

# Г О Д И Ш Н И К

НА

СОФИЙСКИЯ УНИВЕРСИТЕТ  
„СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ“

ФИЗИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

Том 106

---

## ANNUAIRE

DE

L'UNIVERSITE DE SOFIA  
FACULTE DE PHYSIQUE

Tome 106

СОФИЯ • 2013 • SOFIA  
УНИВЕРСИТЕТСКО ИЗДАТЕЛСТВО „СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ“  
PRESSES UNIVERSITAIRES “ST. KLIMENT OHRIDSKI”

Годишник на Софийския университет „Св. Климент Охридски“  
Физически факултет

Annuaire de l'Universite de Sofia "St. Kliment Ohridski"  
Faculte de Physique

*Editor-in-Chief* Assoc. Prof. Valentin Popov, Dr. Habil.  
vpopov@phys.uni-sofia.bg

*Editorial Board:* Assoc. Prof. Ventzislav Yankov, PhD  
rusanov@phys.uni-sofia.bg  
Assoc. Prof. Elisaveta Peneva, PhD  
elfa@phys.uni-sofia.bg  
Assoc. Prof. Milena Georgieva, PhD  
mgeorgieva@phys.uni-sofia.bg  
Assoc. Prof. Plamen Dankov, PhD  
mgeorgieva@phys.uni-sofia.bg

*Editor* Tsvetanka Fizieva  
cvet@phys.uni-sofia.bg

Address for correspondence:

Faculty of Physics  
St. Kliment Ohridski University of Sofia  
5, J. Bourchier, Blvd, 1164 Sofia, Bulgaria  
Fax: (+359 2) 96 25 276

E-mail: annuaire@phys.uni-sofia.bg  
URL: <http://www.phys.uni-sofia.bg/annual/>

## CONTENTS

1. <i>Tatyana Avdjieva, Gichka Tsutsumanova, Stoyan Russev.</i> ELECTRON MICROSCOPY OF THE MICROSTRUCTURE OF LOW CARBON Cr-Ni STEEL .....	5
2. <i>Galya Dimova, Konstantin Staevski.</i> PROBABILITY DISTRIBUTION OF THE DEFECTS OF THE METAL OF THE COMPONENTS, I-ST CONTOUR OF NUCLEAR POWER PLANT TYPE WWER .....	25
3. <i>Rositsa Marinova, Valery Kochev.</i> LIPID MODEL SYSTEMS IN MEDICINE .....	34
4. <i>Boryana Markova, Rumjana Mitzeva.</i> THRESHOLDS OF CAPE AND LIFTED INDEX AT THE DEVELOPMENT OF SUMMER THUNDERSTORMS OVER INLAND AND ALONG THE COAST IN EASTERN BULGARIA .....	64
5. <i>Dimitar Marvakov.</i> GIBBS ENSEMBLES AND FERMI-DIRAC AND BOSE-EINSTEIN DISTRIBUTIONS .....	77
6. <i>Tzvetan Simeonov, Keranka Vassileva, Guergana Guerova.</i> APPLICATION OF GROUND-BASED GNSS METEOROLOGY IN BULGARIA/SOUTHEAST EUROPE: CASE STUDY 2007 HEAT WAVE .....	88
7. <i>Filip Simeonov, Valery Kochev.</i> IMPEDANCE ANALYSIS OF LIPID LIQUID FILMS WITH THE AID OF DEVICE BASED ON PC SOUND CARD .....	101
8. <i>Evgeni Syrakov, Jens Bonewitz.</i> SOME LARGE SCALE EFFECTS, RELATED TO HORIZONTAL THERMAL NONHOMOGENEITIES IN THE ATMOSPHERE BOUNDARY LAYER (ABL) .....	126
9. <i>Evgeni Syrakov, Jens Bonewitz, Silvia Petrova.</i> ON THE RELATION OF THERMAL AND OROGRAPHIC LAPLACIAN WITH MAIN KLIMATIC PROCESSES IN THE ATMOSPHERE .....	138
10. <i>Evgeni Syrakov, Jens Bonewitz.</i> IMPACT OF THE ARRANGED SINOPTIC VERTICAL VELOCITIES ON THE HEIGHT OF THE ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER .....	148
11. <i>Konstantin Staevski.</i> FORTY YEARS “ENGINEERING PHYSICS” .....	154

## СЪДЪРЖАНИЕ

1. <i>Татяна Авджиева, Гичка Цуцуманова, Стоян Русев.</i> ЕЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПСКО ИЗСЛЕДВАНЕ НА МИКРОСТРУКТУРАТА НА НИСКОВЪГЛЕРОДНА Cr-Ni СТОМАНА .....	5
2. <i>Галя Димова, Константин Стаевски.</i> ВЕРОЯТНОСТНО РАЗПРЕДЕЛЕНИЕ НА ДЕФЕКТИ В МЕТАЛА НА КОМПОНЕНТИ ОТ I-ВИ КОНТУР НА АТОМНИ ЕЛЕКТРОЦЕНТРАЛИ ТИП ВВЕР .....	25
3. <i>Росица Маринова, Валери Кочев.</i> ЛИПИДНИ МОДЕЛНИ СИСТЕМИ В МЕДИЦИНАТА .....	34
4. <i>Боряна Маркова, Румяна Мицева.</i> ПРАГОВИ СТОЙНОСТИ НА SCAPE И LIFTED INDEX ЗА РАЗВИТИЕ НА ЛЕТНИ ГРЪМОТЕВИЧНИ ОБЛАЦИ НАД ВЪТРЕШНОСТТА И КРАЙБРЕЖИЕТО НА ИЗТОЧНА БЪЛГАРИЯ .....	64
5. <i>Димитър Мърваков.</i> АНСАМБЛИ НА ГИБС И РАЗПРЕДЕЛЕНИЯ НА ФЕРМИ-ДИРАК И БОЗЕ-АЙНЩАЙН .....	77
6. <i>Цветан Симеонов, Керанка Василева, Гергана Герова.</i> ПРИЛОЖЕНИЕ НА НАЗЕМНИТЕ ИЗМЕРВАНИЯ С ГЛОБАЛНИТЕ СПЪТНИКОВИ СИСТЕМИ ЗА ПОЗИЦИОНИРАНЕ В МЕТЕОРОЛОГИЯТА В БЪЛГАРИЯ И ЮГОИЗТОЧНА ЕВРОПА ПРИ ИЗСЛЕДВАНЕТО НА ТОПЛИННАТА ВЪЛНА ОТ 2007 ГОДИНА .....	88
7. <i>Филип Симеонов, Валери Кочев.</i> ИМПЕДАНСЕН АНАЛИЗ НА ТЕЧНИ ЛИПИДНИ ФИЛМИ С ПОМОЩТА НА УСТРОЙСТВО, БАЗИРАНО НА КОМПЮТЪРНАТА ЗВУКОВА КАРТА .....	101
8. <i>Евгени Сираков, Йенс Боневци.</i> НЯКОИ КРУПНОМАЩАБНИ ЕФЕКТИ, СВЪРЗАНИ С ХОРИЗОНТАЛНИ ТЕРМИЧНИ НЕЕДНОРОДНОСТИ В АТМОСФЕРНИЯ ГРАНИЧЕН СЛОЙ (АГС) .....	126
9. <i>Евгени Сираков, Йенс Боневци, Силвия Петрова.</i> ВЪРХУ ВРЪЗКАТА НА ТЕРМИЧНИЯ И ОРОГРАФСКИЯ ЛАПЛАСИАН С ОСНОВНИ КЛИМАТИЧНИ ПРОЦЕСИ В АТМОСФЕРАТА .....	138
10. <i>Евгени Сираков, Йенс Боневци.</i> ВЛИЯНИЕ НА ПОДРЕДЕНИТЕ СИНОПТИЧНИ ВЕРТИКАЛНИ ДВИЖЕНИЯ ВЪРХУ ВИСОЧИНАТА НА АТМОСФЕРНИЯ ГРАНИЧЕН СЛОЙ .....	148
11. <i>Константин Стаевски.</i> ЧЕТИРИДЕСЕТ ГОДИНИ СПЕЦИАЛНОСТ „ИНЖЕНЕРНА ФИЗИКА“. НИЕ, ЧЕТИРИДЕСЕТГОДИШНИТЕ – А СЕГА, НАКЪДЕ? .....	154



## ЕЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПСКО ИЗСЛЕДВАНЕ НА МИКРОСТРУКТУРАТА НА НИСКОВЪГЛЕРОДНА CR-NI СТОМАНА

ТАТЯНА АВДЖИЕВА<sup>1</sup>, ГИЧКА ЦУЦУМАНОВА<sup>2</sup>, СТОЯН РУСЕВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Катедра „Ядрена техника и ядрена енергетика“*

<sup>2</sup>*Катедра „Физика на твърдото тяло“*

*Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“*

*Татяна Авджиева, Гичка Цуцуманова, Стоян Русев. ЕЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПСКО ИЗСЛЕДВАНЕ НА МИКРОСТРУКТУРАТА НА НИСКО- ВЪГЛЕРОДНА Cr-Ni СТОМАНА*

Цел на тази разработка е изследването на микроструктурата и механичните свойства на Cr-Ni ниско въглеродна стомана. Изследванията са извършени в различно структурно състояние на стоманени пробни тела, получено в резултат на приложени различни термични обработки. Предварително изработени пробни тела са нагривани при различни температури на аустенизация, лежащи в интервала 810–960 °C в продължение на 30 min при всяка температура на нагриване. Веднага след това пробните тела са потопявани за изотермично закаляване в солна вана при температури 300–360 °C, като продължителността на задържане при съответната температура бе 60, 90 и 120 min. Целта на тези обработки бе да се получат структури с феритна и/или бейнитна морфология. Електронно-микроскопското изследване (SEM) показва, че в зависимост от температурата на аустенизация получаваната бейнитна структура е различна – горен, долен или зърнест бейнит. Изпитването на триточково огъване, както и определянето на твърдостта на материала показаха, че с увеличаване на температурата на аустенизация от 300 до 360 °C твърдостта и якостта на удар на материала се променят значително. Фрактографското изследване на разрушените пробни тела показа пластично поведение на материала след всички температури на обработка. В резултат на проведените изследвания бе установена структура, притежаваща едновременно голяма пластичност и якост, което по принцип е трудно достижимо с конвенционални стомани и обработки.

---

*За контакти:* Татяна Авджиева, Катедра „Ядрена техника и ядрена енергетика“, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучер 5, 1164 София, тел. +359 2 8161 603, E-mail: tavidjeva@phys.uni-sofia.bg

The aim of this study was the description of microstructure and properties of the low-carbon Cr-Ni-V bainitic steel. Investigations covered material after various variants of austempering. Low-carbon Cr-Ni-V steel specimens were austenitized at different temperatures between 810 °C and 960 °C for 30 min at every temperature followed by isothermal quenching into a salt bath at the temperature range of 300–360 °C for different time (60, 90 and 120 min). The aim of such treatments was to obtain structures with ferrite and various bainite morphologies. SEM studies showed that by increasing the austempering temperature, bainite structures varies from lower to upper bainite. Impact crack and hardness tests presented that increasing the austempering temperature from 300 °C to 360 °C leads to a changing in hardness and impact energy. Fractography of Sharpie impacted specimens showed ductile behaviour for all austempering temperatures. The investigations were performed in order to find the structure with bigger impact toughness and a possibility of applying this steel for production of high load pistons. The established heat treatment parameters can be useful for preparation of regenerative heat treatment technology of 25Cr2Ni4A steel.

**Keywords:** metallic alloys, bainitic steel, impact toughness, fractography, scanning electron microscopy

**PACS numbers:** 61.72.Ff

## 1. ВЪВЕДЕНИЕ

Необходимостта от намаляване на повредите и загубите на метал в машинните конструкции, причинявани от възникването и развитието на пукнатини в тях, е основателна причина непрекъснато да се търсят нови материали, да се получават структури със зададени свойства и приложение. Стоманите, използвани за изработване на отговорни тръбопроводи и тръбопроводни елементи, трябва да отговарят на редица изисквания, като висока якост, пластичност, пукнатиноустойчивост и съпротивление на динамични натоварвания. Ниско въглеродните Cr-Ni стомани, като стомана 25Cr2Ni4A, намират приложение в много сфери на промишлеността и енергетиката за изработване на елементи, подлагани на ударни натоварвания в условия на повишени температури, поради което познаването на пукнатиноустойчивостта им е от съществено значение. Надеждността на материала и характера на неговото разрушаване зависят основно от структурата на метала и нейните параметри. Много автори [1–10] считат, че бейнитната структура е тази, която в най-голяма степен е отговорна за получаването на висока пукнатиноустойчивост. Някои от тях [1] показват, че една от възможностите за получаване на материал с високо съпротивление срещу развитието на пукнатини е да се получава структура с малко количество на остатъчен аустенит в нея. Други [2, 3] считат, че структурата трябва да се състои от контролирано количество долен бейнит. Присъствието на пакетен мартензит в нисковъглеродни закалени стомани според Woven [6] е причината за голяма якост и пукнатиноустойчивост, а наличието на иглест ферит довеж-

да до различна пукнатиноустойчивост. Наличието на иглест ферит в структура горен бейнит е причина за по-малката якост на нисковъглеродната стомана [4]. Нерядко се открива бейнитна структура със сложен състав – наличие на ферит, остатъчен аустенит, карбиди, понякога мартензитни участъци. Но каква е реалната причина за високата якост и пукнатиноустойчивостта в бейнитните стомани, все още не е напълно ясно.

Ето защо цел на настоящото изследване е да се анализират и сравнят структурите на пробни тела от една и съща стомана след различни режими на термична обработка: аустенизация при температури 810 до 960 °С, след което изотермично закаляване в температурния диапазон 303–340 °С.

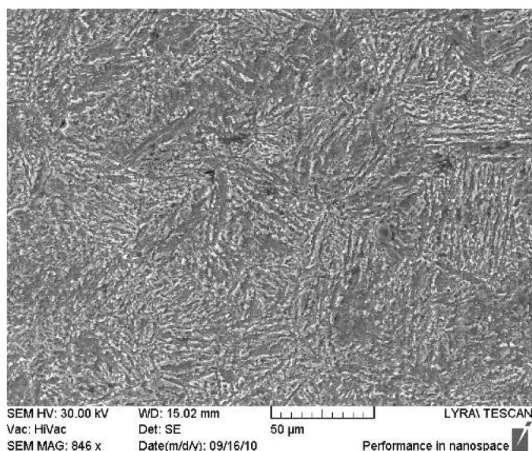
## 2. ИЗСЛЕДВАН МАТЕРИАЛ

На изследване са подлагани пробни тела от нисковъглеродна стомана с химичен състав, посочен в табл. 1.

Таблица 1. Химичен състав на използвания материал (wt. %)

Елемент	C	Cr	Ni	Si	Mn	Mo	W	Cu	Ti	S	P
wt. %	0,24	1,64	4,55	0,27	0,43	0,006	0,002	0,15	0,01	0,01	0,020

За изработване на пробните тела прътов материал от стомана 25Cr2Ni4A първоначално бе горещо изкован до квадратен профил с размери 12×12 mm при достигане на 18 % пластична деформация. След това материалът бе отгрят за отстраняване на деформационната текстура. Ферито-перлитната структура след отгряването е показана на фиг. 1. Пробните тела са изрязани от отгрятата квадратна заготовка и след това са термообработени при различни температури. Режимите на термична обработка са посочени в табл. 2.



Фиг. 1. Ферито-перлитна структура на стоманата

### 3. РЕЖИМИ НА ТЕРМИЧНА ОБРАБОТКА И МЕТОДИ НА ИЗСЛЕДВАНЕ

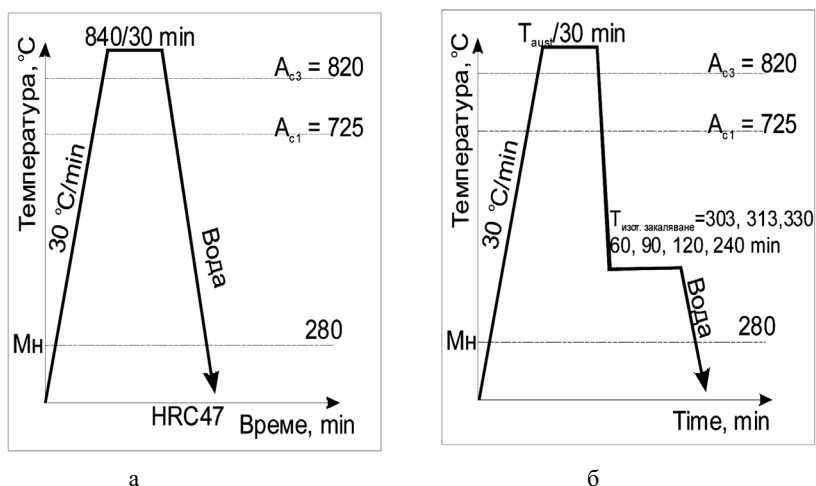
#### 1.1. РЕЖИМИ НА ТЕРМИЧНА ОБРАБОТКА

Стоманените пробни тела са аустенизирани при температури 810 – 960 °С за 30 min, след това са прехвърлени в солна вана ( $KNO_3/NaNO_3$ , 1:1) при температури между 300 и 360 °С и задържани в нея от 60 до 120 min. Схемите на термична обработка са показани на фиг. 2.

За определяне параметрите на режимите на термична обработка предварително са пресметнати температурите на начало на мартензитно (Mn) и на бейнитно (Bs) превръщане [10] по формули (1) и (2). На базата на тези пресмятания е избрана температура на изотермично закаляване 313 °С.

$$Mn = 764,2 - 302,6\%C - 30,6\%Mn - 16,6\%Ni - 8,9\%Cr + 2,4\%Mo - 11,3\%Cu + 8,5\%Co + 7,4\%W - 14,5\%Si = 280 \text{ } ^\circ\text{C} \quad (1)$$

$$Bs = 830 - 270\%C - 90\%Mn - 37\%Ni - 70\%Cr - 83\%Mo = 303 \text{ } ^\circ\text{C} \quad (2)$$



**Фиг. 2.** Схеми на закаляване (а) и изотермично закаляване на пробни тела от стомана 25Cr2Ni4A (б)

**Таблица 2.** Режимы на термична обработка

$T_{\text{austeniz}}, \text{ } ^\circ\text{C}$	$T_{\text{austemp}}, \text{ } ^\circ\text{C}$	$\tau, \text{ min}$
810	303, 313, 323,	60, 90, 120
910	303, 313, 323,	60, 90, 120
860	303, 313, 323,	60, 90, 120

### 3.2. МЕТОДИ НА ИЗСЛЕДВАНЕ

Получените микроструктури са изследвани на сканиращ електронен микроскоп SEM (Czech Focused ion beam equipped SEM Lyra, Tescan with Quantax EDS detector – Bruker) и на трансмисионен електронен микроскоп (ТЕМ). Изследванията са проведени върху металографски шлифове след разяждане на метала с 3%  $\text{HNO}_3$ . Определяна е твърдостта на материала чрез метода на Rockwell по стандартна методика. Якостта на удар е измервана при стайна температура на всички пробни тела ( $10 \times 10 \times 55$  с V-образен надрез) след всяка термична обработка. В основата на всеки концентратор на напрежение (надрез) с ерозионна нишка с диаметър  $\varnothing 0,5$  mm бе нанесена пукнатина с 1 mm дълбочина.

## 4. ПОЛУЧЕНИ РЕЗУЛТАТИ

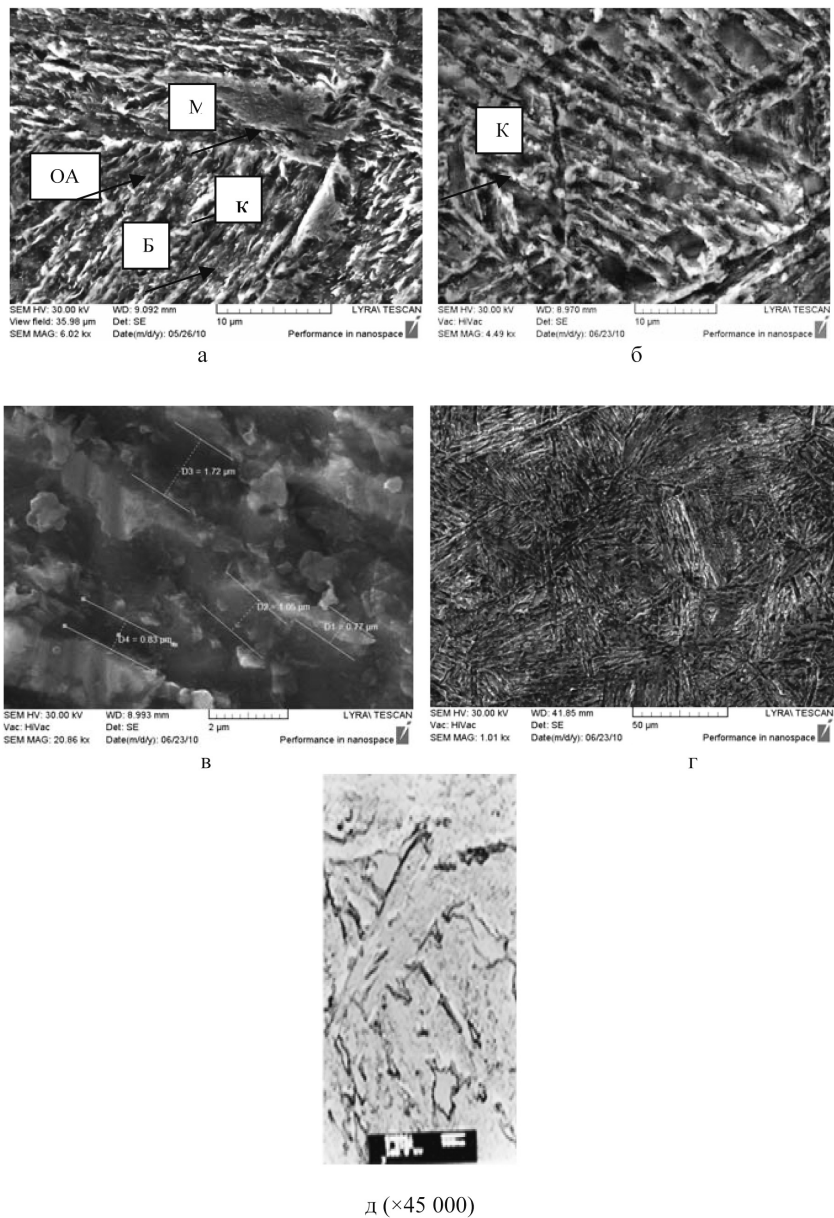
### 4.1. МИКРОСТРУКТУРА

В резултат на приложените термични обработки са получени интересни и различни микроструктури – долен и горен бейнит, перест ферит, зърнест бейнит, мартензит и др. Различните анализирани фактори (температура на аустенизация, на изотермично задържане, продължителност на нагряване) влияят в различна степен върху формирането на структурите.

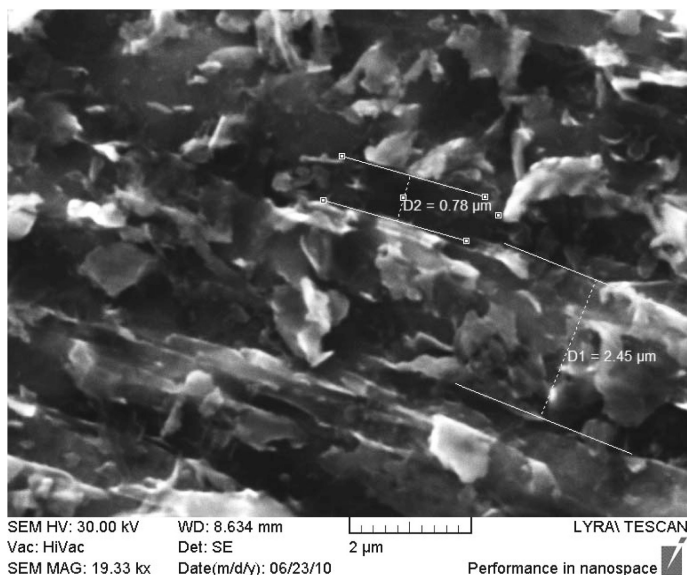
Наблюдавано бе, че при по-ниски температури на аустенизация и продължителност на нагряване 60–90 минути структурата е горен бейнит (Б), мартензит (М) и остатъчен аустенит (ОА) (фиг. 3). При по-голяма продължителност на нагряване (фиг. 3б, в) структурните елементи са с по-голяма дебелина и между отделните феритни ламели се наблюдават отделени легирани карбиди (К). Бейнитните феритни ламели са с еднаква ориентация в рамките на отделни сегрегации – клъстери, намиращи се вътре в бившето аустенитно зърно. Отделните клъстери са с различна ориентация един спрямо друг (фиг. 3г). Клъстерите са зародени хетерогенно върху повърхността на аустенитните граници. (фиг. 3а, б). Цементитът се отделя между отделните феритни ламели (фиг. 3в).

Микроструктурата на долния бейнит е подобна на тази на горния (фиг. 4). Основната разлика е в карбидните отделяния. При по-големи увеличения се установява, че ламелите в долния бейнит са с ширина приблизително  $2,4 \mu\text{m}$ , разположени успоредно една на друга (фиг. 4). Цементитните карбиди се наблюдават вътре във феритните ламели (фиг. 5а), като пресищат ферита с въглерод. В други области на шлифа се наблюдават хромови или комплексни карбиди (фиг. 5б). При някои режими на обработка част от карбидите са с по-малки размери и форма (иглести) и са разположени под ъгъл от  $60^\circ$  един

спрямо друг (фиг. 5б), а при други режими са изключително фини и по-хаотично разположени (фиг. 5в).



**Фиг. 3.** Микроструктура (горен бейнит) при:  
 а) и г)  $T_{\text{austeniz}} = 860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 60\text{ min}$ ;  
 б), в) и д)  $T_{\text{austeniz}} = 860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120\text{ min}$

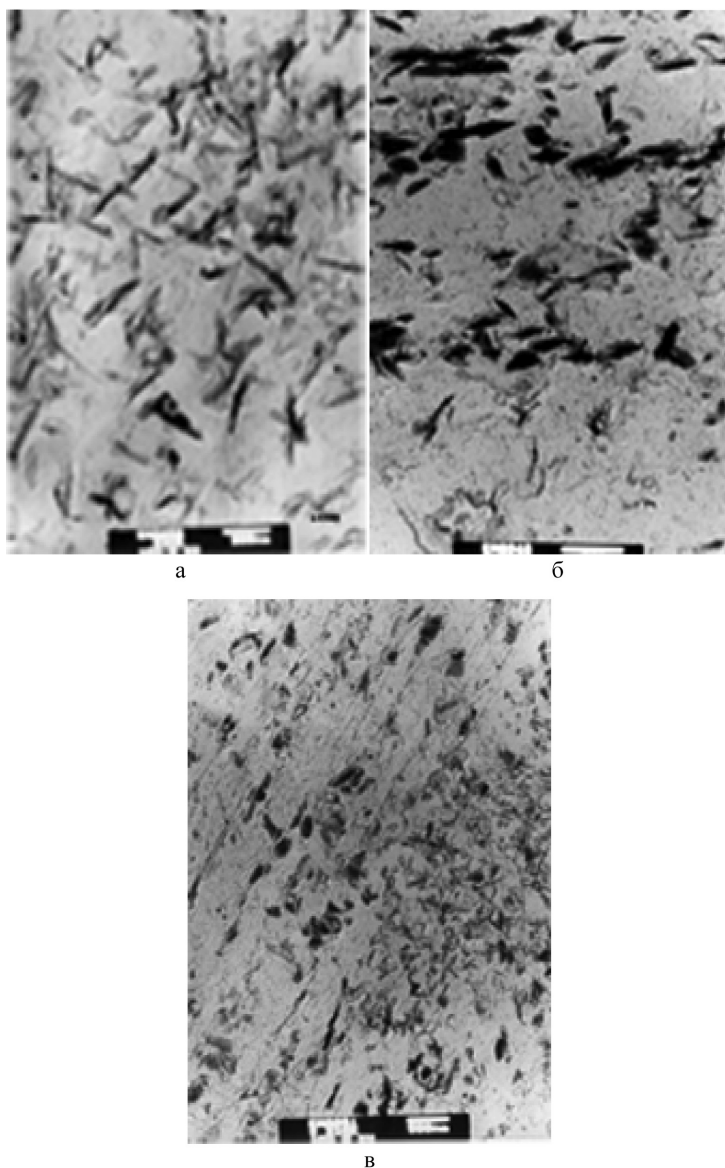


**Фиг. 4.** Микроструктура на долен бейнит

В горния бейнит се наблюдава отделяне на карбиди по границите на бившето аустенитно зърно (фиг. 6). В повечето случаи това се установява при високи температури на аустенизация.

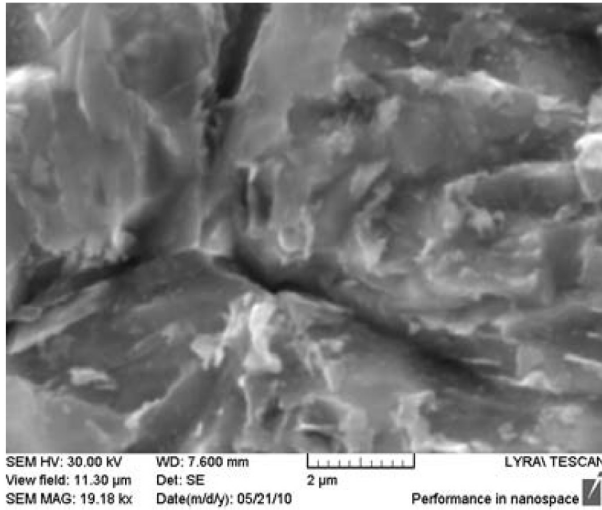
При други режими на термична обработка структурата е иглест ферит и остатъчен аустенит (фиг. 7). Според някои автори [7] това е структурата с най-голяма пукнатиноустойчивост, но в този случай пукнатино-устойчивостта е средна –  $19,4 \text{ J.cm}^{-2}$ . Иглестият ферит образува удължени ламели с неравни граници (голямоъглови граници) (фиг. 7с), като същото е установено и от други изследователи [1, 7]. Отделни ламели от бейнит-феритната фаза са зародени от границите на първичното аустенитно зърно (фиг. 7б). Ламелите са разположени в клъстери, напомняйки формата на отделни „пачки“, разположени под различен ъгъл в рамките на бившето аустенитно зърно.

Структурата наподобява „сандвич,,“ състоящ се от феритни ламели с области на високовъглероден стабилизан остатъчен аустенит между тях. Независимо от температурите на обработка ламелите са с приблизително еднакви размери (фиг. 7а), като вероятната причина може би е еднаквата продължителност на нагряване, позволила пълното протичане на превръщанията.

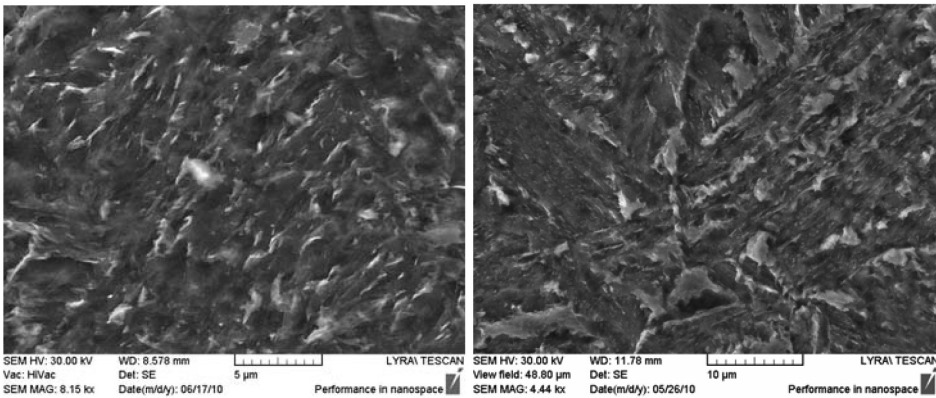


**Фиг. 5.** Карбиди в бейнитната структура (черна структурна съставляваща):  
 а) карбиди вътре във феритната съставляваща (долен бейнит  $T_{\text{austeniz}} = 810\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 303\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 60\text{ min}$ ); б) карбиди в долен бейнит (долен бейнит  $T_{\text{austeniz}} = 810\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 303\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 60\text{ min}$ ); в) дисперсни карбиди във феритна съставляваща ( $T_{\text{austeniz}} = 910\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 303\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 60\text{ min}$ )





**Фиг. 6.** Граници на бившето аустенитно зърно с отделени карбиди по него  
 ( $T_{\text{austeniz}} = 910\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 303\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 60\text{ min}$ )

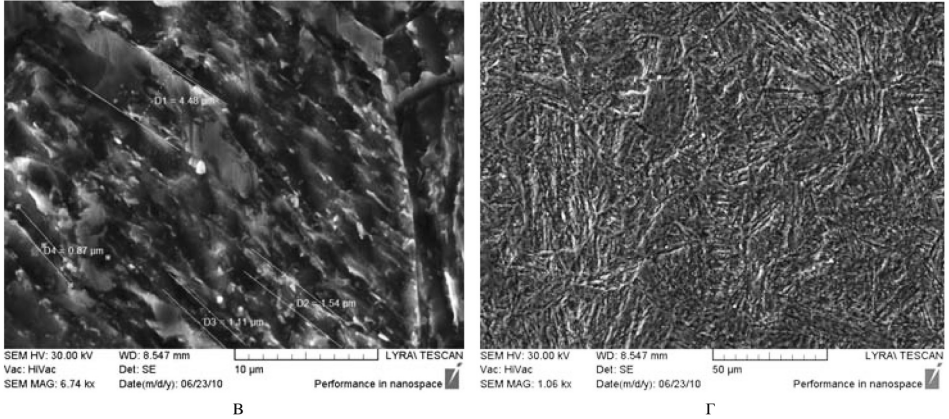


а

б

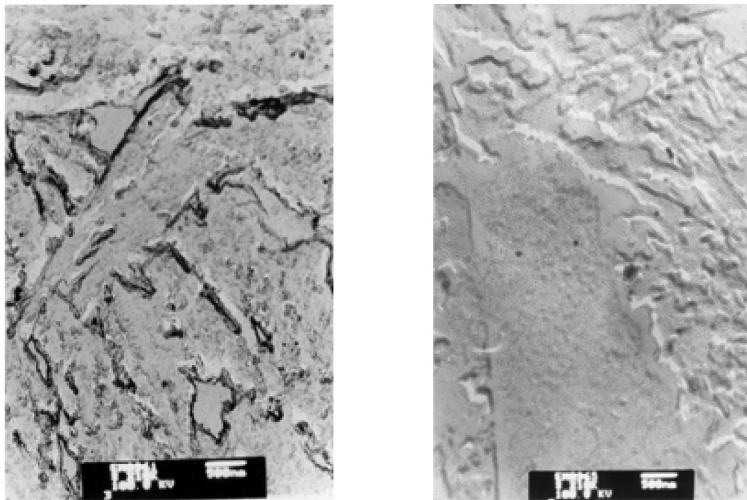
**Фиг. 7.** Микроструктура (иглест ферит и остатъчен аустенит) при:

- а)  $T_{\text{austeniz}} = 810\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 313\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120\text{ min}$ ;  
 б)  $T_{\text{austeniz}} = 960\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 313\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120\text{ min}$



**Фиг. 7.** Микроструктура (иглест ферит и остатъчен аустенит) при:  
 в) и г) = 960 °C,  $T_{\text{austemp}} = 340$  °C,  $\tau = 90$  min

Морфологията на структурата при високо увеличение ( $\times 45\,000$  – фиг. 8) потвърждава, че феритните ламели са перести и удължени, хаотично разположени в областите на остатъчен аустенит. Този вид структура бе наблюдаван при висока температура на изотермично задържане – 340 °C при продължително задържане.

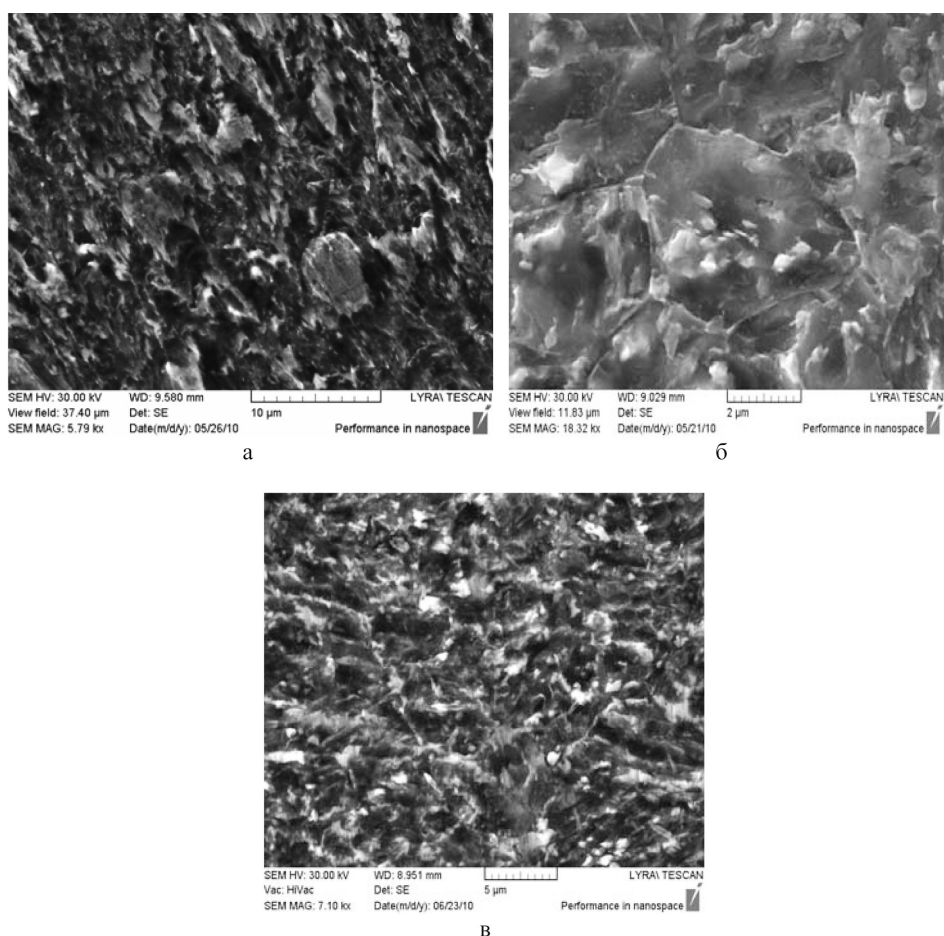


а ( $\times 25\,000$ )

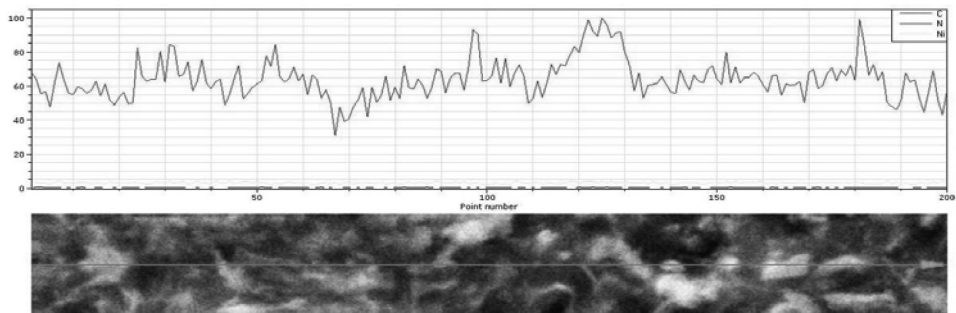
б ( $\times 42\,000$ )

**Фиг. 8.** Перест ферит в микроструктурата:  
 а)  $T_{\text{austeniz}} = 910$  °C,  $T_{\text{austemp}} = 340$  °C,  $\tau = 90$  min;  
 б)  $T_{\text{austeniz}} = 860$  °C,  $T_{\text{austemp}} = 340$  °C,  $\tau = 120$  min

Структура с гранулиран бейнит (фиг. 9) се установява при много продължително време на задържане за изотермично закаляване – 120 минути при ниски температури на аустенизация – 810–860 °С. Въглеродът не е напуснал аустенита и при нагряване за изотермично закаляване той само се преразпределя във феритната и в аустенитната структурна съставна. Наблюдават се богати и бедни на въглерод области вътре в бившето аустенитно зърно, установени чрез допълнително устройство на електронния микроскоп, чрез което се анализира вида и количеството на отделните елементи в микро обеми от кристалното зърно (фиг. 10). Вероятно, това е предпоставка за образуването на зърнест (гранулиран) бейнит. В бедните на въглерод области са се образували феритни гранули, а в богатите – остатъчен аустенит.



