

## **ГЛАВА 11. ФИЗИЧЕСКИЕ ЗНАНИЯ И ПРИНЦИПЫ В МЕЛИОРАЦИИ И ВОДНОМ ХОЗЯЙСТВЕ (Бадекин М.Ю., Басалаев Ю.М., Зуев С.М., Ивахненко Н.Н., Коноплин Н.А., Маринова С.А., Матовников А.В., Морозов А.В., Хусаинов Ш.Г., Шаташвили Т.А.)**

Отрасль мелиорации и водного хозяйства неразрывно связана с технологическим потенциалом промышленности, сельского хозяйства и многих других отраслей деятельности человека. Новые виды материалов, современные приборы и методы научных исследований, новейшие технологии и техника создают мощнейший импульс развития мелиоративной и водохозяйственной отрасли. Базу развития указанных выше категорий задают физические знания, являющиеся фундаментом подготовки специалистов любого естественнонаучного и инженерного направления.

Одним из передовых методов физического исследования в мелиорации и водном хозяйстве является физико-математическое моделирование. Рассмотрим пример применения данного метода для описания процессов формирования и функционирования подземных вод.

Подземные воды являются жизненно важным ресурсом для многих секторов потребления человеком в обществе во всем мире. Управление, защита и оценка подземных вод требуют количественных знаний о потоке в водоносных горизонтах. Количественная оценка потока подземных вод была серьезной проблемой для гидрологов, инженеров и прикладных математиков на протяжении более века, а методы ее количественной оценки являются одними из наиболее важных вопросов в гидрологии подземных вод. Первый шаг к количественной оценке потока воды в пористой среде был сделан Дарси, а полная математическая формулировка в виде уравнений в частных производных (УЧП) была представлена и проанализирована Буссинеском. После этих важных новаторских направлений было опубликовано множество статей и книг, обширные исследования продолжаются, о чем свидетельствуют непрерывные публикации в различных формах.

Одна из форм уравнения Буссинеска потока подземных вод в водоносном горизонте в двух измерениях имеет вид:

$$\phi \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( Kh \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( Kh \frac{\partial h}{\partial y} \right), \quad (11.1)$$

где  $h$  – гидравлический напор водоносного горизонта;  $K$  – насыщенная гидравлическая проводимость водоносного горизонта;  $\phi$  – либо эффективная пористость в безнапорных водоносных горизонтах, либо коэффициент накопительности в напорных водоносных горизонтах;  $x$  и  $y$  – пространственные переменные в двух направлениях;  $t$  – время.

Уравнение (14.1) применимо как к напорным, так и к безнапорным водоносным горизонтам, но с ключевым отличием, заключающимся в различии между параметрами и их определениями для двух типов водоносных горизонтов, которые резюмируются Брасом.

Согласно Беару, Буссинеск был первым, кто представил точное решение уравнения (14.1) для анализа потока подземных вод. Более века уравнения Буссинеска и его упрощения служили основой для анализа течения подземных вод. В одном измерении с включенным уклоном основания водоносного горизонта уравнение Буссинеска записывается так:

$$\phi \frac{\partial h}{\partial t} = K \left[ h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 - \omega \frac{\partial h}{\partial x} \right], \quad (11.2)$$

где  $\omega$  – уклон водоносного горизонта на непроницаемом основании.

Уравнение (14.2) можно записать следующим образом, чтобы учесть изменчивость насыщенной гидравлической проводимости:

$$\phi \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ Kh \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \omega \right] \quad (11.3)$$

Ясно, что уравнение (14.3) является следствием закона сохранения массы, определяемого выражением:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial x}, \quad (11.4)$$

где  $q$  – поток массы через поперечное сечение:

$$q = Kh \left( \omega - \frac{\partial h}{\partial x} \right) \quad (11.5)$$

В дополнение к применению и постоянному анализу [185, 228], за последние двадцать лет различные формы дробного уравнение Буссинеска были представлены на основе дробного исчисления. Приведенные некоторые из форм [190, 191] продемонстрировали применение дробных дифференциальных уравнений в частных производных к проблемам грунтовых вод.

В данной работе представлено двухчленное пространственно-временное дробное уравнение Буссинеска (ДУБ) распределенного порядка, которое может быть упрощено до различных форм, и решения после недавнего удовлетворительного применения аналогичного дробного дифференциального уравнения в частных производных к потоку подземных вод в радиальных координатах для гидравлики скважины. Дробное уравнение Буссинеска по определению включает дробные производные по времени и две компоненты дробных производных по пространству. Две составляющие дробной производной в пространстве объясняют прямое движение потока и эффект обратного подпора с помощью обратной дробной производной.

Концепция дробного исчисления была начата более 320 лет назад, но ее развитие и приложения не параллельны целочисленному исчислению. Несмотря на это несоответствие, некоторые концепции и методы, разработанные для дробного исчисления, нашли важные приложения, такие как дробные уравнения в частных производных и их связь с механикой жидкости и т.д. Такие примеры включают применение случайного блуждания с непрерывным временем для вывода основных уравнений течения и переноса в пористой среде, не прибегая к традиционному методу сохранения массы. Очень важная особенность полученного таким образом ДУБ связана с показателем переноса, который определяет характер потока и переноса двумя параметрами в модели случайного блуждания при непрерывном времени (СБНВ), а также связан с параметрами, определяющими фрактальное пространство и временные

структуры. СБНВ является дальнейшим развитием концепции случайного блуждания, которая была впервые математически проиллюстрирована Крофтоном в терминах случайного полета в качестве альтернативного термина, а затем использована Пирсоном. Явление, описываемое концепцией СБНВ, является аномальным, что является обобщением процессов переноса с классической диффузией как частным случаем. Теория переноса в модели случайного блуждания с непрерывным временем понимается в рамках классической теории восстановления и успешно применяется для моделирования движения растворенных веществ в пористой среде более 50 лет назад. В последние годы теория случайного блуждания с непрерывным временем все шире используется для моделирования потоков и переноса в различных геологических формациях, таких как водоносные горизонты и почвы.

Модель СБНВ обеспечивает основу для транспортных явлений, которая состоит из последовательности двух состояний независимо одинаково распределенных процессов: одно состояние соответствует положительным временам ожидания, обозначаемым  $T_1, T_2, T_3, \dots$ , каждое из которых имеет одинаковую функцию плотности вероятности  $\varphi(t), t > 0$ , а второе состояние представляет собой последовательность случайных скачков, обозначенных  $X_1, X_2, X_3, \dots$  в вещественной области, каждый из которых имеет одинаковую функцию плотности вероятности  $w(x), x \in \mathbb{R}$ . Плотность вероятности движения частицы или порции воды в среде равна  $p(x, t)$  и представлена рядом:

$$p(x, t) = \Psi(t)\delta(x) + \sum_{n=1}^{\infty} v_n(t)w_n(x), \quad (11.6)$$

где  $\Psi(t)$  – функция, определяемая выражением

$$\Psi(t) = \int_t^{\infty} \phi(t') dt' \quad (11.7)$$

$v_n(t)$  и  $w_n(x)$  – повторяющиеся свертки по времени и пространству, соответственно, заданные  $v_n(t) = (\Psi * \phi^{*n})(t)$ , и  $w_n(x) = (w^{*n})(t)$ . В уравнении (14.6) показано, что выражение:

$$\hat{u}(k, s) = \int_0^{\infty} \left[ \exp(-t_* |k|^\lambda i^{\omega \text{sign}(k)}) \right] \left[ s^{\beta-1} \exp(-t_* s^\beta) \right] dt_* \quad (11.8)$$

эквивалентно

$$\hat{u}(k, s) = \frac{s^{\beta-1}}{s^\beta + |k|^\lambda i^{\omega \text{sign}(k)}} \quad (11.9)$$

и представляет собой преобразование Лапласа-Фурье следующего уравнения дробного дифференциала в частных производных по времени и пространства:

$$\frac{\partial^\beta u(x, t)}{\partial t^\beta} = \frac{\partial^\lambda u(x, t)}{\partial x^\lambda}, \quad u(x, 0) = \delta(x), \quad (11.10)$$

где  $k$  и  $s$  – переменные преобразования Фурье и Лапласа соответственно;  $\beta$  – порядок дробной производной по времени,  $\lambda$  – порядок дробной производной по пространству.

