\Delta E_m^{\text{э}}$, ΔI , ΔS)
B_1 -	4,25	$\text{Ag}_c^+(\text{V}_a^+e^-)_2$	(4,25; 1; 0)
B_3 -	4,80	$\text{Ag}_c^+(\text{V}_a^+e^-)_4$	(4,80; 2; 0)
-	5,35	$\text{Ag}_c^+(\text{V}_a^+e^-)_6$	(5,35; 3; 0)
Ag_c^+ I рода	5,90	$\text{Ag}_c^+(\text{V}_a^+e^-)_8$	(5,90; 4; 0)
-	6,45	$\text{Ag}_c^+(\text{V}_a^+e^-)_{10}$	(6,45; 5; 0)
E-	3,35	$\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+$	(3,35; 1/2; $\pm 1/2$)
C_4 -	3,90	$\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+(\text{V}_a^+e^-)_2$	(3,90; 3/2; $\pm 1/2$)
B-	4,45	$\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+(\text{V}_a^+e^-)_4$	(4,45; 5/2; $\pm 1/2$)
A-	5,00	$\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+(\text{V}_a^+e^-)_6$	(5,00; 7/2; $\pm 1/2$)
II рода	5,55	$\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+(\text{V}_a^+e^-)_8$	(5,55; 9/2; $\pm 1/2$)
K-	3,00	$2(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)$	(3,00; 1; ± 1)
D_1 -	3,55	$2(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_2$	(3,55; 2; ± 1)
C_2 -	4,10	$2(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_4$	(4,10; 3; ± 1)
B_2 -	4,65	$2(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_6$	(4,65; 4; ± 1)
III рода	5,20	$2(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_8$	(5,20; 5; ± 1)
D-	3,75	$3(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_4$	(3,75; 7/2; $\pm 3/2$)
C_1 -	4,30	$3(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_6$	(4,30; 9/2; $\pm 3/2$)
D_2 -	3,40	$4(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_4$	(3,40; 4; $\pm 1/2$)
C_3 -	3,95	$4(\text{Ag}_c^+\text{V}_a^+)(\text{V}_a^+e^-)_6$	(3,95; 5; $\pm 1/2$)
M -	1,70	$(\text{V}_a^+e^-)_2$	(1,70; 1; 0)
O-	1,10	$(\text{V}_a^+e^-)_4$	(1,10; 2; 0)
Q-	0,50	$(\text{V}_a^+e^-)_6$	(0,50; 3; 0)
F-	2,65	$\text{Na}_c^+(\text{V}_a^+e^-)$	(2,65; 1/2; $\pm 1/2$)
R-	2,05	$\text{Na}_c^+(\text{V}_a^+e^-)(\text{V}_a^+e^-)_2$	(2,05; 3/2; $\pm 1/2$)
N-	1,45	$\text{Na}_c^+(\text{V}_a^+e^-)(\text{V}_a^+e^-)_4$	(1,45; 5/2; $\pm 1/2$)
P-	0,85	$\text{Na}_c^+(\text{V}_a^+e^-)(\text{V}_a^+e^-)_6$	(0,85; 7/2; $\pm 1/2$)

4. Для превращения E-центров в B-центры путем преобразования $(+0,90; +1/2; +1/2)$, соответствующего присоединению к E-центру ква-

зичастицы $(\text{V}_a^+e^-)$ с электроном, имеющим спин, антипараллельный по отношению к спину электрона E-центра и образованию при этом квази-

частицы $(V_a^+e^-)_2$ приходится предположить, что в составе преобразуемого Е-центра уже имеется квазичастица V_a^+ . Поэтому структура Е-центра должна быть следующей $(Ag_c^+e^-V_a^+)$. Это соответствует результатам работы [6, 7], где считается, что в образовании Е-центров окраски определенную роль играют анионные вакансии (V_a^+) .

5. Можно определить состав различных центров, входящих в разные мультиплеты центров. Например, В-центры окраски должны иметь состав $Ag_c^0V_a^+(V_a^+e^-)$, так как получаются из Е-центра $Ag_c^0V_a^+$ путем преобразования, выражаемого матрицей 2 (0,60; +1;0). Такая модель В-центра в динамическом варианте, когда атом Ag_c^0 в течение определенного времени может находиться на месте вакансии (V_a^+) с электроном, соответствует результатам работы [8], и представляет собой Ag_a^- .