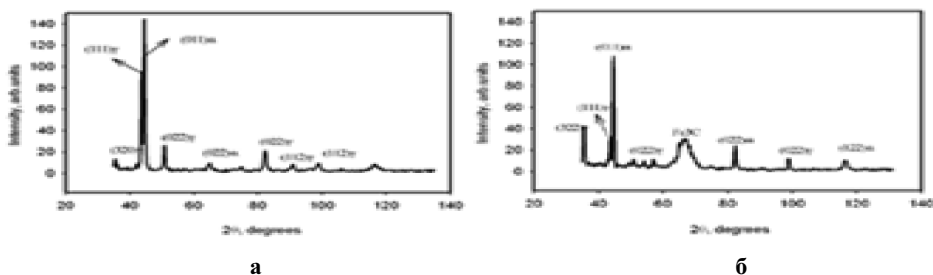
**Фиг. 9.** Зърнест бейнит: а) и б)  $T_{\text{austeniz}} = 860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 303\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120\text{ min}$ ;  
 в)  $T_{\text{austeniz}} = 910\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120\text{ min}$



**Фиг. 10.** Линейно разпределение на въглерод в бивше аустенитно зърно (структура гранулиран бейнит)

#### 4.2. РЕНТГЕНОСТРУКТУРЕН АНАЛИЗ

С цел анализиране на отделните фази в структурата на стоманата бе извършен рентгеноструктурен анализ. Две типични рентгенови диаграми са показани на фиг. 11. Кристалографски направления (320), (111), (002), (022) са за аустенитната фаза, а (011), (002) и (112) за феритната. Всички пробни тела имат идентично фазово разпределение. Установено е, че (111) и (011) пикове се припокриват при всички температури на изотермично закаляване. Степента на препокриване намалява с увеличаване на продължителността на задържане при по-високи температури на обработване, което е установено и в [8]. Това би могло да се обясни с преразпределянето на въглерода между отделните фази при изотермичното задържане [8].



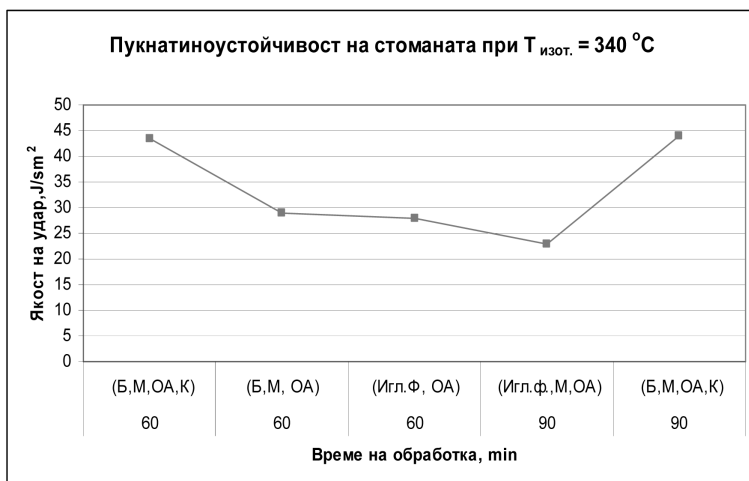
**Фиг. 11.** Рентгеноструктурен анализ на пробни тела при различни режими на обработване:

- а)  $T_{\text{austeniz}} = 860 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120 \text{ min}$ ;
- б)  $T_{\text{austeniz}} = 860 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 303 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 90 \text{ min}$

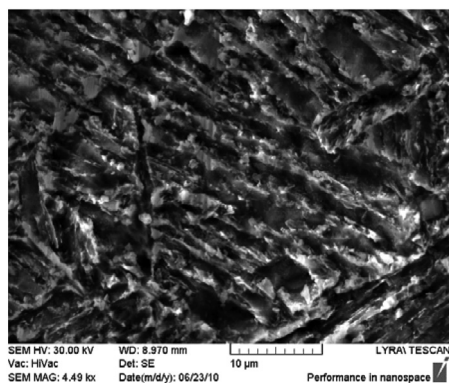
### 4.3. МЕХАНИЧНИ СВОЙСТВА

#### 4.3.1. ДИНАМИЧНА ПУКНАТИНОУСТОЙЧИВОСТ

Стойностите на якостта на удар, които в случая съвпадат с тези на пукнатиноустойчивостта на изследвания материала (изпитват се пробни тела с предварително зародена пукнатина в тях) варира от 19,6 до 43,5 J.cm<sup>-2</sup>. Този факт се дължи на различната микроструктура, формирана при различните режими на термична обработка. Най-добра пукнатино-устойчивост (43,5 J cm<sup>-2</sup>) се установява при режим на термична обработка  $T_{\text{austeniz}} = 860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 90\text{ min}$  (фиг. 12), където структурата е бейнит, мартензит и остатъчен аустенит между феритните ламели (фиг. 13).



Фиг. 12. Пукнатиноустойчивост на стоманата в зависимост от структурата на материала при температура на изотермично задържане 340 °С

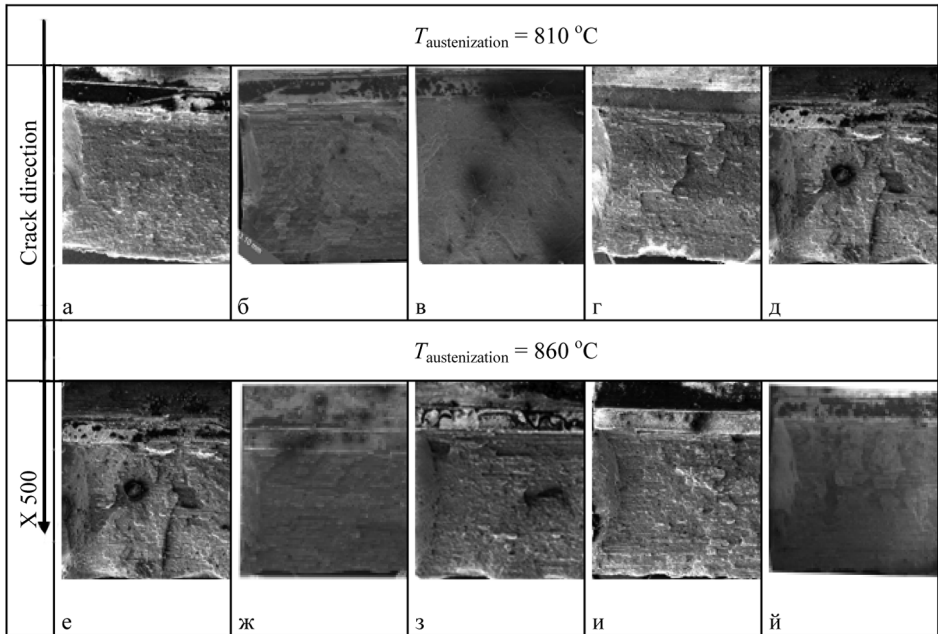


Фиг. 13. Структура с най-добра пукнатиноустойчивост

#### 4.4. ФРАКТОГРАФИЯ

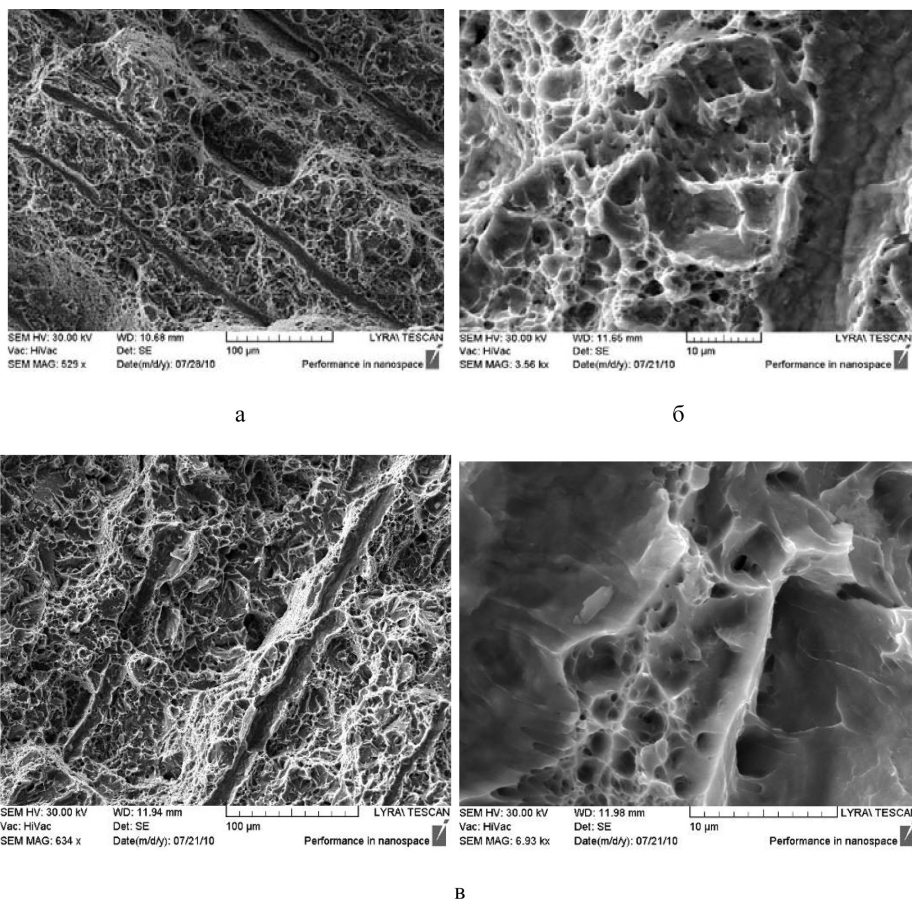
В резултат на извършените фрактографски изследвания са получени резултати, различни от авторските очаквания. В ломовете на всяко пробно тяло пукнатината се разпространява по различен начин (табл. 3).

Таблица. 3. Повърхност на разрушаване



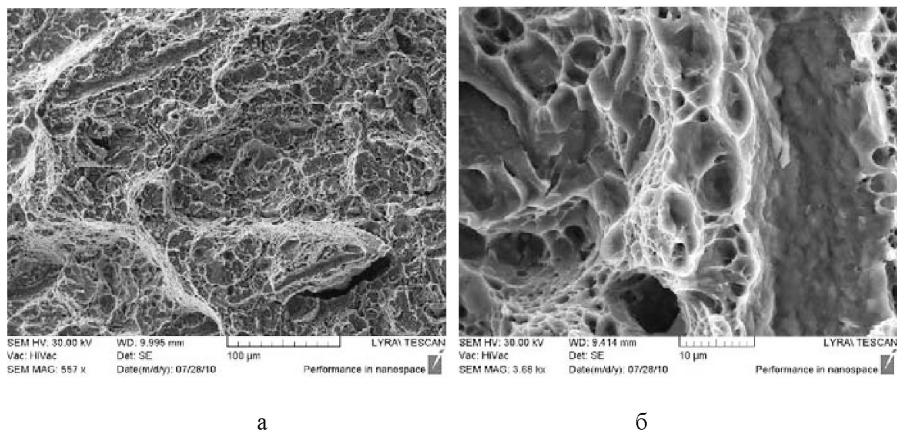
Всеки лом е с пластичен характер на разрушаване, но степента на пластичност е различна. Посоката на разпространение на пукнатината в различните ломове е различна – успоредно на приложеното натоварване (табл. 3ж, й), перпендикулярно – табл. 3а, г, д, з, и. В други ломове (табл. 3в, д) пукнатината се разпространява под ъгъл спрямо посоката на натоварване.

Фрактографски снимки на ломове от структури с иглест ферит са показани на фиг. 14, като кореспондиращата структура е показана на фиг. 7. Наблюдават се плитки ямки, разположени на „гребени“, развиващи се подобно на течение на поток. Под ъгъл на посоката на пукнатината се установяват вторични пукнатини, по-дълбоки от дълбочината на ямките. Средната стойност на якостта на удар е  $25\text{ J}\cdot\text{cm}^{-2}$ . Характерът на ломовете не зависи от режимите на обработка за пробни тела с иглест ферит. Наличието на ориентирано разположение на отделните клъстери и на отделени карбиди между иглите вероятно влияе върху разпространението на пукнатината.



**Фиг. 14.** Лом на пробни тела със структура иглест ферит при различни режими на обработка: а)  $T_{\text{austeniz}} = 860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 303\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120\text{ min}$ ; б)  $T_{\text{austeniz}} = 810\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 313\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120\text{ min}$ ; в)  $T_{\text{austeniz}} = 960\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 90\text{ min}$

В ломовете със структура зърнест бейнит (фиг. 15) наблюдаваната структура е ямковидна. Ямките са малки, плитки, хаотично разположени по повърхността. Този вид ямки показва, че разрушаването се е развило по механизъм на свободна коалесценция – вътрешно разделяне и сливане на материалните частици. Разположението на ямките по цялата повърхност на лоба подсказва за висока якост и ниска пластичност на материала. При по-високи температури на изотермично закаляване и по-продължително задържане ямките са по-дълбоки, което означава малко по-голяма пластичност на материала. В областите между феритните и аустенитните зърна се наблюдават „по-лесни“ пътеки за развитие на пукнатината. Якостта на удар на материала със зърнеста структура е между 21 и 29,9 J.cm<sup>-2</sup>.



**Фиг. 15.** Разрушена повърхност на пробни тела със структура зърнест бейнит:

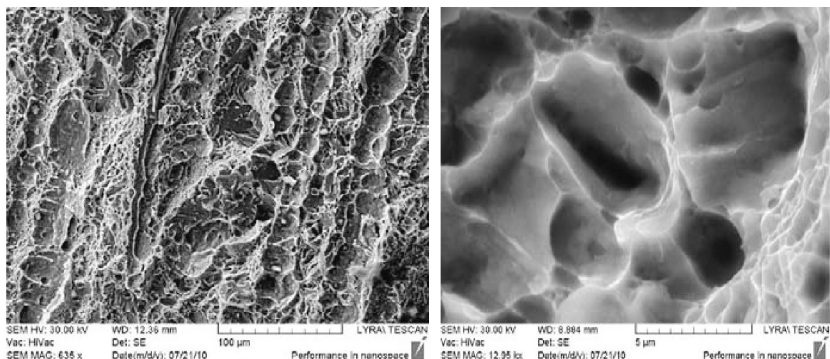
- a)  $T_{\text{austeniz}} = 810 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 313 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 90 \text{ min}$ ;  
 б)  $T_{\text{austeniz}} = 810 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 120 \text{ min}$ ;

Повърхността на разрушаване на пробни тела със структура бейнит, мартензит, иглест ферит и остатъчен аустенит е показана на фиг. 16. Тъй като феритните игли се разполагат в отделните бейнитни клъстери под различен ъгъл в рамките на бившето аустенитно зърно, то съответно могат да лежат успоредно, перпендикулярно или под ъгъл спрямо посоката на приложения товар. По този начин развитието на пукнатината е в тясна зависимост от разположението на клъстерите в обема на материала. Наблюдават се ямки с различна дълбочина, разположени в успоредни пътечки (фиг. 16а). В отделните пътечки ямките са с различна големина, съответстваща на отделните структурни съставляващи. Успоредно на ямките се наблюдават и плътни ивици с по-голяма дълбочина от тази на ямките. На дъното на ямките се виждат различни по големина и форма карбидни частици (фиг. 16б). Карбидните частици във феритните игли спомагат за преминаването на пукнатината през тях, но поради различното разположение на тези игли надали оказват съществено влияние върху модела на разрушаване. Материалът е със значително по-висока пукнатиноустойчивост, като якостта на удар е  $43 - 43,5 \text{ J.cm}^{-2}$ .

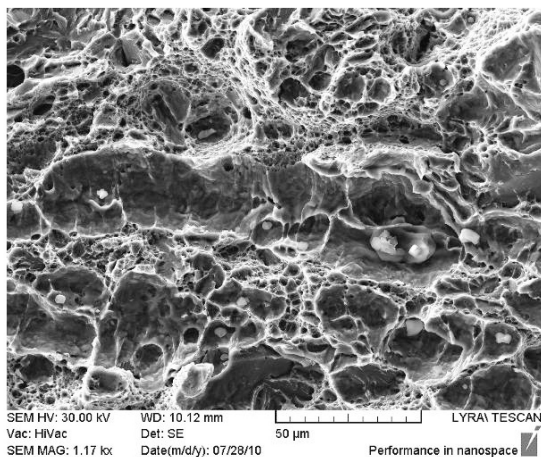
Как би могло да се обясни тази по-висока пукнатиноустойчивост на материала? Основно с вида на структурата – наличие на бейнитни клъстери с различна обемна ориентация (фиг. 17). В пробни тела обработените при едни и същи температури ( $T_{\text{austeniz}} = 860 \text{ }^{\circ}\text{C}$  и  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ), но при различна продължителност на нагриване (60 и 90 минути), пукнатиноустойчивостта е доста различна –  $43,4 \text{ J.cm}^{-2}$  при 60 минути и  $23,8 \text{ J.cm}^{-2}$  при 90 минути. Структурата и в двата случая е бейнитна (ферит, мартензит, остатъчен аус-



тенит и карбиди) (фиг. 17). Обаче разлика е във феритните игли разположени вътре в клъстера и в наличието на мартензит. Обособените структурни ламели, разположени успоредно една на друга (фиг. 17а) възпрепятстват в по-голяма степен развитието на пукнатината, отколкото накланените феритни и мартензитни игли (фиг. 17б). Вероятно бейнитната структура се формира първа, а след това при охлаждането се образуват и мартензитните игли. Когато продължителността на нагряване е по-голяма – 120 минути, количеството на мартензита впоследствие е по-голямо и структурата по този начин става по-крехка.



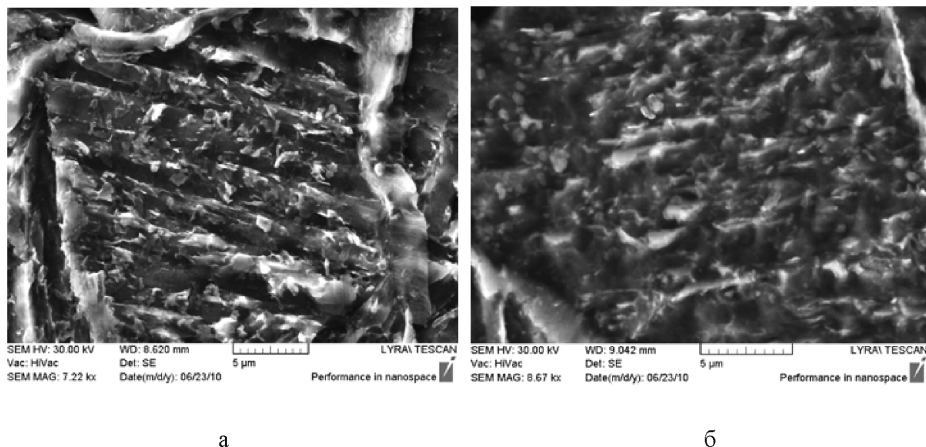
а



б

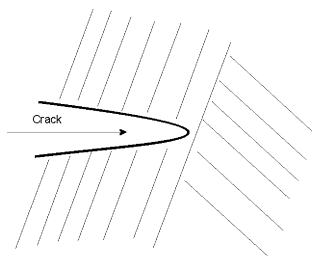
**Фиг. 16.** Повърхност на разрушаване на пробно тяло с бейнитна клъстерна структура

- а)  $T_{\text{austeniz}} = 860 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 90 \text{ min}$ ;  
 б)  $T_{\text{austeniz}} = 960 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\tau = 90 \text{ min}$



**Фиг. 17.** Структура получена след  $T_{\text{austeniz}} = 810 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^\circ\text{C}$ :  
 а) структура с якост на удар  $43,4 \text{ J.cm}^{-2}$  –  $\tau = 60 \text{ min}$ ;  
 б) структура с якост на удар  $23,8 \text{ J.cm}^{-2}$  –  $\tau = 120 \text{ min}$

Друго обяснение на по-високата пукнатинуоустойчивост би могло да се намери в наличието на клъстери с ясни граници. Когато направлението на пукнатината е перпендикулярно или под ъгъл спрямо бейнитните игли, движението на пукнатината вероятно спира, срещайки граница на клъстер, разбира се, ако в структурата има клъстери с очертани граници (фиг. 18). След това пукнатината променя посоката на разпространението си, където и част от енергията на разпространение се абсорбира, т.е. пукнатината среща по-голямо съпротивление срещу нейното движение. Тази структура е с по-голяма пластичност.



**Фиг. 18.** Разположение на бейнитни клъстери и посока на движение на пукнатина

## 5. АНАЛИЗ

Изследваната нисковъглеродна Cr-Ni стомана е с висока пукнатинуостойчивост ( $28,35\text{--}43,4 \text{ J.cm}^{-2}$ ), когато структурата е бейнитна. Максимално съпротивление срещу развитие на динамична пукнатина ( $43,5 \text{ J.cm}^{-2}$ ) е получено след термична обработка, състояща се от аустенизация при  $T_{\text{austeniz}} = 810 \text{ }^\circ\text{C}$ , изотермично закаляване при  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^\circ\text{C}$ , и задържане  $\tau = 60 \text{ min}$ , където структурата се състои от бейнит, мартензит, остатъчен аустенит и отделени легирани карбиди. Феритните и аустенитните пластини са разположени в отделни клъстери, успоредно едни на други.

Пукнатинуостойчивостта на материала е по-висока, когато при разпространението си пукнатината срещайки граници на клъстери, променя посоката на разпространение и енергията на разпространението и намалява.

Размерите на първичното аустенитно зърно не оказват значително влияние върху формирането на структурата.

Необходими са следващи изследвания за установяване на цикличната пукнатинуостойчивост на материала.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Температурата на аустенизация слабо влияе върху формирането на бейнитна структура в стомана 25Cr2Ni4A.
2. Получена е структура едновременно с висока якост на опън  $R_m = 1139 \text{ MPa}$  и енергия на разрушаване, равна на  $24 \text{ J}$ .
3. Установен е режим на термична обработка, в резултат на който се получава материал с високо съпротивление срещу разрушаване –  $T_{\text{austeniz}} = 810 \text{ }^\circ\text{C}$ , изотермично закаляване при  $T_{\text{austemp}} = 340 \text{ }^\circ\text{C}$  и задържане  $\tau = 60 \text{ min}$ .

**Благодарности.** Това изследване е финансирано от Български национален научен фонд, проект ДО-02-56/2008 „Субмикронна обработка и анализ на материали и структури чрез сканираща електронна микроскопия, комбинирана с фокусиран йонен лъч“ и от проект на Софийския университет „Св. Климент Охридски“ „Електронно-микроскопско изследване на клас бейнитни стомани с висока якост и пукнатинуостойчивост, приложими за тръбопроводи на АЕЦ“.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Pokrovskaya, N. G., L. N. Belyakov, I. P. Zhegina, and E. Yu. Grigor'eva. *Metal Science and Heat Treatment*, 1997, **39**, 9–10, 8.
- [2] Saeidi, N., A. Ekrami. *Materials Science and Engineering*, 2010, **A 527**, 21–22, 5575.
- [3] Pacyna, J., P. Bała, S. Dobosz, A. Kokosza, S. Kaç. *J. of Achievements in Materials Jirii, Manufacturing Engineering*, 2010, **39**, 1, 19.
- [4] Mazancova, E., Z. Rucka, K. Mazanec. *Hutnické listy*, 2008, **LXI**, 2, 48.
- [5] Bakhtiar, R., A. Ekrami. *Materials Science and Engineering A*, 2009, **525**, 1–2, 159.
- [6] Bobyliov, K., M. K. Leonavičius, M. Šukšta, A. Krenevičius, S. Stupak. *MECHANIKA*, 2005, **4**, 54, 12.
- [7] Mazancová, E., Z. Rucká, D. Jandová, K. Mazanec. Evaluation and comparison of micro structural characteristics of acicular ferrite and granular bainite. *Metal*, 2009.
- [8] Aravind, V., G. Balachandran, M. Kamaraj, B. Gopalakrishna, K. Prabhakara Ra. *Materials Science and Engineering A*, 2010, **527**, 782.
- [9] Illescas, S., J. Fernández, J. Asensio and J. M. Guilemany. TEM study of bainitic low-carbon HSLA steel: the orientation relationships of cementite, Programa de doctorat: Tecnologia de Materials, Bienni: 2003-2005.
- [10] Bhadeshia, H.K. D.H. *Bainite in Steels*. The Institute of Materials, second ed., London, UK, 2001.
- [11] Gianni, A., T. Karlsson, A. Ghidini, A. Ekberg. Bainitic steel grade for solid wheels: metallurgical, mechanical and in-service testing. US Steel Co., Atlas of Isothermal Diagrams. Heavy Haul Association Specialist Technical Session (IHHA2007), s. 701–711.

## ВЕРОЯТНОСТНО РАЗПРЕДЕЛЕНИЕ НА ДЕФЕКТИ В МЕТАЛА НА КОМПОНЕНТИ ОТ I-ВИ КОНТУР НА АТОМНИ ЕЛЕКТРОЦЕНТРАЛИ ТИП ВВЕР

ГАЛЯ ДИМОВА<sup>1</sup>, КОНСТАНТИН СТАЕВСКИ<sup>2</sup>

<sup>1</sup> „АЕЦ КОЗЛОДУЙ“ ЕАД – Орган за контрол от вида С  
Изпитвателен център „Диагностика и контрол“, гр. Козлодуй

<sup>2</sup> Катедра „Ядрена техника и ядрена енергетика“  
Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“

*Галя Димова, Константин Стаевски.* ВЕРОЯТНОСТНО РАЗПРЕДЕЛЕНИЕ НА ДЕФЕКТИ В МЕТАЛА НА КОМПОНЕНТИ ОТ I-ВИ КОНТУР НА АТОМНИ ЕЛЕКТРОЦЕНТРАЛИ ТИП ВВЕР

Използването на вероятностни методи за оценка на целостта на компоненти на атомни електроцентрали тип ВВЕР се препоръчва като добра практика от серията стандарти за безопасност на Международната агенция по атомна енергетика (МААЕ) – Safety Guide, от Унифицираната процедура за оценка на остатъчния ресурс на компоненти и тръбопроводи в атомни електроцентрали тип ВВЕР, VERLIFE, както и в авторски публикации. Типичен пример за приложение на такива модели е оценката на риска от разрушаване на съоръжението, на което се основава контролът, информиращ за риска – Risk-informed Inservice Inspection (RI-ISI). Настоящата статия представя вероятностно разпределение на дефекти в компоненти от I-ви контур на атомни електроцентрали, основани на проследяване на развитието на дефектите, констатирани чрез методите на безразрушителен контрол.

*Galya Dimova, Konstantin Staeovski.* PROBABILITY DISTRIBUTION OF THE DEFECTS OF THE METAL OF THE COMPONENTS, I-ST CONTOUR OF NUCLEAR POWER PLANT TYPE WWER

Using of probability methods for assessment of the integrity of the components of NPP type WWER is recommended as a good practice in Series of IAEA Safety Guides, as well as Unified Procedures for Lifetime Assessment of Components and Piping in WWER NPP, VERLIFE, and in other publications.

---

За контакти: Галя Димова, 3320 Козлодуй, област Враца, „АЕЦ Козлодуй“ ЕАД, ОКС-ИЦ ДиК, тел. 0973-7-24-79; E-mail: gtdimova@npp.bg.

As a typical example of such models is seen the risk assessment from facility destruction which is the basis of the Risk-informed In-service Inspection (RI-ISI). This paper suggests probability distribution of the defects of the metal of the components of NPP type WWER, based on the In-service inspection results achieved via non-destructive methods.

**Keywords:** methods for non-destructive examinations, discontinuity of the metals (weld), Weibull distribution

**PACS numbers:** 81.70-q; 02.50.cw

## 1. ВЪВЕДЕНИЕ

Обосноваването на якостта и ресурса на компоненти на реакторни установки тип ВВЕР-1000 се провежда чрез детерминистични методи, при които се използват коефициенти на якостни запаси. Граничното състояние на оборудването и тръбопроводите в АЕЦ се определя по якостни критерии, като се отчитат условията на експлоатация и състоянието на конструкцията. Но посредством тези коефициенти не може да се оцени степента на надеждност на компонентите, тъй като се предполага, че вероятността за разрушаване теоретично е нула. Безотказната отработка на обектите не може да бъде предварително предсказана еднозначно. В съвременните подходи за изследване и оценка на ресурса на експлоатирани атомни централи се прилагат вероятностни модели [1]. Тези модели се основават на резултатите от контрола на метала на механично оборудване с безразрушаващи методи. Те не са стандартизирани и все още слабо се прилагат. Същевременно използването на вероятностни методи за оценка на стареенето се препоръчва като добра практика от серията стандарти за безопасност на Международната агенция по атомна енергетика (МААЕ) – Safety Guide, от Унифицираната процедура за оценка на остатъчния ресурс на компоненти и тръбопроводи в атомни електроцентрали тип ВВЕР, VERLIFE, както и в авторски публикации [3]. Типичен пример за приложение на такива модели е оценката на риска от разрушаване на съоръжението, на което се основава контрола, информиращ за риска – Risk-informed Inservice Inspection (RI-ISI).

Настоящата статия разглежда подход за описване на вероятно разпределение на нецялостности, получени от безразрушителен метод на контрол на заварени съединения на щуцери към парогенератори.

## 2. МЕТОД НА ИЗСЛЕДВАНЕ

С цел навременно откриване на нецялостности в метала, а също и за следене развитието на вече констатирани такива, съгласно нормативните изисквания [4] на съоръженията се провежда периодичен експлоатационен контрол на метала с методи на безразрушителен контрол. Заварените съединения на щуцерите към парогенераторите са изследвани чрез ултразвуков метод. При този метод в метала на компонента се разпространява ултразвуков сигнал с честота 0,5–10 МHz. Анализират се характеристиките на отразения ултразвуков сигнал от гранични повърхности, в това число и от повърхности на вътрешни и на подповърхностни нецялостности в метала.

Импулсният ехо-метод е най-широко разпространения метод за ултразвуков контрол и се прилага за регистриране на нецялостности и за определяне на техните параметри – вид, размери, разположение [6]. Оценката на съответствието на размерите на нецялостностите е съгласно нормативни документи. Разглеждани са индикациите на нецялостности в метала на компонентите. С цел да се проследи динамиката на развитието на констатираните нецялостности, са събрани следните входни данни:

– Индикации от ултразвуков контрол на нецялостности на метала на съоръжението – проследявани са параметрите на нецялостностите: размер  $a_i$  на  $i$ -та нецялостност, местоположението  $\dot{y}$  и взаимното разположение спрямо други нецялостности.

– Стойности за критични размери  $[a]$  на нецялостности на съответния сегмент на съоръжението – вземат се от паспортите или от нормативния документ [5].

– Периодът  $t_i$  на експлоатацията на съоръженията – взема се от експлоатационната документация.

Целта е да се проведе анализ на развитието на индикациите и тенденциите за достигане на критичното състояние ( $a_i = [a]$ ).

Входните данни за дадено съоръжение са представени в графичен вид. Всяка точка има координати  $(t_i, y_i)$ , където  $t_i$  отговаря на съответния период на експлоатация на съоръжението (когато са констатирани индикациите), а

$$y_i = \frac{a_i}{[a]_i} \quad (1)$$

е нормираната стойност на дължината на дефекта спрямо критичните му размери. В колкото повече периоди от време има данни за дадена индикация, толкова по-ясно ще се изрази тенденцията на развитието  $\dot{y}$ . Интервалите от време за експлоатационен контрол на съоръженията са от 1 до 4 години. За да има изразена тенденция на развитието на нецялостностите, трябва да са натрупани данни от минимум 16–20 години експлоатационен

срок на съоръжението. Друга практическа трудност е да е осигурено, че се обработват данни за една и съща индикация. Това се постига чрез използване на координатна система и реперна точка на сканиране. Координатите на откритата нецялостност се съпоставят с тези от предишния контрол. Наличието на нецялостности в контролирани зони на съоръжението означава, че тези зони са критични за целостта на съоръжението.

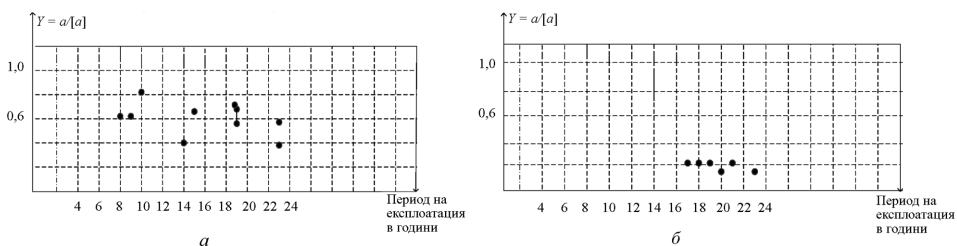
Представеният графичен метод е прост за реализиране и не изисква специално програмно осигуряване. Следенето на развитието на параметър на дадена индикация на нецялостност, и по-конкретно, контролиране на съотношението  $y_i$  в различни периоди от време ще позволи да се предскаже моментът от време, когато ще се достигне до критично ниво, или  $y_i = 1$ .

### 3. РЕЗУЛТАТИ

Заварените съединения на щучери към парогенератори тип ПГВ 1000М са контролирани с ултразвуков метод. Изследвани са параметрите на индикациите на констатираните нецялостности. Резултатите от направените измервания могат да се групират в три групи.

**Първа група от резултати.** Стойностите на  $y_i$  не се променят от времето за експлоатация на съоръжението, наблюдава се плато (фиг. 1).

Няма развитие на индикациите, те са в устойчиво състояние. На основание факта, че нецялостностите не се развиват, може да се приеме, че няма признаци за деградация на механични свойства на материала на заварените съединения. Понякога на практика се оказва, че при следващ експлоатационен контрол една индикация може да се оцени с по-малък размер. И тъй като нецялостността очевидно не може да намалее по размери, то обяснението е свързано с възможностите на методиката за безразрушителен контрол (възпроизводимостта на резултатите, неопределеността на контрола).

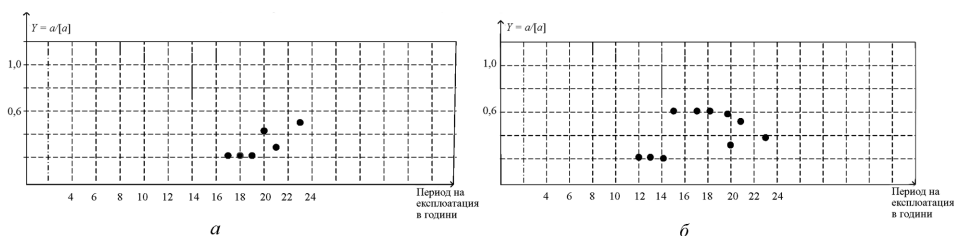


**Фиг. 1.** Развитие на нецялостности на метала по резултати от контрола: първа група



Изводите за безопасната експлоатация на съоръженията са, че те могат да продължават да работят при същите натоварвания. Следващият експлоатационен контрол трябва да бъде не по-късно от 30 000 часа отработка (около 4 години). Ако  $y_i > 0,8$ , е задължително този срок да се съкрати [2].

**Втора група от резултати.** Стойностите на  $y_i$  нарастват с увеличаване времето за експлоатация на съоръжението (фиг. 2).



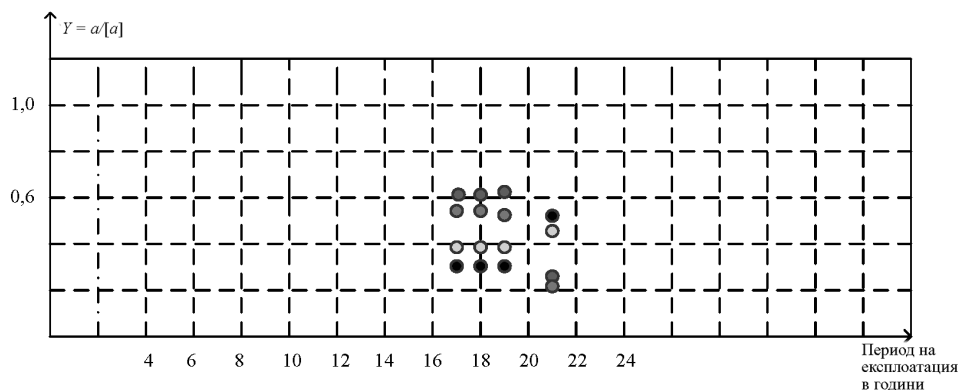
**Фиг. 2.** Развитие на нецялостности на метала по резултати от контрола: втора група

Изводите за последваща безопасна експлоатация на съоръженията са, че е необходимо да бъде извършена техническа диагностика на съоръженията, по възможност да се променят експлоатационните условия (промяна на налягането при функционални изпитания, резервиране на мощности и др.) и да се намалят сроковете за последващ експлоатационен контрол на съоръжението. По-честото провеждане на контрола ще даде възможност да се получат повече данни за размерите на индикациите. Тенденцията за развитие на параметрите на индикациите на нецялостностите ще бъде по-явно изявена. По този начин ще е възможно да се определи дали е механизъм на деградация на механични свойства на материала. Може да бъде определен моментът от време, когато  $y_i$  ще нарасне до стойност 1 (критично състояние).

**Трета група от резултати.** Анализ на развитието на повече от една нецялостност на дадено съоръжение в различни периоди от време.

В случай че имаме повече от една нецялостност, констатирана от експлоатационен контрол на даден възел на съоръжението, се използват правилата за схематизиране на нецялостностите. Ако нецялостностите са близко разположени, те сеобединяват – т.е. цялата група от нецялостности се разглежда като една нецялостност. В този случай подходът за обработката на данните е по първа или втора група резултати. При наличие на негрупируеми нецялостности на един изпитван обект всяка нецялостност дава своя “принос” в деградацията на обекта и се изследва самостоятелно. Тук

се разглеждат и случаите, когато една от тези независими нецялостности е окрупнена (или може да бъде окрупнена) от близко разположени нецялостности. За целите на статистическия анализ, е необходим минимален брой  $n$  нецялостности за един обект (заварено съединение), изследвани през различни периоди от експлоатация на съоръжението, като  $n \geq 5$ . На фиг. 3 е представено развитието на 4 броя негрупируеми (независими) индикации на едно заварено съединение, изследвани през 4 последователни експлоатационни периода на съоръжението.



**Фиг. 3.** Развитие на нецялостности на метала по резултати от контрола: трета група

За конкретен експлоатационен период всяка индикация е изследвана с една и съща апаратура и чувствителност на метода. Има нарастване на 2 индикации и намаляване на 2 индикации. Очевидно е, че е налице процес на деградация на механични свойства на материала. Анализира се геометричното местоположение на всяка индикация и се следи изменението на нейния размер при последващата експлоатация на обекта. Могат да се направят изводи за доминиращите фактори на деградация и да се набележат мероприятия за безопасната експлоатация на съоръжението.

#### 4. АНАЛИЗ

За описване разпределението на характерните относителни дължини на нецялостностите използваме двупараметричния модел на Вейбул, като насяма данни в съответната вероятностна мрежа:

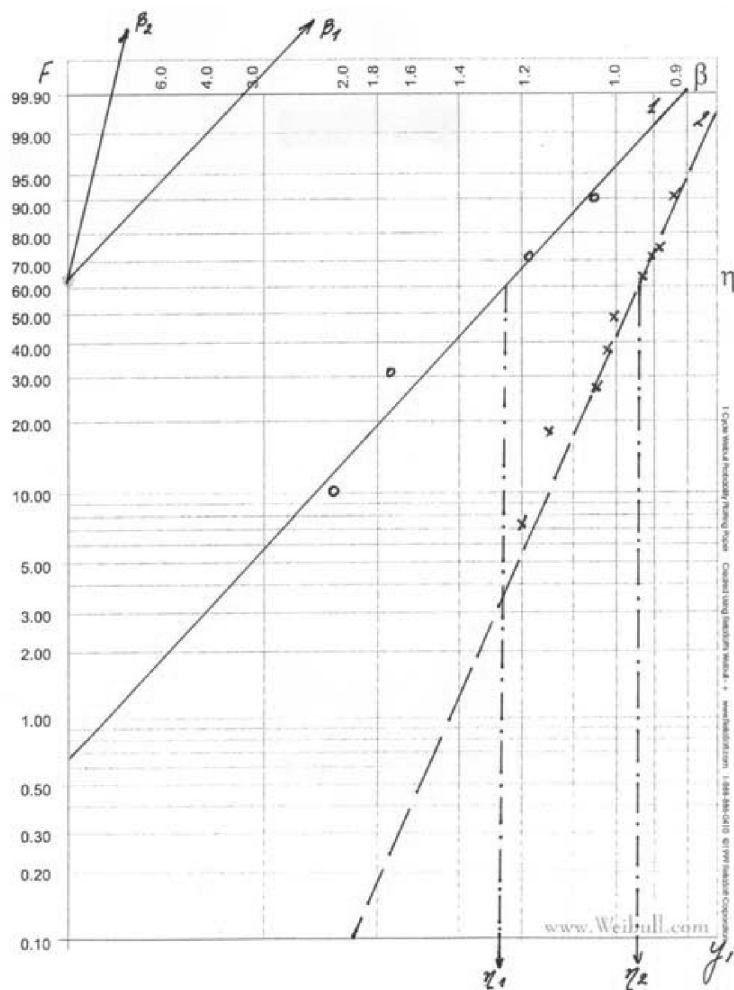
$$F(y_i) = \frac{\beta}{\eta} \cdot \left( \frac{y_i}{\eta} \right)^{\beta-1} \cdot e^{-\left( \frac{y_i}{\eta} \right)^\beta}, \quad (2)$$

където  $F$  е вероятност за реализация на събитието  $y_i > 1$ ,  $\beta$ ,  $\eta$  параметри на вейбулово разпределение.

Обработени са данни от два периода на контрола на заварените съединения на щупери. Параметрите на модела са определени аналитично чрез метода на максималното правдоподобие (MLE), като в табл. 1 са записани данните от статистическа обработка на размерите на индикациите след 10 и след 18 години експлоатация. Същите данни са представени чрез вероятностната мрежа на фиг. 4, графично са определени параметрите на модела.