Вышеизложенный факт означает, что модель случайного блуждания с непрерывным временем в области Лапласа-Фурье эквивалентна дробному уравнению Буссинеска во временной области, тем самым устанавливая связь между СБНВ и дробным уравнением Буссинеска. Модель СБНВ характеризуется долговременным пределом со скачками по степенному закону  $P(X > x) \approx x^{-\beta}$  и временем ожидания по степенному закону  $P(J > t) \approx t^{-\lambda}$  при  $P(X > x)$  и  $P(J > t)$  в качестве условных вероятностей переходов и времени ожидания соответственно. Уравнение (10) также можно записать в виде:

$${}_t D_*^\beta u(x, t) = {}_x D_{\varpi}^\lambda u(x, t), \quad u(x, 0) = \delta(x), \quad (11.11)$$

где левая часть уравнения (11) – дробная производная Капуто по времени, а правая часть – потенциал Рисса-Феллера (который определяет дробные производные) по пространству,  $\varpi$  – асимметрия.

Следует отметить, что дробная производная Рисса-Феллера становится дробной производной Лиувилля для  $\varpi = \pm\lambda$  с положительным знаком для прямой дробной производной и с отрицательным знаком для обратной дробной производной.

Приведенный выше краткий обзор показывает прямую связь между моделью случайного блуждания с непрерывным временем и дробным уравнением в частных производных для одного и того же транспортного процесса. Поток воды в ненасыщенных грунтах успешно описывается с помощью теории СБНВ, а поток в насыщенных средах должен иметь аналогичные свойства с насыщением в средах в качестве специального параметра. Учитывая, что движение растворенных веществ в пористой среде было успешно смоделировано с использованием теории случайного блуждания с непрерывным временем, поток воды, увлекающий за собой движение растворенных веществ в среде, может быть последовательно интерпретирован с использованием концепции случайного блуждания с непрерывным временем. Именно эта фундаментальная связь и более ранний успешный анализ побудили распространить подход с использованием теории СБНВ на насыщенный поток в водоносных горизонтах, который приводит к дробным уравнениям в частных производных.

Обычный поток или расход,  $q$ , на единицу ширины, был изменен в литературе, чтобы соответствовать дробной концепции. Вместо дробного градиента здесь используем дробный вывод потока, который можно рассматривать как компактную форму, предложенную Уиткрафтом и Мершартом:

$$\phi \frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial^\eta q}{\partial x^\eta}, \quad 0 < \eta \leq 1 \quad (11.12)$$

параметр  $q$ , задан уравнением (5). Дробный поток имеет две особенности, которые включают свойство инвариантности к масштабу, устраняет влияние масштаба на параметры. Заменяя скорость изменения во времени дробной

производной в уравнении (14.12) и комбинируя его с уравнением (11.5), можно привести его к следующему виду:

$$\phi \frac{\partial^\beta h}{\partial t^\beta} = -\frac{\partial^\eta}{\partial x^\eta} \left( Kh \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial^\eta}{\partial x^\eta} (\omega Kh), \quad 0 < \eta \leq 1, \quad (11.13)$$

уравнение (11.13) применяется как к замкнутым, так и к безнапорным водоносным горизонтам, аналогично уравнению (11.1), с той лишь разницей, что параметры определены для двух разных типов водоносных горизонтов. Уравнение (11.13) является нелинейным дробным уравнением в частных производных из-за члена  $Kh$ , который имеет очень интересные свойства по сравнению с его линейным аналогом. В гидрологических приложениях уравнение (11.13) можно упростить, используя коэффициент пропускания, который является особым термином, определяемым по-разному для безнапорных и напорных водоносных горизонтов.

Уравнение (11.13) также применимо как к однородным, так и к неоднородным водоносным горизонтам в зависимости от того, является ли гидравлическая проводимость  $K$  постоянной или функцией. На практике его упрощения предпочтительнее, чтобы упростить их применение. В следующих случаях упрощения достигаются для однородных водоносных горизонтов, где  $K$  является постоянным, а для неоднородных водоносных горизонтов используется коэффициент пропускания или средневзвешенное значение для  $K$ .

Следует отметить, что разложение члена  $\frac{\partial^\eta}{\partial x^\eta} \left( Kh \frac{\partial h}{\partial x} \right)$  в уравнении (11.13)

нельзя просто выполнить с помощью цепного правила Лейбница для целочисленного исчисления, и применяется более сложное цепное правило Лейбница, которое представляет собой бесконечный ряд произведения целого и дробного числа производных двух терминов  $Kh$  и  $\frac{\partial h}{\partial x}$ .

Для однородных водоносных горизонтов с постоянным  $K$  уравнение (11.13) имеет вид:

$$\phi \frac{\partial^\beta h}{\partial t^\beta} = K \frac{\partial^\eta}{\partial x^\eta} \left[ h \left( \frac{\partial h}{\partial x} - \omega \right) \right] \quad (11.14)$$

Уравнение (11.14) применимо как к замкнутым, так и к безнапорным водоносным горизонтам. При  $K = const$  уравнение (11.14) по-прежнему является нелинейным дробным уравнением в частных производных.

Для неоднородных напорных водоносных горизонтов  $K$  является функцией глубины,  $z$ , т.е.  $K(z)$ , на практике существует два метода ее определения. Одним из методов является взвешенная средняя гидравлическая проводимость для замкнутых водоносных горизонтов,  $\bar{K}_c$ , рекомендованная вместо обычной гидравлической проводимости,  $K$ , для неоднородного замкнутого водоносного горизонта в уравнении (14.13):

$$\bar{K}_c = \frac{1}{b} \int_0^b K(z) dz, \quad (11.15)$$

где  $b$  – толщина водоносного горизонта. Тогда взвешенный коэффициент пропускания для закрытых водоносных горизонтов,  $\bar{T}_c$ , равен

$$\bar{T}_c = \bar{K}_c h \quad (11.16)$$

Другой метод упрощения – использование среднего коэффициента пропускания:

$$\bar{T}_c = \int_{z_1}^{z_2} K(z) dz, \quad (11.17)$$

где  $z_1$  и  $z_2$  – высоты водоносного горизонта в двух точках интереса соответственно. Тогда уравнение (14.13) для неоднородных напорных водоносных горизонтов записывается так:

$$\phi \frac{\partial^\beta h}{\partial t^\beta} = \bar{T}_c \frac{\partial^\lambda h}{\partial x^\lambda} - \omega \bar{K}_c \frac{\partial^\eta h}{\partial x^\eta}, \quad (11.18)$$

где  $\lambda = \eta + 1$ . Уравнение (14.18) представляет собой линейное дробное уравнение в частных производных, которое отличается от линейного уравнения (11.14). Известно множество работ, в которых записаны аналитические

решения линейных дробных уравнений в частных производных либо с помощью дробного дифференциального уравнения, следующего за преобразованием Лапласа уравнения (11.18) либо в его современной форме.