На основании рассматриваемых представлений Ag_c^+ -центр имеет состав $Ag_c^+(V_a^+e^-)_8$. Таким образом, ион Ag_c^+ центра свечения I – рода окружен 8 электронами, находящимися на месте 8 анионных вакансий, окружающих катион активатора. Поэтому Ag_c^+ -центры имеют окружение из устойчивой электронной оболочки с восьмью электронами. Это соответствует хорошей изоляции иона Ag^+ – центра свечения I – рода от кристаллической решетки фосфора. Вследствие этого ион Ag_c^+ является эффективным центром свечения в кристаллофосфоре NaCl–Ag. Так как активаторные центры свечения I – рода существуют в кристалле непосредственно после его выращивания, то возникает вопрос: как могут образоваться такие сложные центры типа $Ag_c^+(V_a^+e^-)_8$ при выращивании кристаллофосфора NaCl–Ag. Можно предложить следующее объяснение. Так как энергия связи ионов галоида Cl^- больше с ионом Na^+ , чем с ионом Ag^+ , по-видимому, с большой вероятностью анионы Cl^- будут удерживаться, располагаясь при выращивании кристалла, вблизи Na_c^+ чем вблизи Ag_c^+ . Поэтому в кристаллофосфоре в ходе выращивания ионы Ag_c^+ могут оказаться окруженными определенным числом положительных анионных вакансий (V_a^+) . При этом будет происходить нарушение электронейтральности кристалла вблизи ионов Ag_c^+ , находящихся в окружении анионных вакансий. Стремление к восстановлению электронейтральности приведет к стоку свободных электронов на анионных вакансиях (V_a^+) вблизи Ag_c^+ может привести к образованию центров вида $Ag_c^+(V_a^+e^-)_8$, в ходе выращивания кристаллофосфора. При таком составе центров свечения I-рода возникновения А-, В-, С-, Д-, Е-центров окраски при рентгеновском облучении кристалла можно объяснить как результат захвата центрами свечения I-рода (на $(V_a^+e^-)$, находящихся в составе этих центров) дырок Cl^0 или Cl_2^- , в ходе облучения.

6. Не все центры данного типа могут превращаться в другие центры определенного типа.

Для этого необходимы дополнительные условия. Например, в К-центр может превратиться при добавлении квазичастицы $(V_a^+e^-)$ только такой Е-центр, у которого в соседнем узле имеется ион Ag_c^+ , ибо в составе К – центра должны быть 2 иона серебра. Аналогично, в центры свечения III рода могут превратиться только такие центры II рода, которые имеют вблизи ион Ag_c^+ . Поэтому, по крайней мере, определенная часть центров II рода ($E_m^a = 5,55$ эВ) как будто содержит 2 иона Ag_c^+ (см., табл. 2). Возможность существования электронных центров с двумя концами ионов Ag_c^+ или K_c^+ обсужден в работах [9-11].

Так как центры свечения I, II III рода имеют структуру замкнутой электронной оболочки из 8 электронов (2 + 6), и поэтому мало взаимодействуют с окружением, то наличие или отсутствие вблизи этих центров дополнительного иона Ag_c^+ , не приведет, по-видимому, к существенным изменением величины E_m^a . Тогда центры обоих типов, с дополнительным ионом Ag_c^+ вблизи и без него, должны иметь один и тот же спектр поглощения E_m^a .

Используя соответствующие преобразования нетрудно определить состав и структуру других электронных центров, представленных на рис. 3.

Выводы

1. Групповой подход к исследованию совокупности центров позволяет установить состав определенных типов электронных центров окраски и центров свечения в кристалле NaCl–Ag.

2. В пределах ближайших друг к другу 10 октаэдров анионов (анионных вакансий) предсказывается существование некоторых типов электронных центров. В решетке NaCl–Ag получается 70 типов электронных центров, объединенных в два 35 – плота. Один из них начинается с F-центра, а другой – Е-центра.

3. Каждый из типов центров этих мультиплетов состоит из неразличимого по спектрам поглощения дублета с противоположными спинами всех электронов.

4. Изучение структуры группы преобразований центров окраски и центров свечения может позволить в дальнейшем установить пока неизвестные особенности и закономерности взаимопревращения электронных центров и ионных кристаллах.

Список литературы

1. Займан Дж. Твердое тело. // УФН. – 1969. – Т. 97. – В. 1. – С. 160-168.
2. Вайскопф В. Квантовая теория и элементарные частицы. // УФН. – 1966. – 7.90 – В.3. – С. 513-530.
3. Вайскопф В. Три спектроскопии. // УФН. – 1968, – Т. 96. – В. 4. – С. 673-695.
4. Лушпа Р.Г., Ребане Л.А. Концентрационное поведение спектров и выходов в щелочно-галлоидных кристаллофосфоров активированных серебром. // Труды ИФА АН ЭССР. – 1961. – №14. – С 87-110.

5. Topa V. B. Centre in Ag doped Alkali halide crystals. // Rev. Roumaine Phys. –1967. Vol. 12, №13. – P. 781-786.

6. Парфианович И.А., Пензина Э.Э. Электронные центры окраски в ионных кристаллах // Иркутск. – 1977. – С. 208.

7. Эланго М.А., Муратов С.М. // ФТТ. – 1968. – Т. 10. – С. 3218-3222. // ФТТ. – 1969. – Т.2. – С. 3149-3153.