**Таблица 1.** Статистическа обработка на индикации след 10 и 18 години експлоатация

Ранжирани данни от нецялостности след 10 години експлоатация			
$i$	$y_i$	$F(y_i) = \frac{i-0.3}{n+0.4}, [\%]$	$\beta, \eta$
1	0,26	10,90	$\beta_1 = 3.08$ $\eta_1 = 0.46$
2	0,33	34,38	
3	0,33		
4	0,33	73,43	
5	0,53		
6	0,66	89,06	
Ранжирани данни от нецялостности след 18 години експлоатация			
1	0,5	7,44	$\beta_2 = 7.11$ $\eta_2 = 0.75$
2	0,54	18,08	
3	0,64	28,72	
4	0,65	39,36	
5	0,70	50,00	
6	0,78	60,63	
7	0,8	71,27	
8	0,82	81,91	
9	0,86	92,55	



**Фиг. 4.** Двупараметрично вейбулово разпределение на стойностите за  $y_i$ ;  
 1 – след 10 години експлоатация,  $\beta_1 = 3.1$ ;  $\eta_1 = 0.46$ ;  
 2 – след 18 години експлоатация,  $\beta_2 = 7.1$ ;  $\eta_2 = 0.75$

## 5. ИЗВОДИ

От анализа на обработените данни се налагат следните изводи.

– С увеличаване на периода на експлоатация на съоръженията скоростта на нарастване на дефектите се увеличава, т.е. процесът на дегенерация на носещата способност на материала се интензифицира. Същевременно флукуацията (дисперсията) на размерите намалява и се отчита по-висока степен на корелация с приложения – двупараметричен модел на Вейбул.

– Във връзка с горепосоченото е необходимо да се увеличи контролът в критичните зони на съоръженията.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Аркадов, Г. В., А. Ф. Гетман, А. Н. Родионов. Надеждность оборудования и трубопроводов АЭС и оптимизация их жизненного цикла. Москва, 2010.
- [2] Unified Procedures for Lifetime Assessment of Components and Piping in WWER NPP. VERLIFE, European Commission, 2008, Appendix XVI.
- [3] Острейковский, В. А. Старение в АЭС. Продление срока эксплуатации. Москва, 1994, 134–174.
- [4] АТПЭ-9-03. Типовая программа эксплуатационного контроля за состоянием основного металла и сварных соединений оборудования и трубопроводов АС с ВВЭР-1000. Министерство Российской Федерации по атомной энергии, концерн РОСЭНЕРГОАТОМ, 2003.
- [5] ПНАЭ Г-7-010-89. Оборудование и трубопроводов АЭУ. Сварные соединения и наплавки. Правила контроля. ГОСАТОМЭНЕРГОНАДЗОР, СССР, 1989.
- [6] Скордев, А., И. Бъчваров, К. Маринов. Безразрушителен контрол. София, 1984, с. 134.

## ЛИПИДНИ МОДЕЛНИ СИСТЕМИ В МЕДИЦИНАТА

РОСИЦА МАРИНОВА, ВАЛЕРИ КОЧЕВ

*Катедра „Атомна физика“, група „Медицинска физика“  
Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“*

*Росица Маринова, Валери Кочев. ЛИПИДНИ МОДЕЛНИ СИСТЕМИ В МЕДИЦИНАТА*

В работата е направен преглед на някои по-важни липидни моделни системи, използвани за доставяне на лекарствени средства в организма. Разгледани са техните основни елементи, начините на получаване и принципите на действие. Изяснени са от биофизична гледна точка процесите на липидната самосборка и стабилността на агрегатите. Развитието на този тип моделни системи е проследено във връзка с фармакологичното им приложение. Дискутирани са проблемите, възникващи поради разграждането на лекарствените препарати в кръвообращението и намаляването на ефективността им. Показани са някои възможности за прилагане на липидни носещи системи при третиране на тумори и гъбични инфекции. Коментирани са някои бъдещи перспективи за развитие.

*Rositsa Marinova, Valery Kochev. LIPID MODEL SYSTEMS IN MEDICINE*

This work is devoted to drug delivery systems based on lipid membranes analogs. General elements, methods of formation and some features of these systems are disclosed. The processes of lipid self-association and aggregate stability are clarified from biophysical viewpoint. The problems toward the realization of P. Ehrlich's idea for „magic bullets“ are briefly discussed. Some major elements and concepts of operation of lipid drug delivery systems are regarded. Examples of lipid model systems for treating of tumors and fungal infections are given. Some features concerning construction and future implementation of these systems are discussed.

**Keywords:** lipid model systems, drug delivery, membrane analogs, lipid self-association, lipid phases

**PACS numbers:** 87.14.Cc, 87.16.Dg

---

*За контакти:* Росица Маринова, Валери Кочев, Катедра „Атомна физика“, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучер“, 5, София 1164, тел.: +359 2 8161317, E-mail: rosie.marinova@gmail.com

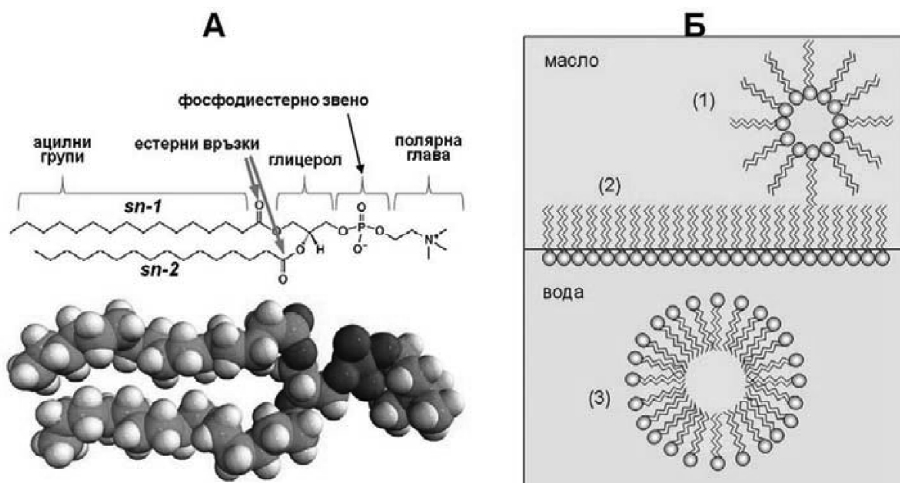
# 1. ВЪВЕДЕНИЕ.

## ДВИЖЕЩИ СИЛИ НА ЛИПИДНАТА САМОАСОЦИАЦИЯ. ПАРАМЕТЪР НА ОПАКОВАНЕ. ГЛАВНИ ТИПОВЕ МЕЗОФАЗИ

Липидите, една от основните съставки на биологичните мембрани, в последните десетилетия много усилено привличат вниманието на все по-широк кръг специалисти със способността си за самоасоциация. Именно това тяхно свойство е в основата на двойния молекулен слой, който те изграждат, за да служи като гръбнак на нативните мембрани. Към това „скеле“ са прикачени множество полипептидни видове, отговорни за една плеяда от извънредно важни клетъчни дейности [7, 3, 12].

За изработването на адекватни представи, относно морфологията и поведението на различните липидни архитектури при хидратация, очевидно от особена важност е познаването на основните термодинамични принципи, от които зависи тяхното структуриране и стабилност. Химичният състав на липидите е отговорен за специфичното им държане спрямо различните разтворители. Техните молекули притежават както хидрофилни области (в зоната на полярните глави), така и хидрофобни участъци (по протежение на ацилните вериги). Такива вещества, наречени амфипатични, проявяват афинитет и към полярни, и към неполярни фази, като разпределението им между тях се определя от съотношението на различните части в молекулата, което понякога се изразява с т.нар. *число на хидрофилно-липофилния баланс* (англ. hydrophilicity lipophilicity balance, HLB, [38]). Това обстоятелство, дължащо се на *хидрофобния ефект*, напълно задава и ориентацията им – с главите към водното обкръжение и с въглеродородните опашки към олеофилната фаза. Идеята за хидрофобния ефект е лансирана за пръв път от Ленгмюр (Irving Langmuir, 1881–1957) и по-късно е доразвита от Валтер Кауцман [48], за да се стигне до общоприетото мнение, че това е основният фактор на амфифилната асоциация [80, 14].

В хидратирано състояние липидите приемат много разнообразна микро- и макроскопична подредба. Дори двукомпонентните системи от вода и само един чист липид са способни да образуват повече от един вид структури. Отдавна е известно, че във водни разтвори те са склонни да се самоасоциират като мицели, бимолекулни слоеве, везикули и т.н. По същите причини те изграждат монослоеви на граничната повърхност между две среди (фиг. 1Б). Този полиморфизъм [36] дълги години е обект на особен интерес и изследването на много водно-липидни системи позволи да се идентифицират десетки фази, чиято специфична организация бе точно определена [58, 72, 56].



**Фиг. 1.** (А) Молекулен модел на най-често срещания фосфолипид – дипалмитоил-фосфатидилхолин, DPPC. (Б) Схематично представяне на ориентацията на липидните молекули в интерфейса между водната и маслената фаза: 1) обърнат мицел; 2) монослой; 3) нормален мицел

Впечатляващо е, че такова многообразие от форми не се среща за никак друго химично съединение и още от самото начало то бе свързано с физиологичните процеси, в които участват биологичните мембрани. Независимо че в тази насока все още много въпроси очакват своето изясняване, категорично се оформя мнението, че мембранните липиди не са само пасивни структурни елементи. Преходите от една към друга фаза най-вероятно осигуряват адаптация към промените във външните условия, така че да се запази нормалната функционална активност на мембраните и свързаните с тях клетъчни процеси.

В основни линии самосборката на амфифилите в строго подредени структури се управлява от два типа взаимодействия – хидрофобно *привличане* на границата въглеродородни опашки/вода и хидрофилно *отблъскване* между полярните глави (електростатично и/или дължащо се на стерични ефекти). Първото тласка молекулите към асоцииране заради хидрофобния ефект, докато второто изисква по-близък контакт с водата. Така естествено изплува концепцията за „*противодействащите сили*“ [80] – едните, стремящи се да намалят, а другите да увеличат интерфейлната повърхност *a*, падаща се на една молекула. Силите на привличане произхождат от междофазовото напрежение  $\gamma$ , действащо върху граничната повърхност хидрофобна/хидрофилна зона. То представлява интерфейлната свободна енергия за единица площ [2] (която за повечето въглеродороди е от порядъка на 20–50



mJ/m<sup>2</sup>) така, че тези сили могат да бъдат зададени чрез  $\gamma$  и техният принос към химичния потенциал е пропорционален на ефективната площ  $a$  на молекулата. Поради различните си съставки силите на отблъскване са твърде сложни за експлицитно формулиране. В първо приближение обаче те се представят като обратно пропорционални на площта  $a$  и в крайна сметка свободната енергия  $\mu$  за една молекула в агрегат се дава с израза [45, 4, 59]

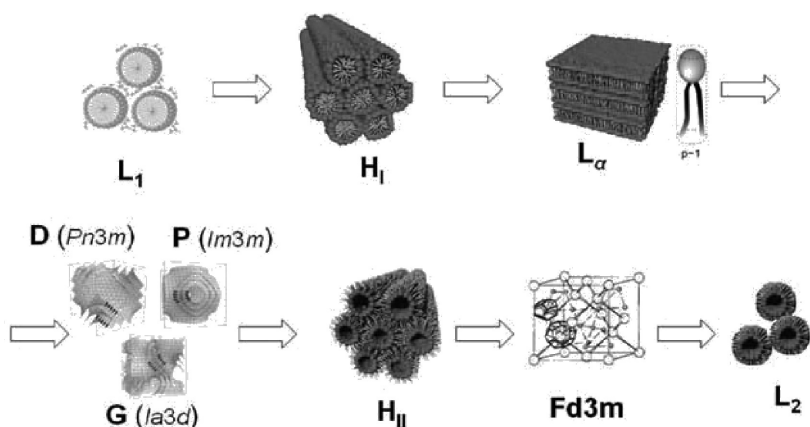
$$\mu = \gamma a + K/a,$$

който има минимум за някаква оптимална площ  $a_0 = (K/\gamma)^{1/2}$ , съответстваща на механичното равновесие.

Така или иначе, молекулната опаковка и близкият порядък в пространствената организация на агрегатите ще се определят преди всичко от специфичната форма на амфифилите, която е отразена в трите молекулни атрибута – оптимална площ  $a_0$  на главата, обем  $v$  на въглеродните вериги (които се предполагат в „течно“ състояние) и критична дължина  $l_c$ . Последната величина е полуемпирична и дава представа за границата, до която хидрофобните опашки могат да се считат за флуидоподобни. Критичната дължина на веригите все пак е по-малка, но от същия порядък, както максималната им дължина. Споменатите характеристики позволяват да се въведе един безразмерен параметър, известен като *параметър на опаковане* –  $v/a_0 l_c$ , с помощта на който може да се прогнозира видът на агрегатите [44].

Над дадена критична концентрация на мицелообразуване (англ. critical micellar concentration, СМС), разтворените във водна среда липиди спонтанно се самоасоциират, образувайки дисперсна фаза. Формата, големината и разпределението на агрегатите в нея зависят от потенциала на междумолекулните взаимодействия, който се определя от структурата на участващите химични видове. В зависимост от техния състав (т.е. параметъра на опаковане  $v/a_0 l_c$ ) и концентрация, както и от условията на околната среда (рН, температура, осмотично налягане, йонна сила и т.н.), хидратираните липиди могат да диспергират в *изотропна течна фаза* (англ. fluid isotropic, FI phase [32]) или да се обособят в няколко главни типа лиотропни мезофази [52].

Класификацията на тези фази се базира на следните техни главни свойства – организация от далечен порядък (т.е. вид кристална решетка, 1D, 2D или 3D периодична); състояние на веригите (течно, произволно ориентирани или гел, опънати плътно подредени); кривина на липидния слой (нормален или обърнат).

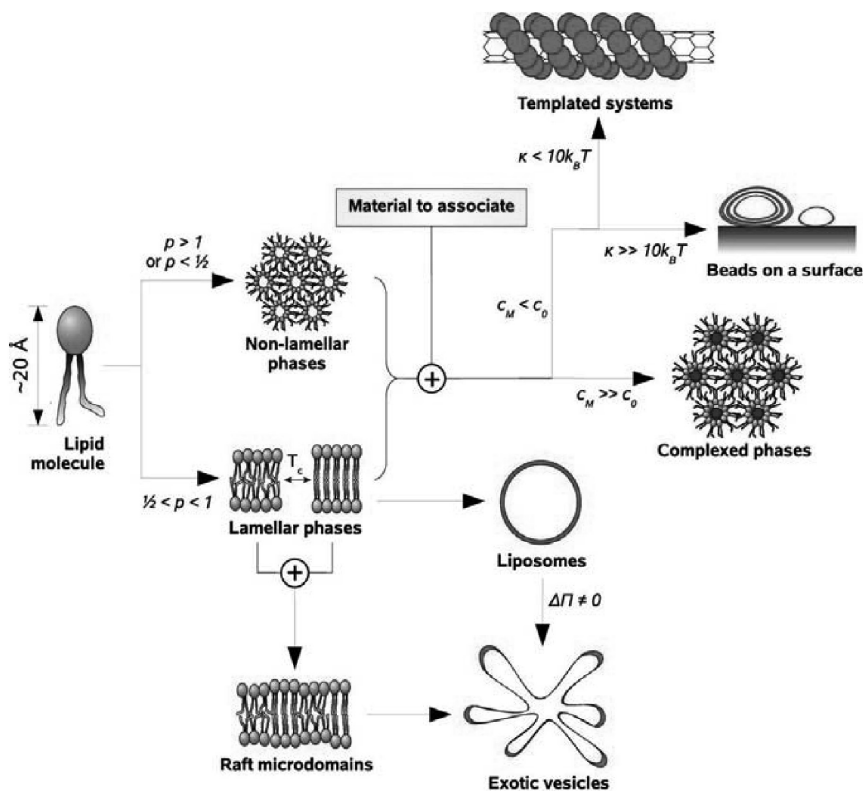


**Фиг. 2.** Схематично представяне на основните липидни фази, които се появяват в реда на нарастване (отляво-надясно) на параметъра на опаковане: нормални мицели  $L_1$ ; нормална хексагонална фаза  $H_1$ ; плоска течна ламеларна фаза  $L_\alpha$ ; трите биконтинуални кубични фази – G, D и P (пространствени групи  $Ia3d$ ,  $Pn3m$  и  $Im3m$ ); обърната хексагонална фаза  $H_{II}$ ; дискретна кубична фаза, съставена от мицели (група  $Fd3m$ ) и обеман разтвор на обратни мицели  $L_2$  [74, 75, 60]

На фиг. 2 са показани главните липидни фази при нарастване на параметъра на опаковане. Една по-подробна класификация е дадена в обзора на Седон и Темплър [73].

## 2. ЛИПИДНИ МОДЕЛНИ СИСТЕМИ – СТРУКТУРА И ПРИЛОЖЕНИЕ

Чрез параметъра на опаковане една обобщена, макар и повърхностна, класификация на липидните моделни системи (ЛМС) може да бъде дадена въз основа на макроскопичната форма, която заемат. По този признак те се разделят на *плоски* и *изкривени*. Към вторите освен сферичните могат да се причислят и разнообразните биконтинуални липидни кубични фази [73, 53, 54], както и екзотичните везикули [85]. Освен това друга категоризация на ЛМС се базира на условията, в които се намират – дали са в свободно състояние, или в контакт с твърдотелен субстрат. За целите на нашето разглеждане обаче сме се ограничили само с първия тип системи, тъй като те главно са от интерес за доставката на лекарствени средства в организма.



**Фиг. 3.** Общ преглед на структурите, образуващи се при самоасоциацията на липидните моделни системи ЛМС в различни условия. Физични фактори, от които зависи архитектурата на ЛМС:  $p$  е параметър на опаковане;  $c_0$  – спонтанна (вътрешна) кривина;  $k$  – средна кривина, задаваща се като  $k = \frac{1}{2}(c_1 + c_2) = \frac{1}{2}(1/R_1 + 1/R_2)$ ;  $T_c$  – критична температура на фазов преход;  $\Delta\Pi$  – разлика в осмотичното налягане;  $c_M$  – локална кривина на материала, свързан с липидите [81]

Схемата, показана на фиг. 3, илюстрира разнообразието, сложния строеж и широкия пространствен мащаб на изява на ЛМС в зависимост от основните физични фактори, с които те са свързани. Както казахме, параметърът на опаковане  $p$  (т.е. формата на молекулата) задава вида на фазата, в която се намират липидите. При  $p$ , по-голям от единица или по-малък от  $\frac{1}{2}$ , системите са склонни да образуват неламеларни фази (напр. хексагонални или кубични), докато при  $\frac{1}{2} < p < 1$  предпочитани са плоските бислойни фази в гелно или течно-кристално състояние, съобразно с критичната температура за преход  $T_c$ . Смесването на липиди с различно фазово състояние води до тяхната сегрегация и появата на обособени латерални области, т.нар. *липидни салове* (англ. lipid rafts). На по-високо пространствено ниво (от порядъка на микрометри) ламеларните фази могат спонтанно да формират затворени образу-

вания – сферични липозоми или везикули с екзотична форма, под влияние на външното осмотично налягане. По-надолу ще се опитаме да изложим примери на някои характерни представители от различните типове ЛМС. Доколкото идеята на работата е да даде представа за тяхното използване като лекарствени носители, първо ще се спрем на основните възгледи в тази насока.

В началото на ХХ в. големият имунолог и баща на съвременната медицинска химия Паул Ерлих формулира концепцията за идеалните лекарства, които трябва да действат като „вълшебни куршуми“ – автоматично да улучват и селективно да унищожават болните клетки, без да увреждат околната здрава тъкан. Оттогава насам тази идея естествено се превърна в пътеводна звезда за разработването и приложението на терапевтични средства. Една нейна модерна версия схематично е показана на фиг. 4. Лекарството е асоциирано с носител, който го транспортира (най-вече чрез кръвния ток) до болната тъкан. Носителят е снабден с рецепторна структура, която го свързва с клетките мишени. Освен това е необходим и механизъм за освобождаване на препарата. Въпреки развитата досега активна дейност, за съжаление трябва да се каже, че все още сме далеч от цялостната реализация на идеята на Ерлих.

Тук сме се помъчили да покажем някои възможни ефективни реализации по пътя към тази заветна цел. Независимо че параграфът е посветен главно на везикуларните системи, той дава представа изобщо за подходите (най-вече физикохимични, а също фармакологични и биохимични) в решаването на проблема за използването на ЛМС за терапевтични цели.

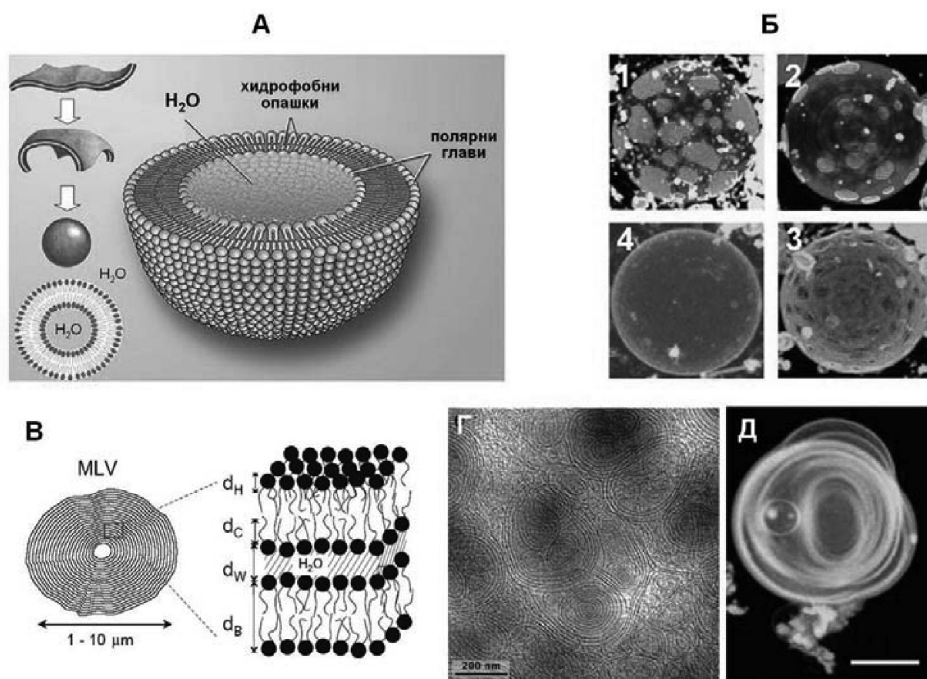


**Paul Ehrlich**  
(1854-1915)



**Фиг. 4.** Горе: Паул Ерлих [13]. Долу: Принципна схема на съставните части на „вълшебните куршуми“ [10]

Отдавна познатите липидни везикули, или т.нар. *липозоми* (от гр. λίπος мазнина + σφῆρα тяло, материална същност), са може би най-често срещаната моделна система. Терминът липозом се използва за означаване изобщо на всякакво затворено липидно образувание, ограждащо обем с воден разтвор [8] (фиг. 5). От тях са известни най-различни варианти, като например мултиламеларните (многослойни) везикули (англ. MultiLamellar Vesicles, MLV), представляващи концентрично подредени бислоини филми (стотици), разделени помежду си от водна фаза (фиг. 5В, Г), които спонтанно се получават от болшинството фосфолипиди при диспергирането им във водна среда. Друг широк клас са едностенните малки (Small Unilamellar Vesicles, SUV; диаметър 20–50 nm) и големи (Large Unilamellar Vesicles, LUV; диаметър 50–500 nm) везикули, които биват формирани с разнообразни методи [42, 40].

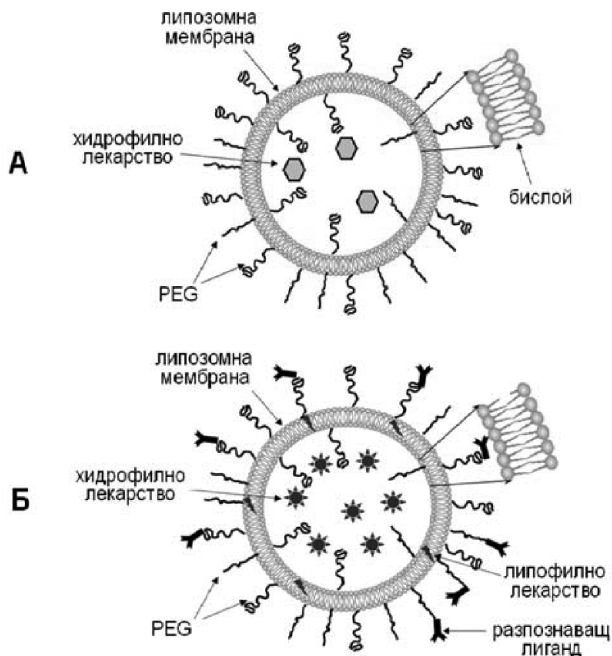


**Фиг. 5.** (А) Схематично представяне на липозом – затвореният липиден бислой граничи отвътре и отвън с воден разтвор. (Б) 3D изображение от конфокална флуоресцентна микроскопия на SUV, маркиран с две флуоресцентни сонди, показващи фазовото разделяне [81]. (В) Схема на MLV:  $d_W$  – ширина на водната фаза,  $d_B$  – дебелина на бислоя, включваща  $d_H$  – зона на полярните глави, и  $d_C$  – зона на опашките [67]. (Г) Трансмисионна електронно-микроскопска снимка (сгуо-ТЕМ) на MLV от моноолеин/натриев олеат/D<sub>2</sub>O = 10/5/85 [30]. (Д) Конфокално микроскопско изображение на различните слоеве от MLV, съдържащ POPC и флуоресцентния маркер DiIC<sub>18</sub> [25]

В тази глава малко по-подробно ще се спрем на т.нар. *гигантски едно-листови везикули* (англ. Giant Unilamellar Vesicles, GUV). Те представляват достатъчно големи ( $>20 \mu\text{m}$  в диаметър) затворени бислойни сфери, за да бъдат наблюдавани оптично. Всъщност подобни хидратирани липозомни структури от лецитинов екстракт са били регистрирани със светлинна микроскопия от Вирхов още в средата на XIX в.

Причините за голямата популярност на гигантските везикули са няколко. Първо, те са сравнително лесни за получаване и съставът им и условията на външната среда могат да бъдат прецизно контролирани. Това дава голямото предимство да се изследва фазовото поведение както на дву- и три-компонентни смеси от чисти липиди, така и на естествени липидни фракции или нативни мембрани [62], а също да се манипулират GUV с вградени мембранни белтъци [46]. Второ, GUV позволяват директно наблюдение на единични екземпляри с оптична микроскопия [24] и, трето, размерите и сферичната им форма са твърде близки до тези на плазмалемата. Със самото им дефиниране през 60-те години на XX в. като малки липидни капсули, съдържащи вода (фиг. 5А), липозомите дадоха големи надежди за потенциални кандидати да играят ролята на „вълшебни куршуми“ [26, 27]. Съображенията за това са следните: липозомите са лесни за възпроизвеждане структури и са изградени от нетоксични биосъвместими материали; водният им лумен може да съдържа хидрофилни вещества, докато бислоят им да бъде натоварен с хидрофобни или амфибилни съединения; притежават различни размери (някои са достатъчно малки, за да преминат и през най-фините капилляри); на повърхността им могат да бъдат разположени специфични химични групи, играещи ролята на разпознавателни елементи, с помощта на които да се ориентират към клетките мишени (фиг. 6).

Независимо обаче от положените колослни усилия за разработването на липозомно базирани системи за доставяне в организма на лекарствени средства, едва в последно време бяха постигнати съществени успехи в тази насока. Един от главните проблеми е, че конвенционалните липозоми (фиг. 5А), вкарани в кръвообращението, много бързо биват „засечени“ от имунната система и елиминирани посредством нейните макрофаги. След тяхната деградация лекарствените препарати, които съдържат, се освобождават в кръвта, където или се разграждат, или, което е още по-лошо, започват да влияят пагубно на околните клетки (напр. еритроцитите). Друга, не малка пречка е затруднената екстравазация на липозомите поради ендотелната бариера между кръвоносните съдове и външната тъкан мишена. Тя е съставена от плътно подредени клетки, често подкрепени от базална мембрана [1], но за щастие в много примери целостта ѝ е нарушена именно в патологичните места. Така или иначе, стандартните липозоми в най-добрия случай едвам успяват да достигнат само до черния дроб и далака [10].



**Фиг. 6.** Дълготрайни липозоми с модифицирана повърхност, способни да се промъкват през барьерите на имунната система, служещи като носители на лекарствени средства. (А) Пасивно насочващи се липозоми, натоварени с хидрофилно лекарство във водната фаза (лумена). (Б) Активни липозоми с различни хидрофобни и амфифилни вещества, допълнително инкорпорирани в липидния бислой. Към повърхностното полимерно покритие ковалентно са прикачени елементи, разпознаващи клетките мишени [61]

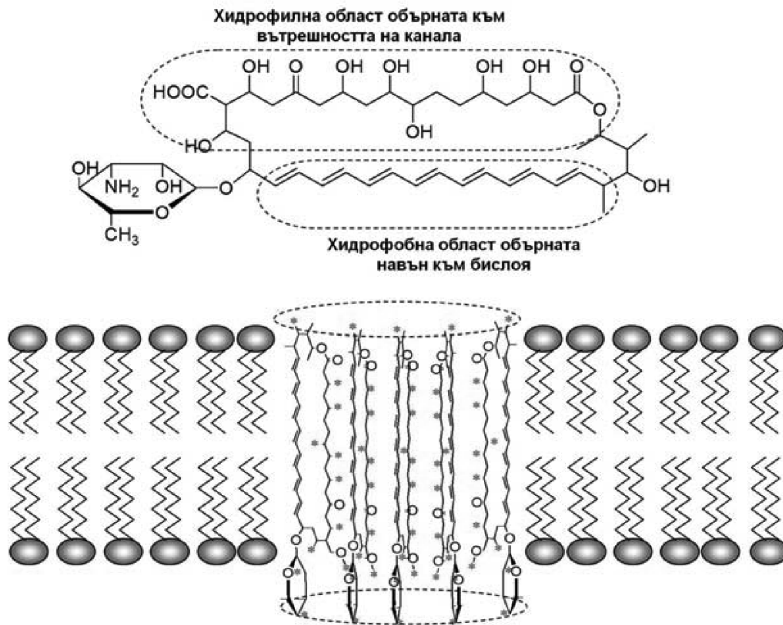
Много голям прогрес бе осъществен с изобретяването на т.нар. „прокрадвачи“\* се липозоми, които са снабдени със специално покритие, „екраниращо“ ги от наблюдението на имунната система, подобно на модерните самолети, избягващи радарната локация [9]. Това най-често се постига с ковалентно прикачване на различни полимери (напр. полиетиленгликол, PEG [82], поливинилалкохол, PVA [76] или полиаминокиселини, PAA [71]) към главите на външния липиден монослой (фиг. 6). Такова хидрофилно полимерно покритие прави липозомите „невидими“, неуловими за имунната система поради близките му физикохимични свойства до водата [61].

Като резултат се повишава времето за циркулация в кръвта и се увеличава вероятността липозоми с подходящ размер (обикновено от 100 nm) да се подвизават по-дълго в капилярната мрежа на големите тумори. Тъй

\*Англ. stealth – прокрадване, промъкване, промушване; потайно, незабелязано, тихо-мълком, крадешком.

като лимфния дренаж на туморите е потиснат в сравнение с този на здравите тъкани, липозомите са склонни да се натрупват в туморите. Този феномен, известен като *ефект на повишено пропускане и задържане*, значително подобрява ефикасността на доставяното лекарство и драстично снижава страничното му въздействие.

Едни от първите липозомно приложени лекарства са цикличният антибиотик Амфотерицин Б и противотуморният препарат доксорубицин. Амфотерицин Б (фиг. 7) е силен, водоразтворим антибиотик, използван за третиране на общи инфекции, представляващи сериозна заплаха за пациенти с имунодепресивни симптоми, като болни от СПИН и подложени на интензивна хемотерапия. Успешната липозомна формула за доставка на доксорубицина е позната като Doxil и е одобрена за лечение например на рак на яйчниците и на гърдата. Понастоящем съществуват редица противоракови лекарства, включени в липозомен носител, които са одобрени за клинична употреба, и още много други са в процес на тестване.



**Фиг. 7.** Структурна формула (горе) и начин на вграждане в бислоя (долу) на каналобразувания йонофор Амфотерицин Б [35]. Със звездички (\*) са отбелязани хидроксилните групи, повечето от които покриват вътрешността на канала. Показани са молекулите само от едната половина на канала

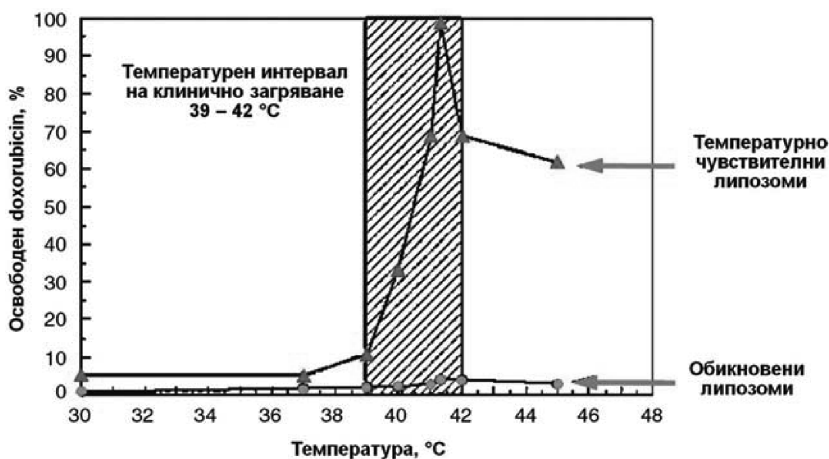


Свойствата на носещата система могат да се оптимизират в зависимост от конкретния случай чрез подбор на липидния състав и полимерните модификатори. Това е една сложна процедура, взимаща под внимание много подробности по отношение на лекарството, което се използва, болестта и молекулния състав на липозомното образувание. Що се отнася до активно насочване (фиг. 6Б) на липозомите към клетките-мишени, то може да се каже, че засега е постигнато много малко. С други думи, липозомните носители все още не могат да бъдат видяни като истински магически куршуми на Ерлих.

Колкото и да звучи парадоксално, подобрената стабилност на липозомите в даден момент се оказва техен недостатък. Един от сериозните проблеми на липозомната доставка на лекарства в организма е не толкова как да бъдат направени липидните микрокапсули по-издръжливи, отколкото как по-лесно да бъде изнесен навън носения препарат при достигане на целта. Нещо повече, той не само трябва да бъде освободен в значителни количества на предвиденото място, но и за точно определено време, съгласувано с неговия режим на действие. В много случаи локалното количество на лекарството при липозомно прилагане не надвишава това, получено от внасянето му в свободна форма. Причината е, че препаратът не може да напусне капсулата достатъчно бързо, за да осигури високи локални дози.

Физикохимично решение на проблема е предложено от Дейвид Нийдхам и сътрудници от университета Duke в щатите [66]. То се основава на използването на хипертермия, т.е. нагряване на тумора малко над телесната температура. Тази процедура дава няколко благоприятни ефекта. От една страна, разширяване на кръвоносните съдове в раковата тъкан, позволяващо промушването на липозомите в нея, а от друга, засилено поглъщане на лекарството от раковите клетки. Гвоздеят на програмата обаче е, че липозомите са проектирани да стават по-пропускливи с повишаване на температурата. Това се дължи на фазовия преход в бислоя, по време на който липидите заемат по-малко плътна опаковка, появяват се дефекти и хетерогенности, в резултат на което се увеличава проницаемостта за полярни и заредени вещества [10]. На този феномен именно се базира по-ефективното изтичане на лекарствения препарат от липозомите.

Конструирайки носители, чийто бислой е съставен от липиди с точка на фазовия преход, непосредствено над нормалната телесна температура, споменатите учени са успели да доставят 30 пъти повече лекарство, отколкото с обикновените липозоми. Както се вижда от фиг. 8, топлинно зависимите липозоми изпускат много бързо (в рамките на 20 секунди след загряването) съдържимия препарат в доста тесен температурен интервал, което е от критично значение за терапевтичния ефект. Клинично, локалното повишаване на температурата в областта на тумора се постига с микровълново или ултразвуково облъчване.

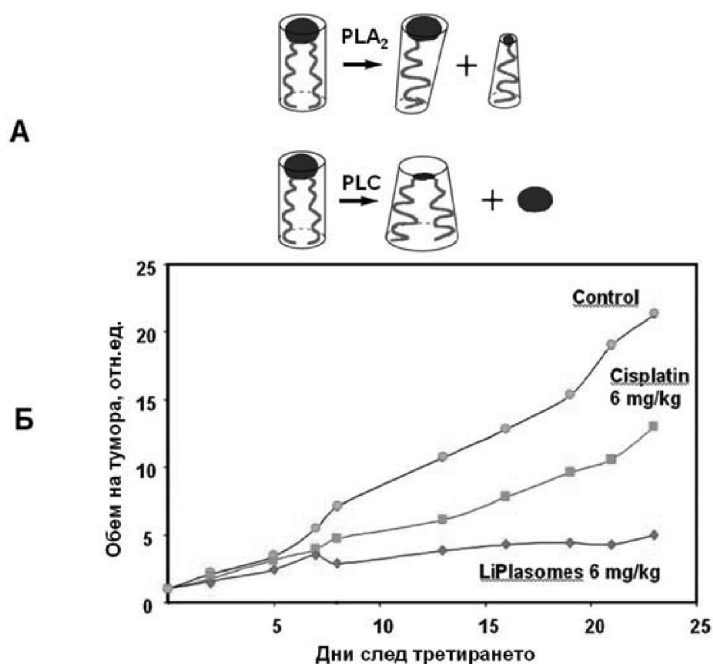


**Фиг. 8.** Освобождаване на доксорубицин от конвенционални и температурно зависими липозоми [66]

Недостатък на хипертермията като начин за индуциране на лекарственото освобождаване е необходимостта от предварителна диагностика, за да се локализира точно поразената тъкан, която трябва да се нагрее. По отношение на канцерогенезата в много случаи това не е възможно, особено в ранните стадии от развитието на тумора. За да се доближим до идеята на Паул Ерлих, очевидно са нужни процеси, които по-лесно да идентифицират болното място и да задействат разтоварването на лекарството в него.

Важна стъпка напред в тази насока е направена с въвеждането на нов механизъм за тригериране, който е резултат от един комбиниран физикохимичен и биохимичен подход. От фармакологична гледна точка той е нетрадиционен, тъй като използва по-скоро биофизични съображения, отколкото медицинска химия и лекарствено-рецепторни схеми. Предложената липозомна система се възползва, от една страна, от специфичните физикохимични свойства на липидния бислой, а от друга, от патофизиологичните и биохимичните свойства на раковите клетки. Пусковият механизъм за деградация на липозомите и освобождаване на препарата, който носят в мястото на малформацията, се основава на засилена ендогенна активност на секреторната фосфолипаза  $A_2$  (sPLA<sub>2</sub>). По принцип фосфолипазите са такъв клас ензими, които разцепват липидите в различни части на молекулата. Те променят физикохимичните свойства на мембраните, тъй като произвеждат продукти, склонни да формират неламерарни липидни фази. Например фосфолипаза  $A_2$  генерира лизолипиди (едноверижни) и свободни мастни киселини, докато фосфолипаза C (PLC) дава диацилглицерол с разрушаване на връзки в полярната глава (фиг. 9А). Тези липиди са известни като „конични“ поради различния от единица параметър на опаковане (фиг. 2).

По-специално, секреторната фосфолипаза  $A_2$  проявава активност само в мембранните интерфейси, но не и върху липидни мономери в разтвор. Нещо повече, нейното ензимно действие е много силно зависимо от физичното състояние на бислоя, в частност, локална кривина и дефекти [63]. Понеже самата тя генерира мембранно активни продукти, излиза, че е налице някаква форма на положителна обратна връзка и автокатализа. Този факт е много изгоден за реализацията на ензимния запусък механизъм. Освен това поради ентропийни причини, свързани с взаимното разположение на PEG и липидните молекули, sPLA<sub>2</sub> е по-ефективна върху модифицираните повърхности, отколкото върху голи недериватизирани липиди.



**Фиг. 9.** Ензимен механизъм, задействащ деструкцията на липозомите и неговото приложение в антитуморната терапия. (А) Образуване на конично оформени молекули под действие на фосфолипазите  $A_2$  и С. (Б) Сравнение на резултатите от обработване на карциноми при мишки с препарата цисплатин: (●) контрола (без препарат), (■) 6 mg/kg цисплатин в свободна форма, (◆) 6 mg/kg цисплатин, инкапсулиран в липлазому; по данни на LiPlasome Pharma A/S [64]

По някакво щастливо стечение на обстоятелствата се оказва, че голяма част от различните видове тумори се характеризира със засилена експресия на sPLA<sub>2</sub> така, че нейната локална концентрация в увредената тъкан е на един-два порядъка по-висока от нивото ѝ в серума и много по-висока, отколкото в здравата тъкан около тумора [15]. Това явление позволява да бъ-

де разиграна комбинацията от пасивно насочване на липозомите и ензимен тригериращ механизъм [33].