Для неоднородных безнапорных водоносных горизонтов средняя проводимость определяется по формуле:

$$\bar{T}_u = \int_{z_1}^h K(z) dz, \quad (11.19)$$

где верхний интегральный предел представляет собой свободную поверхность водоносного горизонта, а не фиксированную высоту, а средневзвешенная гидравлическая проводимость для неоднородного безнапорного водоносного горизонта  $\bar{K}_u$  определяется выражением:

$$\bar{K}_u = \frac{1}{h} \int_0^h K(z) dz, \quad (11.20)$$

где верхний предел интегрирования  $z_1$  установлен равным нулю в качестве исходной точки отсчета, что также может применяться к уравнению (11.19). С уравнениями (11.19) и (11.20) для взвешенных средних, уравнение (11.13) для неоднородных безнапорных водоносных горизонтов теперь записывается с  $\lambda = \eta + 1$  так

$$\phi \frac{\partial^\beta h}{\partial t^\beta} = \bar{T}_u \frac{\partial^\lambda h}{\partial x^\lambda} - \omega \bar{K}_u \frac{\partial^\eta h}{\partial x^\eta} \quad (11.21)$$

и имеет идентичную структуру с уравнением (11.18) для неоднородных напорных водоносных горизонтов, но параметры представляют разные концепции.

Приведенный выше анализ показывает, что для однородных водоносных горизонтов применяется то же основное уравнение. Для неоднородных водоносных горизонтов упрощенные уравнения (11.18) и (11.21) выглядят одинаково по структуре, но два взвешенных параметра,  $\bar{T}$  и  $\bar{K}$ , определяются немного по-разному, разница заключается в верхнем пределе интеграла и знаменателе для взвешивания интеграла.

Дробные порядки в приведенных выше уравнениях  $\beta$ ,  $\lambda$  и  $\eta$  не обязательно являются дробями или константами, они также могут быть функциями времени, пространства и/или  $h$  или других параметров. Когда они являются функциями, порядки называются переменными порядками дробного дифференцирования. В этой работе рассмотрены только водоносные горизонты, где  $\beta$ ,  $\lambda$  и  $\eta$  являются дробями.

Выше представлен набор двучленных дробных уравнений Буссинеска с распределенным порядком во времени и пространстве для потока подземных вод, которые применимы как к замкнутым, так и к безнапорным водоносным горизонтам. Для безнапорных водоносных горизонтов представлено упрощенное ДУБ, а решения даны путем модификации общих решений. ДУБ формулируются на основе симметричных дробных производных в пространстве как для диффузии, так и для адвекции, которые объясняют процессы случайного блуждания.

В дробном уравнении Буссинеска двучленные дробные производные по времени используются для моделирования течения в больших и малых порах, чтобы соответствовать хорошо известной модели больших и малых пор. Для дробного уравнения Буссинеска, представленного для неоднородного водоносного горизонта, можно использовать либо средневзвешенный коэффициент пропускания,  $\bar{T}$ , либо нелинейное дробное уравнение Буссинеска. В то время как средний коэффициент пропускания широко используется, обращаем особое внимание на тот факт, что для конкретной формы гидравлической проводимости  $K(z) = \frac{1}{\lambda} \Gamma(1 + \lambda) z^{1-\lambda}$ , показывает, что

целочисленное уравнение в частных производных вида  $\frac{\partial}{\partial z} \left( K(z) \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0$  дает идентичный результат для фронта смачивания, полученного с использованием дробной модели при тех же граничных условиях. Этот факт означает, что самодробное уравнение Буссинеска эквивалентно классическому уравнению в частных производных с пространственно-зависимой проводимостью. В связи с

этим использование среднего коэффициента пропускания не является необходимым, так как само дробное уравнение Буссинеска учитывает пространственную изменчивость или нелокальный эффект, если гидравлическая проводимость принимает форму  $K(z) = \frac{1}{\lambda} \Gamma[1 + \lambda] z^{1-\lambda}$ , где  $\Gamma[1 + \lambda]$  — гамма-функция.

Большее количество решений ДУБ в различных условиях позволит по-новому взглянуть на то, как вода течет во фрактальных средах. Представленные здесь ДУБ применимы как к замкнутым, так и к безнапорным водоносным горизонтам.

Важнейшая роль физических знаний проявляется в вопросах создания новых уникальных по своим свойствам функциональных материалов. Кратчайший путь получения передовых строительных, конструкционных материалов, материалов для электронных компонент современных цифровых систем, компонент для современной высокопроизводительной техники, внедряемой в процессе цифровой трансформации отрасли мелиорации и водного хозяйства, предусматривает комплексный анализ механических, оптических, электрических, термодинамических и других важных физических свойств простейших и многокомпонентных химических соединений, сплавов, растворов. Современные физические методы исследования материалов включают в том числе цифровые методы расчета и прогнозирования их свойств. Примером применения указанных методов является исследование механических свойств кристаллов  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{SiO}_2$  и  $\text{SiS}_2$  в структуре  $\beta$ - $\text{SiO}_2$  с помощью кода CRYSTAL, реализующего расчеты на основе теории функционала плотности.

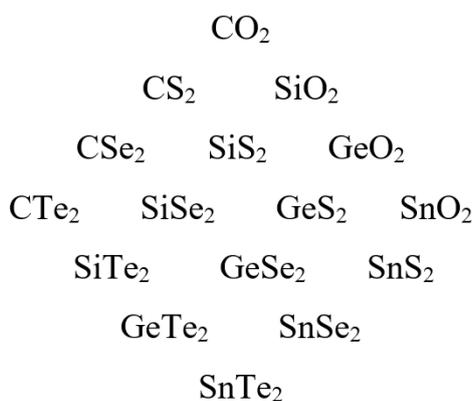
В настоящее время обсуждаются вопросы разработки «единой теории» кремния в сельском хозяйстве, мелиорации и водном хозяйстве, а также других важных технологических отраслях народного хозяйства [90, 130].

Полиморфизм диоксида кремния обеспечивает широкий спектр его практического применения. Среди множества структур  $\text{SiO}_2$  представляет

интерес структура дефектного халькопирита,  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>, в которой имеются упорядоченные пустоты [17, 91, 92].

Свойства химических соединений во многом определяются их составом и кристаллической структурой, которая зависит от химической связи катионов с анионами, что находит свое отражение в электронном строении и фоновых спектрах кристаллов. Исследования электронной структуры кристаллов со структурой дефектного халькопирита были выполнены нами в работах [17, 91, 92].

Диоксид кремния образует семейство кристаллов IV-VI<sub>2</sub>, которое можно представить в виде следующей диаграммы:



*Рисунок 11.1 – Семейство диоксида кремния*

Диаграмма на рисунке 11.1 позволяет сделать выводы об изменении физических свойств. Самой большой шириной запрещенной зоны ( $E_g$ ) обладает кристалл в ее вершине CO<sub>2</sub>. Величина  $E_g$  закономерно уменьшается в изокатионных и изоанионных рядах. Также закономерно изменяются свойства кристаллов в этих рядах, что обусловлено изменением химического состава и ослаблением химических связей. Самыми неупругими и легкоплавкими должны быть соединения, содержащие олово и теллур, особенно это касается SnTe<sub>2</sub>.

Способность кристаллического твердого тела изменять свою форму (деформироваться) под влиянием внешнего воздействия (нагрузки) и возвращаться в исходное равновесное состояние (восстанавливать свои

размеры и первоначальную форму) после прекращения этого воздействия называется упругостью. Она определяет механические свойства твердого тела и характеризуется модулями упругости, которые можно вычислить или измерить.