8. Kleeman W. Anionische silberzentren (B – zentren) in Alkalihalogeniden. // Zs.f. Phys. –1968. Vol.214, №3. – P. 285-230.

9. Арапов Б., Сидляренко В.И., Осмонбаев М. ЭПР и промежуточных радиационных дефектов в кристаллах KCl-Ag // Науч. труды ОшГУ. физ.-мат. науки. – 1995. В. 1. – С. 54-62.

10. Осмонбаев М.Ч. Роль вакансионных дефектов в распаде и преобразовании радиационных центров в кристаллах KCl и KCl: дис ... канд. физ.-матем. наук. – Ош, 1996.

11. Арапов Т.Б. Механизм и кинетика тушения свечения радиационно-наведенных центров окраски в ЩГК: дис. ... канд. физ.-матем. наук. – Ош, 2004.

СОЛНЕЧНАЯ АКТИВНОСТЬ И БИОСФЕРА ЗЕМЛИ

¹Либин И., ²Хорхе Перес Пераса

¹Международная Академия оценки и консалтинга;
²Институт Геофизики Национального Автономного
университета Мексика, Мексика, e-mail: libin@bk.ru

Для исследований влияния солнечной активности на биосферу Земли впервые был проведен совместный анализ космофизических и биофизических процессов.

Совместный анализ вариаций космофизических, климатических и биосферных индексов, который показал, что изменения солнечной активности являются модулятором изменений биосферы Земли и климата.

До начала XX века наука о Земле была ареной противоборства двух концепций: одна объясняла все процессы в экосфере Земли собственными земными явлениями, вторая подчеркивала решающий вклад космических источников в процессы на Земле, особенно на метеорологию, солнечную радиацию, биологию и медико-биологические явления в целом. Отсутствие экспериментальных данных о космическом пространстве делало невозможным даже построение теоретических моделей, описывающих влияние солнечной активности на атмосферу или биосферу Земли. Предпосылки для реальных теоретических моделей появились после запусков первых искусственных спутников Земли, когда начали проводиться непосредственные исследования космического пространства. В наши дни, когда для практических целей функционирует специальная служба прогноза солнечной активности, вопрос о воздействии космоса на биосферу не вызывает никаких сомнений.

Впервые в истории науки, в начале двадцатых годов прошлого века обратил внимание на синхронность солнечной активности и происходящих на Земле процессов Александр Леонидович Чижевский. Выдающийся российский ученый, мыслитель, он был вместе с тем и та-

лантливым художником, утонченным поэтом-философом и музыкантом. «Леонардо да Винчи XX века» назвали А.Л. Чижевского участники состоявшегося в Нью-Йорке в сентябре 1939 года I Международного конгресса по биофизике и космологии.

Дальнейшие исследования различных медико-биологических явлений на фоне изменений солнечной активности (смертность в некоторых крупных городах Европы, концентрация лейкоцитов в крови человека, наблюдения над различными физиологическими показателями человека, мировая статистика инфекционных заболеваний) подтвердили наличие статистических связей с солнечной активностью.

В 1964 году на конференции, проходившей в Ленинграде, профессор Паккарди из Италии сделал сенсационный доклад, после которого химики разных стран в одно и то же время (по Гринвичу) проводили простейший школьный опыт: следили за реакцией осаждения в коллоидном растворе оксихлорида висмута. Ученых волновали не результаты экспериментов (они были известны), а скорость прохождения реакции осаждения, потому что каждый раз она была различна для различных опытов, но одинакова по всей Земле. Значит, существовал какой-то общий для всей планеты фактор, влияющий на прохождение реакций. Это открытие, блестяще подтвержденное советским биофизиком из Пуццино С.Э.Шнолем, было последней каплей в накоплении данных об удивительных связях различных процессов на Земле с активностью Солнца. Оказалось, что реакция в любой точке земного шара на 99% оно зависит от солнечной активности.

Доказано, что в периоды вспышек на Солнце резко меняется состав крови: в эти моменты кровь напоминает ту, которая бывает у людей, перенесших радиоактивное облучение. Влияние на кровь оказывают не только долгопериодические циклы (как и на все в природе), но и годовые, сезонные, суточные и даже секундные. Кровь меняется постоянно – в нас, как вино, бродит Солнце.

Наряду с такими корифеями науки, как В.И. Вернадский и К.Э. Циолковский, А.Л. Чижевский положил начало новому космическому мировоззрению. Обнаружение влияний космических факторов на биологические и научно-социальные процессы – одно из самых значительных его вкладов в современное научное мышление. «Как же волнения и бури на Солнце влияют на планету? – писал он. – Продолжает ли наш космический корабль «Земля» спокойно и безмятежно плыть своим курсом или его все же «покачивает» на волнах солнечных циклов так, что время от времени слышен звон стаканов в кают-компани?».

Солнечная активность и климатологические процессы. Биосфера – это глобальное