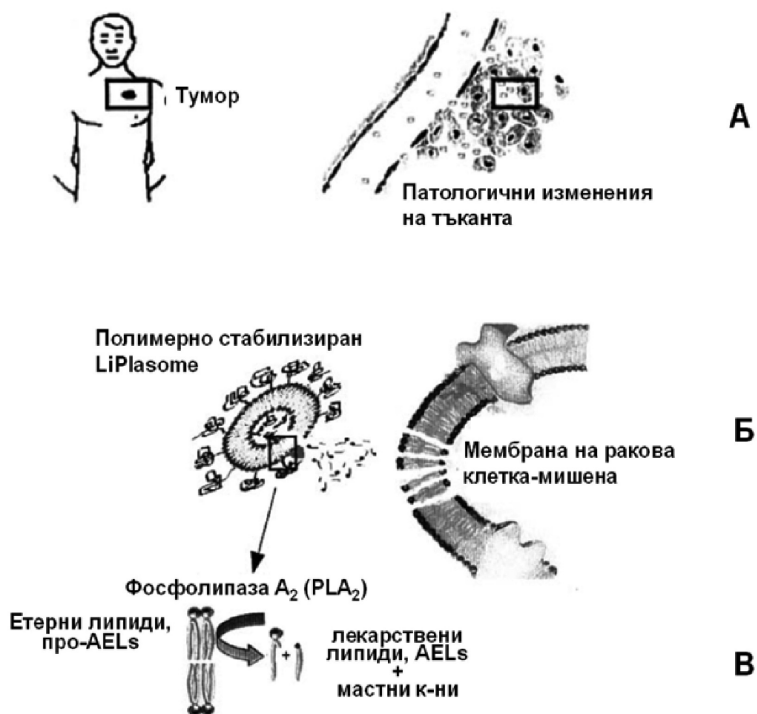
На полимерно стабилизирани липозоми, специално модифицирани за по-голяма чувствителност към хидролизата от страна на sPLA<sub>2</sub>, бе дадено наименованието *липлазоми* (LiPlasomes) и те бяха препоръчани като дистрибуторна система за тумори с висока локална концентрация на фосфолипазата [17]. Дизайнът на липлазомите бе разработван с упорити проучвания върху моделни мембранни системи, за да се установят връзките между активността на sPLA<sub>2</sub> и физичните свойства на бислоя [63]. След многобройни *in vitro* експерименти с култури от ракови клетки бе проведено и тестване с препаратите цисплатин *in vivo* върху мишки. Резултатите недвусмислено показват, че така предложената система за прилагане на антитуморни агенти в организма е много по-ефикасна от традиционните липозоми (фиг. 9Б).

По-доброто представяне на липлазомната формулировка в сравнение със свободно внесения цисплатин (при същите токсични дози) се дължи и на още едно явление. Както казахме, продуктите от хидролизата на липидния носител са мембранно активни и предизвикват латерален стрес в бислоя, с което увеличават проникваемостта на раковите клетки. Така самите липиди на дистрибуторната система могат да играят ролята на антитуморни лекарства след активиране от sPLA<sub>2</sub> в болното място (фиг. 10).

Първите кандидати за липидни антитуморни про-лекарства, от които да бъде изградена носещата капсула, са моно-естер-моно-естер-глицеро-фосфолипидите, в които *sn-1* ацилната верига е свързана към глицеролния гръбнак с етерна връзка, а *sn-2* веригата е свързана с „нормална“ етерна връзка (фиг. 1А). Определени видове лизо-естерни липиди са известни със своята цитотоксичност и тъй като еритроцитите не притежават ензими за тяхното разграждане, инжектирането им в кръвта води до масивна хемолiza. Също толкова чувствителни към тях са и раковите клетки. Под формата на двувърижни естерно-естерни липиди обаче, влизащи в състава на капсулата, тези съединения не са опасни [16].

След казаното дотук не е трудно да се досетим каква е следващата стъпка в развитието на липлазомите. Ако към лизо-естерен липид се прикачи обичайно антитуморно средство, след хидролизата от sPLA<sub>2</sub> продуктите на разпада ще имат двойно действие срещу раковите клетки – лизо-естерните липиди ще атакуват мембраните, а освободеният лекарствен препарат ще прояви нормалната си активност.

Освен липозомите с „традиционни“ размери, като лекарствени носители се срещат и нано-варианти. Един оригинален метод за нанолипозомна формулировка е разработен преди десетина години от Мозафари и сътр. [11]. Докато повечето протоколи използват силен механичен стрес (озвучаване, хомогенизация, високи налягания), вредни химикали (органични разтвори-

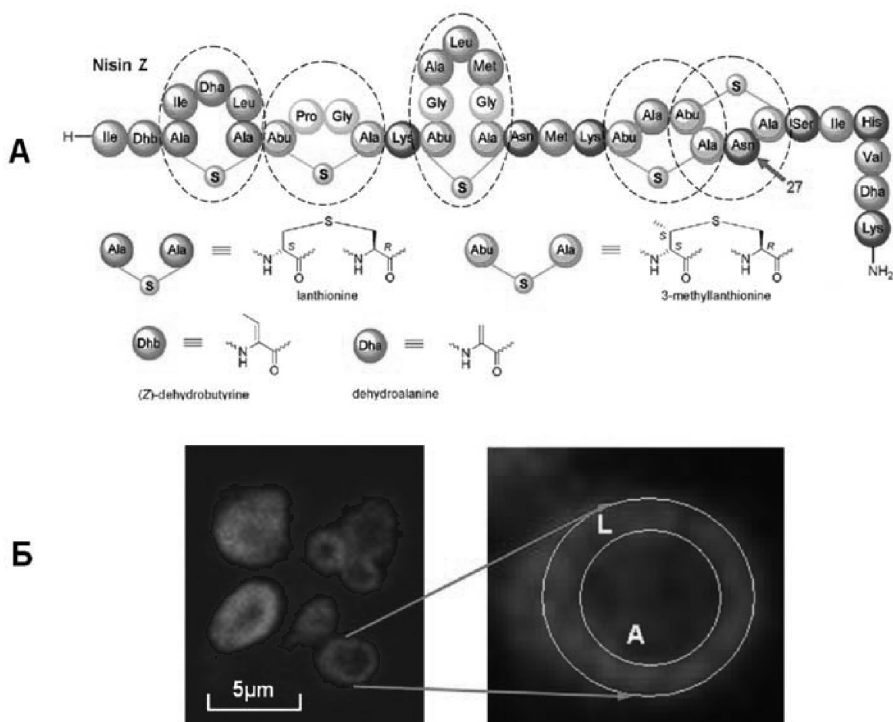


**Фиг. 10.** Схема на прилагане на антитуморни етерни липиди (англ. Anti-tumor Ether Lipids, AELs) чрез модифицирани липозоми. (А) Патологични изменения в тъканта, характеризиращи се с пропускливи капилляри и висока sPLA<sub>2</sub> активност. (Б) Пасивно насочване и взаимодействие на липозомите с клетките мишени. (В) Хидролизиране на липидите от носещата капсула с отделянето на мембранно активните етерни лекарствени липиди AELs [10]

тели, детергенти) или екстремни рН, новият метод предлага по-мека процедура, максимално запазваща активността на вграждания препарат. Той се базира главно на ефективно турбулентно разбъркване на липидните съставки при температура, над критичната, и многократно прекарване през филтърна мембрана със субмикронни пори. Получените нано-липозоми са с размери от порядъка на 200–300 nm и коефициент на полидисперсност (polydispersity index, PDI) около 0,2–0,3. Стабилността им достига от няколко до десетина месеца в зависимост техническите детайли и начина на съхранение. Тези липозоми се оказват много удобни носители на бактерициди при третирането на редица инфекциозни заболявания [5].

В цитираната работа е използван цикличният лантибиотик низин, секретирани от някои млечно-кисели бактерии (*Lactococcus lactis*), срещу различни Gram-положителни бактерии. Това е един катионен амфифилен пептид (34 аминокиселини, фиг. 11А), който съдържа няколко необичайни

дехидро-остатъка и тиоетерно (–S–) свързани лантионини [31]. Той съществува в две естествени форми А и Z, които се произвеждат в еднакви количества от различните щамове и се различават само по една аминокиселина в 27 позиция – хистидин (His, H) за низин А и аспарагин (Asn, N) за низин Z [65]. Субституцията с Asn увеличава разтворимостта на низина и го прави по-удобен за хранителни и фармацевтични нужди [29].

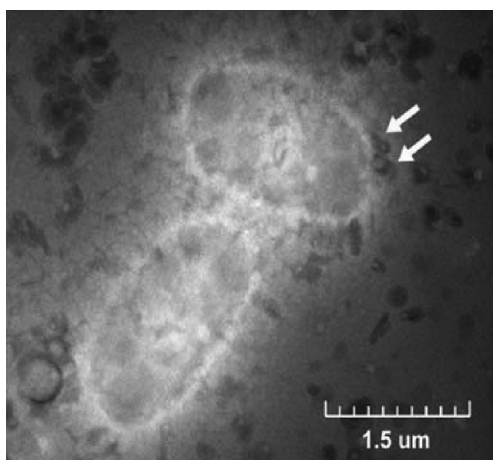


**Фиг. 11.** (А) Първична структура на цикличния лантибиотик Nisin Z [31, 57]. (Б) Конфокално микроскопско изображение на натоварени с низин нано-липозоми; вдясно – увеличение, показващо водната А и липидната L фази [5]

Прилагането на низина в свободна форма обаче е скъпо и свързано със значителна загуба на активност и деградация, а също така и с появата на мутирали микроорганизми, които не се влияят от него. Капсулирането му във фосфолипидни везикули дава няколко предимства – намалява сродството към компоненти, различни от мишените, и избягва нежелани странични взаимодействия; предпазва го от инхибитори; намалява риска от възникването на резистентни щамове; улеснява насочването на препарата. Последният ефект се постига благодарение на подбора на липидното съдържание. Известно е, че наличието на фосфатидил-инозитол например увеличава

афинитета на липозомите към някои бактерии, асоциирани с епидермиса на устната кухина и кожата. Катионните липозоми, включващи стеариламин, се държат по подобен начин. Повърхностно прикачените лектини\*\*, очевидно също подпомагат свързването с бактериите мишени [43].

Като илюстрация на ефикасността на предложената формулировка на фиг. 12 е показано как nano-липозомите (в тъмно) са обградили бактерията и се прикрепват към повърхността ѝ.



**Фиг. 12.** ТЕМ изображение на взаимодействието на nano-липозомите (посочени със стрелки) с грам-положителната бактерия *Bacillus subtilis* [5]

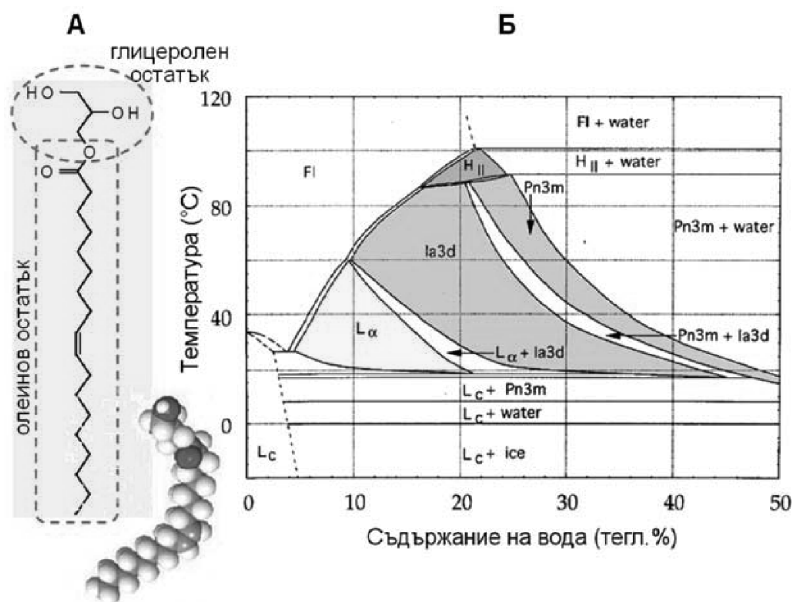
Липозомната формулировка от години е доказала преимуществата си пред директното прилагане на медикаментите. Тя с успех е използвана в третирането на редица заболявания в моделни, предклинични и клинични тестове. Въпреки това обаче понастоящем за рутинна употреба са в наличност много малко лекарствени средства от този тип, предимно цитираните по-горе антитуморни агенти [41].

В последните две десетилетия не малко усилия бяха положени за реализиране на носещи системи, базирани на неламеларни липидни фази, и използването им в депозирането на лекарствени препарати. В основни линии става дума за дисперсни кубични формирания, или т.нар. *кубозоми* (Cubosome®), фиг. 14) [79], които добиха широка известност, след като в своята докторска дисертация Томас Ландх [50, 51] показва много примери за възникване на би-

---

\*\* Лектините от всички организми са протеини които свързват въглехидратите с голям афинитет и специфичност [6, 49]. Те участват в широк кръг процеси на клетъчно разпознаване, сигнализация и адхезия, а така също и във вътреклетъчното насочване на новосинтезираните полипептиди [12].

континуални кубични фази (фиг. 2) в бислоя на някои субклетъчни органиели *in vivo*. Освен това бързо се изясни, че тези нетрадиционни бислойни форми могат да намерят широко (био)нанотехнологично приложение, включително във фармакологията. Макар все още да не са повсеместно одобрени за клинична употреба, в редица тестове те са показали добри резултати като система за лекарствена доставка. За тяхно главно достоинство се сочи високото съотношение площ/обем на бислойната структура, както и улесненото отдаване на препаратите, с които са натоварени [77, 83, 84]. Тъй като едно от най-често използваните амфибилни съединения за получаване на различни кубични фази е моноолеина, по-долу на фиг. 13 е дадена неговата фазова диаграма.



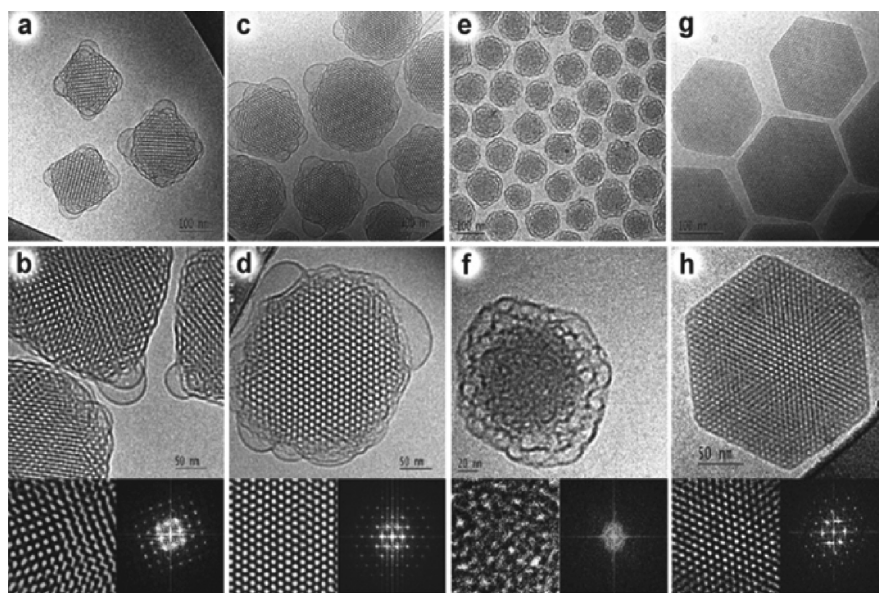
**Фиг. 13.** (А) Структурна формула и Ван-дер-Ваалсов модел на моноолеин (глицерол-моноолеат, GMO, 1-9*cis*-octadecenoyl-glycerol). (Б) Фазова диаграма за бинарна система моноолеин/вода, получена с помощта на рентгенова дифракция и диференциална сканираща калориметрия, DSC [31, 69]. Отбелязани са следните фази:  $L_c$  – твърда кристална,  $L_\alpha$  – течна-кристална,  $\text{FI}$  – изотропна течна,  $\text{ia3d}$  – биконтинуална кубична  $Q_{II}^G$ ,  $\text{Pn3m}$  – биконтинуална кубична  $Q_{II}^D$ , и  $\text{H}_{II}$  – обърната хексагонална

Въпреки че параметърът на опаковане на GMO се оценява на 1,07 (което означава толериране на неламеларни структури), фазовата диаграма на чистия моноолеин може да служи като пример за това, че в реалните лиотропни системи не винаги се срещат всички фази. В нея отсъства например биконтинуалната кубична фаза  $Q_{II}^P$  (базираща се върху  $P$ -повърхността,



пространствена група  $Im\bar{3}m$ ). Независимо от това обаче, както се вижда, GMO показва доволно богато фазово поведение, което го прави привлекателен за целите на кубозомната формулировка.

Фрагментацията на обемните липидни кубични фази в дисперсна система от течено-кристални наночастици с многопреградно вътрешно устройство в много случаи се постига с използването на кополимери, показващи детергентни свойства (фиг. 14) [39, 28].



**Фиг. 14.** Типични cryo-TEM микрографии на различни неламеларни липидни наночастици: (a–d) частици, съдържащи биконтинуална кубична фаза от тип P( $Im\bar{3}m$ ). Дисперсията е приготвена от смес на глицерол-моноолеат (GMO), кополимер Pluronic F127 и вода в тегловно съотношение GMO/F127/вода = 1.88/0.12/98.0; (e, f) монодисперсни частици, включващи гъбовидната (сюнгеров тип „sponge-like“)  $L_3$  фаза, приготвени от смес на диглицерол-моноолеат (DGMO), глицерол-диолеат (GDO), кополимер P80 и вода в тегловно съотношение DGMO/GDO/P80/вода = 2.13/2.13/0.74/95.0; (g, h) монокристални частици на обратната хексагонална фаза  $H_{II}$ , получени от смес на DGMO/GDO/F127/вода = 2.25/2.25/0.5/95.0. Най-долният ред показва увеличени области от частиците с техните фурие-трансформации, даващи характерната периодичност за съответните мезофази, отбелязани по-горе [28]

Механизмът на този процес не е напълно изяснен. Процедурата обикновено включва високо енергетични техники на възбуждане, като силна латерална хомогенизация, свръхзвучаване, топлинна обработка в автоклав. При стайни температури дисперсната система се състои преимуществено от съвместно съществуващи кубични и везикуларни частици. Третирането с висока температура при  $125^\circ\text{C}$  предизвиква трансформация на бислойните везикули в ку-

бични наноструктури. Това се дължи на сливането на липозомите в кубозомни обекти с по-големи размери и по-плътна вътрешна бислойна опаковка.

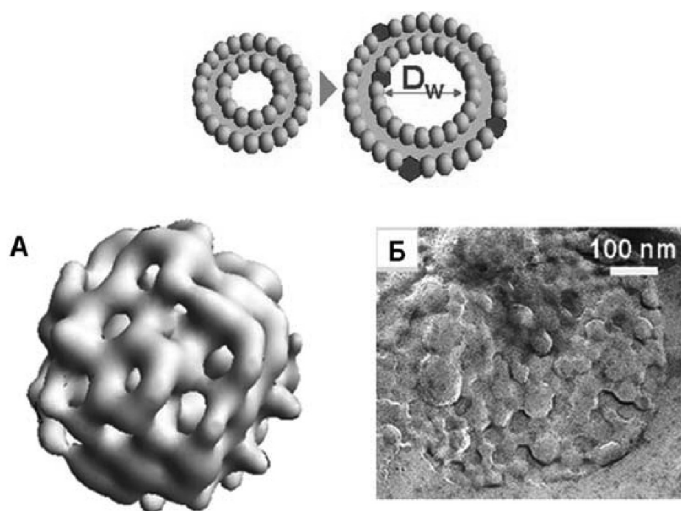
Очевидно от особен интерес е възможното използване на кубозомите за задържане в тях на биомакромолекули (като пептиди, белтъци, ДНК), запазващи естествената си структура и функции [55]. Протеиново натоварени кубозомни частици (*протеокубозоми*) вече са били проучвани и резултатите показват, че те представляват високо подредени наноструктури, които изглеждат перспективни като носеща система, способна да доставя белтъчни компоненти [20–22]. По този въпрос се работи много интензивно и е налице изобилна литература, чийто преглед може да бъде предмет на широк обзор. Ето защо тук ще спрем вниманието само върху успехите на един френско-български екип, постигнати в тази насока в последните години.

За вграждането на биосъвместими макромолекули в кубозомите, могат да се посочат поне две сериозни пречки – „силовата“ обработка за получаването им и малкият размер на каналите в кубичната фаза. Съвсем ясно е, че дадените стандартни процедури за формиране са несъвместими със запазването на нативната конформация и функционалната активност на биомакромолекулите. Един алтернативен подход предвижда приготвянето на кубозомите да става в съответствие с лиотропните фазови преходи на трикомпонентната система моноглицерид/етанол/вода. Той разчита на преципитация на наночастиците под въздействие на разреждането без намесата на силно външно възбуждане [78]. Този метод осигурява функционализиране на кубозомите, при условие че конформацията на пептидите не се влияе от органичния разтворител.

В тази връзка предлаганата от споменатия научен екип стратегия, описана в една обзорна работа [23], изглежда доста по-съвършена. Най-общо може да се каже, че тя се базира на възможността за контролирана хидратация на неламеларните фази на някои нейонни липиди, като ГМО, монолинолеина, фитантриола и др. Понастоящем изследването на тяхното фазово поведение с увеличаване на водното съдържание е важна предпоставка за напредъка в развитието на липидни наноносители с многосекторно вътрешно устройство.

При ниска степен на хидратация, от порядъка на 40 тегл.%, вграждането на протеини в бислоя на наночастиците води до конкуренция за водната фаза между макромолекулите и самоасоцииращите се липиди. В това състояние се наблюдават биконтинуалните фази  $G(Ia3d)$  и  $P(Im3m)$ , които нормално не се срещат при напълно хидратирани смеси ГМО/вода без протеини (фиг. 13). Диаметърът на водните канали в решетката на ромбоидната фаза  $D(Pn3m)$  е около 2,5–3,5 nm [20, 21]. Независимо че тази големина на наноканалите не надхвърля размерите на по-едрите белтъци, установено е, че те успешно се включват в кубичните фази. Явно тяхното разположение не е изцяло във водните канали, което се потвърждава от данните по рентгенова дифракция.

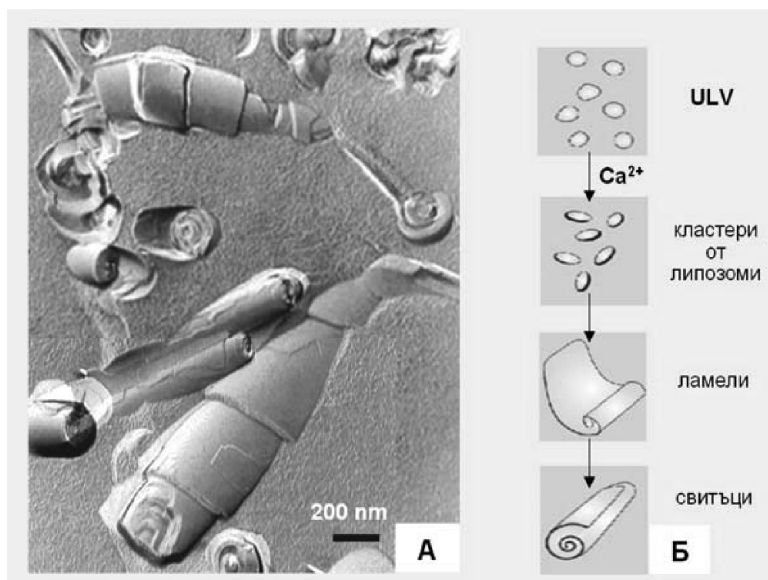
Добре известно е, че биконтинуалната водно-липидна мрежа е чувствителна към външно въздействие. Така манипулирането на размера на каналите чрез външни стимули представлява удачно решение на проблема за ефикасното вграждане на макромолекули в липидните носители. В този смисъл поемането на вода и набъбването на биконтинуалните GMO фази трябва да се разглежда като свързано с модулирането на кривината на бислоя. Такива изменения в ширината на тримерния (3D) лабиринт от водни фази и дебелината на бислоя могат да се постигнат с различни добавки към основния моноглицерид. Засега са докладвани примери на промяна в диаметъра на каналите с помощта на заредени липиди и липо-пептиди, а също и с прибавянето на някои повърхностно активни вещества, ПАВ (англ. surfactants). Заради параметъра на опаковане, тяхното действие се основава именно на намаляването на кривината на бислоя и оттам засилване на хидратацията. Например нейонните сурфактанти октилглюкозид и додецилмалтозид драстично изменят течно-кристалната структура на GMO при акомодирането си в интерфейса полярна/неполярна област. В резултат на това структурите набъбват, стават по-плоски (близки до преход към ламеларни, или  $L_3$ -сюрджеров тип фази) и диаметърът на водните канали се увеличава до  $\sim 7$  nm [18] (фиг. 15, горе).



**Фиг. 15.** Горе: изменение размера на каналите с намаляване на кривината на бислоя заради включването в него на молекули с параметър на опаковане  $< 1$  [18]. Долу: протеокубозоми със силно хидратирана неламеларна фаза: (А) Модел на биконтинуалната повърхност на кубозомна наночастица, съдържаща нанокаверни, породени от разширението на каналите във водната фаза. Слабо подредената липидна D- фаза се преплита с водните канали. (Б) Трансмисионна електронно-микроскопска снимка, получена след замразяване и нарязване с микротом на образците (т.нар. freeze-fracture, FF-ТЕМ методика), даваща представа за вътрешната организация на GMO протеокубозом. Вижда се липсата на идеална монокристална подредба.

Предполага се, че протеиновите молекули са разположени в нанокаверните [19, 23]

Освен сферичните липозоми, в момента предмет на усилено внимание са и различни нетрадиционни липидни образувания. Едни много характерни по форма структури, удачно наречени „охлювчета“ (англ. cochleates), бяха описани още в средата на 70-те години на XX в. от Папахаджиопулос и сътр. [68]. Те представляват пурообразни, плътно навити липидни слоеве, които се получават със сравнително лесен протокол. Той включва няколко стъпки на трансформиране на еднослойни везикули (ULV), изградени от отрицателно заредения фосфатидилсерин (PS). Първоначално поради наличието на  $\text{Ca}^{2+}$  катионни мостове, свързващи отрицателно заредените полярни глави на PS, ULV кондензират в по-големи кластери, които се сливат и дават широки липидни листове. Вместо обаче да образуват затворени сферични структури, тези ламелни образувания се завиват под формата на цилиндрични свитъци (фиг. 16).



**Фиг. 16.** Охлювчетата на Папахаджиопулос. (А) FF-ТЕМ снимка, показваща типичните липидни свитъци. (Б) Последователни етапи от процедурата за получаване на „охлювчетата“ [87]

Много скоро след откриването им „охлювчетата“ привлякоха интереса на фармаколозите [37]. Това не бива да ни учудва, като се има предвид, че проблемите, касаещи режима на внасяне на медикаментите в организма далеч не са по-малки, отколкото тези, свързани със самото им разработване. Тъй като притежават както хидрофобни, така и хидрофилни повърхности, тези интересни липидни формирания се оказват подходящи за капсулиране и на

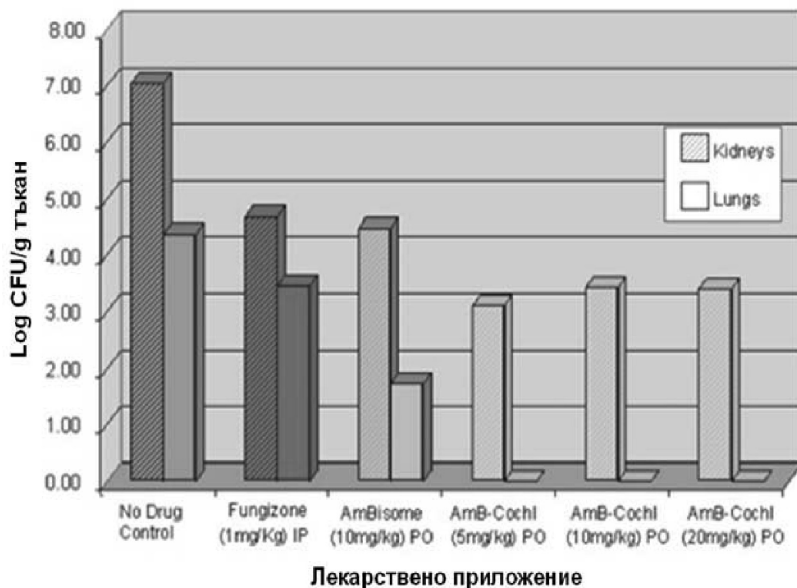
хидрофобни препарати (като Амфотерицин Б, АмВ; фиг. 7) и на амфипатични лекарства, като доксорубицин. Ефективността на инкорпориране на препаратите зависи по-скоро от физикохимичните им свойства, докато размерите на получените комплекси зависят от процедурата на вграждане [86]. Пуруобразните свитъци съдържат най-вече фосфатидилсерин (PS), който се среща предимно в мембраните на невроните и понастоящем широко се препоръчва като хранителна добавка, подпомагаща менталните функции и задържаща процесите на стареене на мозъчната тъкан.

Докладваните в литературата „охлювчета“, използвани през 80-те и 90-те години на ХХ в. за транспорт на антигени и пептиди при ваксините, не винаги имаха еднаква унифицирана структура. В зависимост от процедурата за получаване те се явяваха или във формата на слепени листове и свитъци, или като големи игловидни образувания. С усъвършенстване на протокола за формиране стана възможно рутинното възпроизвеждане на стабилни наночастици с размери < 500 nm (фиг. 16). Тези частици с успех са използвани за модифициране с хидрофобни макромолекули [87].

Фармакокинетичните изследвания на „заредени“ с АмВ наночастици (САМВ) показват, че след орално (per os, PO) подаване на ?с-комплексите, разпределението на АмВ в тъканите мишени следва редът – най-високи концентрации в бъбреците и съответно намаляващи в белите дробове, черния дроб, жлъчката и мозъка. Като цяло тестовете очертават добри изгледи за прилагането на „охлювчетата“ като надеждна система за доставяне на лечебни средства. От друга страна, също е изяснено, че действието на имунните фактори чувствително затруднява задачата на САМВ поради унищожаването им от макрофагите в кръвообращението.

Много добро представяне на САМВ е отбелязано срещу гъбични инфекции от типа на кандидиазис, аспергилозис, криптококозис и др. Данните, изложени на фиг. 17, недвусмислено говорят за ефикасността на тази лекарствена формулировка.

Като пример за способността на САМВ да се справят с общи гъбични инфекции на фиг. 17 е даден ефектът от третирането на мишки, заразени с кандидиазис (предизвикан от *Candida albicans*). При интраперитонеално (IP) вкарване на комплексите мишките се оказват защитени от инфекцията още след поемането на минимални дози, от порядъка на 0,1 mg/kg/ден. Оралното вкарване (PO) на САМВ предизвиква дозово зависимо намаление на общия брой микроорганизми в колонията (CFU) за бъбреците и белите дробове. Тотално премахване на *C.albicans* от дробовете се наблюдава след PO при САМВ дози от 2,5 mg/kg/ден, което е съизмеримо с IP приложението на Фунгизона.



**Фиг. 17.** Тъканно натоварване на бъбреците и белите дробове при мишки, заразени с кандидиазис, след третиране с САМВ, AmBisome и Фунгизон [87]

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработването на системи за пренасяне и депозиране на лекарствени препарати в организма е бързо развиващо се модерно направление, продиктувано от необходимостта за тяхното адекватно действие. Добре известен е проблемът с разграждането на медикаментите (в много случаи на токсични крайни продукти), водещ до нежелателни странични ефекти и/или загуба на ефективност. От друга страна, още от раждането на концепцията на Паул Ерлих за „вълшебните куршуми“, не е затихнал стремежът да се намерят средства за насочването им към точно зададени клетки мишени, без да се засяга здравата тъкан. Това именно определя големия интерес за получаването на подходящи носещи структури, които, запазвайки функционалната активност на препарата, да бъдат в състояние да го доставят в местата на патологични изменения.

Независимо от положените усилия и не малките постигнати успехи с различни не-липозомни системи [34, 70, 47], като най-перспективно направление в тази област се очертава формулирането на носители, базиращи се на състава и свойствата на биомембраните. Това не изглежда странно от гледна точка на огромното разнообразие от структури и функции, които клетъчни-

те мембрани изпълняват. Много важна черта на липидите, като изграждащи елементи за инкапсулиране на макромолекулни препарати, е тяхната биосъвместимост, осигуряваща естествено обкръжение, което поддържа нативната конформация. Също така като природни нетоксични вещества тяхното приложение в организма значително се улеснява. Нещо повече, в последните години недвусмислено се оформи разбирането за сложната латерална компартиментализация на мембраните *in vivo* и за активната роля на липидния бислой в регулирането на дейността на мембранните белтъци [64]. Разкриването на редица нови уникални физикохимични свойства на липидните системи (в частност бислойните) доведе до изясняването на много детайли от фазовото им поведение, което спомогна за получаването в лабораторни условия на нови структурни форми с контролирани параметри и манипулируема, отнапред зададена архитектура. Всичко това дава основание да се надяваме, че с всеки изминат ден се приближаваме до гениалната идея на Паул Ерлих и че в близко бъдеще ни очакват много по-ефикасни решения за пренасяне, насочване и модулиране на лекарствените средства в организма.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Петков, П., Ив. Георгиев, В. Доков. Обща хистология и ембриология. Медицина и физкултура. София, 1986.
- [2] Шелудко, А. Колоидна химия. Наука и изкуство. София, 1966.
- [3] Alberts, B., A. Johnson, D. Bray, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter. *Molecular Biology of the Cell*. 4th ed. New York, 2002.
- [4] Bagatolli, L. A. *Membranes and Fluorescence Microscopy*. New York, 2009, p. 33–51.
- [5] Cevc, G. and D. Marsh. *Phospholipid Bilayers. Physical Principles and Models*. New York, 1987, p. 442.
- [6] Finkelstein, A. Aqueous pores created in thin lipid membranes by the antibiotics nystatin, amphotericin B and gramicidin A. Implications for pores in plasma membranes. London, 1974, pp. 241–250.
- [7] Fukuda, M. and O. Hindsgaul. *Molecular Glycobiology*. IRL Press at Oxford University Press. New York, 1994.
- [8] Garrett, R. H. and C. M. Grisham. *Biochemistry*. 2nd ed. Orlando, 1998.
- [9] Gennis, R. B. *Biomembranes: molecular structure and function*. New York, 1989.
- [10] Landh, T. *Cubic cell membrane architectures. Taking another look at membrane bound cell spaces*. Lund University. Sweden, 1996.
- [11] Lasic, D. D. and D. Papahadjopoulos. *Medical Applications of Liposomes*. Elsevier. Amsterdam, Holland, 1998.
- [12] Lewis, R. N., D. A. Mannock and R. N. McElhaney. *Membrane lipid molecular structure and polymorphism*. San Diego, 1997, pp. 25–102.
- [13] Liskamp, R. M. J., D. T. S. Rijkers, and S. E. Bakker. *Bioactive macrocyclic peptides and peptide mimics*. Weinheim, 2008, pp. 1–27.
- [14] Luzzati, V. *X-ray diffraction studies of lipid-water systems*. New York, 1968, pp. 71–123.
- [15] Metselaar, J. M. *Liposomal targeting of glucocorticoids. A novel treatment approach for inflammatory disorders*. Utrecht University, 2003.

- [16] Mouritsen, O. G. *Life as a Matter of Fat. The emerging science of lipidomics*. Springer Verlag, Heidelberg, 2005.
- [17] Mozafari, M. R. and S. M. Mortazavi. *Nanoliposomes: From Fundamentals to Recent Developments*. Trafford Publishing Ltd. Oxford, UK, 2005.
- [18] Nelson, D. L. and M. M. Cox. *Lehninger Principles of Biochemistry*. 4th ed. New York, 2005.
- [19] Nobel Lectures. *Physiology or Medicine 1901-1921*. Elsevier Publishing Company. Amsterdam, 1967.
- [20] Romberg, B. Poly(amino acid)s: next-generation coatings for long-circulating liposomes. Doctoral Thesis., Utrecht University, 2007.
- [21] Seddon, J. M. and R. H. Templer. *Polymorphism of Lipid-Water Systems*. Elsevier Science B.V., 1995.
- [22] Tanford, C. *The Hydrophobic Effect: Formation of Micelles and Biological Membranes*. 2nd ed. New York, 1980.
- [23] Yagmur, A. and M. Rappolt. *Liquid Crystalline Nanoparticles as Drug Nanocarriers*. London, 2010, p. 339–353.
- [24] Abe, T., K. Sakamoto, H. Kamohara, Y. Hirano. Group II phospholipase A2 is increased in peritoneal and pleural effusions in patients with various types of cancer. – *Int. J. Cancer.*, 1997, **74**, 245–250.
- [25] Andresen, T. L., J. Davidsen, M. Begtrup, O. G. Mouritsen, and K. Jørgensen. Enzymatic release of anti-tumor ether lipids by specific phospholipase A2 activation of novel liposome-forming prodrugs. – *J. Med. Chem.*, 2004, **47**, 1694–1703.
- [26] Andresen, T. L., S. S. Jensen, and K. Jørgensen. Advanced strategies in liposomal cancer therapy: Problems and prospects of active and tumor specific drug release. – *Prog. Lipid Res.*, 2005, **44**, 68–97.
- [27] Angelov, B., A. Angelova, M. Ollivon, C. Bourgaux, and A. Campitelli. Diamond type lipid cubic phase with large water channels. – *J. Am. Chem. Soc.*, 2003, **125**, 7188–7189.
- [28] Angelov, B., A. Angelova, B. Papahadjopoulos-Sternberg, S. Lesieur, J. F. Sadoc, M. Ollivon, and P. Couvreur. Detailed structure of diamond-type lipid cubic nanoparticles. – *J. Am. Chem. Soc.*, 2006, **128**, 5813–5817.
- [29] Angelova, A., B. Angelov, B. Papahadjopoulos-Sternberg, C. Bourgaux, and P. Couvreur. Protein driven patterning of self-assembled cubosomic nanostructures: Long oriented nanoridges. – *J. Phys. Chem. B.*, 2005a, **109**, 3089–3093.
- [30] Angelova, A., B. Angelov, B. Papahadjopoulos-Sternberg, M. Ollivon, C. Bourgaux. Proteo-cubosomes: Nanoporous vehicles with tertiary organized fluid interfaces. – *Langmuir.*, 2005b, **21**, 4138–4143.
- [31] Angelova, A., B. Angelov, S. Lesieur, R. Mutafchieva, M. Ollivon, C. Bourgaux, R. Willumeit, and P. Couvreur. Dynamic control of nanofluidic channels in protein drug delivery vehicles. – *J. Drug Delivery Sci. Technol.*, 2008, **18**, 41–45.
- [32] Angelova, A., B. Angelov, R. Mutafchieva, S. Lesieur, and P. Couvreur. Self-assembled multi-compartment liquid crystalline lipid carriers for protein, peptide, and nucleic acid drug delivery. – *Acc. Chem. Res.*, 2011, **44**(2), 147–156.
- [33] Bagatolli, L. A. To see or not to see: Lateral organization of biological membranes and fluorescence microscopy. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 2006, **1758**, 1541–1556.
- [34] Bangham, A. D. and R. W. Horne. Negative staining of phospholipids and their structural modification by surface-active agents as observed in the electron microscope. – *J. Mol. Biol.*, 1964, **8**, 660–668.
- [35] Bangham, A. D. Surrogate cells or Trojan horses. The discovery of liposomes. – *Bioessays.*, 1995, **17**, 1081–1088.