Программа CRYSTAL позволяет проводить высокоточные вычисления упругих постоянных кристаллов  $C_{ij}$  и с их помощью вычислять основные модули упругости: модуль Юнга ( $E$ ), модуль сдвига ( $G$ ), модуль объемной упругости ( $K$ ) и коэффициент Пуассона ( $\nu$ ).

Вычисленные нами параметры, характеризующие упругие свойства исследуемых соединений  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiS}_2$  представлены в таблице 11.1.

Таблица 11.1

**Упругие постоянные и модули упругости кристаллов  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiS}_2$   
(ГПа)**

Параметр	$\text{CO}_2$	$\text{CS}_2$	$\text{SiO}_2$	$\text{SiS}_2$
$C_{11}$	312	143	78	57
$C_{12}$	-10	7	-28	-1
$C_{13}$	133	70	21	27
$C_{33}$	311	142	86	51
$C_{44}$	176	88	26	34
$C_{66}$	107	42	29	17
$E$	298	134	65	47
$G$	126	55	30	20
$K$	155	78	27	29
$\nu$	0.18	0.21	0.10	0.21
$K/G$	1.23	1.42	0.90	0.69
$G/K$	0.81	0.71	1.11	1.45
$H_m$	26.94	10.63	6.87	3,76
$H_V$	22.31	10.56	10.16	5,03
$\gamma_D$	1.21	1.33	0.92	1,32

Существует несколько моделей определения модулей упругости твердых тел: модель Фойгта, Ройса и Хилла, в которых объемный модуль  $K$  и модуль сдвига  $G$  отличаются по величине. Расчет этих модулей выполнен с помощью программ кода CRYSTAL и результаты расчетов представлены в таблице 11.1. Там же даны значения модуля Юнга и коэффициента Пуассона  $\nu$ , вычисленные в модели Хилла. В коде CRYSTAL заложен один из наиболее достоверных

способов оценки упругих характеристик твердых тел в виде стандартной процедуры Фойгта – Ройсса – Хилла. Приближение Фойгта использует модель однородной локальной деформации, в которой заложено усреднение по телесному углу при вычислении модулей сдвига и всестороннего. Модель Ройсса основана на аналогичном усреднении, но для упругих постоянных. Поскольку оба приближения являются крайними предельными условиями, Хилл усреднил эти модели, что позволило получить более реальные значения модулей упругости.

Критериями механической стабильности для тетрагональных кристаллов, к которым относятся исследуемые нами кристаллы, являются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} C_{11} > 0, C_{33} > 0, C_{44} > 0, C_{66} > 0 \\ (C_{11} - C_{12}) > 0, (C_{11} + C_{33} - 2C_{13}) > 0 \\ [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}] > 0 \end{aligned} \quad (11.22)$$

Согласно данным таблицы 11.1 эти соотношения выполняются для всех исследуемых кристаллов. Для кристаллов с чисто ковалентной связью или существенным перекрытием электронных оболочек атомов выполняется неравенство  $C_{12} - C_{44} < 0$ , что справедливо для наших кристаллов и не противоречит данным, полученным при анализе химической связи в них по картам распределения электронной плотности [17, 91, 92].

По величине основных модулей упругости ( $E$ ,  $G$ ,  $K$ ) все кристаллы можно разделить на четыре группы: с высокими, повышенными, средними и низкими значениями модулей  $E$ ,  $G$ ,  $K$ . Кристаллы кварца относятся к средней группе, для которой определены следующие границы изменения значений модулей упругости: 50-100 ГПа для модуля Юнга ( $E$ ), 20-40 ГПа для модуля сдвига ( $G$ ) и 50-75 ГПа для модуля объемной упругости ( $K$ ).

С учетом этой классификации из исследуемой группы кристаллов к средней группе однозначно относится только  $\text{SiO}_2$ , значения модулей упругости  $\text{CO}_2$  показали высокие значения, остальные кристаллы относятся к четвертой низшей группе, что не противоречит известным экспериментальным данным.

Модуль объемной деформации или объемной упругости  $K$  характеризует свойство материала изменять свой объем при всестороннем сжатии или растяжении, он прямо пропорционален величине оказываемого давления. При одинаковых давлениях изменения относительного объема для  $\text{SiO}_2$  и  $\text{SiS}_2$  почти одинаковы, для  $\text{GeS}_2$  значение меньше приблизительно в 1.4, а для  $\text{CO}_2$  – в 1.2 раза.

Важную информацию можно получить из сопоставления модуля сдвига и модуля всестороннего сжатия: если  $K/G \geq 1.75$  кристалл является прочным и пластичным, а если  $K/G < 1.75$  – хрупким; для ковалентных кристаллов  $G/K \geq 1.1$ , а для ионных материалов  $G/K \leq 0.8$ . Исходя из этих условий можно сделать вывод, что кристаллы  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiS}_2$ ,  $\text{GeS}_2$  являются ковалентными (особенно  $\text{SiO}_2$ ), но хрупкими.

Закономерность изменения значений модулей упругости в изоэлектронном ряду исследуемых кристаллов объясняется следующими причинами. Поскольку кристаллическая структура не изменяется, и единообразно задается относительное положение атомов в кристаллах, на изменение в том числе упругих свойств влияют химический состав и плотность упаковки. Как было установлено с помощью анализа распределения электронной плотности для кристаллов  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiS}_2$  и  $\text{GeS}_2$  [17, 91, 92] характерны: преимущественно ковалентная связь и закономерное изменение плотности упаковки атомов, обусловленное изменением катионных и анионных радиусов, что и определяет упругие свойства этих кристаллов.

Естественной реакцией на растяжение или сжатие твердого тела является его стремление сохранить объем, что обусловлено химическим составом тела и химической связью между атомами, входящими в его состав. Соотношение между изменением линейного размера тела и изменением поперечного сечения

характеризуется коэффициентом Пуассона  $\nu$  (коэффициентом поперечной деформации), который определяется модулем величины  $\nu = |\varepsilon/\varepsilon_1|$ , устанавливающим связь между относительной поперечной ( $\varepsilon_1$ ) и продольной ( $\varepsilon$ ) деформацией, и, показывает, во сколько раз изменяется поперечное сечение деформируемого тела. Коэффициент Пуассона зависит только от материала твердого тела и не зависит от его размеров и формы сечения. Величина коэффициента Пуассона для разных материалов изменяется от 0 до 0.5. Кристалл считается несжимаемым, если  $\nu = 0.5$ .

Таблица 11.2

**Скорости распространения продольных ( $\nu_L$ ) и поперечных ( $\nu_{T1}, \nu_{T2}$ ) упругих волн кристаллов  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiS}_2$  (в км/с)**

Волновой вектор	$\text{CO}_2$			$\text{CS}_2$		
	$\nu_L$	$\nu_{T1}$	$\nu_{T2}$	$\nu_L$	$\nu_{T1}$	$\nu_{T2}$
(001)	9.949	7.489	5.982	7.284	5.731	5.731
(010),(100)	9.957	7.489	5.978	7.330	5.731	3.983
(110)	9.058	7.489	4.824	6.631	5.731	5.061
(101),(011)	11.259	6.717	5.772	8.529	4.935	3.672
(111)	10.876	7.270	5.349	8.237	5.294	3.462
Волновой вектор	$\text{SiO}_2$			$\text{SiS}_2$		
	$\nu_L$	$\nu_{T1}$	$\nu_{T2}$	$\nu_L$	$\nu_{T1}$	$\nu_{T2}$
(001)	5.982	3.421	3.421	4.788	3.790	3.790
(010),(100)	5.978	3.619	3.421	4.928	3.790	2.764
(110)	4.824	5.057	3.421	4.390	3.790	3.558
(101),(011)	5.772	3.761	3.522	5.644	3.317	2.472
(111)	5.349	4.577	3.246	5.437	3.637	2.301

В таблице 11.2 приведены скорости звука исследуемых кристаллов  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiS}_2$  для продольных ( $\nu_L$ ) и поперечных ( $\nu_{T1}$ ,  $\nu_{T2}$ ) направлений распространения упругих волн. Как видно из таблицы 11.2, значения продольных и поперечных скоростей зависят от направления, при этом для всех кристаллов выполняется неравенство  $\nu_L > \nu_T$ , за исключением волнового вектора (110) для кристалла  $\text{SiO}_2$ , для которого это условие не выполняется.