- [36] Barauskas, J., M. Johnsson, and F. Tiberg. Self-Assembled Lipid Superstructures: Beyond Vesicles and Liposomes. – *Nano Lett.*, 2005, **5**(8), 1615–1619.
- [37] Benech, R. O., E. E. Kheadr, R. Laridi, C. Lacroix, and I. Fliss. Inhibition of *Listeria innocua* in cheddar cheese by addition of nisin Z in liposomes or by in situ production in mixed culture. – *Appl. Environ. Microbiol.*, 2002, **68**, 8, 3683–3690.
- [38] Borné, J., T. Nylander and A. Khan. Phase Behavior and Aggregate Formation for the Aqueous Monoolein System Mixed with Sodium Oleate and Oleic Acid. – *Langmuir.*, 2001, **17**, 7742–7751.
- [39] Briggs, J., H. Chung and M. Caffrey. The temperature-composition phase diagram and meso-phase structure characterization of the monoolein/water system. – *J. Phys. II France.*, 1996, **6**, 723–751.
- [40] Cherezov, V., J. Clogston, Y. Misquitta, W. Abdel-Gawad and M. Caffrey. Membrane Protein Crystallization In Meso: Lipid Type-Tailoring of the Cubic Phase. – *Biophys. J.*, 2002, **83**, 3393–3407.
- [41] Colas, J. C., W. Shi, V. S. N. Malleswara Rao, A. Omri, M. R. Mozafari, and H. Singh. Microscopical investigations of nisin-loaded nanoliposomes prepared by Mozafari method and their bacterial targeting. – *Micron.*, 2007, **38**, 841–847.
- [42] Davidsen, J., K. Jørgensen, T. L. Andresen, and O. G. Mouritsen. Secreted phospholipase A(2) as a new enzymatic trigger mechanism for localized liposomal drug release and absorption in diseased tissue. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 2003, **1609**, 95–101.
- [43] Esfand, R. and D. A. Tomalia. Poly(amidoamine) (PAMAM) dendrimers: from biomimicry to drug delivery and biomedical applications. – *Drug Discov.*, 2001, **6**, 427–436.
- [44] Fogerite, S. Gould-, M. Kheiri, F. Zhang, Z. Wang, A. Scolpino, E. Feketeova, M. Canki, and R. J. Mannino. Targeting Immune response induction with cochleate and liposome-based vaccines. – *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 1998, **3**, 273–287.
- [45] Frolov, V. A., A. V. Shnyrova, and J. Zimmerberg. Lipid polymorphisms and membrane shape. *Cold Spring Harb. Perspect. Biol.*, 2011, doi:10.1101/cshperspect.a004747.
- [46] Griffin, W. C. Classification of surface-active agents by hydrophilicity lipophilicity balance. – *J. Soc. Cosmetic Chemists.*, 1949, **1**, 311–326.
- [47] Gustafsson, J., H. Ljusberg-Wahren, M. Almgren, and K. Larsson. Cubic lipid-water phase dispersed into submicron particles. – *Langmuir*, 1996, **12**, 4611–4613.
- [48] Hope, M. J., M. B. Bally, L. D. Mayer, A. S. Janoff, and P. R. Cullis. Generation of multilamellar and unilamellar phospholipid vesicles. – *Chem. Phys. Lipids.*, 1986, **40**, 89–107.
- [49] Hoven, J. M. van den, S. R. Van Tomme, J. M. Metselaar, B. Nuijen, J. H. Beijnen, and G. Storm. Liposomal drug formulations in the treatment of Rheumatoid Arthritis. – *Mol. Pharmaceutics.*, 2011, **8**, 1002–1015.
- [50] Huang, C. H. Studies on phosphatidylcholine vesicles. Formation and physical characteristics. – *Biochemistry.*, 1969, **8**, 344–351.
- [51] Israelachvili, J. N., D. J. Mitchell, B. W. Ninham. Theory of Self-Assembly of Hydrocarbon Amphiphiles into Micelles and Bilayers. – *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II.*, 1976, **72**, 1525–1568.
- [52] Israelachvili, J. N., S. Marcelja and R. L. Horn. Physical principles of membrane organization. – *Quart. Rev. Biophys.*, 1980, **13**, 121–200.
- [53] Jones, M. N. Use of liposomes to deliver bactericides to bacterial biofilms. – *Meth. Enzymol. Part E.*, 2005, **391**, 211–228.
- [54] Kahya, N. Protein–protein and protein–lipid interactions in domain-assembly: Lessons from giant unilamellar vesicles. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 2010, **1798**, 1392–1398.
- [55] Kamburova, K., V. Milkova, I. Petkanchin, and T. Radeva. Effect of pectin charge density on formation of multilayer films with chitosan. – *Biomacromolecules.* 2008, **9**(4), 1242–1247.

- [56] Kauzmann, W. Some factors in the interpretation of protein denaturation. – *Adv. Protein Chem.*, 1959, **14**, 1–63.
- [57] Kilpatrick, D. C. Animal lectins: a historical introduction and overview. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 2002, **1572**, 187–197.
- [58] Landh, T. From entangled membranes to eclectic morphologies: cubic membranes as subcellular space organizers. – *FEBS Lett.*, 1995, **369**(1), 13–17.
- [59] Larsson, K. Cubic lipid-water phases: structures and biomembrane aspects. – *J. Phys. Chem.*, 1989, **93**, 7304–7314.
- [60] Larsson, K. Aqueous dispersions of cubic lipid-water phases. – *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, 2000, **5**, 64–69.
- [61] Larsson, K. Lyotropic liquid crystals and their dispersions relevant in foods. – *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, 2008, **14**, 16–20.
- [62] Marsh, D. Lateral pressure in membranes. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 1996, **1286**, 183–223.
- [63] Marsh, D. Protein modulation of lipids, and vice-versa, in membranes. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 2008, **1778**, 1545–1575.
- [64] Montes, L. R., A. Alonso, F. M. Goñi, and L. A. Bagatolli. Giant unilamellar vesicles electroformed from native membranes and organic lipid mixtures under physiological conditions. – *Biophys. J.*, 2007, **93**, 3548–3554.
- [65] Mouritsen, O. G., T. L. Andresen, A. Halperin, P. L. Hansen, et al. Activation of interfacial enzymes at membrane surfaces. – *J. Phys.: Condens. Matter.*, 2006, **18**, S1293–S1304.
- [66] Mouritsen, O. G. Lipids, curvature, and nano-medicine. – *Eur. J. Lipid Sci. Technol.*, 2011, **113**, 1174–1187.
- [67] Mulders, J. W., I. J. Boerrigter, H. S. Rollema, R. J. Siezen, and W. M. DeVos. Identification and characterization of the lantibiotic nisin Z, a natural nisin variant. – *Eur. J. Biochem.*, 1991, **201**, 581–584.
- [68] Needham, D., G. Anyarambhatla, G. Kong, and M. W. Dewhirst. A new temperature-sensitive liposome for use with mild hyperthermia: characterization and testing in a human tumor xenograft model. – *Cancer Res.*, 2000, **60**, 1197–1201.
- [69] Pabst, G. Global properties of biomimetic membranes: perspectives on molecular features. – *Biophys. Rev. Lett.*, 2006, **1**(1), 57–84.
- [70] Papahadjopoulos, D., W. J. Vail, K. Jacobson, G. Poste. Cochleate lipid cylinders: formation by fusion of unilamellar lipid vesicles. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 1975, **394**(32), 483–491.
- [71] Qiu, H. and M. Caffrey. Phase properties of the monoolein/water system: metastability and equilibrium aspects. – *Biomaterials.*, 2000, **21**, 223–234.
- [72] Radeva, T. and K. Kamburova. Polypeptide multilayer films on colloidal particles: An in situ electro-optical study. – *J. Colloid Interface Sci.*, 2007, **308**(2), 309–317.
- [73] Seddon, J. M. Structure of inverted hexagonal ( $H_{II}$ ) phases and non-bilayer phase transition of lipids. – *Biochim. Biophys. Acta.*, 1990, **1031**, 1–69.
- [74] Seddon, J. M. and R. H. Templer. Cubic phases of self-assembled amphiphilic aggregates. – *Phil. Trans. R. Soc. Lond.: Phys. Sci. Eng.*, 1993, **344**(1672), 377–401.
- [75] Shearman, G. C., O. Ces, R. H. Templer and J. M. Seddon. Inverse lyotropic phases of lipids and membrane curvature. – *J. Phys.: Condens. Matter.*, 2006, **18**, S1105–S1124.
- [76] Shehata, T., K. Ogawara, K. Higaki, and T. Kimura. Prolongation of residence time of liposome by surface-modification with mixture of hydrophilic polymers. – *Int. J. Pharm.*, 2008, **359**, 272–279.
- [77] Siekmann, B., H. Bunjes, M. H. J. Koch, and K. Westesen. Preparation and structural investigations of colloidal dispersions prepared from cubic monoglyceride–water phases. – *Int. J. Pharm.*, 2002, **244**, 33–43.
- [78] Spicer, P. T., K. L. Hayden, M. L. Lynch, A. Ofori-Boateng, and J. L. Burns. Novel process for producing cubic liquid crystalline nanoparticles (cubosomes). – *Langmuir.*, 2001, **17**, 5748–5756.

- [79] Spicer, P. T. Progress in liquid crystalline dispersions: Cubosomes. – *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, 2005, **10**, 274–279.
- [80] Tanford, C. The hydrophobic effect and the organization of living matter. – *Science.*, 1978, **200**(4345), 1012–1018.
- [81] Tresset, G. The multiple faces of self-assembled lipidic systems. – *PMC Biophysics.*, 2009, **2**, 3, doi:10.1186/1757-5036-2-3.
- [82] Woodle, M. C. and D. D. Lasic. Sterically stabilized liposomes. – *Biochim. Biophys. Acta, Rev. Biomembr.*, 1992, **1113**, 171–199.
- [83] Yagmur, A., L. de Campo, S. Salentinig, L. Sagalowicz, M. E. Leser, and O. Glatter. Oil-loaded monolinolein-based particles with confined inverse discontinuous cubic structure (Fd3m). – *Langmuir.*, 2006, **22**, 517–521.
- [84] Yanagisawa, M., M. Imai, T. Taniguchi. Shape Deformation of Ternary Vesicles Coupled with Phase Separation. – *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **100**, 148102-1-4.
- [85] Zarif, L. Elongated supramolecular assemblies in drug delivery. – *J. Controlled Release.*, 2002, **81**, 7–23.
- [86] Zarif, L. and D. S. Perlin. Amphotericin B nanocochleates: From formulation to cochleate technology. – *Drug Delivery Technology.*, 2002, **2**, 4, 1–4.

## THRESHOLDS OF CAPE AND LIFTED INDEX AT THE DEVELOPMENT OF SUMMER THUNDERSTORMS OVER INLAND AND ALONG THE COAST IN EASTERN BULGARIA

BORYANA MARKOVA<sup>1,2</sup>, RUMJANA MITZEVA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Meteorology and geophysics,  
Faculty of Physics, St. Kliment Ohridski University of Sofia,*  
<sup>2</sup>*National Institute of Meteorology and Hydrology – Varna, Bulgaria*

*Боряна Маркова, Румяна Мицева.* ПРАГОВИ СТОЙНОСТИ НА CAPE И LIFTED INDEX ЗА РАЗВИТИЕ НА ЛЕТНИ ГРЪМОТЕВИЧНИ ОБЛАЦИ НАД ВЪТРЕШНОСТТА И КРАЙБРЕЖИЕТО НА ИЗТОЧНА БЪЛГАРИЯ

Пресметнати са два индекса на неустойчивост (*CAPE* и *LI*), като са използвани характеристики на околната среда от дни с летни валежи по крайбрежието и във вътрешността на Източна България. Статистическият анализ показва, че средните стойности на *CAPE* и *LI* при гръмотевични облаци са значително по-високи и по-ниски съответно, отколкото за обикновените дъждовни облаци и че разликата между разпределенията и съответните средни стойности на индексите за вътрешността и по крайбрежието са незначителни. С помощта на дискриминантен анализ са установени прагови стойности на *CAPE* и *LI*, които разделят гръмотевичните облаци от обикновените дъждовни (без мълнии) облаци. Резултатите показват, че намерената прагова стойност на *Lifted Index (LI)* разделя по-добре гръмотевичните облаци от обикновените дъждовни облаци в сравнение с получения праг за *CAPE*.

*Boryana Markova, Rumjana Mitzeva.* THRESHOLDS OF CAPE AND LIFTED INDEX AT THE DEVELOPMENT OF SUMMER THUNDERSTORMS OVER INLAND AND ALONG THE COAST IN EASTERN BULGARIA

*CAPE* and *Lifted Index, LI*, are calculated using environmental conditions for days with summer precipitation along the coast and over inland of eastern Bulgaria. The statistical analysis reveals that the mean values of *CAPE* and *LI* at the development of thunderstorms are significantly higher

---

*For contact:* Boryana Markova, Department of Meteorology and geophysics, Faculty of Physics, St. Kliment Ohridski University of Sofia, 5 James Bourchier Blvd., 1164 Sofia, Phone: +359 2 8161315. E-mail: b\_markova@abv.bg

and lower correspondingly than at the development of ordinary precipitating clouds and that the differences between the distribution and corresponding indices over inland and along the coast are insignificant. Using general discriminant analyses the threshold values of *CAPE* and *LI*, which are able to discriminate between thunderstorms and ordinary (without lightning) clouds are established. The results indicate that the thresholds of *LI* have better probability of detection for thunderstorms than the established thresholds for *CAPE*.

**Key words:** instability indices, thunderstorms, discriminant analyses

**PACS numbers:** 92.60.Pw, 92.60.Qx

## 1. INTRODUCTION

The use of instability indices to evaluate the state of the atmosphere in relation with the development of convective phenomenon and severe events is already tradition ([1–4] and others). It is known that the ingredients for deep moist convection are instability, moisture inflow and initiating lifting process (e.g. [5, 6]). For the physical representation of the state of the atmosphere the vertically integrated measures of instability such as the Convective Available Potential Energy (*CAPE*) is commonly used (e.g. [7–12]). The other frequently used instability index that predicts the likelihood of thunderstorms is Lifted Index, *LI*. [13] compared the ability of 32 indices proposed over the past 50 years as a predictors for thunderstorm over the Netherlands and established that the best predictors, better than e.g. *CAPE* was *LI*. Usually the threshold values for the corresponding indices above or below which thunderstorms developed are determined. These thresholds however are valid for particular geographical region, season etc.

In [14] the ability of *CAPE*, *LI* and *K*-index to discriminate between ordinary (non-lightning) clouds and thunderstorms in eastern Bulgaria were studied. The results reveal that the higher probability of detection of thunderstorms has Lifted index. The established *LI* threshold ( $LI = -2.3$  deg) was able to discriminate correctly ~74 % of cases in accordance to the type of the considered clouds – ordinary precipitating or thunderstorms. However, the results in [14] have to be considered as preliminary, because only data from one year were used and the indices were calculated when the precipitating clouds developed over 5 inland and 6 along the coast stations. One can assume that the environmental conditions along the coast and inland are different at the development of convective clouds over these regions. Thus, in an attempt to search classification functions (threshold values) with higher probability of detection of thunderstorms it is worth to consider separately the inland and coastal cloud cases developed over eastern Bulgaria, using large number of precipitating cases from several years.

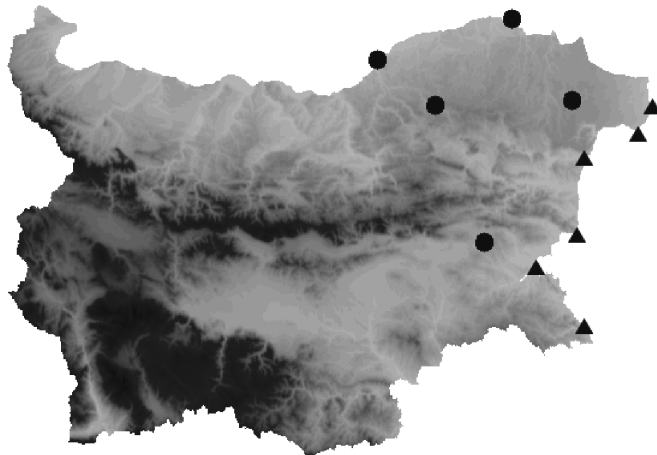
The present work is a continuation of the study presented in [14]. It is directed to reveal if the distribution and mean values of Convective Available Potential Energy, *CAPE*, and Lifted Index, *LI*, are statistically significant at the development of summer thunderstorms and ordinary (without lightning) precipitating

clouds over inland and along the coast in eastern Bulgaria. The task of the study is to obtain threshold values of *CAPE* and *LI*, which can be used as an indication of summer thunderstorms in eastern Bulgaria.

## 2. DATA AND METHODOLOGY

The environmental conditions of 340 days with precipitation after 1200 UTC from April to September 2006 to 2009 over eleven synoptic stations of the National Institute of Meteorology and Hydrology (NIMH), located in eastern Bulgaria are analyzed. Six of the stations are situated along the coast (Shabla, Kaliakra, Varna, Emine, Burgas and Ahtopol), denoted with triangles in Fig. 1, and five are inland stations (Ruse, Silistra, Razgrad, Dobrich and Karnobat), denoted with circles in Fig. 1. All cases with precipitation after 1200 UTC (1329) are divided into two samples – ordinary (without lightning) precipitating clouds (748) and thunderstorms (581). The information for thunderstorms was taken from synoptic reports in eastern Bulgaria. The both samples are considered separately in two groups based on geographical location – storms developed above the inland (403 ordinary and 353 thunderstorms) and storms developed along the coast (345 ordinary and 228 thunderstorms). The ordinary precipitating clouds and thunderstorms over inland hereafter are denoted as *land or* and *land th*, correspondingly, while along the coast – *coast or* and *coast th*, correspondingly.

The proximity aerological soundings at 1200 UTC close to the stations with detected precipitation, obtained by the numerical model GFS [15], were used to calculate *CAPE* [16] and Lifted Index [17] (see Table 1). Surface level meteorological data taken from [18], were utilized for processing the data from the soundings.



**Fig. 1.** The location of synoptic stations on the map of Bulgaria. The inland stations are denoted by circles, the stations along the coast are denoted by triangles.

**Table 1.** Summary of thermodynamic, kinematic parameters and skill scores used:  $\theta$  is potential temperature [K],  $\theta_e$  is equivalent potential temperature [K],  $g$  is the acceleration of gravity [ $\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$ ],  $z$  is height [m],  $LFC$  – the level of free convection,  $EL$  – the equilibrium level of the parcel,  $T_{500}$  is temperature [ $^{\circ}\text{C}$ ] at 500 hPa,  $TP_{500}$  – temperature of a parcel after it has been lifted pseudo-adiabatically to 500 hPa from its original level,  $x$  – the number of correctly classified thunderstorms cases,  $y$  – the number of incorrectly classified thunderstorms cases,  $w$  – the number of incorrectly classified ordinary clouds cases. Subscripted numbers indicate constant pressure levels.

Parameter	Code and units	Equation
Convective Available Potential Energy	$CAPE, \text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$	$CAPE = g \int_{LFC}^{EL} \frac{\ddot{e} - \ddot{e}_e}{\ddot{e}_e} dz$
Lifted Index	$LI, \text{deg}$	$LI = T_{500} - TP_{500}$
Probability of detection	POD	$POD = \frac{x}{x + y}$
False alarm ratio	FAR	$FAR = \frac{w}{x + w}$

The descriptive statistics (mean, mode, median, etc.) for  $CAPE$  and  $LI$  are estimated separately for any of the four samples *land or, land th, coast or and coast th*. The statistical analyses ( $F$ - and  $t$ -test with significance level  $\alpha = 0.05$ ) is performed to establish if there is a statistical significant difference in  $CAPE$  and  $LI$  values in the corresponding (for inland and along the coast) considered samples – ordinary precipitating clouds and thunderstorms.

The distributions of the  $CAPE$  and  $LI$  in the four samples are considered. The general discriminant analysis [19] is carried out to establish the ability of  $CAPE$  and Lifted index to classify the clouds as ordinary precipitating cloud or thunderstorm in the samples with clouds developed along the coast and over inland. The probability of detection ( $POD$ ) and false alarm ratio ( $FAR$ ) are calculated [20] for the derived classification functions (see Table 1). From the manner of calculations (given in Table 1) it follows that the probability of detection,  $POD$  is the ratio of the number of thunderstorms correctly forecasted over the number of actual thunderstorms and that the false alarm ratio,  $FAR$  is the number of incorrect classified (as thunderstorm) ordinary clouds over the total number of forecasted thunderstorms. For  $POD$  the best score is 1 and the worst score is 0, while for  $FAR$  the best score is 0 and the worst score is 1.

The critical values (thresholds) of  $CAPE$  and  $LI$  that may separate the studied cases in two groups (ordinary clouds and thunderstorms) are established separately for clouds over inland and along the coast. Using general discriminant analyses [19] the classification function as a combination of  $CAPE$  and  $LI$  is obtained.

### 3. RESULTS

Information for the mean values, mode, median, upper and lower quartile for Convective Available Potential Energy, *CAPE*, for the samples of thunderstorms and ordinary precipitating clouds developed over the inland (*land or* and *land th*) and along the coast (*coast or* and *coast th*) in eastern Bulgaria is given in Table 2. The corresponding information is presented in Table 3 for Lifted Index, *LI*.

**Table 2.** Descriptive statistics for *CAPE* calculated at the development of ordinary precipitating clouds over inland (*land or*) and along the coast (*coast or*) and at the development of thunderstorms over inland (*land th*) and along the coast (*coast th*).

	<i>CAPE</i> <i>land or</i>	<i>CAPE</i> <i>land th</i>	<i>CAPE</i> <i>coast or</i>	<i>CAPE</i> <i>coast th</i>
Mean	610	1302.4	542.7	1150
Median	466	1248	378	1189
Mode	40	1248	20	1102
Lower quartile	132.9	845.9	132.5	689.2
Upper quartile	927	1668.6	809.1	1564.0

**Table 3.** Descriptive statistics for *LI* calculated at the development of ordinary precipitating clouds over inland (*land or*) and along the coast (*coast or*) and at the development of thunderstorms over inland (*land th*) and along the coast (*coast th*).

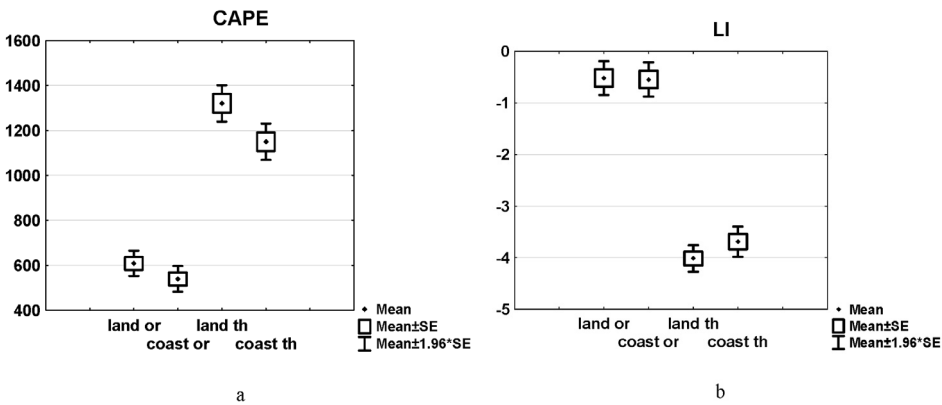
	<i>LI</i> <i>land or</i>	<i>LI</i> <i>land th</i>	<i>LI</i> <i>coast or</i>	<i>LI</i> <i>coast th</i>
Mean	-0.54	-3.97	-0.57	-3.7
Median	-1.1	-3.9	-0.9	-3.8
Mode	-1.1	-4	-0.7	-3
Lower quartile	-2.8	-5.4	-2.7	-5
Upper quartile	1.8	-2.6	1.4	-2.56

A more detailed review of the information presented in Table 2 and Table 3 reveals that mean values, mode, median, lower and upper quartile of *CAPE/LI* at the development of thunderstorms are significantly higher/lower in comparison with the corresponding values of *CAPE/LI* at the development of ordinary precipitating clouds in the both samples (inland and along the coast). There is no significant difference in the corresponding *CAPE* and *LI* values calculated at the development of ordinary precipitating clouds along the coast and over inland. The same is valid for *CAPE* and *LI* values at the development of thunderstorms along the coast and over inland. The *CAPE* values of upper quartile and median (Table 2) indicate that according to the study [21], performed for the USA regions, 75% of the studied ordinary precipitating clouds over eastern Bulgaria developed at “marginal insta-



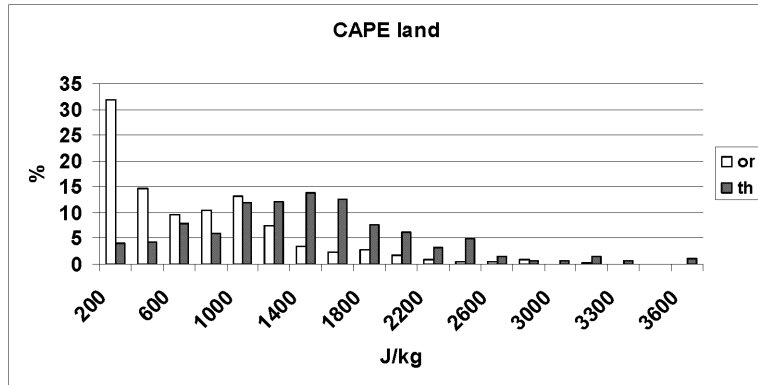
bility” ( $0\text{--}1000 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) while more than 50% of thunderstorms developed in the interval for “moderate instability” ( $1000\text{--}2500 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ). The mode and median  $LI$  values shown in Table 3 reveal that according to the classification [21] the higher number of thunderstorms and more than 50% of them developed over eastern Bulgaria when calculated  $LI$  values are in the interval for “moderate instability” ( $-3$  to  $-6$  deg), while the mode and median at the development of ordinary precipitating clouds are in the interval of “marginal instability” ( $-3 < LI < 0$  deg).

The Box and Whiskers plot demonstrates the above differences for the mean  $CAPE$  (Fig. 2a) and  $LI$  (Fig. 2b) values. It is seen that the mean of  $CAPE/LI$  values at the development of thunderstorms are noticeable higher/lower in comparison with  $CAPE/LI$  values at the development of ordinary precipitating clouds. The difference between mean  $CAPE/LI$  values at the development of corresponding type of clouds (ordinary precipitating and thunderstorm) along the coast and over inland is very small. The statistical analysis ( $t$ - and  $F$ -tests with a significance level  $\alpha = 0.05$ ) also confirms that there is a well pronounced statistically significant difference between the corresponding mean  $CAPE/LI$  values at the development of thunderstorms and at the development of ordinary precipitating clouds, while the differences in the corresponding mean  $CAPE/LI$  values at the development of the studied clouds over inland and coast are statistically insignificant.

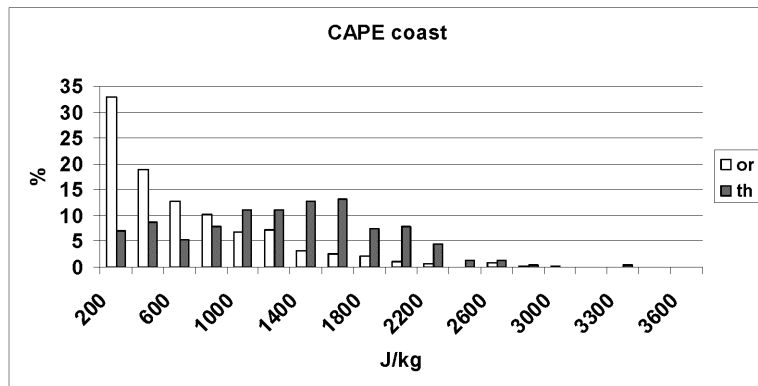


**Fig. 2.** Box and Whiskers plot of: a)  $CAPE$ , and b)  $LI$ , for ordinary precipitating clouds developed over inland and along the coast (*land or and coast or*) and thunderstorms, developed over inland and along the coast (*land th and coast th*).

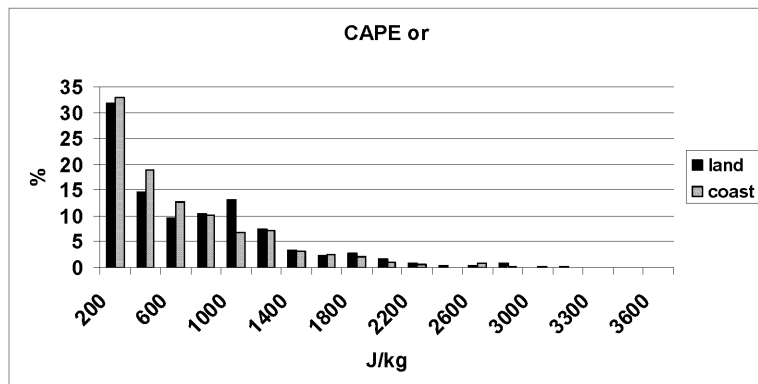
The results presented in Fig. 3a and Fig. 3b reveal that there is a pronounced difference in the distribution of  $CAPE$  values at the development of thunderstorms and ordinary precipitating clouds. The higher percentage of ordinary precipitating clouds developed at very low  $CAPE$  values ( $CAPE \leq 200 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ), while the mode of  $CAPE$  at thunderstorm developed over inland and along the coast is above  $1000 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ .



a



b



c

**Fig. 3.** Frequency distribution of *CAPE* values (in percentages) at the development of: a) ordinary precipitating clouds (white columns) and at thunderstorms (hatch columns) for inland; b) ordinary precipitating clouds (white columns) and at thunderstorms (hatch columns) for coast; c) ordinary precipitating clouds, developed over inland (black columns) and along the coast (hatch columns);

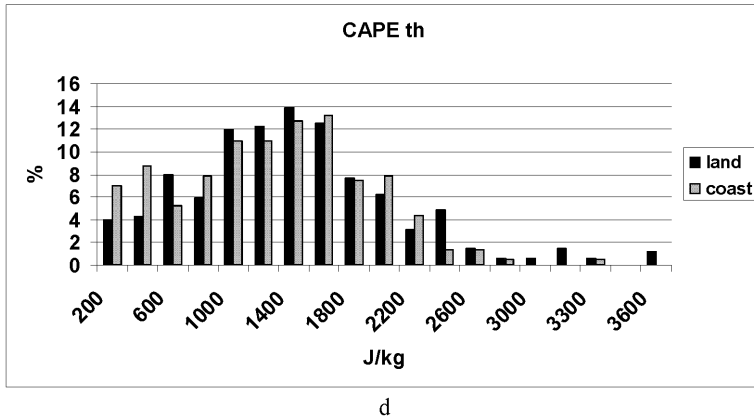


Fig. 3. Frequency distribution of *CAPE* values (in percentages) at the development of : d) thunderstorm clouds developed over inland (black columns) and along the coast (hatch columns).

There is no significant difference in the shape of *CAPE* distributions at the development of corresponding type of clouds developed along the coast and over the inland (see Fig. 3c for ordinary clouds and Fig. 3d for thunderstorm).

The results presented in Fig. 4a and Fig. 4b also reveal that there is a pronounced difference in the distribution of *LI* values at the development of thunderstorms and ordinary precipitating clouds. The higher percentage of ordinary precipitating clouds developed at positive values of *LI*, while the mode of *LI* at thunderstorm development over inland and along the coast is  $\sim -4$  deg.

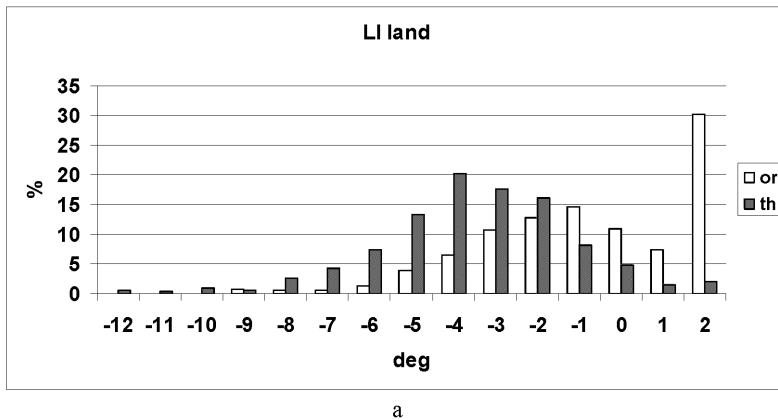
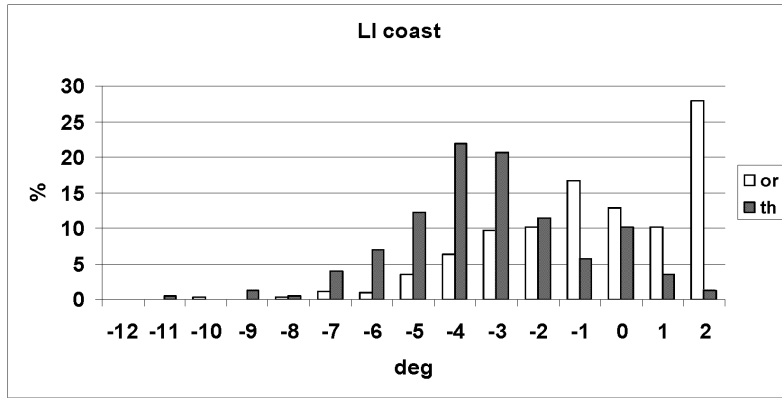
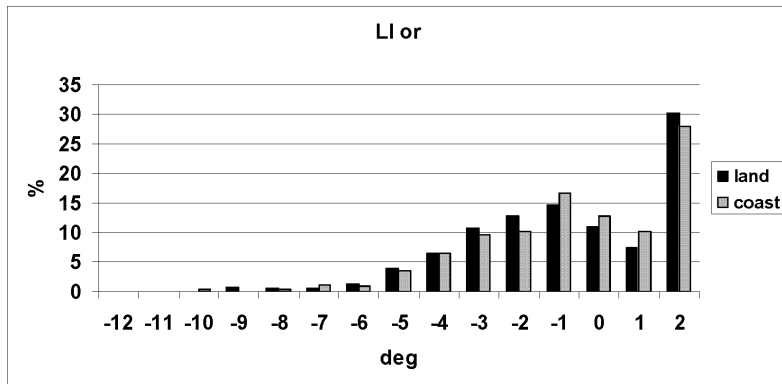


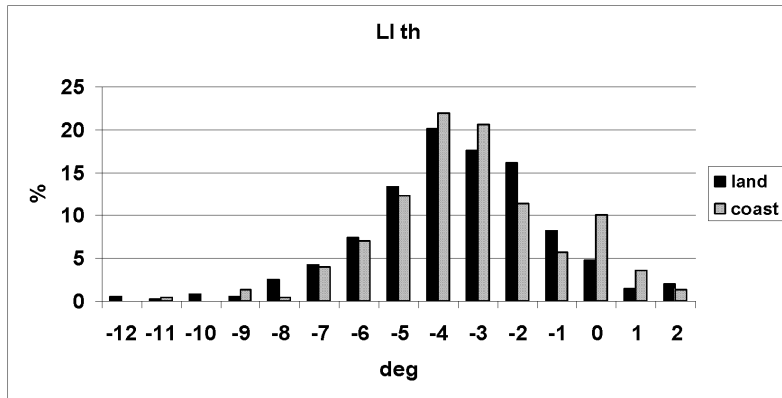
Fig. 4. Frequency distribution of *LI* values (in percentages) at the development of: a) ordinary precipitating clouds (white columns) and at thunderstorms (hatch columns) for inland;



b



c



d

**Fig. 4.** Frequency distribution of *LI* values (in percentages) at the development of: b) ordinary precipitating clouds (white columns) and at thunderstorms (hatch columns) for coastal; c) ordinary precipitating clouds developed over inland (black columns) and along the coast (hatch columns); d) thunderstorm clouds developed over inland (black columns) and along the coast (hatch columns)

There is no significant difference in the shape of *LI* distribution for ordinary clouds (Fig. 4c) and thunderstorms (Fig. 4d) developed along the coast and over the inland.

Although there is not statistically significant difference between the corresponding *CAPE* and *LI* values at clouds (thunderstorms or ordinary) developed along the coast and over the inland the general discriminant analyses [19] is carried out separately for both samples (inland and along the coast) to determine the thresholds values of *CAPE* and *LI* which discriminate thunderstorms from ordinary precipitating clouds in eastern Bulgaria. The obtained thresholds of *CAPE* and *LI*, the percentage of correctly classified cases (*th* or *or*) and calculated skill scores *POD* and *FAR* are presented in Table 4 and Table 5, respectively. It is worth noting that the percentage correctly classified thunderstorms give the same information as the probability of detection *POD*. The false alarm ratio however differs from percentage of incorrect classified ordinary thunderstorms.

**Table 4.** Threshold of *CAPE* for the type of clouds, the percentage of correctly classified cases, and skill scores *POD* and *FAR*

Stations	Threshold, <i>CAPE</i> , $J \cdot kg^{-1}$	Correct classification %			<i>POD</i>	<i>FAR</i>
		Total	<i>th</i>	<i>or</i>		
Land	953	72.9	67.7	77.4	0.68	0.28
Coast	826	72.8	68.4	75.7	0.68	0.35

**Table 5.** Threshold of *LI* for the type of clouds, the percentage of correctly classified cases, and skill scores *POD* and *FAR*.

Stations	Threshold, <i>Li</i> , deg	Correct classification %			<i>POD</i>	<i>FAR</i>
		Total	<i>th</i>	<i>or</i>		
Land	-2.2	72.9	81.3	65.5	0.81	0.33
Coast	-2.1	73.8	78.5	70.7	0.79	0.36

The results in Table 4 show that 68.4% of thunderstorms along the coast and 67.7% of thunderstorms over inland developed at *CAPE* values higher than the determined corresponding thresholds  $953 J \cdot kg^{-1}$  and  $826 J \cdot kg^{-1}$ . Thus, using the determined *CAPE* thresholds values, the probability of detection (*POD*) of thunderstorm is 0.68, with false alarm ratio *FAR* = 0.28 (for clouds over inland) and *FAR* = 0.35 (for clouds along the coast). According to results in Table 5 – 81.3% of

thunderstorms over inland and 78.5% of thunderstorm along the coast developed at *LI* values lower than the determined *LI* thresholds. The probability of detection of thunderstorm using *LI* threshold values is 0.81 and 0.79 for thunderstorm developed over inland and along the coast *FAR* is 0.33 and 0.36 correspondingly.

In an attempt to obtain better discrimination between the ordinary precipitating clouds and thunderstorms general discriminant analyses [19] with combination of *CAPE* and Lifted index are carried out. The obtained classification functions  $F(th,or)$  for clouds developed along the coast and over the inland stations are presented in Table 6. At  $F(th,or) > 0$  the case is classified as thunderstorm; at  $F(th,or) \leq 0$  the case is classified as ordinary cloud. The percentage of correctly classified cases in accordance to the type of the clouds (*or* or *th*), the *POD* and *FAR* values indicate that the combination of *CAPE* and *LI* values does not improve the classification ability of the single use of the determined *LI* threshold.

**Table 6.** Classification functions  $F(th,or)$  for the type of clouds, and the percentage of correctly classified cases - thunderstorm *th* or ordinary *or*, using combination of *CAPE* and *LI*, and skill scores *POD* and *FAR*.

Indices	Function	Correct classification %			POD	FAR
		Total	<i>th</i>	<i>or</i>		
Land <i>CAPE, LI</i>	$F(th,or) = -0.3264 LI + 0.0004 CAPE - 1.1399$	72.4	77.9	67.5	0.78	0.32
Coast <i>CAPE, LI</i>	$F(th,or) = -0.2650 LI + 0.0007 CAPE - 1.1917$	73.6	75.0	72.8	0.75	0.36

Due to the insignificant difference between *LI* and *CAPE* thresholds for thunderstorm development over inland station and along the coast we suggest that it is reasonable in the future not to consider separately the data from inland stations and stations along the coast. For this reason the threshold of *LI* and *CAPE* values, which are able to discriminate correctly high percentage of thunderstorms from ordinary (non-lightning) precipitating clouds developed over eastern Bulgaria are determined. Their values are given in Table 7.

**Table 7.** Threshold of *CAPE* and *LI* values for the type of clouds, using data from all stations; the percentage of correctly classified cases and skill scores *POD* and *FAR*.

Index	Thresholds	Correct classification %			<i>POD</i>	<i>FAR</i>
		Total	<i>th</i>	<i>or</i>		
<i>CAPE</i>	891 J·kg <sup>-1</sup>	72.5	68.3	75.7	0.68	0.31
<i>LI</i>	-2.2 deg	73.2	79.9	68.1	0.80	0.34

The results show that the percentage of correctly classified clouds as thunderstorms or ordinary precipitating clouds, as well as the calculated correspondingly false alarm ratio (*FAR*) using the determined threshold of *CAPE* ( $891 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) or *LI* ( $-2.2 \text{ deg}$ ) are approximately one and the same. However the calculated *POD* at the use of *LI* threshold is significantly higher ( $POD = 0.8$ ) in comparison with calculated *POD* at the use of *CAPE* threshold ( $POD = 0.68$ ). Based on this one can conclude that the established *LI* threshold values has a better probability of detection of thunderstorms developed in eastern Bulgaria than the established *CAPE* thresholds. It is worth also to be mentioned that the both determined thresholds are in the upper limit of the interval of “marginal instability” assign for the USA regions [21]. The significantly lower *CAPE* thresholds and higher *LI* thresholds at the development of thunderstorms over eastern Bulgaria is in accordance to other studies for thunderstorms developed over Europe. For example the analyses in [13] indicates that the established by them  $LI < -0.4 \text{ }^\circ\text{C}$  as a threshold is the best predictor (among the thresholds of 32 others instability indices) for thunderstorms over Netherlands. The studies of [22] and [23] reveal that more than 50% of different types of severe convective storms in Europe developed at  $CAPE \leq 500 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ .

#### 4. SUMMARY

*CAPE* and Lifted index are calculated using environmental conditions of 340 days with precipitation over eastern Bulgaria from April-September 2006 to 2009. The data at the surface necessary for the calculations of the both instability indices are taken from 11 synoptic stations of the National Institute of Meteorology and Hydrology (NIMH) located in eastern Bulgaria. Five of the stations are situated along the coast and six are inland stations. Proximity sounding at 1200 UTC for these stations close to the location of the storms development was used for the calculations of *CAPE* and *LI*. For the statistical analyses the cases have been divided in two samples – ordinary (without lightning) precipitating clouds and thunderstorms. The both samples have been considered separately in two groups based on geographical location – storms developed above the inland and storms developed along the coast.

The main result from the study is that the differences between the distribution and mean values of *CAPE* and *LI* over inland and along the coast are statistically insignificant, thus the separation of the summer clouds developed over eastern Bulgaria based on different geographical locations (inland and along the coast) is not required. The statistical analyses shows that the mean values of *CAPE* and *LI* at the development of thunderstorms are significantly higher and lower correspondingly than at the development of ordinary precipitating clouds. The estab-

lished thresholds of *CAPE* and *LI* classified correctly ~ 73% of the studied clouds according to their type – thunderstorms or ordinary (non-lightning) clouds. The results however reveal that the thresholds of Lifted index has higher probability of detection of thunderstorm (*POD* = 0.80) than the established threshold for *CAPE* (*POD* = 0.68).

#### REFERENCES

- [1] Tuduri, E., C. Ramis. *Weather and Forecasting*, 1997, **12**, 294.
- [2] Doswell III, C. A., D. M. Schultz. *Electronic J. Severe Storms Meteor.*, 2006, **1**, 1.
- [3] Gaztelumendi, S., J. Egaña, D. Pierna, I. R. Gelpi, R. Hernández, J. López, K. Otxoa de Alda. Preprints: 6th European Conf. on Severe Storms, 3-7 October 2011, Palma de Mallorca, Spain.
- [4] Tsenova, B., A. Bogatchev. Preprints: 16th Inter. Conf. on Clouds and Precipitation, July 30 – August 03, 2012, Leipzig, Germany.
- [5] Johns, R. H., C. A. Doswell III. *Weather Forecast.*, 1992, **8**, 559.
- [6] Doswell III, C. A., H. E. Brooks, R. A. Maddox. *Weather Forecast.*, 1996, **11**, 560.
- [7] Rasmussen, E. N., D. O. Blanchard. *Weather Forecast.*, 1998, **13**, 1148.
- [8] Craven, J. P., H. E. Brooks, J. A. Hart. Preprints, 21st Conference on Severe Local Storms, San Antonio, Texas, USA. *Am. Meteorol. Soc.*, 2002, pp. 643.
- [9] Markowski, P. M., J. M. Straka, E. N. Rasmussen. *Mon. Weather Rev.*, 2002, **130**, 1692.
- [10] Brooks, H. E., J. W. Lee, J. P. Craven. *Atmos. Res.*, 2003, **67–68**, 73.
- [11] Brooks, H. E., A. R. Anderson, K. Riemann, I. Ebberts, H. Flachs. *Atmos. Res.*, 2007, **83**, 294.
- [12] Doswell III, C. A., J. S. Evans. *Atmos. Res.*, 2003, **67–68**, 117.
- [13] Haklander, A. J., A. Van Delden. *Atmospheric Research*, 2003, **67–68**, 273.
- [14] Markova, B., R. Mitzeva. *Bulgarian Geophysical Journal*, 2012 (accepted for publication).
- [15] <https://www.arl.noaa.gov/ready/cmet.html> NOAA Air Resources Laboratory.
- [16] Moncrieff, M., M. Miller. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 1976, **102**, 37.
- [17] Galway, J.G. *Bull. Am. Meteorol. Soc.*, 1956, **37**, 528.
- [18] <http://www.ogimet.com/synops.phtml.en> Professional information about meteorological conditions in the world.
- [19] StatSoft, Inc., 2001: STATISTICA (data analysis software system), version 6.1, [www.statsoft.com](http://www.statsoft.com)
- [20] Donaldson, R., R. Dyer, M. Krauss. Preprints: 9th Conf. Severe Local Storms, Norman, Oklahoma. *Amer. Meteor. Soc.*, 1975, 321.
- [21] <http://www.crh.noaa.gov/lmk/soo/docu/indices.php> NOAA's National Weather Service Weather Forecast Office, Science and Technology, NWS Louisville. KY Convective Season Environmental Parameters and Indices.
- [22] Romero, R., M. Gaya, C.A. Doswell III. *Atmos. Res.*, 2007, **83**, 389.
- [23] Kaltenbock, R., G. Diendorfer, N. Dotzek. *Atmos. Res.*, 2009, **93**, 381.



## АНСАМБЛИ НА ГИБС И РАЗПРЕДЕЛЕНИЯ НА ФЕРМИ– ДИРАК И БОЗЕ–АЙНЩАЙН

ДИМИТЪР МЪРВАКОВ

*Катедра "Методика на обучението по физика"  
Физически факултет, Софийски университет "Св. Климент Охридски"*

*Димитър Мърваков. АНСАМБЛИ НА ГИБС И РАЗПРЕДЕЛЕНИЯ НА ФЕРМИ–ДИРАК  
И БОЗЕ–АЙНЩАЙН*

С помощта на статистическите ансамбли на Гибс (микрoканоничен, каноничен и голям каноничен) е направен последователен извод на разпределенията на Ферми–Дирак и Бозе–Айнщайн. Обърнато е специално внимание на направените основни приближения и на съответствията между получените резултати.

*Dimitar Marvakov. GIBBS ENSEMBLES AND FERMI-DIRAC AND BOSE-EINSTEIN  
DISTRIBUTIONS*

The Gibbs statistical ensembles (microcanonical, canonical and grand canonical) have been used to derive Fermi–Dirac and Bose–Einstein distributions in a consistent approach. A special attention has been taken to the used approximations and to the correspondence of the obtained results.

**Keywords:** Gibbs statistical ensembles, quantum ideal gases, Fermi-Dirac distribution, Bose-Einstein distribution.

**PACS numbers:** 05.30.Ch, 05.30.-d, 71.10.Ca

---

*За контакти:* Димитър Мърваков, Катедра „Методика на обучението по физика“, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучер“ 5, 1164 София, тел.: +359 2 8161 884, E-mail: marvakov@phys.uni-sofia.bg

## 1. ВЪВЕДЕНИЕ

Изучаването на статистическата физика като важна част от образованието на всеки съвременен специалист в областта на природните науки (физика, химия, биология) е свързано с придобиването на ключови компетентности по разбирането и приложението на статистическите ансамбли на Гибс – микроканоничен, каноничен и голям каноничен (вж. напр. [1,2]). Обикновено се установява еквивалентността на изброените ансамбли в термодинамична граница [1,3] и при приложенията като правило се използва само един от тях – най-често каноничният или големият каноничен ансамбъл. От друга страна, използването на различни ансамбли за решаването на една и съща задача дава възможност за ясното разбиране на преимуществата и трудностите при използването на определен ансамбъл.

В настоящата работа, методическа по характер, е разгледан изводът на разпределенията на Ферми–Дирак и на Бозе–Айнщайн, като последователно е проследено прилагането на всички изброени по-горе ансамбли. Този пример е избран, тъй като в учебната литература отсъства съвместното (чрез трите вида ансамбли) едновременно изложение на този въпрос. В класическите книги [1,2] е отредено място на приложението на микроканоничния и големия каноничен ансамбъл, като е пропуснато прилагането на каноничния ансамбъл, докато в [4] е разгледан само случаят на каноничен ансамбъл. В [5] е направен опит за съвместното използване на трите ансамбъла, но изводът чрез микроканоничния ансамбъл не е направен самостоятелно, а са използвани резултати от прилагането на другите два ансамбъла.

## 2. ИДЕАЛНИ ГАЗОВЕ

Най-простата система от  $N$  еднакви частици с маса  $m$ , които не взаимодействат помежду си, е пример за идеален газ. Механичното поведение на системата се описва с хамилтониан

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} = \sum_{i=1}^N \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m}$$

който не зависи от спина на частиците. Всяка частица може да се намира в индивидуално (едночастично) състояние, определено от набора квантови числа  $\xi$ , в което енергията на частицата е  $\varepsilon_\xi$ . Тогава енергията на идеалния газ се дава с израза

$$E_n = \sum_{\xi} \varepsilon_{\xi} n_{\xi},$$

където числата на запълване  $n_\xi$  определят броя на частиците в едночастично състояние  $\xi$ , а  $n$  задава набора квантови числа  $\{n_\xi\}$ , които описват микроскопичното състояние на газа. Еднаквите частици в природата са неразличими и се срещат само два различни типа – фермиони и бозони, които различаваме на микрониво по спина на частиците  $s\hbar$ . Фермионите са частици с полуцял спин:  $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ , а бозоните – частици с цял спин:  $s = 0, 1, 2, \dots$ . В идеалния ферми-газ възможните стойности на числата на запълване са  $n_\xi = 0, 1$  (принцип на Паули), докато в идеалния бозе-газ възможните стойности на числата на запълване са  $n_\xi = 0, 1, 2, \dots$  [1,2]. При високи температури и ниски плътности свойствата на идеалния ферми-газ и на идеалния бозе-газ не се различават и те се описват с така нареченото Болцманово приближение.

### 3. МИКРОКАНОНИЧЕН АНСАМБЪЛ [1,2]

Когато системата идеален газ е елемент от микроканоничен ансамбъл, тя се намира в равновесие при следните макроусловия:

$$E = \text{const}, \quad V = \text{const}, \quad N = \text{const},$$

където

$$E = \sum_{\xi} \varepsilon_{\xi} n_{\xi}, \quad N = \sum_{\xi} n_{\xi},$$

а енергиите на едночастичните състояния  $\varepsilon_{\xi}$  зависят от обема  $V$  и са постоянни величини. Тогава микросъстоянията на идеалния газ са определени от съвкупността  $\{n_{\xi}\}$ , която показва колко частици има във всяко едночастично състояние. В микроканоничния ансамбъл основна роля играе величината

$$\Omega(E, V, N) = \text{брой микросъстояния на системата с енергия } E,$$

чрез която по формулата на Болцман

$$S = k \ln \Omega(E, V, N)$$

се определя ентропията на газа ( $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  J/K е константата на Болцман).

В равновесие ентропията има максимална стойност. За макроскопични системи енергетичните нива  $\varepsilon_{\xi}$  образуват практически континуум. Тогава можем да разделим енергетичния спектър на групи от нива, всяка от които съдържа съответно  $G_1, G_2, \dots, G_i$  състояния. Такава група от нива ще наричаме клетка, като средната енергия на клетката ще означим с  $\varepsilon_i$ , а числото на запълване на  $i$ -тата клетка – с  $N_i$ :

$$\varepsilon_i = \frac{1}{G_i} \sum_{\xi^{(i)}} \varepsilon_{\xi^{(i)}}, \quad N_i = \sum_{\xi^{(i)}} n_{\xi^{(i)}}.$$

При формирането на клетките предполагаме, че за всяко  $i$  числото  $G_i$  е много голямо, но точната му стойност не е от значение. Тогава можем да запишем

$$E = \sum_i \varepsilon_i N_i, \quad N = \sum_i N_i. \quad (1)$$

Нека означим с  $\Omega_i$  броя начини, по които  $N_i$  частици в  $i$ -тата клетка могат да бъдат разпределени по  $G_i$  състояния. При дадена конфигурация  $\{N_i\}$  броят микросъстояния  $W(\{N_i\})$  се дава с израза

$$W(\{N_i\}) = \prod_i \Omega_i, \quad (2)$$

тъй като размяната на частици между две клетки не води до ново състояние (частиците са неразличими). За да намерим пълния брой микросъстояния  $\Omega(E, V, N)$  ще трябва да сумираме по всички съвместими с условията (1) конфигурации  $\{N_i\}$ , т.е.

$$\Omega(E, V, N) = \sum_{\{N_i\}} W(\{N_i\}). \quad (3)$$

**Идеален ферми-газ.** В този случай във всяко от квантовите състояния  $G_i$  може да се намира не повече от една частица. Броят на разпределенията на  $N_i$  частици по  $G_i$  състояния се дава с броя начини, по които от  $G_i$  предмета могат да бъдат избрани  $N_i$  предмета, т.е.

$$\Omega_i = \frac{G_i!}{N_i!(G_i - N_i)!},$$

откъдето следва

$$W(\{N_i\}) = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{G_i!}{N_i!(G_i - N_i)!}.$$

При сумирането в (3) можем да се ограничим само с една конфигурация  $\{\bar{N}_i\}$ , която съответства на максималния член (вж. [1]). Той се получава в случая, когато  $\bar{N}_i \sim G_i$  за всяко  $i$ , т.е. всичките  $\bar{N}_i$  са много големи числа. Следователно можем да запишем приближената формула

$$\Omega(E, V, N) \approx \prod_i \bar{\Omega}_i = \prod_i \frac{G_i!}{\bar{N}_i!(G_i - \bar{N}_i)!}.$$

Тогава имаме

$$S = k \ln \Omega \approx k \sum_i G_i \ln G_i - \bar{N}_i \ln \bar{N}_i - (G_i - \bar{N}_i) \ln (G_i - \bar{N}_i).$$

Тук е използван главният член във формулата на Стърлинг  $\ln N! \approx N \ln N - N$ , която е в сила при големи стойности на  $N$ . Ако въведем средния брой частици  $\bar{n}_i$  в състояние от групата  $i$  чрез формулата  $\bar{n}_i = \bar{N}_i / G_i$  получаваме израза

$$S = -k \sum_i G_i [\bar{n}_i \ln \bar{n}_i + (1 - \bar{n}_i) \ln (1 - \bar{n}_i)].$$

Разпределението на Ферми–Дирак  $\bar{n}_i$  осигурява максимум на ентропията в равновесие при допълнителни условия

$$E = \sum_i G_i (\varepsilon_i \bar{n}_i) = \text{const}, \quad N = \sum_i G_i \bar{n}_i = \text{const}. \quad (4)$$

**Идеален бозе-газ.** В идеалния бозе-газ всяко състояние може да бъде заето от произволен брой частици. Нека предположим, че състоянията в  $i$ -тата клетка са представени като  $G_i$  на брой кутийки чрез  $G_i - 1$  чертички, като частиците в дадено състояние, т.е. в дадена кутийка, представяме чрез точки, например:

$$\cdot \cdot | 1 \dots |_2 \quad | 3 \cdot | \cdot \cdot | \quad |_{G_i - 1} \dots$$

Това пълният брой разпределения на  $N_i$  частици по  $G_i$  състояния се дава с броя начини, по които могат да бъдат подредени  $N_i$  (еднакви) точки и  $G_i - 1$  (еднакви) чертички, т.е.

$$\Omega_i = \frac{(N_i + G_i - 1)!}{N_i! (G_i - 1)!}.$$

В приближението на максималния член, съответстващ на много големи  $N_i = \bar{N}_i$  имаме

$$\Omega(E, V, N) \approx \prod_i \bar{\Omega}_i = \prod_i \frac{(\bar{N}_i + G_i - 1)!}{\bar{N}_i! (G_i - 1)!},$$

$$S = k \ln \Omega \approx k \sum_i (\bar{N}_i + G_i - 1) \ln (\bar{N}_i + G_i - 1) - \bar{N}_i \ln \bar{N}_i -$$

$$-(G_i - 1) \ln (G_i - 1) \approx k \sum_i (\bar{N}_i + G_i) \ln (\bar{N}_i + G_i) - \bar{N}_i \ln \bar{N}_i - G_i \ln G_i,$$

тъй като  $G_i, \bar{N}_i > 1$ . Ако въведем средния брой частици  $\bar{n}_i$  в състояние от групата  $i$  чрез формулата  $\bar{n}_i = \bar{N}_i / G_i$ , получаваме

$$S = -k \sum_i G_i [\bar{n}_i \ln \bar{n}_i - (1 + \bar{n}_i) \ln (1 + \bar{n}_i)].$$

Разпределението на Бозе–Айнщайн  $\bar{n}_i$  осигурява максимум на ентропия-

та в равновесие при същите допълнителни условия (4), както при разпределението на Ферми–Дирак.

Можем да запишем ентропията на двата газа чрез обединения израз

$$S = -k \sum_i G_i [\bar{n}_i \ln \bar{n}_i \pm (1 \mp \bar{n}_i) \ln(1 \mp \bar{n}_i)], \quad (5)$$

където горният знак съответства на ферми-газ, а долният – на бозе-газ.

За да намерим равновесните разпределения  $\bar{n}_i$ , ще варираме средните числа на запълване, докато ентропията (5) достигне максимум при допълнителните условия (4). По метода на неопределените множители на Лагранж имаме

$$\delta(S + \alpha \sum_i G_i \bar{n}_i + \beta \sum_i G_i \varepsilon_i \bar{n}_i) = 0,$$

което е еквивалентно на

$$\sum_i G_i \left\{ \ln \bar{n}_i - \ln(1 \mp \bar{n}_i) - \frac{\alpha + \beta \varepsilon_i}{k} \right\} \delta \bar{n}_i = 0.$$

При произволно  $\delta \bar{n}_i$  изразът в скобите трябва да е нула и получаваме

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_i)/k} \pm 1},$$

където горният знак дава разпределението на Ферми–Дирак, а долният – на Бозе–Айнщайн. Смисълът на неопределените множители може да бъде намерен по следния начин [2]. Тъй като

$$d(S + \alpha N + \beta E) = 0,$$

от сравняването на

$$dS = -\beta dE - \alpha dN$$

и основното термодинамичното равенство

$$dS = \frac{1}{T} dE - \frac{\mu}{T} dN$$

следва  $\alpha = \mu/T$ ,  $\beta = -(1/T)$ , при което разпределенията придобиват стандартния си вид

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} \pm 1}. \quad (6)$$

Следва да се отбележи, че използването само на главния член във формулата на Стирлинг води до пренебрегване на флукуациите на  $\bar{n}_i$ . Както е показано в [1], относителните флукуации на  $\bar{n}_i$  са величини много по-малки от единица.

#### 4. КАНОНИЧЕН АНСАМБЪЛ [4,5]

Когато една макроскопична система е елемент от каноничен ансамбъл на Гибс, тя се намира в макроскопично състояние, определено от условията

$$T = \text{const}, \quad V = \text{const}, \quad N = \text{const}.$$

За идеален квантов газ микроскопичното състояние се определя от набора квантови числа  $n \equiv \{n_\xi\}$ , където  $n_\xi$  е числото на запълване на едночастичното състояние  $\xi$ . Връзката между статистика и термодинамика се дава от статистическата сума

$$Z(T, V, N) = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}} = \sum_{\{n_\xi\}} e^{-\frac{\sum_\xi \varepsilon_\xi n_\xi}{kT}},$$

като сумирането по  $n_\xi$  се извършва по тези стойности, за които е изпълнено условието

$$N = \sum_\xi n_\xi.$$

Можем да преминем към сумиране по всички възможни стойности на  $n_\xi$ , ако запишем

$$Z(T, V, N) = \sum_{\{n_\xi\}} \delta_{N, \sum_\xi n_\xi} e^{-\frac{\sum_\xi \varepsilon_\xi n_\xi}{kT}} = \sum_{\{n_\xi\}} \delta_{N, \sum_\xi n_\xi} \prod_\xi e^{-\frac{\varepsilon_\xi}{kT} n_\xi},$$

където  $\delta_{m,n} = 1$ , ако  $m = n$ , и  $\delta_{m,n} = 0$ , ако  $m \neq n$  (символ на Кроникер). Като използваме представянето

$$\delta_{m,n} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi i} e^{(m-n)\varphi} d\varphi, \quad (m \text{ и } n \text{ са цели числа})$$

за статистическата сума получаваме

$$\begin{aligned} Z(T, V, N) &= \sum_{\{n_\xi\}} \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi i} e^{N\varphi - \sum_\xi n_\xi \varphi} d\varphi \times e^{-\frac{\sum_\xi \varepsilon_\xi n_\xi}{kT}} = \sum_{\{n_\xi\}} \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi i} e^{N\varphi} \prod_\xi e^{-\frac{\varepsilon_\xi + \varphi kT}{kT} n_\xi} d\varphi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \prod_\xi \int_0^{2\pi i} e^{N\varphi} \sum_{n_\xi} e^{-\frac{\varepsilon_\xi + \varphi kT}{kT} n_\xi} d\varphi = \frac{1}{2\pi i} \prod_\xi \int_0^{2\pi i} e^{N\varphi} \left( 1 \pm e^{-\frac{\varepsilon_\xi + \varphi kT}{kT}} \right)^{\pm 1} d\varphi. \end{aligned}$$

Тук е извършено сумиране по всички възможни стойности на  $n_\xi$ , като  $n_\xi = 0, 1$  за ферми-газ (горният знак), докато в идеалния бозе-газ възможните стойности на числата на запълване са  $n_\xi = 0, 1, 2, \dots$  (долният знак). От друга страна, имаме

$$\begin{aligned} \prod_{\xi} \left( 1 \pm e^{-\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi k T}{k T}} \right)^{\pm 1} &= \prod_{\xi} \exp \left[ \pm \ln \left( 1 \pm \exp \left( -\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi k T}{k T} \right) \right) \right] \\ &= \exp \left[ \pm \sum_{\xi} \ln \left( 1 \pm \exp \left( -\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi k T}{k T} \right) \right) \right] \end{aligned}$$

и статистическата сума се записва във вида

$$Z(T, V, N) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi i} e^{Nw(\varphi, N)} d\varphi, \quad (7)$$

като

$$w(\varphi, N) = \varphi \pm \frac{1}{N} \sum_{\xi} \ln \left( 1 \pm e^{-\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi k T}{k T}} \right).$$

Тъй като  $N \sim N_{\Lambda}$  е много голямо число, можем да оценим статистическата сума по следния начин. Понеже подинтегралната функция в (7) е аналитична, можем да деформираме контура на интегриране в посока на преминаване през стационарната точка  $\varphi_0$  на функцията на комплексна променлива  $w(z, N)$  в направление на най-стръмното „изкачване“ и най-стръмното „спускане“ [5]. Тогава можем да заменим подинтегралната функция  $w(z, N) \approx w(\varphi_0, N)$ , където  $\varphi_0$  съответства на седлова точка и се определя от условието

$$w'(\varphi_0, N) = 1 \pm \frac{1}{N} \sum_{\xi} \frac{\pm e^{-\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 k T}{k T}} (-1)}{1 \pm e^{-\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 k T}{k T}}} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\xi} \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 k T}{k T}} \pm 1} = 0,$$

при което имаме

$$N = \sum_{\xi} \bar{n}_{\xi} = \sum_{\xi} \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 k T}{k T}} \pm 1}, \quad \bar{n}_{\xi} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 k T}{k T}} \pm 1}.$$

Използваното приближение при оценка на (7) е свързано с пренебрегването на флуктуациите на енергията, т.е. на  $\bar{n}_{\xi}$  в каноничния ансамбъл. Тогава можем да запишем

$$Z(T, V, N) \approx e^{Nw(\varphi_0, N)},$$

при което свободната енергия се дава с израза

$$F(T, V, N) = -kT \ln Z(T, V, N) = -NkT w(\varphi_0, N) =$$



$$= -NkT \left[ \varphi_0 \pm \frac{1}{N} \sum_{\xi} \ln \left( 1 \pm e^{-\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 kT}{kT}} \right) \right].$$

За да определим стойността на параметъра  $\varphi_0$ , нека пресметнем химичния потенциал на квантовия газ по формулата

$$\begin{aligned} \mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} &= -kT \left[ \varphi_0 \pm \frac{1}{N} \sum_{\xi} \ln \left( 1 \pm e^{-\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 kT}{kT}} \right) \right] \\ &- \left[ \pm \frac{kT}{N} \sum_{\xi} \ln \left( 1 \pm e^{-\frac{\varepsilon_{\xi} + \varphi_0 kT}{kT}} \right) \right] = -kT \varphi_0, \end{aligned}$$

откъдето следва  $\varphi_0 = -\mu/kT$ . Тогава за разпределенията на Ферми–Дирак и на Бозе–Айнщайн получаваме (6), т.е.

$$\bar{n}_{\xi} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\xi} - \mu}{kT}} \pm 1}.$$

## 5. ГОЛЯМ КАНОНИЧЕН АНСАМБЪЛ [1,2,5]

Когато идеалният квантов газ е елемент от големия каноничен ансамбъл, той се намира в макроскопично състояние, определено от условията

$$T = \text{const}, \quad V = \text{const}, \quad \mu = \text{const}.$$

Микроскопичното състояние на газа при  $N$  на брой частици се задава с набора квантови числа  $n$ , който зависи от  $N$ . По такъв начин микросъстоянието на газа се определя от съвкупността  $nN$ . В този случай енергията на микросъстоянието на газа е

$$E_{nN} = \sum_{\xi} \varepsilon_{\xi} n_{\xi}, \quad \text{като} \quad N = \sum_{\xi} n_{\xi}.$$

В големия каноничен ансамбъл основна роля има голямата статистическа сума

$$Q(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n e^{-\frac{E_{nN} - \mu N}{kT}},$$

където съвкупността  $n \equiv \{n_{\xi}\}$  включва всички числа на запълване на едночастичните състояния. Сумирането по  $n$  се извършва не по всички възможни

стойности на  $n_\xi$ , а само по тези, които удовлетворяват условието

$$N = \sum_{\xi} n_{\xi}.$$

В голямата статистическа сума може да се въведе сумиране по всички възможни стойности на  $n_\xi$ , ако включим символ на Кроникер  $\delta_{N, \sum_{\xi} n_{\xi}}$ , при което имаме

$$Q(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_{\xi}\}} \delta_{N, \sum_{\xi} n_{\xi}} e^{-\frac{E_{nN} - \mu N}{kT}}.$$

Тогава можем да разменим реда на сумиране

$$\begin{aligned} Q(T, V, \mu) &= \sum_{\{n_{\xi}\}} \sum_{N=0}^{\infty} \delta_{N, \sum_{\xi} n_{\xi}} e^{-\frac{E_{nN} - \mu N}{kT}} = \sum_{\{n_{\xi}\}} e^{-\frac{\sum_{\xi} (\epsilon_{\xi} - \mu) n_{\xi}}{kT}} = \sum_{\{n_{\xi}\}} \prod_{\xi} \left( e^{\frac{\mu - \epsilon_{\xi}}{kT}} \right)^{n_{\xi}} \\ &= \prod_{\xi} \sum_{n_{\xi}} \left( e^{\frac{\mu - \epsilon_{\xi}}{kT}} \right)^{n_{\xi}}. \end{aligned}$$

В идеалния ферми-газ възможните стойности на числата на запълване са  $n_{\xi} = 0, 1$ , докато в идеалния бозе-газ възможните стойности на числата на запълване са  $n_{\xi} = 0, 1, 2, \dots$ . Като извършим сумирането по  $n_{\xi}$ , намираме

$$Q(T, V, \mu) = \prod_{\xi} \left( 1 \pm e^{\frac{\mu - \epsilon_{\xi}}{kT}} \right)^{\pm 1},$$

откъдето за  $\Omega$ -потенциала получаваме

$$\Omega = -kT \ln Q = \mp kT \sum_{\xi} \ln \left( 1 \pm e^{\frac{\mu - \epsilon_{\xi}}{kT}} \right),$$

като горният знак се отнася за ферми-газ, а долният – за бозе-газ. От термодинамичното равенство

$$d\Omega = -SdT - pdV - \bar{N}d\mu$$

за средния брой частици  $\bar{N}_i$  следва

$$\bar{N} = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V} = \sum_{\xi} \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\xi} - \mu}{kT}} \pm 1} = \sum_{\xi} \bar{n}_{\xi},$$

откъдето получаваме разпределения на Ферми–Дирак и на Бозе–Айнщайн. Трябва да се отбележи, че в големия каноничен ансамбъл отсъстват флуктуации на  $\bar{n}_i$ , тъй като температурата  $T$  и химичният потенциал  $\mu$  са фиксирани.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящата работа е направено последователно разглеждане на извода на разпределения на Ферми–Дирак и Бозе–Айнщайн в рамките на стандартните статистически ансамбли на Гибс – микроканоничен, каноничен, голям каноничен. Показано е, че използването на различните ансамбли води до един и същ резултат в термодинамична граница, като еквивалентността на асимптотиките се дължи на използването на приближението на максималния член в сумата по състоянията и главния член във формулата на Стьрлинг в микроканоничния ансамбъл, както и приближението на седловата точка при оценката на статистическата сума в каноничния ансамбъл. Приведените изводи са апробирани на лекции със част от студентите във Физическия факултет на Софийския университет „Св. Климент Охридски“.

**Благодарности.** Настоящата работа беше осъществена с подкрепата на фонд “Научни изследвания” на Софийски университет, договор 069/2012.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Huang, K. Statistical Mechanics. New York–London, John Wiley & Sons, 1963.
- [2] Ландау, Л. Д., Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, ч. I. Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2002.
- [3] Зубарев, Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. Москва, Наука, 1971.
- [4] Леонтович, М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. Москва, Наука, 1983.
- [5] Квасников, И. А. Статистическая физика. Москва, Едиториал УРСС, 2002, с. 99.

## APPLICATION OF GROUND-BASED GNSS METEOROLOGY IN BULGARIA/SOUTHEAST EUROPE: CASE STUDY 2007 HEAT WAVE

TZVETAN SIMEONOV<sup>1</sup>, KERANKA VASSILEVA<sup>2</sup>, GUERGANA GUEROVA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Meteorology and Geophysics*

*Faculty of Physics, St. Kliment Ohridski University of Sofia*

<sup>2</sup>*Department of Geodesy, National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, BAS*

*Цветан Симеонов, Керанка Василева, Гергана Герова. ПРИЛОЖЕНИЕ НА НАЗЕМНИТЕ ИЗМЕРВАНИЯ С ГЛОБАЛНИТЕ СПЪТНИКОВИ СИСТЕМИ ЗА ПОЗИЦИОНИРАНЕ В МЕТЕОРОЛОГИЯТА В БЪЛГАРИЯ И ЮГОИЗТОЧНА ЕВРОПА ПРИ ИЗСЛЕДВАНЕТО НА ТОПЛИННАТА ВЪЛНА ОТ 2007 ГОДИНА*

Водната пара е най-разпространеният парников газ и се очаква да нараства в атмосферата вследствие на глобалното затопляне. Поради големите си времеви и пространствени нееднородности водната пара е трудна за измерване със стандартните метеорологични уреди. През последните 15 години се наложи нов метод за измерване на интегрираното във височина количество водна пара в атмосферата с помощта на глобалните навигационни спътникови системи (ГНСС), а именно ГНСС метеорология. В Европа методът е широко разпространен, като в момента Националните метеорологични институти получават данни от повече от 1600 наземни ГНСС станции чрез проекта на EUMETNET-E-GVAP. В югоизточна Европа този метод е слабо познат и все още не се използва. Тук за първи път се разглежда денонощният ход на интегрираната по височина водна пара за 8 станции в югоизточна Европа по време на топлинната вълна между 19-ти и 25-ти юли 2007 година. В станциите, разположени край Черно море – Констанца и Варна, водната пара има максимум в 15 ч. по Гринуич, т.е. 3 часа след температурния максимум. Водната пара, измерена в станциите, разположени край Средиземно море (Атина и Дубровник), има подобно поведение. Максимумът в 15 ч. може да се обясни с максимум в развитието на морската бриза, която доставя влажен въздух над сушата. В станции, далеч от морския бряг, като Букурещ и Крайова, максимумът на водната пара е отчетен между 6 и 9 ч. по Гринуич. Разликите в дневния ход на водната пара показват важноста на местната циркулация.

---

*For contact:* Guergana Guerova, Department of Meteorology and Geophysics, Faculty of Physics, St. Kliment Ohridski University of Sofia, 5 James Bourchier Blvd., 1164 Sofia, Phone: +359 2 8161 311, E-mail: guerova@phys.uni-sofia.bg

Atmospheric water vapour, the most abundant greenhouse gas, is expected to increase in a warmer climate. Due to its high temporal and spatial variation it is also difficult to sample with the conventional atmospheric observing systems. In the last 15 years, vertically Integrated Water Vapour (IWV) is derived from the GNSS (Global Navigational Satellite Systems) signal time delay: the GNSS meteorology method. GNSS meteorology is well established research field in Europe and data from over 1,600 ground-based GNSS stations are available to the European National Weather Services via EUMETNET E-GVAP project. In Southeast Europe GNSS is yet to be used for water vapour studies. This first work employs IWV derived from 8 GNSS stations in Southeast Europe to study the water vapour cycle during the 19-25 July 2007 heat wave. At the Black sea coastal stations Constanta and Varna, the peak IWV is at 15 UTC, i.e., 3 hours after the temperature peak. Similarly, IWV peak at 15 UTC is characteristic for the Mediterranean sea station Athens and Adriatic sea station Dubrovnik. The IWV peak at 15 UTC can be explained with the peak of the sea breeze circulation that brings humid air from the sea inland. In contrast, at the inland stations Bucharest and Craiova the peak of IWV is between 6-9 UTC. The differences in diurnal cycle of inland and coastal stations show the importance of local circulation.

**Keywords:** global navigation satellite systems (GNSS), GNSS meteorology, atmospheric water vapour, heat wave

**PACS numbers:** 92.40.Zg 92.60.J- 92.70.Ly

## 1. INTRODUCTION

Atmospheric water vapour is the most abundant greenhouse gas involved in the climate feedback loop. As the temperature of the Earth's surface and atmosphere increases, so does the moisture-holding capacity of the atmosphere and atmospheric water vapour is expected to increase in a warmer climate. The evidence is now indisputable [1] that water vapour released into the atmosphere adds one degree Celsius to global warming for every one degree contributed by man through greenhouse gas emissions.

According to the World Bank [2], as a consequence of climatic change a dramatic decrease in precipitation (-25%) is likely to occur in Bulgaria/Southeast Europe (Bulgaria and 9 neighboring countries). Since 1950 the rate of change of precipitation shows a decrease of about 0.2% per year. Comparing the mean value for annual temperature in 1901-1920 to 1980-2002, warming has increased by 0.5<sup>o</sup> in Southeast Europe. Heat waves have become a common summer feature on the Balkan Peninsula in the last 20 years [3]. During the 2007 summer, three heat waves are reported in the second half of June, July and August [3]. The July 2007 heat wave has the largest geographical extension reaching Bulgaria. In the period 18-25 July 2007, temperature above 40<sup>o</sup> is measured in at least two stations, operated by the National Institute of Meteorology and Hydrology in

Bulgaria. On 23 and 24 July in all 41 stations temperature records are registered. The temperature reached a record of 45.5<sup>0</sup> C in the Sandanski station in South Bulgaria. The heat wave caused wild fires and drought. Coarse-resolution global climate models project that by the mid-century, Bulgaria will become warmer, drier and with more frequent heat waves (data available from the World Bank Climate Portal).

In this work we study the atmospheric water vapour during the July 2007 heat wave in Bulgaria using the Global Navigation Satellite System (GNSS) Meteorology technique. The concept of GNSS Meteorology was first suggested in 1992 by Bevis [4]. As the GNSS signal travels through the atmosphere its propagation is affected by the atmospheric gases and in particular water vapour, which has high temporal variation up to 20-30% within a day. Thus vertically integrated water vapour data with high temporal and spatial resolution can be derived from the GNSS signal time delay.

In Europe, the exploitation of GNSS for monitoring the troposphere started in 1998. The initial research combined the GPS networks of France, Italy and Spain [5]. Operational provision of ground-based GPS tropospheric products in Near Real Time (NRT) started in 2001 [6]. Currently, 13 European GNSS processing centers deliver tropospheric products from more than 1,600 continuously operating GNSS stations with a maximum of 90 minute latency and hourly update. While in Europe, application of GNSS in Meteorology is well established, in East Europe it is an emerging research field.

This study presents the first results of application of ground-based GNSS meteorology method in Bulgaria/Southeast Europe for monitoring water vapour during the 2007 heat wave. The combination of high water vapour and temperature are lethal [3].

The paper is organized as follows: section 2 presents the radiosonde and the GNSS Meteorology methods and intercomparison for estimation of atmospheric water vapour; the GNSS tropospheric parameters and intercomparison between GNSS and radiosonde is given in section 3; section 4 discusses the diurnal cycle of atmospheric water vapour at 8 GNSS stations during the 2007 heat wave. Conclusions are given in section 5.

## 2. METHODS

### 2.1. RADIOSOUNDE METHOD

The radiosonde is a standard technique for in-situ sampling of the atmosphere. The method is approved by the World Meteorological Organization (WMO) and is widely adopted for temperature, pressure, humidity, wind speed and direction.

The National Institute of Meteorology and Hydrology of the Bulgarian Academy of Sciences (NIMH-BAS) performs regular radiosonde observations at 12 UTC in station Sofia. Since 2005 the sounde type is VAISALA RS92KL. The relative humidity sensor is a thin-film capacitor heated twin sensor with measurement range between 0 and 100%, resolution 1% and total uncertainty in sounding 5%.

In this work we use the radiosonde *Integrated Water Vapour (IWW)*. It is computed using:

$$IWW = \frac{1}{\rho_w} \int_{h_0}^{h_{top}} \rho_{wv}(h) dh \quad (1)$$

where  $h_0$  is the altitude of the station, where the probe is released,  $h_{top}$  is the maximum achieved height by the probe during sounding,  $\rho_w$  is the density of water,  $\rho_{wv}$  is the density of water vapour. *IWW* is measured in millimeters [7].

## 2.2. GNSS METEOROLOGY

The concept of GNSS Meteorology was first suggested in 1992 by Bevis [4]. As the GNSS signal travels through the atmosphere, its propagation is affected by atmospheric gases and in particular by water vapour. The magnitude of the atmospheric effects depends on the elevation angle of the satellite and on the current atmospheric situation. There are three major effects, caused by the atmosphere: ionospheric group delay; group wet and dry delay, caused by the troposphere and the stratosphere and the signal attenuation in the troposphere and in the stratosphere [8].

The ionosphere is the highest part of the atmosphere. It is situated between 100 and 500 km from the Earth's surface and consists mainly of ionized gases. The ionosphere has a highly noticeable daily fluctuation, because it is very sensible to sun and space radiation. The refraction index of the atmosphere depends on the wavelength of the signal, but it can be accurately calculated by using the main two frequencies (*L1* and *L2*) of every GNSS.

The troposphere, the bottom 12 km of the atmosphere, can be described as a combination of dry air and water vapour. Nitrogen, Oxygen, Argon and carbon dioxide are the fundamental gases, which create the troposphere. From them, mainly oxygen, refracts the GNSS signal. The signal refraction in the atmosphere is the main error source in GNSS. The total tropospheric delay of GNSS signal in zenith direction is called *Zenith Total Delay (ZTD)*. *ZTD* is a result of two major factors - the wet and hydrostatic delays.

The *Zenith Hydrostatic Delay (or ZHD)* is the largest of the two and is caused primarily by Oxygen and Nitrogen. *ZHD* causes about 2.1 meters of uncertainty in

positioning at sea level and varies with temperature and pressure in a predictable manner. The *ZHD* is calculated, using this formula:

$$ZHD = (2.2768 \pm 0.0024) \frac{p_s}{f(h, \theta)}, \quad (2)$$

$$f(h, \theta) = 1 - 0.00266 \cos(2\theta) - 0.00028h, \quad (3)$$

where  $p_s$  is local surface pressure and  $f(h, \theta)$  is a factor, dependent on height  $h$  and the latitude variation of the gravitational acceleration  $\theta$ .

The second delay is caused by the water vapour and is called *Zenith Wet Delay (ZWD)*. *ZWD* is much smaller, than the *ZHD* and adds from 1 up to 80 cm to the uncertainty in positioning. Unlike the *ZHD*, it has a large variation in a short time, due to its dependence of temperature, soil moisture and local conditions, which makes it highly unpredictable. The *ZWD* is defined by:

$$ZWD = ZTD - ZHD \quad (4)$$

The *Integrated Water Vapour (IWW)* can be extracted from this formula:

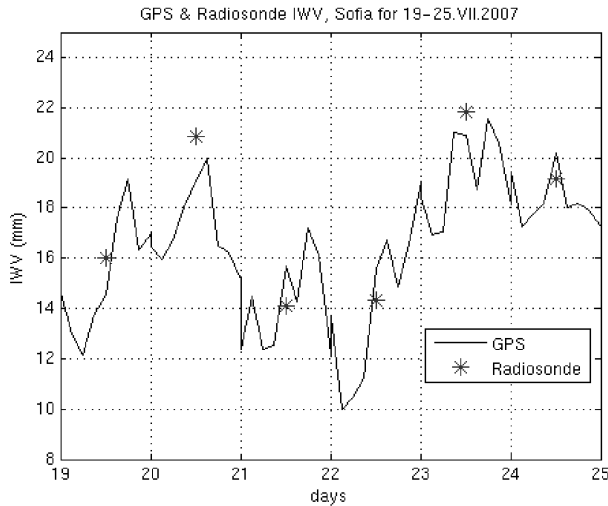
$$IWW = \frac{10^6}{(k_3 / T_m + k_2') R_v} ZWD \quad (5)$$

where  $k_2'$ ,  $k_3$  and  $R_v$  are constant and  $T_m$  is the weighted mean atmospheric temperature.

### 2.3. *IWW* INTERCOMPARISON: GNSS AND RADIOSOUNDE

Figure 1 shows intercomparison between GNSS derived *IWW* and the radiosonde during the heat wave period. The two methods show similar results. Clearly seen are the sampling differences between the two techniques. While GNSS provides high temporal resolution data (15 minute to 1 hour observations) the radiosonde is limited to only one sample a day. Clearly the large temporal variation between two sounding makes the GNSS data very suitable to study the diurnal cycle of *IWW*.





**Fig. 1.** *IWV* intercomparison: GNSS (solid line) and radiosonde (star).

Table 1 shows a comparison between the GNSS meteorology and the radiosonde method for retrieving information about water vapour. Beside the high temporal resolution, the GNSS has very high spatial coverage, 115 stations in Bulgaria, compared to 1 sounding for the same region. The low vertical resolution of GNSS meteorology is caused by the lack of measuring at different altitudes.

**Table 1.** Characteristics of water vapour measurement techniques

Criteria	Radiosonde	GNSS
temporal resolution	low (24 hours)	high (15 min - 1 hour)
spatial resolution	low (1 station)	high (115 stations)
vertical resolution	high (profile)	low (integrated quantity)
all weather operation	yes	yes
dataset length	about 50 years	from 1997 (SOFI station), 2009 (114 stations)
ownership	NIMH	IGS (SOFI) and 3 private networks

The radiosonde is an in-situ observing system, providing vertically resolved water vapour profiles in the troposphere. Both methods are all weather operational including cloud cover and precipitation events. While the radiosonde is in operation for more than 50 years the GNSS is only available since mid 1990ies. In addition to the high temporal and spatial resolution GNSS method comes at low cost. The GNSS meteorology is an established observing system providing

unique data for the state-of-the-art numerical weather prediction models. It is the only technique that can measure atmospheric water vapour with a reproducibility better than 1% over decades at a reasonable cost [9].