Твердость кристаллических твердых тел определяется микротвердостью (microhardness), которая является свойством, характеризующим прочность

химической связи между атомами, входящими в его состав и образующими кристаллическую решетку. Микротвердость кристалла определяют по наиболее слабым связям. С микротвердостью коррелируют такие важные характеристики, как температура плавления и ширина запрещенной зоны.

Наиболее точными и универсальными являются формулы нахождения микротвердости кристалла на основе коэффициента Пуассона и модуля Юнга:

$$H_m = \frac{E(1-2\nu)}{6(1+\nu)} \quad (11.23)$$

а также формулы, основанной на модулях сдвига и объемной упругости:

$$H_v = 0.92 \left( \frac{G}{K} \right)^{1.137} G^{0.708} \quad (11.24)$$

Результаты расчетов микротвердости исследуемых кристаллов, полученные на основе первопринципных расчетов упругих постоянных и модулей упругости представлены в таблице 11.1. Как видно из таблицы, максимальную микротвердость имеет кристалл CO<sub>2</sub>, а минимальную – SiSi<sub>2</sub>. Значения микротвердости кристаллов убывают в ряду CO<sub>2</sub>, CS<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub>, SiS<sub>2</sub>.

Еще одной важной физической величиной твердых тел является параметр Грюнайзена  $\gamma_D$ , который характеризует ангармонические свойства, обусловленные колебаниями кристаллической решетки и нелинейностью сил взаимодействия между атомами.

Параметр Грюнайзена является однозначной функцией отношения скоростей распространения продольных ( $v_l$ ) и поперечных ( $v_s$ ) звуковых волн:

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left[ \frac{3(v_l/v_s)^2 - 4}{(v_l/v_s)^2 + 2} \right] \quad (11.25)$$

и коэффициента Пуассона ( $\nu$ ):

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left[ \frac{1+\nu}{2-3\nu} \right] \quad (11.26)$$

Вычисленные по формулам (11.25 – 11.26) значения параметров Грюнайзена кристаллов CO<sub>2</sub>, CS<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub>, SiS<sub>2</sub> представлены в таблице 11.1.

Значения вычисленных нами параметров Грюнайзена  $\gamma_D$  (его средних значений) находятся в интервале от 1.0 до 3.0, который определен для большинства твердых тел, включая алмазоподобные соединения со структурой дефектного халькопирита.

Таким образом, теоретическое исследование механических свойств изоэлектронной группы соединений  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiS}_2$  со структурой дефектного халькопирита, основанное на первопринципных вычислениях с использованием возможностей программного кода CRYSTAL позволило выявить закономерности изменения упругих свойств, обусловленные изменением химического состава. Из анализа значений упругих постоянных для рассматриваемой тетрагональной структуры  $\beta\text{-SiO}_2$  следует вывод о том, что кристаллы  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}_2$  и  $\text{SiS}_2$  могут быть синтезированы в данной структуре, которая привлекательна с точки зрения наличия упорядоченных пустот, представляющих возможность их заполнения полезными веществами. Не менее привлекательной характеристикой является большая величина ширины запрещенной зоны рассматриваемых кристаллов, что определяет их как диэлектрики со свойствами полупроводников.

К веществам, обладающим экстремальными значениями физических характеристик (твёрдость, температуры плавления) и проявляющим разнообразные электронные, магнитные, механические свойства в широком интервале температур, приковано повышенное внимание исследователей. Это связано с возможностью их применения в различных областях народного хозяйства. Использование таких уникальных материалов в современном оборудовании для мелиорации и водного хозяйства создает перспективы резкого увеличения интенсивности проведения работ за счет повышения производительности техники и в целом составляющих отрасль технологических процессов. К таким перспективным функциональным материалам относится семейство тетраборидов редкоземельных элементов  $\text{RB}_4$  (где  $R$  – редкоземельный металл).

Тетрабориды редкоземельных металлов представляют собой изоструктурные соединения, кристаллическая решетка  $UB_4$ . В соединении с бором все редкоземельные металлы, за исключением Eu и Pm, образуют тетрабориды. Для подрешетки бора тетраборидов характерно сочетание элементов структур диборидов (цепочечные образования атомов бора) и гексаборидов (октаэдры атомов бора) [125]. Экстремальные значения твердости, характеристических температур, температур плавления тетраборидов РЗМ обусловлены большими значениями энергии связи в борной подрешетке тетраборидов.

Специфические электронные и магнитные свойства РЗ-тетраборидов обусловлены массивными и связанными между собой слабо атомами металла, расположенными в решетке над семиугольными кольцами атомов бора. Разнообразные физические и химические свойства, высокие значения ряда характеристик делают тетрабориды РЗЭ весьма перспективными для использования в гидромелиоративной технике, машиностроении, приборостроении, металлургии и т.п.

Согласно фазовым диаграммам тетраборид  $ErB_4$  может быть получен в твердой фазе синтезом из металла и бора путем стехиометрического смешивания металла с бором и последующего отжига. В настоящей работе получение тетраборида происходило в два этапа [150]. На первом этапе редкоземельный металл механически измельчался, а затем по схеме  $Er+4 \cdot B \rightarrow ErB_4$  смешивался с аморфным бором стехиометрически. Затем смесь прессовалась в таблетку и помещалась в молибденовый тигель. Тигель загружался в высокотемпературную печь. Синтез проводился при температуре  $1200^\circ\text{C}$  в аргоне в течение четырех часов. На втором этапе для удаления посторонних примесей использовался отжиг при высокой температуре. Синтез проводился при температуре  $1700^\circ\text{C}$  в течение полутора часов. Содержания посторонних примесей и фаз проводилось спектральным, химическим и рентгенофазовым анализами. В полученных образцах содержание примесей оказалось менее 1 % в массовом отношении.

Измерение теплоемкости проводилось на калориметре фирмы «Гермакс». Данный калориметр реализует классический адиабатический метод определения теплоемкости [150]. Температура в ходе калориметрического опыта измерялась железо-родиевым термометром, изготовленным и проградуированным в ВНИИФТРИ. Погрешность измерения теплоемкости в области 2-20 К составляет 3%, при более высоких температурах она снижается до 1% и остается в этих пределах.

На рисунке 11.2 показана температурная зависимость экспериментальных значений молярной теплоемкости тетраборида эрбия в интервале температур 2-300 К в сравнении с литературными данными. Экспериментальные значения получены на низкотемпературной вакуумной калориметрической установке с периодическим нагревом.