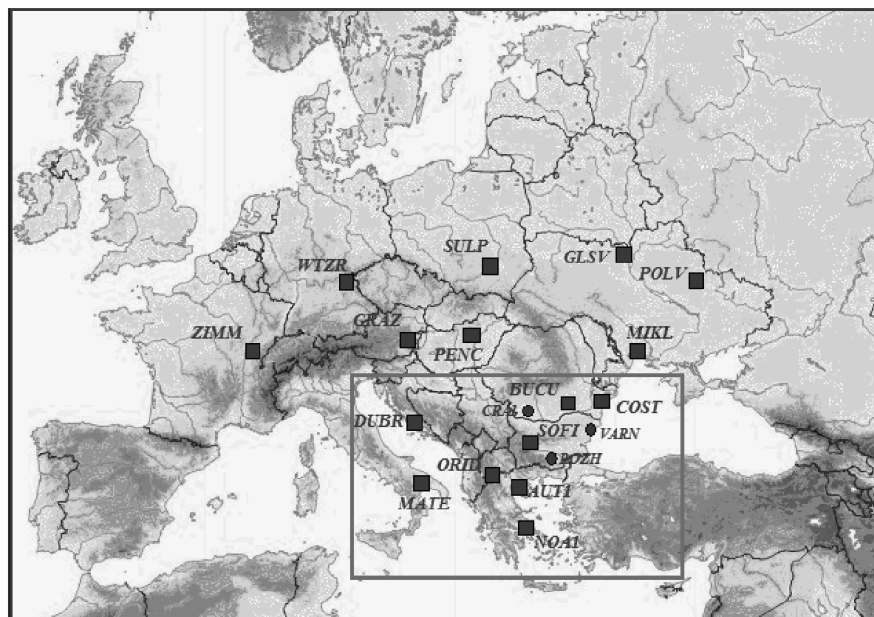
### 3. TROPOSPHERIC PARAMETERS DURING THE JULY 2007 HEAT WAVE

#### 3.1. GNSS DATA-SETS

In this work two GNSS data-sets are used. The first data-set is from the GNSS station in Sofia, which is suitable for intercomparison with the radiosonde station in Sofia (see section 3.3). The second data-set, with 19 GNSS station is provided by Dr. Keranka Vassileva from the National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography. From this data-set 8 stations are in Southeast Europe and are used in section 4 to study the water vapour dynamics during the heat wave. Short description of the two data-sets is given below.

The tropospheric parameters  $ZTD$ ,  $ZHD$  and  $IWV$  are derived for GNSS station Sofia (SOFI), Bulgaria. The SOFI station is in operation since 1997 and is part of the permanent EUREF (EUropean REference Frame) Network. The station is routinely processed by EUREF GNSS Processing Centers and tropospheric parameters are available hourly. The station is located in the Plana mountain, 1120m msl., about 20km from Sofia and is equipped with an AR25 Leica antenna and provides data for IGS and EGVAP.

In addition, GPS data from 19 GNSS permanent stations (*AUTI, NOAI, BUCU, COST, DUBR, GLSV, GRAZ, MATE, ORID, PENC, POLV, ROZH, SOFI, SULP, MIKL, WTZR, ZIMM, VARN, CRAI*) from Central and Eastern Europe (figure 2) are processed with the Bernese software, version 5.0 for the period 19-25 July, 2007. Sixteen of them are IGS (International GNSS Service) and EPN (EUREF Permanent network) stations. Seven sessions of 24 hours have been created. Daily station coordinates and station troposphere zenith delays in every 1 hour of each session are estimated. The troposphere model used is Saastamoinen dry model with Niell dry mapping and tilting gradient model. Corrections to the introduced zenith values have been estimated and finally the total zenith delays have been obtained as well as gradient parameters in North and East directions. These daily tropospheric files with estimated zenith total delays are used as input files for estimation of  $IWV$ .



**Fig. 2 .** Location of the IGS/EPN GNSS permanent stations. In this study are used SOFI, BUCU, COST, CRAI, VARN, AUT1, NOA1 and DUBR, marked with a box.

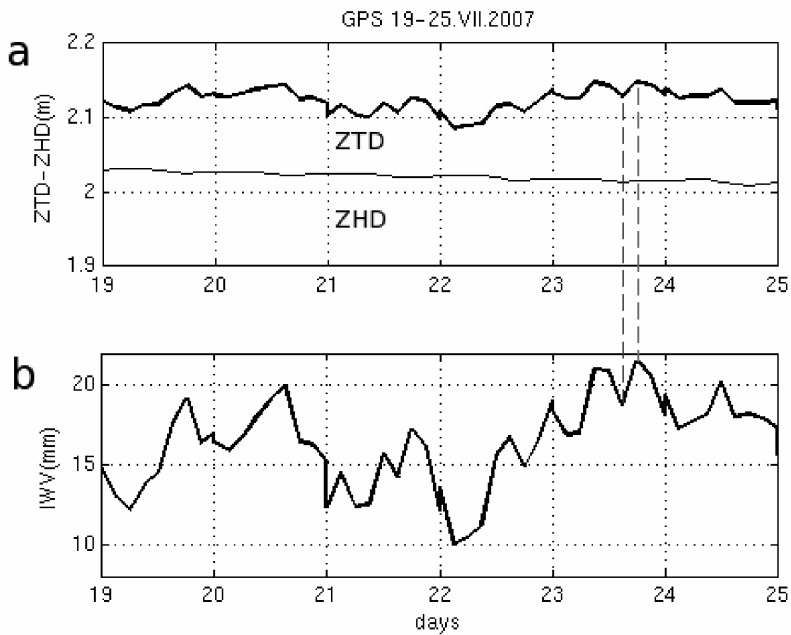
**Table 2.** GNSS and meteorological stations coordinates

Station	GNSS altitude[m]	Meteo station altitude [m]	GNSS Longitude	GNSS Latitude
Sofia	1120	595	23 <sup>o</sup> 23'	42 <sup>o</sup> 33'
Varna	91	43	27 <sup>o</sup> 55'	43 <sup>o</sup> 12'
Bucharest	143	91	26 <sup>o</sup> 07'	44 <sup>o</sup> 27'
Craiova	143	195	23 <sup>o</sup> 45'	44 <sup>o</sup> 20'
Constanta	46	14	28 <sup>o</sup> 39'	44 <sup>o</sup> 09'
Dubrovnik	545	165	18 <sup>o</sup> 06'	42 <sup>o</sup> 38'
Athens	538	15	23 <sup>o</sup> 51'	38 <sup>o</sup> 02'
Thessaloniki	150	4	23 <sup>o</sup> 00'	40 <sup>o</sup> 34'

### 3.2. GNSS TROPOSPHERIC PARAMETERS: ZTD, ZWD AND IWV

Figure 3a presents *ZTD* for the period 19-25 July 2007 at SOFI station. The *ZTD* is in the range of 2.1m. The *ZHD* temporal variation is almost flat slightly above 2.0m. During the heat wave, the high pressure is dominant over the region, which is the reason for the *ZHD* flatness. The temporal variation of *IWV* is presented in figure 3b. As seen in the figure, *IWV* has a rapid variation,

for example at 03 UTC on the 22 July it is about 10 mm and 21 hours later at 00 UTC on 23 July it almost doubles reaching 19 mm. In order to retrieve *ZHD* and *IWV*, temperature and pressure data from the synoptic station Sofia of NIMH-BAS is used. The station is at elevation 595 m msl. therefore, a height correction is applied to accommodate the 625 m altitude difference. The temperature and pressure data are available every 3 hours and this is the reason for degrading the GNSS data, which provides hourly products.



**Fig. 3.** Temporal variation of: a) *ZTD* and *ZHD*; b) *IWV* at GNSS SOFI station during 19–25 July 2007 heat wave.

#### 4. DIURNAL CYCLE OF *IWV* DURING THE 19-25 JULY 2007 HEAT WAVE IN SOUTHEAST EUROPE

The atmospheric circulation leading to the heat wave is characterized by northerly displacement of the subtropical jet stream (flow at 200 hPa) that allowed subtropical African air to reach the Balkan Peninsula as far as 50° N. Clearly seen on figure 4 is a hot air tongue spreading over the Mediterranean sea and the Balkan Peninsula at 00 UTC on 23 July 2007.

23JUL2007 00Z

850 hPa Temperatur (Grad C)

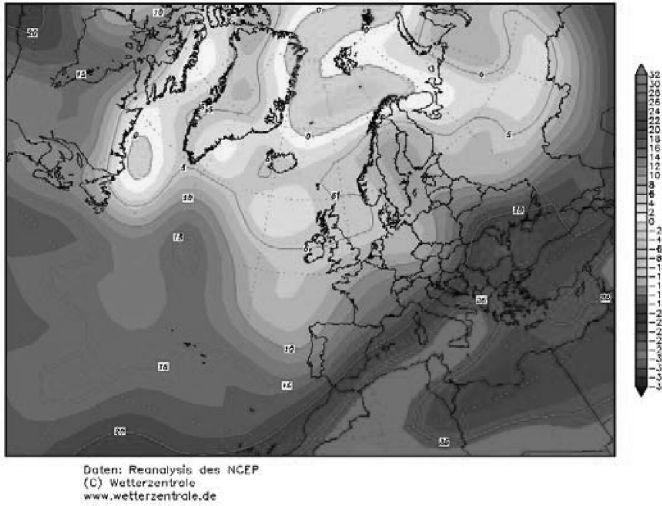
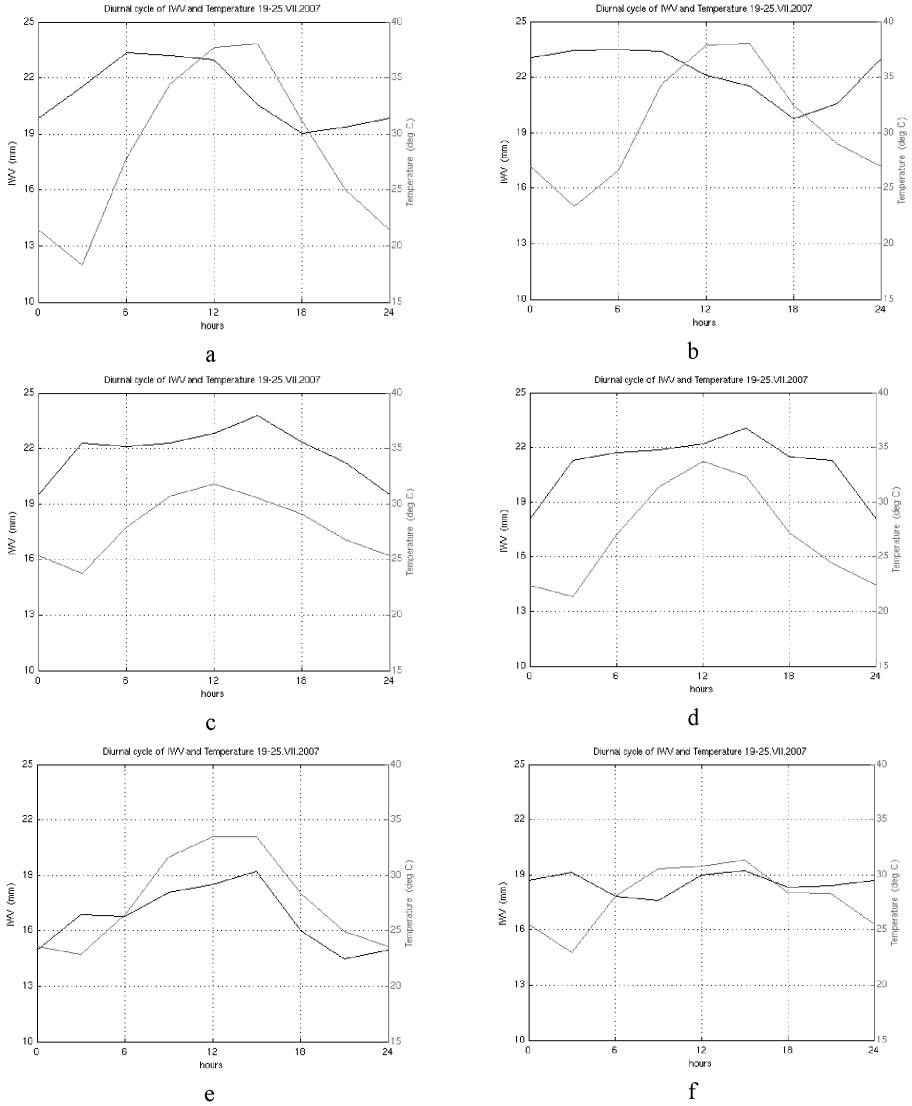
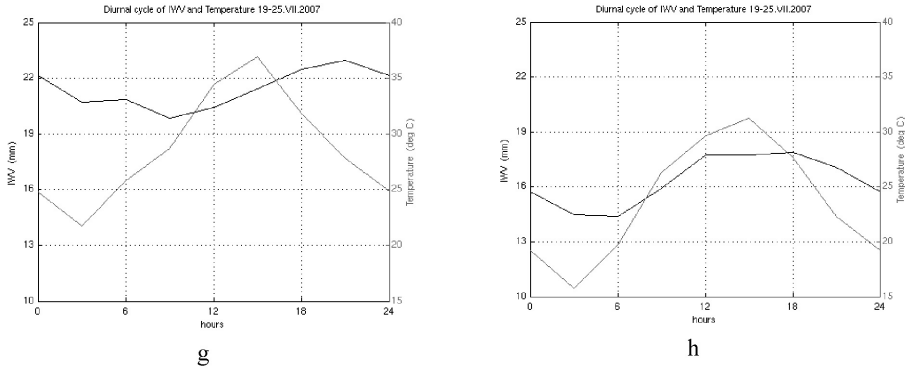


Fig. 4. Temperature at 850 hPa (1.5 km msl.) on 23 July 2007 00UTC.

The diurnal cycle of the temperature and *IWV* is presented in figure 5. At all location the temperature reaches minimum at 3 UTC. At all but 2 locations the temperature peaks at 15 UTC. At the Black sea coastal sites Constanta (figure 5c) and Varna (figure 5d) the temperature peak is at 12 UTC. The diurnal cycle of *IWV* shows substantial differences. For the inland stations in Romania - Bucharest (figure 5a) and Craiova (figure 5b) the peak of *IWV* is between 6-9 UTC and a minimum is at 18 UTC. At the Black sea coastal stations Constanta (figure 5c) and Varna (figure 5d) the *IWV* minimum is around 00 UTC and the peak is at 15 UTC, i.e., 3 hours after the temperature peak. The *IWV* peak at 15 UTC can be explained with the peak of the sea breeze circulation that brings humid sea air inland. Similarly, the *IWV* peak at 15 UTC is also characteristic for the Mediterranean sea station Athens (figure 5e) and Adriatic sea station Dubrovnik (figure 5f). At the Mediterranean sea station Thessaloniki (figure 5f), the *IWV* peak is at 21 UTC, i.e., 6 hours later than the temperature peak. Morland et al. [10] study the diurnal climatology from 2003 to 2007 for station Bern and conclude that the *IWV* diurnal cycle peak occurs about 6 hours later, than the daily temperature maximum. At the inland station Sofia (figure 5h) the *IWV* minimum is at 6 UTC and a broad peak is seen between 12-18 UTC. It is to be noted that the GNSS station in Sofia located in a mountainous area outside of the city at altitude of 1120 m msl. which makes it suitable for study of local *IWV* circulation in mountainous regions.



**Fig. 5.** Diurnal cycle of *IWV* in mm (black line) and temperature in °C (colored line) for:  
a) Bucharest, Romania; b) Craiova, Romania; c) Constanta, Romania;  
d) Varna, Bulgaria; e) Athens, Greece; f) Dubrovnik, Croatia;



**Fig. 5.** Diurnal cycle of *IWW* in mm (black line) and temperature in °C (colored line) for: g) Thessaloniki, Greece; h) Sofia, Bulgaria.

## 5. CONCLUSIONS

Heat waves have large adverse social, economic and environmental effects including increased mortality, the destruction of large areas of forests by fire, and effects on water ecosystems and glaciers. They cause increased power consumption and power cuts, transport restrictions and a decreased agricultural production. Heat waves have become a common summer feature in the Southeast Europe thus calling for adequate strategy regarding air quality, transportation, energy production and consumption, agriculture, water management and tourism. The estimated economic losses of the 2007 heat wave in Southeast Europe exceed 2 billion EUR.

Monitoring water vapour during the heat waves is critical as the combination of high temperature and water vapour is lethal. This study presents the first results of application of ground-based GNSS meteorology method in Bulgaria/Southeast Europe. GNSS tropospheric products from 8 stations in Southeast Europe are used to study the diurnal cycle of water vapour during the 19–25 July 2007 heat wave. For the coastal stations at Black sea the peak *IWW* occurs at 15 UTC, i.e., 3 hours after the peak of the temperature and co-insides with the peak of the sea breeze circulation. For the inland stations in Romania the peak of *IWW* is between 6–9 UTC and a minimum is at 18 UTC. A double peak of *IWW* at temperature at 15 UTC is characteristic for the Mediterranean sea station Athens and Adriatic sea station Dubrovnik. The differences in the diurnal cycle of inland and costal stations show the importance of local conditions. While the temperature peak occurs between 12 and 15 UTC at all stations the maximum of *IWW* shows large variations depending on the local environment.

**Acknowledgments.** This research is supported by a Marie Curie International Reintegration Grant (FP7-PEOPLE-2010-RG) within the 7<sup>th</sup> European Community Framework Program.

#### REFERENCES

- [1] Dessler, A. E. and S. C. Sherwood. – *Science*, 2009, **323**, 1020.
- [2] Adapting to climate change in Europe and Central Asia, Tech. report, World Bank, 2009.
- [3] Matzarakis, A., C. de Freitas and D. Scott. Developments in tourism climatology. Commission Climate, Tourism and Recreation, International Society of Biometeorology, 2007.
- [4] Bevis, M., S. Businger, T. Herring, C. Rocken, R. Anthes, and R. Ware. – *Journal of Geophysical Research*, 1992, **97**, 15787.
- [5] Haase, J., E. Calais, J. Talaya, A. Rius, F. Vespe, R. Santangelo, X.-Y. Huang, J. M. Davila, M. Ge, L. Cucurull, A. Flores, C. Sciarretta, R. Pacione, M. Boccolari, S. Pugnaghi, H. Vedel, K. Mogensen, X. Yang and J. Garate. – *Phys. Chem. Earth A*, 2001, **26**, 433.
- [6] Elgered, G., H. van der Marel, S. Barlag, J. Nash, P. Plag (eds.). COST716: Exploitation of ground-based GPS for operational numerical weather prediction and climate applications, COST, 2005.
- [7] Guerova, G., E. Brockmann, J. Quiby, F. Schubiger and C. Matzler. – *Journal of Applied Meteorology*, 2003, **42**, 141.
- [8] Parkinson, B.W., J.J. Spilker, P. Axelrad and P. Enge (eds.). Global Positioning System: Theory and Applications, vol. I, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2005.
- [9] Ning, T. GPS meteorology: With focus on climate applications, PhD thesis, Chalmers University of Technology, 2012.
- [10] Morland, J., M. C. Coen, K. Hocke, P. Jeannet and C. Matzler. – *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2009, **9**, 5975.



## ИМПЕДАНСЕН АНАЛИЗ НА ТЕЧНИ ЛИПИДНИ ФИЛМИ С ПОМОЩТА НА УСТРОЙСТВО, БАЗИРАНО НА КОМПЮТЪРНАТА ЗВУКОВА КАРТА

ФИЛИП СИМЕОНОВ, ВАЛЕРИ КОЧЕВ

*Катедра „Атомна физика“, група „Медицинска физика“  
Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“*

*Филип Симеонов, Валери Кочев.* ИМПЕДАНСЕН АНАЛИЗ НА ТЕЧНИ ЛИПИДНИ ФИЛМИ С ПОМОЩТА НА УСТРОЙСТВО, БАЗИРАНО НА КОМПЮТЪРНАТА ЗВУКОВА КАРТА

Статията е посветена на конструирането на сравнително просто и евтино устройство за изследване на импеданса, използващо звуковата карта на персонален компютър. Цялата схема работи като съчетание на звуковата карта с един предусилвател с постоянно усилване, независимо от честотата. Той дава възможност да се съгласува входния импеданс на картата с импеданса на образеца, което е особено важно при изследването на химични и биологични системи. Това драстично подобрява качеството на измерванията, които при използването на стандартен софтуер дават незадоволителни резултати. Като примери са показани някои анализи на импеданса на моделни липидни системи.

*Filip Simeonov, Valery Kochev.* IMPEDANCE ANALYSIS OF LIPID LIQUID FILMS WITH THE AID OF DEVISE BASED ON PC SOUND CARD

Construction and major principles of operation of a set-up, suitable for impedance analysis of biologically relevant samples are disclosed in the paper. The devise is based on a simple scheme, operating in conjunction with the PC sound card. While many programs running directly on sound card are capable of simulating impedance analyzer, their performance is not consistent when chemical or biological systems are explored. The addition of pre-amplifier drastically improves the implementation of the set-up. Some examples of impedance analysis of lipid model systems are given and their behavior is discussed.

**Keywords:** impedance analysis, lipid membrane analogs, solid supported lipid films

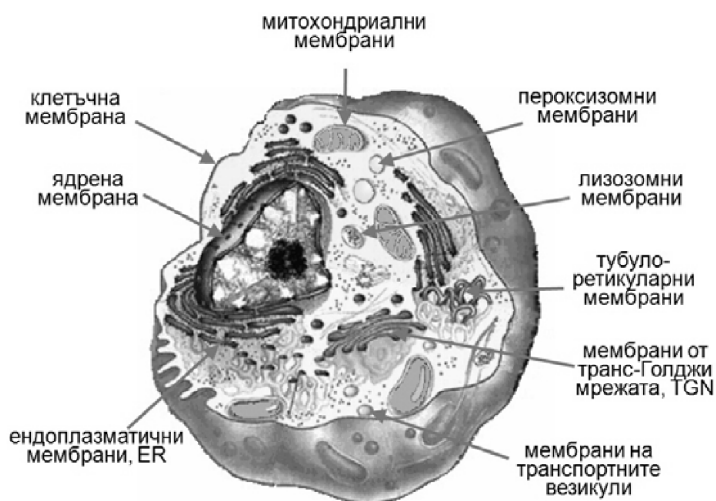
**PACS numbers:** 87.14.Cc, 87.16.Dg, 87.80.-y

---

*За контакти:* Филип Симеонов, Валери Кочев, Катедра „Атомна физика“, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул.„Джеймс Баучер“ 5, София 1164, тел.: +359 2 8161317, E-mail: fipost@abv.bg

## 1. ВЪВЕДЕНИЕ

Изучаването на клетъчните процеси на молекулно ниво вече повече от половин век е в центъра на вниманието на съвременната биология. С откриването на носителя на генетичната информация изключителни усилия бяха насочени към изясняване на механизмите за нейната експресия, за намиране на интимната връзка между гени и белтъци, а оттам и за разгадаване на големата тайна за съхраняването на отношенията структура–функции. Появата на много нови физични и химични методи за изследване на материята, както и на теоретични подходи към решаване на загадките на микросвета, даде възможност за по-задълбочено навлизане в тайните на биологичните форми на живота. Не е странно, че тези проучвания разшириха изобщо кръгозора на разбиранията ни за молекулярната биология на клетката и за биохимичните превръщания на веществата в нея. От друга страна, макар и с леко закъснение, се развиха и представите за едни от най-важните субклетъчни структури – липидните мембрани [1] (фиг. 1). Големите постижения във физикохимията на интерфейсите от първата половина на XX в. несъмнено дадоха силен тласък в тази насока. Разкрити бяха движещите сили, лежащи в основата на образуването, полиморфизма и стабилността на биомембраните [2].



**Фиг. 1.** Скица на животински еукариот, онагледяваща мембранното обзавеждане на клетката

Мембранологията се оформи като едно огромно самостоятелно и перспективно направление в сферата на науките за живота. Съществен принос даде и бумът в технологиите, базиращи се на класически и съвременни

принципи от всички области на физиката – твърдо тяло, акустика, оптика, електроника, атомна физика, флуидомеханика и т.н. Така в момента мембранологията има на разположение широка гама от експериментални средства за атакуване на проблемите, свързани с богатата архитектура и неимоверно важната роля на липидните мембрани в клетъчната физиология. Като се вземе предвид техният крайно сложен молекулен състав и организация, не е трудно да си представим трудностите, на които се натъкват учените, работещи по тези въпроси. Несъмнено изучаването на свойствата на по-прости моделни системи, възпроизвеждащи част от параметрите на нативните биомембрани, е от особен интерес за осмисляне на функционалната активност на тези клетъчни образувания.

От горното кратко изложение е ясно колко сериозна задача е изследването на биомембранните аналози с адекватен физичен инструментариум. Добре известен факт е обаче, че за жалост болшинството от модерните експериментални методи изискват сложни, скъпо струващи технически средства. Такива системи се обслужват от високо квалифициран персонал, съдържат екзотична апаратура и са почти немислими за лабораторен студентски практикум. Очевидно провеждането на научни проучвания с достъпни опитни установки е крайно важно за нуждите на образованието и подготовката на кадри. Проблемът за намиране на по-евтини апаратурни изпълнения не е нов и негови решения се срещат все по-често. Докладвани са множество варианти на лабораторно произведени уреди, заместващи с успех скъпите установки [3]. Така един приемлив компромис между изпълнение и костуемост в много случаи може да се окаже изключително полезен както за научни, така и за образователни цели.

В настоящата работа е представено именно едно такова техническо решение, базиращо се на концепцията за импеданса. Причините да се насочим към него не са малко. Непрекъснато засилващият се интерес към електрохимичните методи за изследване в областта на биологията и медицината се определя на първо място от изключителната роля, която играят биоелектрохимичните процеси в субклетъчната физиология. От друга страна, бурното развитие на аналитичната електрохимия в последно време снабди учените с нови мощни средства за извличане на информация за тези процеси на молекулно ниво. Поради редица свои преимущества, като чувствителност, неинвазивност, сравнително проста и евтина апаратура, тя си извоюва едно много широко приложение, особено в интердисциплинарните научни направления. В редица случаи електрохимичните методи за анализ съществено се обогатяват с прилагането на импеданския подход. Възможността честотата да се мени по време на измерването определя този подход като спектроскопичен, т.е. при електрохимичната импедансна спектроскопия (англ. Electrochemical Impedance Spectroscopy, EIS) се следи честотно зависимото поведение на

образца при облъчването му посредством електродите с електромагнитна енергия. Веднага трябва да се обърне внимание, че изследването на импеданса на химични и биологични системи изисква по-специално отношение най-малко поради две причини – стремежа към „непертурбиращо“ въздействие (за да не се променят параметрите в хода на измерването) и съществено нелинейния отговор на системата. Напоследък се видя, че такива измервания са прелюдия към модерните техники на сканираща EIS и импедансна томография.

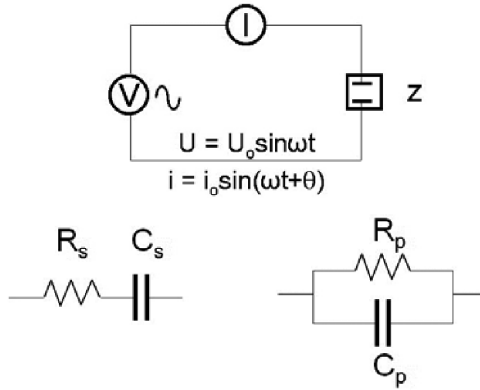
Докладваното тук устройство е в състояние да измерва със задоволителна точност импеданса главно в аудио-диапазона (приблизително 10 Hz–10 kHz). Това честотно ограничение се налага от възможностите на звуковата карта, която е съществен компонент от него. Предимствата, които предлага такова решение, са повече от ясни. На достъпна, нищожна цена се реализира уред, способен да измерва импеданса на разнообразни химични и биологични системи, който, освен PC и софтуерното му обезпечаване, включва само още един модул – сравнително просто устроен електронен предусилвател.

## 2. ЕЛЕКТРОХИМИЧНА ИМПЕДАНСНА СПЕКТРОСКОПИЯ, EIS

Както казахме, при редица проучвания електрохимичните методи могат да бъдат разширени с използването на техники, базиращи се върху концепцията за импеданса. В повечето случаи е удобно той да бъде определен, като на електрохимичната клетка с образца се подава променливотоково възбуждане. Едно голямо преимущество на метода е възможността честотата да се мени по време на измерването, като това сканиране по същество представлява вече някаква форма на спектроскопия. С други думи, аналогично на оптичната спектроскопия, при EIS пробата се „облъчва“ посредством електродите с електромагнитна енергия с честоти, вариращи в доста широк обхват – от микрохерци ( $\mu\text{Hz}$ ) до гигахерци (GHz). По този начин могат да се изследват честотно зависимите пасивни електрични свойства (т.е. импедансът или комплексната проводимост) на различни системи. Такъв подход се оказва мощно средство както за определяне на структурата им, така и за следене на процесите, протичащи в тях. В последно време той се изяви като особено чувствителна методика към параметрите на интерфейсните зони.

Известно е, че при прилагане на променливо синусоидално напрежение  $U(\omega t)$  към някаква пасивна електрична верига протичащият ток  $I$  има също синусоидална форма и е отместен по фаза спрямо напрежението. В зависимост от компонентите на веригата това отместване може да бъде положително (при наличие на капацитивно съпротивление), отрицателно (с индуктивно съпротивление) или нула (чисто активно, омично съпротивление). Тъй като химичните и биологичните системи много рядко съдържат индуктивна

компонента, разглежданията обикновено се ограничават до вериги, съдържащи комбинации от капацитивни и омични съпротивления, фиг. 2.



**Фиг. 2.** Пасивна електрическа верига (горе) и двете основни комбинации от честотно независими елементи (долу)

В комплексно представяне импедансът  $Z = U/I$  и комплексната проводимост (адмитанс,  $Y = I/Z$ ) се задават във вида

$$Z = \operatorname{Re} Z + i \operatorname{Im} Z; \quad Y = \operatorname{Re} Y + i \operatorname{Im} Y,$$

така че връзката между отделните им части ще бъде

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} Z &= \frac{\operatorname{Re} Y}{(\operatorname{Re} Y)^2 + (\operatorname{Im} Y)^2} & \operatorname{Re} Y &= \frac{\operatorname{Re} Z}{(\operatorname{Re} Z)^2 + (\operatorname{Im} Z)^2} \\ \operatorname{Im} Z &= \frac{-\operatorname{Im} Y}{(\operatorname{Re} Y)^2 + (\operatorname{Im} Y)^2} & \operatorname{Im} Y &= \frac{-\operatorname{Im} Z}{(\operatorname{Re} Z)^2 + (\operatorname{Im} Z)^2} \end{aligned}$$

По-нататък ще работим с импеданса  $Z$ , въпреки че в някои случаи е по-удобно да се използва  $Y$ . Това, естествено, не променя разглежданията. В много случаи импедансът на образеца представлява комбинация от последователно и/или паралелно свързани “идеални” елементи, т.е. честотно независими съпротивления ( $R$ ) и кондензатори ( $C$ ). Най-простите примери са показани на фиг.2. От теорията на електричните вериги за тях са известни следните зависимости:

$$Z = R_s + \frac{1}{i\omega C_s} = \frac{1}{\frac{1}{R_p} + i\omega C_p},$$

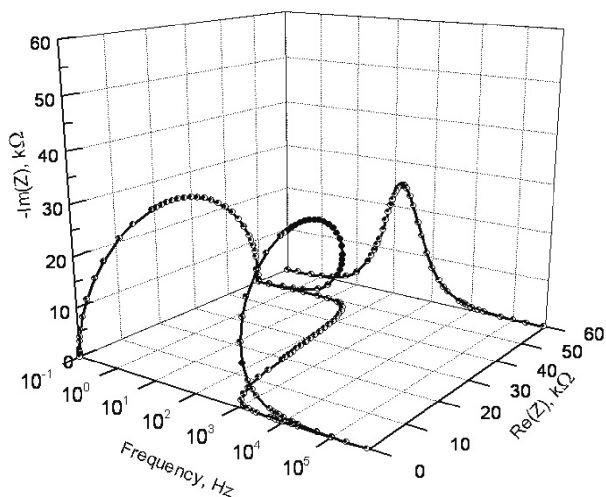
$$\operatorname{Re} Z = R_S = \frac{R_P}{1 + (\omega R_P C_P)^2} = \frac{R_P}{1 + W_P}, \quad \operatorname{Re} Y = \frac{1}{R_P} = \frac{\omega^2 R_S C_S^2}{1 + (\omega R_S C_S)^2} = \frac{W_S}{R_S (1 + W_S)},$$

$$\operatorname{Im} Z = \frac{1}{\omega C_S} = \frac{\omega R_P^2 C_P}{1 + (\omega R_P C_P)^2} = \frac{R_P \sqrt{W_P}}{1 + W_P}, \quad \operatorname{Im} Y = \omega C_P = \frac{\omega C_S}{1 + (\omega R_S C_S)^2} = \frac{\omega C_S}{1 + W_S},$$

където  $\omega = 2\pi f$  е кръговата честота и  $W = (\omega RC)^2$ .

При пасивните вериги импедансът  $Z$  по определение не зависи от приложеното напрежение, но, както се вижда от горните формули, зависи от честотата  $f = \omega/2\pi$ , т.е.  $Z = Z(f)$ . За химичните и биологичните обекти обаче трябва да се има предвид и обстоятелството, че те променят свойствата си при прилагане на по-високи напрежения. Ето защо използваните за измерване сигнали трябва да бъдат достатъчно слаби, без, разбира се, това да пречи на регистрацията им. Зависимостта на импеданса от честотата може да служи за описание на пасивните електрични свойства на изследваните системи, като им бъде приписана еквивалентна схема, която от своя страна е физически адекватна на различните структури и процеси в тях.

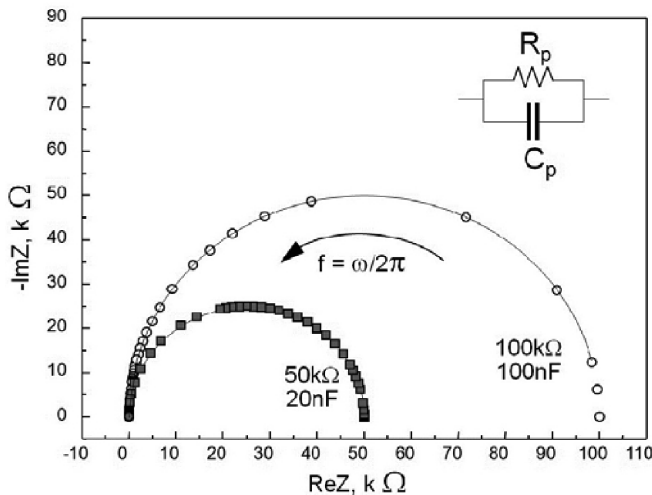
Един удобен начин за представяне на връзките между отделните компоненти на еквивалентната схема и намиране на техните стойности са т.нар. *импедансни диаграми*. Тъй като  $Z(f) = \operatorname{Re}Z(f) + i\operatorname{Im}Z(f)$ , той може да бъде изобразен като радиус-вектор или точка в тримерното пространство  $(\operatorname{Re}Z, \operatorname{Im}Z, f)$ . С промяната на честотата  $Z$  описва някаква крива в това пространство. Импедансните диаграми са ортогоналните проекции на  $Z$  в трите равнини  $(\operatorname{Re}Z, -\operatorname{Im}Z)$ ,  $(\operatorname{Re}Z, f)$  и  $(-\operatorname{Im}Z, f)$ , фиг. 3.



Фиг. 3. Тримерно представяне на импеданса  $Z$  и неговите проекции в трите равнини  $(\operatorname{Re}Z, -\operatorname{Im}Z)$ ,  $(\operatorname{Re}Z, f)$  и  $(-\operatorname{Im}Z, f)$  [4]

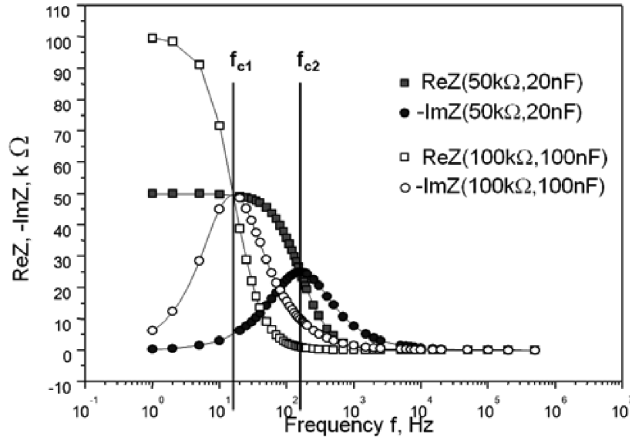
От конкретния вид на кривите може да се съди за еквивалентната схема, породила такова импедансно поведение, както и да бъдат определени нейните параметри. Като илюстрация по-надолу са показани теоретично получени импедансни диаграми за някои прости комбинации от съпротивления ( $R$ ) и кондензатори ( $C$ ). Естествено, ще се спрем само на най-характерните.

Импедансът  $Z(f)$  на успоредно свързани  $R_p$  ( $50\text{ k}\Omega$ ) и  $C_p$  ( $20\text{ nF}$ ) ( $RC$ -кръг) в зависимост от честотата описва кривата, дадена с по-тъмен маркер на фиг. 4. Имайки предвид горните изрази за  $\text{Re}Z$  и  $\text{Im}Z$ , не е трудно да се покаже, че проекцията на тази крива в равнината ( $\text{Re}Z, -\text{Im}Z$ ) (известна още като Nyquist plot) представлява допирателна към ординатата полуокръжност с център върху абсцисата и радиус  $R_p/2$ . На фиг. 4 е показана и втора полуокръжност за други стойности на  $R_p$  ( $100\text{ k}\Omega$ ) и  $C_p$  ( $100\text{ nF}$ ), маркирана с бяло. Нарастването на честотата  $f$  е указано със стрелка.



**Фиг. 4.** Диаграма на Найкуист (Nyquist) за успоредно свързани  $R_p$  и  $C_p$

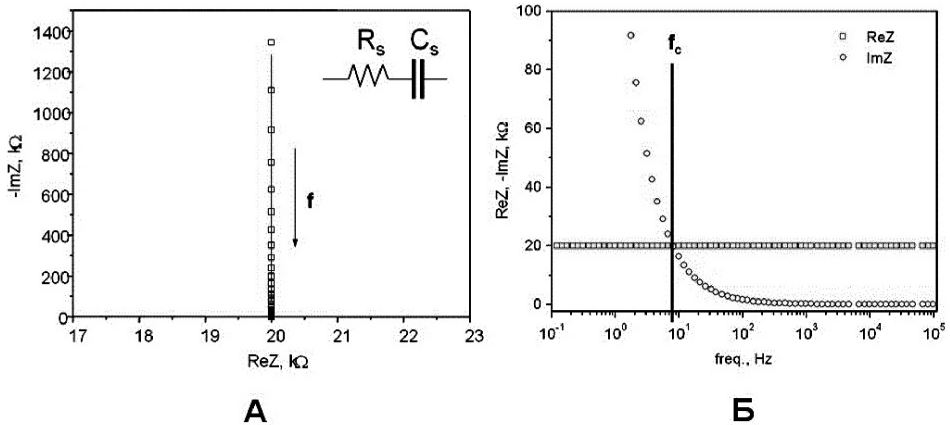
Кривите на зависимостта от  $f$  (фиг. 5) в другите две диаграми (на Боде) също имат типична форма и дават възможност за определяне на  $R_p$  и  $C_p$ .  $R_p$  се определя от стойността, към която клони  $\text{Re}Z$  при ниски честоти, а  $C_p$  – от максимума на  $\text{Im}Z$  или инфлексната точка на  $\text{Re}Z$ , които се проявяват на честотата на полупрехода  $f_c = 1/2\pi R_p C_p = 1/2\pi\tau$ , наричана още характеристична, или *критична честота*. На диаграмата на фиг. 4 тя съответства на върха на полуокръжността.



Фиг. 5 Диаграма на Бодe (Bode) за успоредно свързани  $R_p$  и  $C_p$

Алтернативен начин на комплексното представяне на  $Z$  може да бъде зададено чрез неговия модул  $|Z|$  и фазовия ъгъл  $\theta$ :  $Z = \text{Re}Z + i\text{Im}Z = |Z|e^{-i\theta} = |Z|\cos\theta - i|Z|\sin\theta$ .