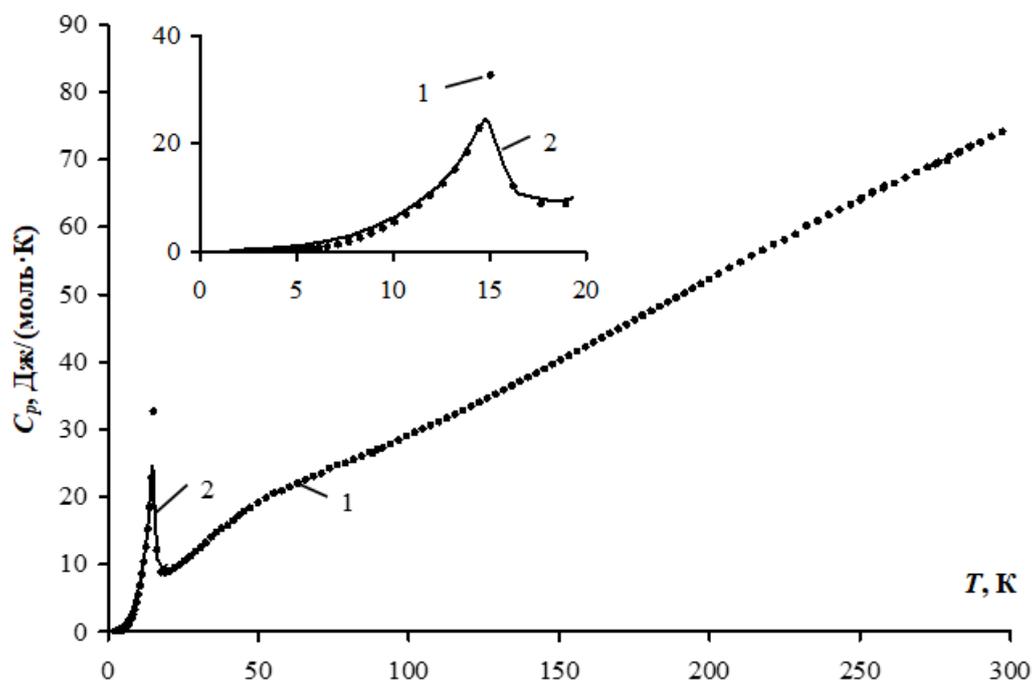


Рисунок 11.2 – Температурная зависимость изобарной молярной теплоемкости  $C_p(T)$   $ErB_4$ . 1 – экспериментальные значения, 2 – [229]

Как видно из рисунка 11.2, представленные результаты хорошо согласуются с имеющимися литературными данными. Слабые расхождения величин теплоёмкости, полученных в настоящей работе, с имеющимися литературными данными можно отнести к возможному отклонению от

стехиометрии в составе  $ErB_4$ , к разным методам получения образцов, к влиянию разнообразных примесей.

Температурная зависимость теплоемкости тетраборида эрбия имеет несколько отличительных признаков – высокий максимум при низких температурах, присутствие разных аномалий в области умеренно низких температур, близкий к линейному ход  $C_p(T)$  в верхней части изучаемого температурного интервала. Указанные особенности также соответствуют имеющимся данным других исследований.

Аномалии обнаруженные на температурной зависимости теплоемкости  $C_p(T)$  тетраборида эрбия обусловлены, вероятно, различными процессами: максимум при температуре  $T_N=15.2$  К процессами магнитного упорядочения, возможен вклад Шоттки в теплоёмкость в расплывчатый максимум вблизи 20 К.

Интегрируя сглаженные зависимости  $C_p(T)$ ,  $C_p(T)/T$  были рассчитаны температурные зависимости энтальпии, энтропии, свободной энергии Гиббса тетраборида эрбия. Аппроксимируя сглаженные температурные зависимости  $C_p(T)$  к абсолютному нулю по соотношению  $C_p(T) \cong C_v(T) = a \cdot T + b \cdot T^3$ , где первое слагаемое представляет собой вклад свободных электронов в теплоёмкость борида, второе – суммарный решёточный и возможный антиферромагнитные вклады, были определены коэффициенты  $a$  и  $b$ :  $a=7.34 \cdot 10^{-4}$  Дж·моль/К<sup>2</sup> и  $b=6.27 \cdot 10^{-5}$  Дж·моль/К<sup>4</sup>.

Были определены стандартные значения (при  $T=298.15$  К) молярной теплоемкости  $C_p^\circ = 74.29 \pm 0.30$  Дж/(моль·К), характеристических термодинамических функций  $S_{298.15}^\circ = 91.29 \pm 0.37$  Дж/(моль·К),  $\Delta H_{298.15}^\circ = H^\circ(298.15) - H^\circ(0) = 12.06 \pm 0.05$  кДж/моль,  $\Delta G_{298.15}^\circ = -15.15 \pm 0.06$  кДж/моль.

Для того чтобы проанализировать особенности магнитной подсистемы тетраборида эрбия необходимо было отделить электронный и решёточный (фононный) вклады в теплоемкость. Это было сделано следующим образом.

Предполагаем в первом приближении одинаковыми величины электронного вклада в теплоемкость тетраборида эрбия и изоструктурного ему тетраборида лютеция. Решеточный вклад  $c_{lat}(T)$  в теплоемкость тетраборида эрбия рассчитан по методу соответствия сравнением с решеточной теплоемкостью  $\text{LuB}_4$  [217].

Температурная зависимость избыточной составляющей теплоемкости:  $\Delta c(T) = c(T) - c_{lat}(T) - c_{el}(T)$  получена вычитая решеточный, электронный вклады из полной теплоемкости  $\text{ErB}_4$ :  $\Delta c(T) = c(T) - c_{lat}(T) - c_{el}(T)$ . Энтропия, соответствующая  $\Delta c(T)$ ,  $\Delta S(T) = \int_0^T (\Delta c/T) dT$ , с ростом температуры стремится к величине 27.12 Дж/(моль·К).

Полученное значение энтропии значительно выше максимального изменения энтропии, связанной с нарушением антиферромагнитной упорядоченности:  $\Delta S_{m.\max} = R \ln(2J + 1) = R \ln 16$ , где  $R$  – газовая постоянная,  $J=15/2$  – квантовое число полного момента электронов  $\text{Er}^{3+}$ .

Мы предполагаем, что наряду с магнитным вкладом величина  $\Delta c(T)$  содержит ещё одну составляющую. Вероятно, здесь можно говорить о вкладе Шоттки в теплоемкость  $\text{ErB}_4$ , что характерно для многих соединений редкоземельных металлов:  $\Delta c(T) = c_m(T) + c_{Sch}(T)$ . Определить температурную зависимость теплоемкости Шоттки тетраборида эрбия можно следующим образом [164].

Как известно энергетические уровни ионов, содержащих нечетное число электронов, расщепляются на  $J+1/2$  дублетов. Таким образом, схема расщепления она  $\text{Er}^{3+}$  будет содержать восемь дублетов. В этом случае для четырехуровневого приближения кратности вырождения  $\xi_0$  основного и  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  возбуждённых уровней. Возбужденные уровни отделённый от основного энергиями  $\delta_1, \delta_2$  и  $\delta_3$ . Тогда статистическая сумма по состояниям  $Z$  имеет вид:

$Z = \xi_0 + \xi_1 e^{-\frac{\delta_1}{kT}} + \xi_2 e^{-\frac{\delta_2}{kT}} + \xi_3 e^{-\frac{\delta_3}{kT}}$ , здесь  $\delta_i$  – величины расщепления,  $k$  – постоянная Больцмана.

Теплоёмкость Шоттки  $c_{Sch}$  – это составляющая теплоёмкости, связанная с переходами электронов между основным и возбуждёнными состояниями, она определяется по термодинамическому выражению:  $c_{Sch} = \frac{\partial}{\partial T} (RT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T})$ .

Подставляя выражения для  $Z$  можно получить следующую температурную зависимость молярного шотткиевского вклада в теплоемкость для случая четырёхуровневой системы:

$$C_{Sch} = 2RT \frac{(n_1 \frac{\delta_1}{T^2} e^{-\frac{\delta_1}{kT}} + n_2 \frac{\delta_2}{T^2} e^{-\frac{\delta_2}{kT}} + n_3 \frac{\delta_3}{T^2} e^{-\frac{\delta_3}{kT}})}{(1 + n_1 e^{-\frac{\delta_1}{kT}} + n_2 e^{-\frac{\delta_2}{kT}} + n_3 e^{-\frac{\delta_3}{kT}})^2}. \text{ Здесь } n_1, n_2, n_3 \text{ – отношение}$$

кратностей вырождения 1-го, 2-го и 3-го возбуждённых состояний к кратности вырождения основного состояния:  $n_1 = \frac{\xi_1}{\xi_0}$ ,  $n_2 = \frac{\xi_2}{\xi_0}$ ,  $n_3 = \frac{\xi_3}{\xi_0}$ .

Перебирая возможные значений  $n_i$  и  $\delta_i$ , при этом основываясь на наилучшем согласии с экспериментальными данными теплоемкости  $\text{ErV}_4$ , нами были получены следующие значения указанных параметров расщепления:  $\delta_1/k=85$  К,  $n_1=2$ ;  $\delta_2/k=240$  К,  $n_2=3$ ;  $\delta_3/k=700$  К,  $n_3=2$ .

Температурная зависимость магнитной составляющей теплоемкости  $\text{ErV}_4$  получена вычитанием вклада Шоттки в теплоемкость из избыточной теплоемкости  $\Delta c(T)$ .

На рисунке 11.3 представлены зависимости от температуры решеточного, магнитного вклада в теплоемкость, а также вклад Шоттки и полная теплоемкость тетраборида эрбия.

Одну из основных характеристик обменного взаимодействия в системе атомных магнитных моментов ионов  $\text{Er}^{3+}$  – величину обменного интеграла  $J$  (или обменного параметра  $J/k$ , где  $k$  – постоянная Больцмана) можно определить из полученной температурной зависимости магнитной

составляющей теплоёмкости  $c_m(T)$ . В настоящей работе это было сделано различными способами.

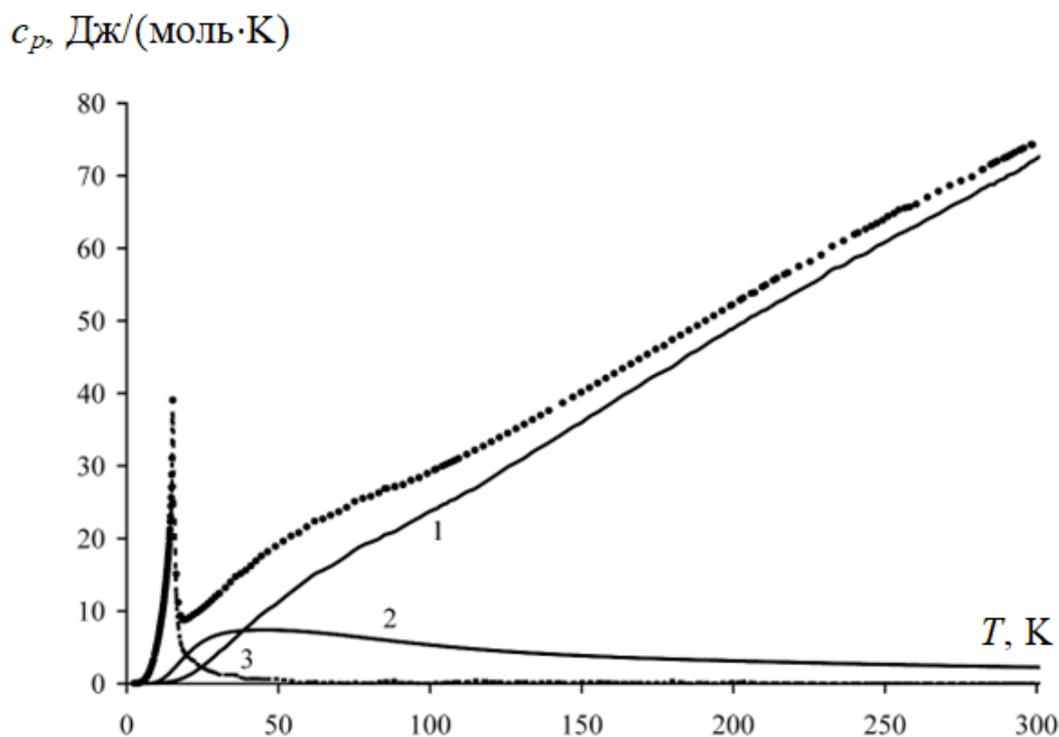


Рисунок 11.3 – Температурная зависимость составляющих теплоемкости тетраборида эрбия (точки – экспериментальные данные, 1 – решеточная составляющая, 2 – вклад Шоттки, 3 – магнитная составляющая)

Первый способ позволяет определить величину  $J/k$  из температуры магнитного превращения (температуры Нееля)  $T_N$ :  $J/k = 3T_N/2zs(s+1)$ . Здесь  $z=5$  – число ближайших соседей,  $s=3/2$  – спиновое число. Для  $\text{ErB}_4$  величина  $(J/k)_{T_N}$ , полученная по значению  $T_N=15.2$  К, оказалась равной 1.216 К.

Величину  $J/k$  также можно определить из энтальпии магнитного превращения – второй способ. Интегрируя магнитный вклад в теплоемкость

можно рассчитать величину магнитной энтальпии: 
$$\Delta H_m = \int_0^{\infty} c_m(T) dT.$$

Для тетраборида эрбия  $\Delta H_m=138$  Дж/моль. Так как  $\Delta H_m = RzS^2J/k$ , то для обменного параметра в системе  $\text{Er}^{3+}$  получена величина  $(J/k)_{\Delta H_m}=1.80$  К.

С другой стороны, магнитная составляющая теплоемкости  $\Delta c_m = c - c_{el} - c_{lat} - c_{Sch}$  при  $T_N \ll T$  пропорциональна  $T^{-2}$ :  $c_m = 2RS^2(S+1)^2zJ^2/3k^2T^2$ ,

т.е. величина  $c_m T^2(T) = \text{const}$ . Если проанализировать зависимость  $c_m T^2(T)$ , то можно определить обменный параметр  $(J/k)_{c_m} = 1.57 \text{ K}$  – это третий способ.

Анализируя полученные значения величин обменного параметра  $J/k$  магнитной подсистемы тетраборида эрбия, рассчитанные с использованием различных методов, можно заметить различия в полученных величинах. По всей видимости, величина  $(J/k)_{T_N}$ , рассчитанная из температуры Нееля  $T_N$ , является оценочной. Так как параметр  $J/k$  в большой степени зависит от типа кристаллической решётки, то его истинное значение выше рассчитанного по представленной формуле.

Величина  $(J/k)_{c_m}$  рассчитанная с использованием магнитной составляющей теплоемкости очень сильно зависит от определения вклада Шоттки. Даже малые изменения параметров этого вклада могут привести к значительным изменениям «хвоста» магнитной теплоёмкости и, соответственно, величины обменного параметра. Следовательно, погрешность определения величины  $(J/k)_{c_m}$  может быть также высокой.

Учитывая вышесказанное, по нашему мнению, следует считать, что величина обменного параметра, определенная из магнитной энтальпии  $(J/k)_{\Delta H_m}$ , ближе остальных к её действительному значению:  $J/k = 1.80 \text{ K}$ .

Калориметрическое исследование термических свойств тетраборида эрбия позволило выявить температурные изменения его тепловых свойств, закономерности этих изменений, а также определить величины характеристик его магнитной, решеточной, электронной подсистем.

Переход в антиферромагнитное состояние тетраборида эрбия проявляется в виде аномалий температурных зависимостей его тепловых свойств. Определение, анализ магнитного вклада, вклада Шоттки в теплоемкость  $\text{ErB}_4$  позволяет рассчитать величину обменного параметра в системе парамагнитных ионов  $\text{Er}^{3+}$ , а также характер расщепления основного  $f$ -уровня кристаллическим электрическим полем.

Внедрение современных инновационных технологий, в том числе в области гидромелиорации и водного хозяйства, сопровождается необходимостью подготовки специалистов, способных осваивать и использовать передовые технологии в процессе профессиональной деятельности [71]. К обозначенным инновациям можно смело отнести навигационное спутниковое оборудование, машинное зрение, беспилотные летательные аппараты, искусственный интеллект. Этот процесс неразделим с процессом корректировки образовательных компетенций профессиональных и специальных дисциплин учебных планов вузов, осуществляющих подготовку таких специалистов. Базовые знания для специальных и профессиональных технических дисциплин, необходимых для профессиональной подготовки любого инженера, в том числе специалиста в области гидромелиорации и водного хозяйства, формирует дисциплина «Физика». Внедрение в профессиональные дисциплины новых передовых компетенций порождает необходимость детального изучения соответствующих им разделов физики.

Важной целью является анализ компетенций дисциплины «Физика» и путей их реализации в учебном процессе бакалавриата по направлениям подготовки 35.03.11 «Гидромелиорация» и 20.03.02 «Природообустройство и водопользование» с учетом специфики образовательных стандартов, содержащих современные требования к профессиональным компетенциям специалистов.

В государственных образовательных стандартах для бакалавров и магистров основу подготовки в вузе стал составлять процесс освоения компетенций [74]. Содержание понятия «компетенция» более широкое в сравнении с понятием «профессионализм». Оно включает, помимо теоретической и прикладной подготовки, элементы надпрофессионального характера. Итогом компетентного подхода является более эффективное продвижение студента вуза на высокий уровень профессионального совершенства.

В настоящее время обучение в бакалавриате по направлениям 35.03.11 «Гидромелиорация» и 20.03.02 «Природообустройство и водопользование» в высших учебных заведениях России ведется по федеральным государственным образовательным стандартам высшего образования (ФГОС ВО) поколения 3++ [112], утвержденным в 2020 году. В данных образовательных стандартах учтены требования профессиональных стандартов для специалистов по реализуемым направлениям подготовки.

Реализация действующего ФГОС ВО предусматривает возможность распределения компетенций и выбора содержания части профессиональных компетенций высшим учебным заведением с целью формирования максимально эффективного содержания учебного процесса для обучающегося, в том числе по индивидуальной траектории обучения. С учетом этого важную роль начинает играть эффективность научно-педагогической школы вуза по соответствующему направлению подготовки, опыт реализации образовательной программы его педагогическим коллективом, возможности материально-технической базы профильных кафедр, которые позволяют вносить в содержание компетенций широкий диапазон инновационных технологий. При этом непрофильные или менее рейтинговые вузы, реализующие такие же направления подготовки, стараются использовать учебные планы и рабочие программы передовых учебных заведений в качестве ориентира для реализации в собственном учебном процессе.

Передовым образовательным высшим учебным заведением, обладающим мощными научно-педагогическими школами по направлениям подготовки студентов в области гидромелиорации и водного хозяйства, относится Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева. В 2022 году в учебные планы направлений подготовки 35.03.11 «Гидромелиорация» и 20.03.02 «Природообустройство и водопользование» вуза для дисциплины «Физика» предусмотрено освоение компетенций, указанных в таблице, представленной в Приложении.

При этом отметим, что формирование данных компетенций осуществляется при освоении целого набора дисциплин. Знания, умения и навыки, получаемые студентами при изучении физики, являются одним из компонентов, обеспечивающих их целостность.

Анализ содержания компетенций и индикаторов их достижения показывает, что для направлений подготовки 35.03.11 «Гидромелиорация» и 20.03.02 «Природообустройство и водопользование» актуальна совокупность компетенций, необходимых для освоения будущим специалистом своей специальности, требует значительного увеличения знаний и умений в области физического эксперимента. Универсальным требованием к будущему работнику остается знание и умение применять основные законы дисциплины «Физика», умение их выделять в основных задачах профессиональной деятельности; формирование способности решать типовые задачи из области профессиональной деятельности на основе знаний основных законов физики с применением информационно-коммуникационных технологий; формирование способности проводить и оценивать результаты измерений, готовности изучать и использовать научно-техническую информацию, готовности исследовать имеющийся опыт по профессиональной тематике.

Следует отметить, что главным акцентом в процессе освоения физики является формирование универсальных и общепрофессиональных компетенций. Физика формирует теоретические основы технических дисциплин, расширяет научный и политехнический кругозор будущего специалиста водохозяйственного комплекса, формирует первичные навыки проведения измерений. В процессе обучения студенты развивают техническое мышление. Степень его развития напрямую соответствует уровню физических знаний.

Главным результатом освоения составляющей компетенций в области физического эксперимента для инженера водного хозяйства является формирование способности использования этих знаний, умений и навыков в решении профессиональных практических задач. Знание, полученные на

лабораторных работах по физике, являются важнейшим компонентом практической подготовки бакалавра, определяющей также его готовность к поиску информации эмпирическими методами.

Учет современных тенденций в системе образования, внедряемых в практическую деятельность инновационных технологий, эффективным инструментом повышения результативности учебного процесса студентов является внедрение компьютерных лабораторных установок, включение в лабораторный практикум лабораторных работ по тематикам, положенных в основу функционирования передовых технических систем, использование эффективных методов проведения работ [72, 73]. Традиционно курс лабораторных работ по физике для направлений подготовки в области мелиорации и водного хозяйства базируется на наборе классических установок по механике, молекулярной физике, электромагнетизму и оптике. А первостепенная роль в общей трудоемкости физики отводилась разделу «Механика».

Современная технологическая база отрасли водного хозяйства, как и всех других отраслей, вследствие происходящей цифровой трансформации, сместила акценты в сторону электронных технологий. Изменение содержания получаемых знаний приводит к необходимости корректировки состава лабораторного оборудования кабинета физики. Важным элементом учебного процесса должны стать лабораторные работы по изучению физических принципов работы GPS-технологий, установки по исследованию принципов работы основных электронных элементов (датчиков, микросхем), по изучению метода спектрального анализа вещества, основ современных оптических измерительных приборов. Выполнение указанных работ в совокупности с традиционно используемыми в учебном процессе установками, позволит более эффективно сформировать у будущего инженера основу для овладения профессиональными компетенциями, содержащими умения и навыки в области современных технологий в профессиональной деятельности.

Заметим, что с повышением объема итоговых знаний и компетенций, большую роль начинает играть объем входных знаний. Эти знания приобретаются студентами при выполнении самостоятельной работы, а также являются результатом освоения школьного курса физики. Начало занятия с современным дорогостоящим оборудованием будет подразумевать тщательный контроль самостоятельной работы студента по изучению описания лабораторной работы. Для организации эффективной самостоятельной работы студентов потребуется эффективное методическое обеспечение и соответствующие образовательные технологии.