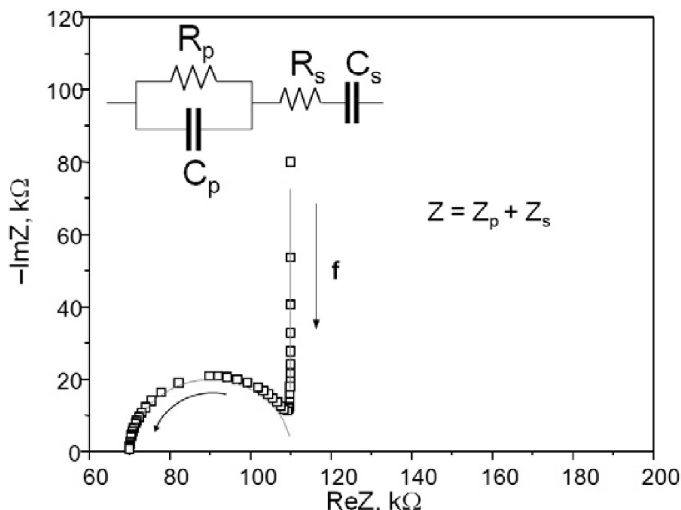
При последователно свързани  $R_s$  ( $20 \text{ k}\Omega$ ) и  $C_s$  ( $1 \mu\text{F}$ ) импедансната диаграма в комплексната равнина е права, перпендикулярна на абсцисата, пресичаща я в точката  $\text{Re}Z = R_s$  (фиг. 6А). Правата започва от безкрайност при ниските честоти и клони към нула при високите, както следва и от израза за  $\text{Im}Z$ . Съответно, на другата диаграма (фиг. 6Б) реалната част на импеданса е постоянна за всички честоти  $\text{Re}Z = \text{const} = R_s$ , а имагинерната е  $\text{Im}Z = -1/\omega C_s = -f_c R_s / f$  (т.е. от вида  $1/x$ ).



Фиг. 6. Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Бодe (Б) за последователно свързани  $R_s = 20 \text{ k}\Omega$  и  $C_s = 1 \mu\text{F}$



Ако към  $R_s$  ( $70 \text{ k}\Omega$ ) и  $C_s$  ( $1 \text{ }\mu\text{F}$ ) добавим още и един  $RC$ -кръг, ще се получи диаграмата от фиг. 7.



**Фиг. 7.** Диаграма на Nyquist за последователно свързани  $R_s$ ,  $C_s$  и  $RC$ -кръг ( $R_p = 40 \text{ k}\Omega$ ,  $C_p = 20 \text{ nF}$ ;  $R_s = 70 \text{ k}\Omega$ ,  $C_s = 1 \text{ }\mu\text{F}$ )

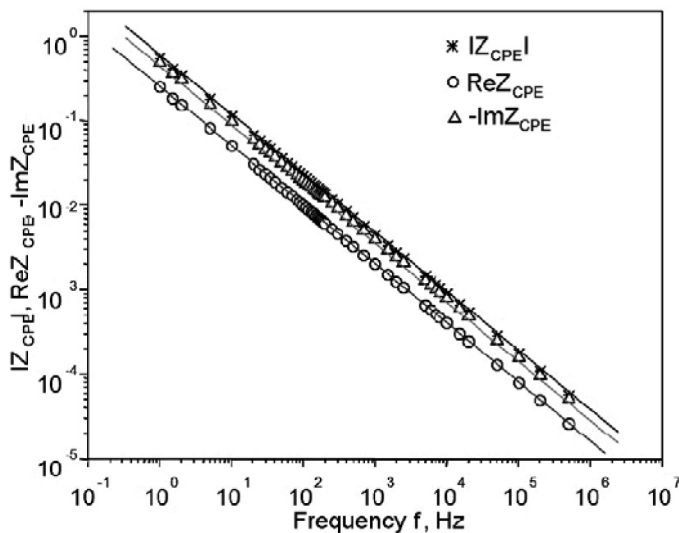
За съжаление обаче, не винаги е възможно поведението на една реална система да бъде моделирано с еквивалентна схема, съдържаща само краен брой честотно независими елементи (идеални  $R$  и  $C$ ). Обикновено импедансът на химичните и биологични образци е силно нелинеен, т.е. може да зависи от честотата както пряко, така и косвено (когато самите му компоненти зависят от  $f$ ). Това налага въвеждането на нелинейни елементи с характерна честотна зависимост. Един от най-популярните е т.нар. *елемент с постоянна фаза* (англ. Constant Phase angle Element, CPE). Той се дефинира с израза

$$Z_{\text{CPE}} = A(i\omega)^{-a}$$

където  $A$  и  $a$  са параметри, независещи от  $f$ . Очевидно, за  $a = 0$  CPE представлява идеален резистор  $R = A$ , докато за  $a = 1$  той е идеален кондензатор  $C = 1/A$ . Използвайки равенството на Ойлер, можем да намерим реалната и имагинерната част на  $Z_{\text{CPE}}$ :

$$Z_{\text{CPE}} = A(i\omega)^{-a} = A\omega^{-a} e^{-ia\pi/2} = A\omega^{-a} \cos(a\pi/2) - iA\omega^{-a} \sin(a\pi/2),$$

т.е. модулът и фазовият ъгъл са съответно  $|Z_{\text{CPE}}| = A\omega^{-a}$  и  $\theta = a\pi/2$ . От тук е ясно, че в логаритмичен мащаб зависимостта на  $|Z_{\text{CPE}}|$ ,  $\text{Re}Z_{\text{CPE}}$  и  $-\text{Im}Z_{\text{CPE}}$  от честотата дава прави линии (фиг. 8). При това положение очевидно и диаграмата в равнината ( $\text{Re}Z$ ,  $-\text{Im}Z$ ) ще бъде права.



Фиг. 8. Честотна зависимост на модула на импеданса  $|Z|$  и двете му части  $\text{Re}Z$  и  $-\text{Im}Z$  за CPE с параметри  $A = 2$ ,  $a = 0,7$

Пасивните електрични свойства на някаква среда между два електрода с площ  $A$  на разстояние  $d$  един от друг напълно се определят от нейната специфична проводимост  $\sigma'$  и от диелектричната проникваемост  $\epsilon'$ . Тези величини могат да бъдат получени от измерването на импеданса, като се имат предвид зависимостите

$$G = \sigma'(A/d),$$

$$C_p = \epsilon'\epsilon_0(A/d),$$

За широк честотен диапазон обаче диелектричните свойства на веществата не остават постоянни. Подобно на импеданса се наблюдава дисперсия на диелектричната проникваемост  $\epsilon' = \epsilon'(\omega)$ , като  $\epsilon'$  намалява от една статична стойност  $\epsilon'_L$  за ниските честоти до някакво гранично  $\epsilon'_\infty$  за високите. Това поведение се описва от класическата теория на Дебай-Хюкел [5] за полярни електролити с въвеждането на комплексната диелектрична проникваемост

$$\epsilon^\infty = \epsilon' \quad i\epsilon'' = \epsilon'_\infty + \frac{\epsilon'_L \epsilon'_\infty}{1 + i\omega\tau} = \epsilon'_\infty + \frac{\epsilon'_L \epsilon'_\infty}{1 + (\omega\tau)^2} \quad i\omega\tau \frac{\epsilon'_L \epsilon'_\infty}{1 + (\omega\tau)^2},$$

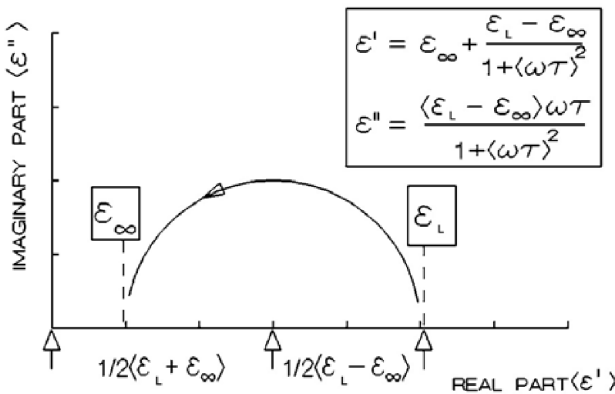
където имагинерната част  $\epsilon'' = (\sigma' - \sigma'_L)/\omega\epsilon_0$  е известна като диелектрични загуби, а  $\tau$  има смисъл на релаксационна константа. Теорията обяснява разликата  $\Delta\epsilon' = \epsilon'_L - \epsilon'_\infty$  с диполната поляризация. Молекулите се разглеждат като взаимодействащи сферични частици във вискозна среда. Тяхната ориентация в променливото външно електрично поле

среща противодействието на топлинното движение и междумолекулните сили. Лесно се вижда, че, както и в случая на импеданса, зависимостта на имагинерната  $\epsilon''$  от реалната част  $\epsilon'$  представлява полуокръжност с радиус  $\frac{1}{2}\Delta\epsilon'$  (фиг. 9). Едно по-късно полуемпирично доусъвършенстване на модела, направено от Коул и Коул [6], включва и СРЕ в еквивалентната схема, така че горният израз се превръща в

$$\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon'' = \epsilon'_\infty + \frac{\epsilon'_L - \epsilon'_\infty}{1 + (i\omega\tau)^{1-\alpha}}$$

При това положение на диаграмата в равнината  $(\epsilon', \epsilon'')$  центърът на полуокръжността ще бъде отместен на ъгъл  $\alpha\pi/2$  под абцисата. В зависимост от характера на изследването, понякога се оказва по-информативно данните да се представят чрез комплексната проводимост, чиято имагинерна част се дава с изказа

$$\sigma'' = (\epsilon' - \epsilon'')\omega\epsilon_0.$$



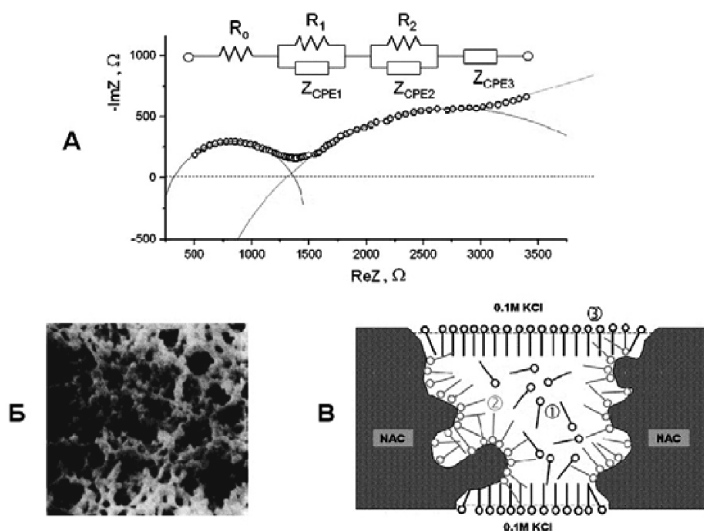
Фиг. 9. Диаграма на Коул-Коул (Cole-Cole) за двете части на диелектричната проникваемост

Тук е мястото да напомним, че (на всичкото отгоре) в общия случай на анизотропна среда диелектричната проникваемост е тензор от втори ранг с компоненти  $\epsilon_{ij}$ , задаващи връзката между векторите на електричното поле  $\mathbf{E}$  и индукцията  $\mathbf{D}$  [7]:

$$D_i = \sum_j \epsilon_{ij} E_j.$$

Намирането на адекватен модел, който задоволително да обяснява експерименталните резултати, получени с помощта на електрохимичната импедансна спектроскопия (EIS), не винаги е лесна задача. Данните от измерването на импеданса трябва да се напасват с подходяща еквивалентна схема.

За тази цел има разработени програми, осигуряващи тяхната комплексна апроксимация (едновременно и на реалната и на имагинерната част). Еквивалентната схема сама по себе си обаче не е в състояние да отговори еднозначно на въпроса какви са конкретните механизми и структури, лежащи в основата на модела (напр. фиг. 10).



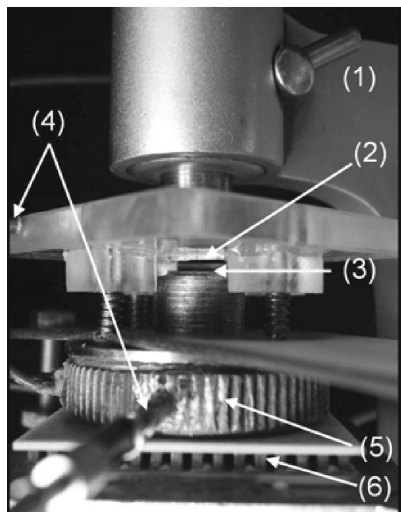
**Фиг. 10.** Импедансно изследване на нитроацетатцелузна (NAC) филтърна мембрана, импрегнирана с лецитин.  $R_0$  е съпротивлението на разтвора (0,1M KCl), в който е потопена мембраната. (A) Диаграма на Найкуист (по данни на Е. Матсаридиζ); (Б) електронно-микроскопска снимка на порите в мембраната; (В) хипотетично разпределение на молекулите в липидната фаза, което би могло да обясни трите вида импедансно поведение

Във всички случаи са необходими допълнителни съображения за изясняване на неговата физическа същност. Ето защо проблемът значително се опростява, когато е налице информация от източници, независими от електрохимичния експеримент.

### 3. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА УСТАНОВКА И ИЗПОЛЗВАНИ МАТЕРИАЛИ

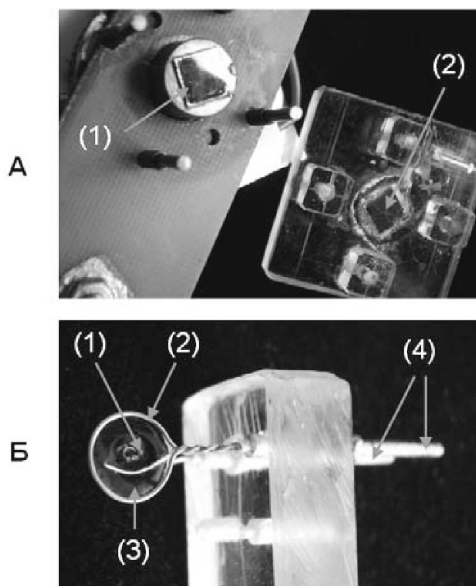
За измерване на импеданса на липидните филми върху твърдотелна подложка беше изработена и сглобена експерименталната установка, показана на фиг. 11. Тя е съставена от следните възли – микрометрично устройство за установяване на разстоянието между подложките-електроди (1); работни електроди (2, 3), свързващи се с измервателното устройство чрез иглени

конектори (4); пелтие-елемент (6) за поддържане на температурата на филмите. Електродите са монтирани върху държател (5). В долния електрод, контактуващ с пелтие-елемента, е вградено термосъпротивление за следене на температурата на подложките.



**Фиг. 11.** Снимка на експерименталната установка за изследване на импеданса на липидни филми върху твърда подложка: 1) микрометър; 2) горен работен електрод; 3) долен работен електрод; 4) иглени („pin“) конектори; 5) държател за долния електрод (месинг); 6) пелтие-елемент

В тази установка като твърдотелни подложки-електроди се използват силициеви заготовки от полупроводникови MOS ( $\text{Si}/\text{SiO}_2$ ) структури, които имат златно покритие от едната страна (фиг. 12А). Върху това покритие се отлагат липидните филми. При изследване на импеданса на пенните липидни филми е използвана електрохимичната клетка, показана на фиг. 12Б. Нейните два електрода са изработени от неръждаема стоманена жица (Krupp Dental, Germany), като единият е кръгъл, с формата на пръстен, а другият има Г-образна форма, която влиза в центъра на кръга (т.е. на пенния филм след образуването му). Свързването на всички електроди към измервателното устройство се извършва чрез позлатени pin-конектори тип Amphenol ( $\text{Ø } 1,5 \text{ mm}$ ).



**Фиг. 12.** Снимка на използваните в работата електроди. (А) MOS пластинки със златно покритие, прикрепени към съответните държатели: 1) горен електрод; 2) долен електрод. (Б) Електроди за измерване на импеданса на пенни филми: 1) централен Г-образен електрод; 2) периферен кръгъл електрод; 3) пенен филм; 4) иглени конектори

Липидните филми, с които е работено в нашето изследване, се получават от естествен лецитин с растителен произход (Lecithin, „Walmark Co. Ltd.“, Czech Republic). Той се разтваря в нормален хексан (n-Hexan,  $C_6H_{14}$ , „Merck KG&A“, Germany) до концентрация от 20 mg/ml. За приготвяне на смесените пенни филми като детергент е използван натриев додецил сулфат ( $CH_3(CH_2)_{10}OSO_3Na^+$ , NaDoS, SDS, „Merck KG&A“, Germany).

#### 4. МЕТОД НА ИЗМЕРВАНЕ. РЕЗУЛТАТИ И ОБСЪЖДАНЕ

Подходът за изследване на електричните свойства на химични и биологични образци, предлаган в тази работа, дава възможност да се измерва с висока точност импедансът на RLC-вериги и е изграден върху проста, евтина и широко достъпна схема. Реализиран е чрез стандартна стерео звукова компютърна платка, базирана на „ALC861-GR“ (16 битов АЦП-ЦАП (A/D-D/A) преобразувател с до 96 kHz честота на извадката) [8] плюс схема с двоен операционен усилвател LM358 за поддържане на висок входен импеданс.

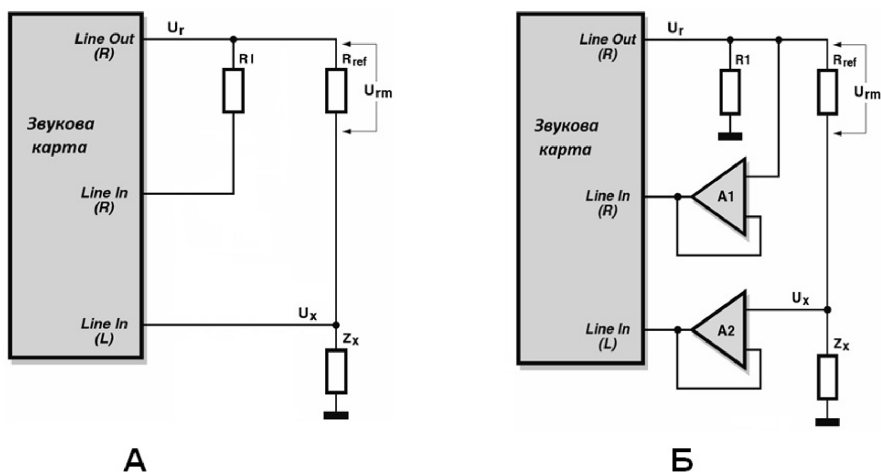
Методът на измерване се основава на следния принцип. Единият от двата изходни канала (десният) на звуковата карта подава синусоидален сигнал

към делителя на напрежение, състоящ се от сравнителен резистор  $R_{\text{ref}}$  и изследвания импеданс  $Z_x$ . Вторият изходен канал (левият) не се използва. По-средством двата входни канала се измерват двете напрежения  $U_{\text{rm}}$  и  $U_x$ . По принцип е възможно напрежението, приложено върху  $R_{\text{ref}}$ , да се разглежда като пропорционално на напрежението, което подава програмата през изхода. На практика обаче звуковата карта притежава латентност между командата за подаване на сигнал от програмата и изработването на сигнала. Този проблем се решава елегантно, като се използват левият и десният вход на картата.

В нашата работа за отчитане на данните от входовете на звуковата карта е използвана програмата PhysLab 5.0 с автор С. П. Палто, Москва, Институт кристаллографии [9]. Тази програма представлява виртуален осцилоскоп, използващ компютърната звукова карта за регистрация на сигнала от нейния вход и изход. Преди всичко PhysLab е предназначена за изследвания, използващи фазово чувствителни измервания. Основните „уреди“, които използвахме от програмата, и техните характеристики са:

- Нискочестотен двуканален осцилоскоп (Oscilloscope) с макси-мална честота на дискретизация на входния сигнал 96 kHz.
- Синхронен детектор (Lock-In), предназначен за синхронно отчитане на честотата, амплитудата и фазата на периодични сигнали до 5 V. Сумарната нелинейност от дискретизацията на сигнала е не повече от 0,01%. Динамичният диапазон на измервания опорен сигнал е от 2 mV до 5 V. Честотният диапазон на измервания опорен сигнал е от 20 Hz до 48 kHz.
- Управляем генератор на сигнал (VF-scanner). Генерира синусоидални сигнали. Сигналят може да бъде генериран едновременно по два канала, като единият може да се използва в качеството на опорен сигнал. Ако VF-scanner се използва заедно с Lock-In, това дава възможност да се изследват амплитудно-честотните характеристики на физични обекти.

Като първоначална идея беше реализирана следната проста схема (която условно ще наричаме V1), чиято блок-схема е показана на фиг. 13А. Отношението между падовете на напреженията върху сравнителното съпротивление  $R_{\text{ref}}$  и образеца  $Z_x$  и фазата между тях са ключовите параметри за пресмятане на импеданса. Падът  $U_r$  върху последователно свързаните  $R_{\text{ref}}$  и  $Z_x$  (който е равен на изходното от картата напрежение) съдържа пада  $U_x$ , определящ се от импеданса на образеца. Чрез разликата в нивата на напрежението  $U_{\text{rm}}$  върху сравнителния резистор и напрежението  $U_x$  върху образеца и фазовата разлика между двата сигнала става възможно да се определи импедансът на изследвания образец.



**Фиг. 13.** Блок-схема на устройството за измерване на импеданса. (А) Вариант V1, в който се използват директно входовете на звуковата карта. (Б) Вариант V2, в който е добавена схема с операционни усилватели за поддържане на високо входно съпротивление

Тъй като в процеса на тестване бяха получени някои незадоволителни, несъвпадащи с теорията резултати, се наложи да се изработи допълнителна схема с двоен операционен усилвател LM358 за поддържане на висок входен импеданс. Като резултат бе сглобено устройството V2 (чиято блок-схема е показана на фиг. 13Б), чрез което вече може да се измери с по-висока точност импедансът на различни RLC- вериги. Съпротивлението  $R_1$  задава изхода на звуковата карта спрямо земята. Двата операционни усилвателя, вградени в един корпус (всеки с усилване единица) действат като буфер с висок входен и нисък изходен импеданс. Синусоидалното напрежение  $U_r$  (идващо от изхода на звуковата карта), което се подава на образеца, се измерва посредством десния входен канал. Падът на напрежение върху образеца  $U_x$  се измерва посредством левия входен канал. Захранващото напрежение на операционния усилвател се поддържа ниско до 3,3 V с цел предпазване на звуковата карта от повреди. Точността на измерването зависи от това, доколко точно е определена стойността на  $R_{ref}$ .

Принципът на действие на вариант V2 е същият като предишния. Отново разликата в нивата на напрежението  $U_r$  върху сравнителния резистор и напрежението  $U_x$  върху образеца и фазовата разлика между двата сигнала дава възможност да се определи импедансът на изследвания образец. Имат се предвид следните прости формули:

$$U_x = I_{ref} \cdot Z_x = \frac{U_{rm}}{R_{ref}} \cdot Z_x,$$



$$\text{където } U_{rm} = U_r - U_x.$$

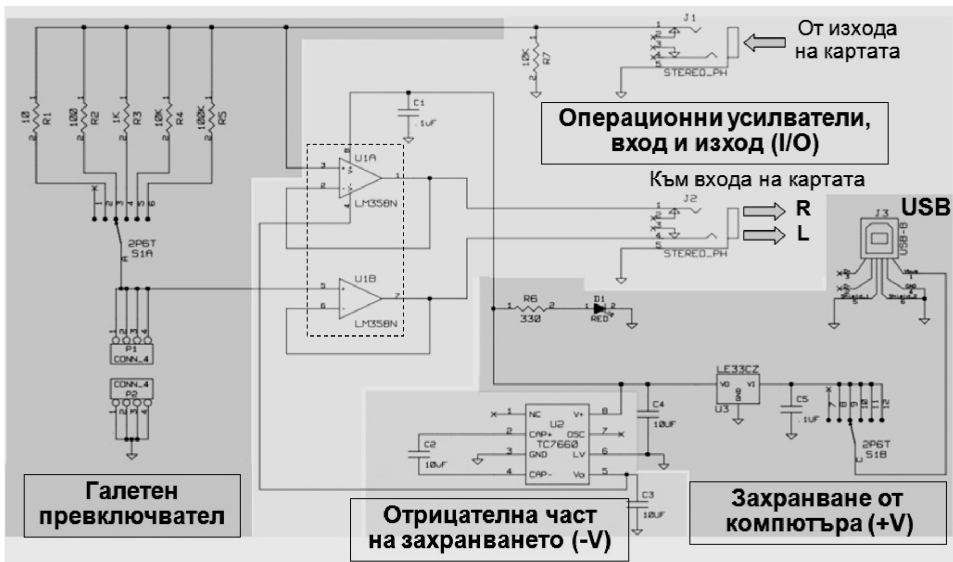
В крайна сметка можем да запишем

$$U_{rm} = A.\sin(\omega t)$$

и

$$U_x = A.\sin(\omega t + \varphi)$$

Електрическата схема на предусилвателя от вариант V2 е показана на фиг.14. В нея операционният усилвател LM358 се захранва с напрежение до  $\pm 3,3\text{V}$ . Напрежението не бива да надвишава тази стойност, тъй като е възможно да бъде повредена звуковата карта. За осигуряване на това напрежение схемата се свързва към  $+5\text{V}$ -ата линия на USB порта на компютъра, след което чрез регулатора на напрежение LE33CZ то се понижава до  $+3,3\text{V}$ . Конверторът на напрежение TC7660 преобразува напрежението  $+3,3\text{V}$  в напрежение  $\pm 3,3\text{V}$ . Галетният превключвател служи за избор на съпротивлението  $R_{\text{ref}}$ . Монтиран е и светодиодиод за указване дали схемата е в работно положение.

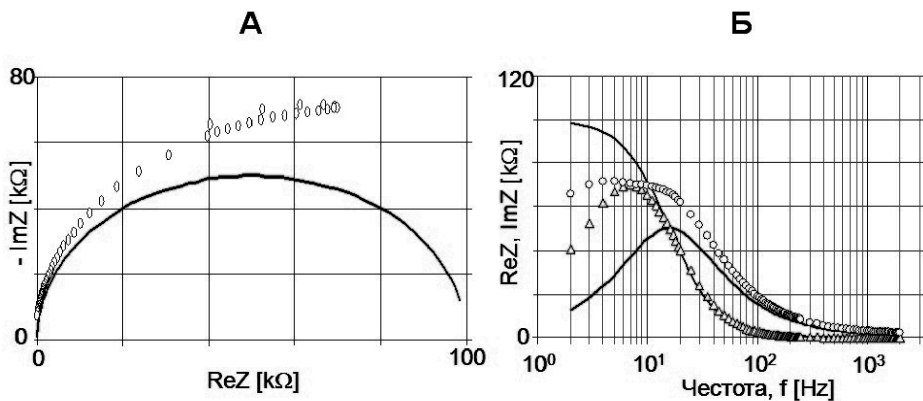


Фиг. 14. Електрическа схема на предусилвателя и захранването му

Както казахме, най-напред бяха проведени серия измервания, при които сигналът беше подаван директно на звуковата карта (или т.нар. вариант V1). Като репрезентативна извадка по-надолу са показани резултатите

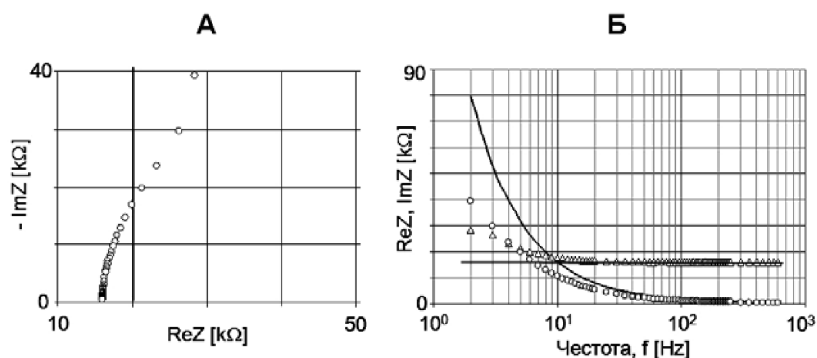
от някои измервания на успоредно и последователно свързани стандартни електронни елементи – съпротивления и кондензатори, независещи от честотата. Резултатите са дадени във вид на импедансни диаграми съответно на Найкуист (зависимост на  $-\text{Im}Z$  от  $\text{Re}Z$ ) и Боде (зависимост на  $\text{Re}Z$  и  $\text{Im}Z$  от честотата  $f$ ). Този начин на представяне изглежда най-удобен за целите на нашето изложение, тъй като дава възможност за бързо ориентиране в поведението на импеданса.

На фиг. 15 са дадени резултатите от измерването на импеданса на успоредно свързани  $R_p = 100 \text{ k}\Omega$  и  $C_p = 100 \text{ nF}$  със сравнително съпротивление  $R_{\text{ref}} = 9,83 \text{ k}\Omega$  (определено с омметър G-1004.501, производство на бившата ГДР). Въпреки че диаграмите в общи линии запазват характерната форма за този тип свързване (срв. фиг.4, 5), вижда се голямото несъответствие и за двете диаграми между експерименталните и теоретичните стойности.



**Фиг. 15.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за успоредно свързани  $R_p = 100 \text{ k}\Omega$  и  $C_p = 100 \text{ nF}$  измервани по схема VI. Експерименталните данни са показани с маркери ( $-\text{Im}Z(\text{Re}Z)$ : $\circ$ ,  $\text{Re}Z(f)$ : $\circ$ ,  $\text{Im}Z(f)$ : $\triangle$ ), а теоретично пресметнатите стойности – с непрекъснати криви

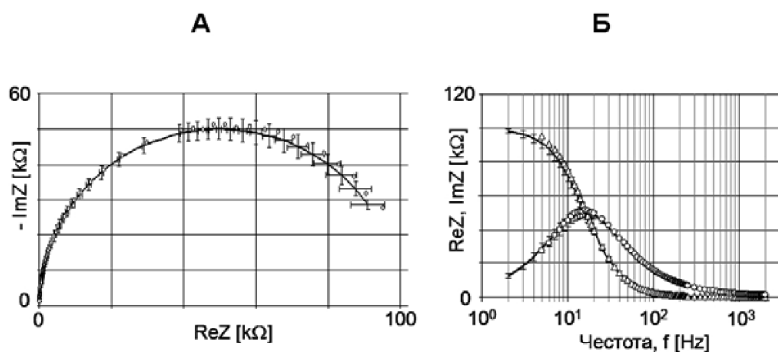
Не е по-добро положението и с другите модели. При последователно свързани  $R_s = 20 \text{ k}\Omega$  и  $C_s = 1 \text{ }\mu\text{F}$  (срв. фиг. 6) се получават резултатите, дадени на фиг.16. Несъответствието е по-силно изразено в ниските честоти, като стойностите за  $\text{Re}Z$  са завишени, а тези за  $\text{Im}Z$  са занижени, което води до сигмоидалния вид на Найкуист-диаграмата (фиг. 16А), която в този случай трябва да бъде права линия.



**Фиг. 16.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за последователно свързани  $R_s = 20 \text{ k}\Omega$  и  $C_s = 1 \text{ }\mu\text{F}$  измервани по схема V1. Експерименталните данни са показани с маркери  $(-\text{Im}Z(\text{Re}Z))$ : $\circ$ ,  $\text{Re}Z(f)$ : $\circ$ ,  $\text{Im}Z(f)$ : $\triangle$ , а теоретично пресметнатите стойности – с непрекъснати криви

Очевидно е, че и при двата вида свързване отклонението от истинските импедансни криви е много голямо. Ето защо в тези случаи не сметохме за нужно да дадем грешката в цифров вид.

Представените по-долу измервания имат за цел да се сравнят резултатите, получени с използване на съгласуващия предусилвател (схема V2) с тези от предишния параграф. Най-напред е измерена комбинация от успоредно свързани съпротивление и кондензатор със същите стойности  $R_p = 100 \text{ k}\Omega$  и  $C_p = 100 \text{ nF}$  като на фиг. 15.

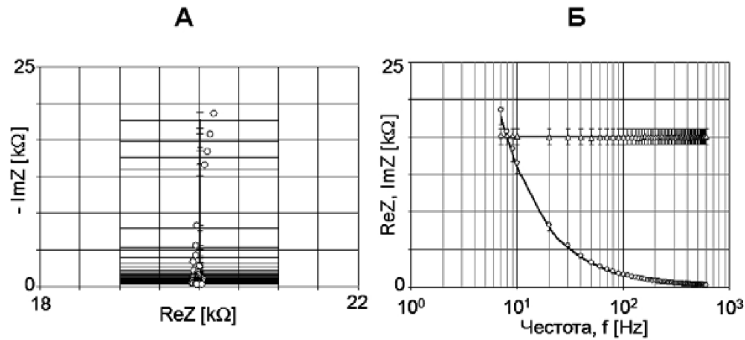


**Фиг. 17.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за успоредно свързани  $R_p = 100 \text{ k}\Omega$  и  $C_p = 100 \text{ nF}$ . Измерванията стават по схема V2. Експерименталните данни са показани с маркери  $(-\text{Im}Z(\text{Re}Z))$ : $\circ$ ,  $\text{Re}Z(f)$ : $\circ$ ,  $\text{Im}Z(f)$ : $\triangle$ , а теоретично пресметнатите стойности – с непрекъснати криви

Много по-доброто представяне на устройството при наличието на съгласуващ предусилвател е очевидно. Независимо от това, тук е дадена и

грешката, дължаща се на вариацията в  $R$ - и  $C$ -елементите. Тя е изчислявана при предположение за отклонение от 5% в стойностите на съпротивленията и кондензаторите. Както се вижда, получените резултати са доста под рамките на грешката.

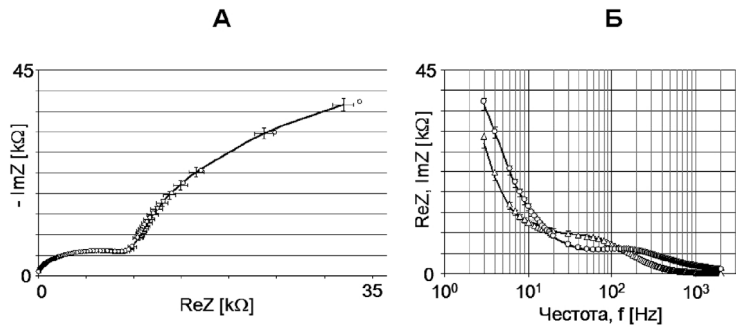
Следващата серия представя измерване на същата комбинация от последователно свързани  $R_s = 20 \text{ k}\Omega$  и  $C_s = 1 \text{ }\mu\text{F}$ , както на фиг. 16.



**Фиг. 18.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за последователно свързани  $R_s = 20 \text{ k}\Omega$  и  $C_s = 1 \text{ }\mu\text{F}$ . Измерванията стават по схема V2. Експерименталните данни са показани с маркери ( $-\text{Im}Z(\text{Re}Z)$ : $\circ$ ,  $\text{Re}Z(f)$ : $\circ$ ,  $\text{Im}Z(f)$ : $\triangle$ ), а теоретично пресметнатите стойности – с непрекъснати криви

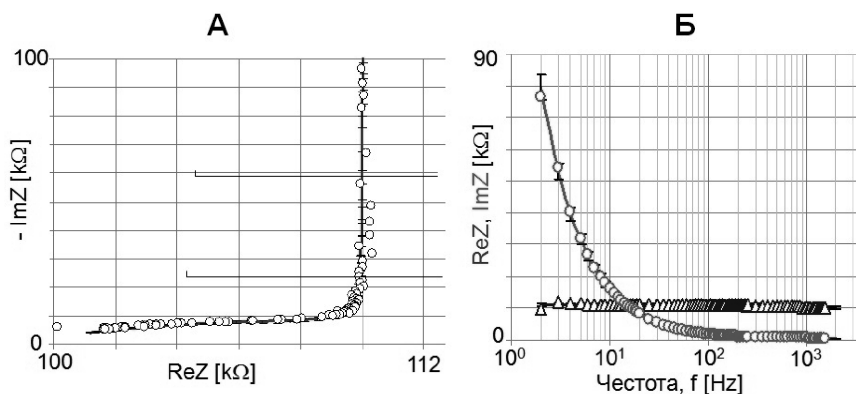
Тук отново се наблюдава извънредно надеждното действие на измерителното устройство. На графиката на фиг. 18А скалата по X е разтегната и затова отсечките на грешката изглеждат по-големи.

С усложняване на моделните схеми за измерване чрез добавянето на допълнителни елементи точността остава в същите граници. Това е категорично демонстрирано на следващите две фигури (фиг. 19, 20).



**Фиг. 19.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за комбинация от два последователни  $RC$ -кръга, в които  $R_{p1} = 10 \text{ k}\Omega$ ;  $C_{p1} = 100 \text{ nF}$  и  $R_{p2} = 100 \text{ k}\Omega$ ;  $C_{p2} = 1 \text{ }\mu\text{F}$

Данните, получени от измерването на два последователни  $RC$ -кръга почти напълно съвпадат с теоретичните изчисления (фиг. 19). Това, че втората полуокръжност не може да бъде записана цялата, се дължи на обхвата на звуковата карта, който за тези стойности на  $RC$ -комбинацията се оказва недостатъчен в ниските честоти.



**Фиг. 20.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за комбинация от един  $RC$ -кръг (с  $R_p = 10 \text{ k}\Omega$ ;  $C_p = 22 \text{ nF}$ ) и последователно свързани с него  $R_s = 100 \text{ k}\Omega$  и  $C_s = 100 \text{ nF}$

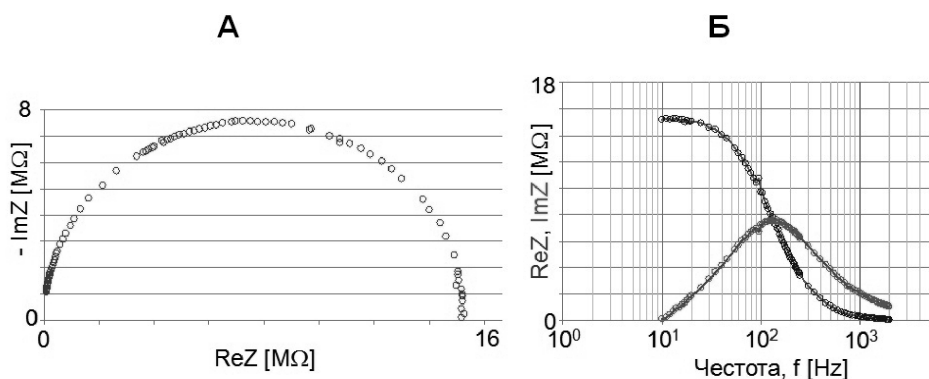
Също много добри резултати се получават и при използване на комбинация от един  $RC$ -кръг и последователно свързани с него  $R_s$  и  $C_s$  (срв. фиг. 7). Съответните импедансни диаграми са показани на фиг. 20. За да не се претрупва графиката, в диаграмата на Найкуист (фиг. 20А) са дадени само две отсечки на грешката по  $X$ . Също така, за по-голяма яснота на фиг. 20В скалата по  $Y$  е разтеглена, за да се види по-отчетливо характерната за този тип свързване част от окръжност във високите честоти.

Тъй като устройството е конструирано с основната идея да бъде използвано за изследване на различни мембранни аналози, естествено бяха правени измервания на някои липидни моделни системи. В нашата работа сме се ограничили до два типа от тях, които се различават съществено както по структура, така и по свойства.

Първо ще представим резултатите от липидните филми върху подложка. Те се получават с нанасяне на разтвор от лецитин в нормален хексан с концентрация  $20 \text{ mg/ml}$  върху златната повърхност на електродите. Като най-презентативни, демонстриращи възможностите на измерителното устройство, са показани зависимостите на импедансните диаграми от дебелината на филмите (т.е. от разстоянието между електродите). Веднага е редно да кажем, че става дума за много “дебели” филми. Те съществено се различават по вътрешна структура и свойства от тънките течни филми [10], които

могат да достигнат и до мономолекулни слоеве. Използваните тук филми трябва да се разглеждат по-скоро като хомогенни и изотропни, съставени от обемен разтвор. Разбира се, те също притежават и адсорбирана към металните електроди мономолекулна компонента, но нейният импеданс не може да бъде регистриран на “фона” на обемната част. В случая обаче е по-важно, че устройството може задоволително да работи в течна среда с ниска диелектрична проникваемост (за липидите  $\epsilon \approx 2$ ). Освен това тези филми са интересни и от практическа гледна точка, тъй като са свързани с проблемите на смазване на металните повърхности [11]. Такива са например някои части от двигателите с вътрешно горене, които работят на по-високи натоварвания.

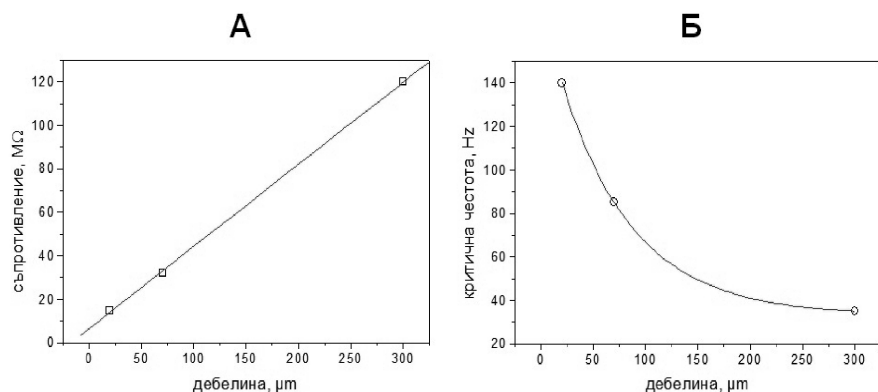
По-долу е изследвана зависимостта на импеданса от дебелината на филмите. Получени са двата вида импедансни диаграми за три дебелини на липидните филми – 20, 70 и 300  $\mu\text{m}$ . На фиг. 21 са показани резултатите за 20  $\mu\text{m}$ . За останалите дебелини формата на кривите е аналогична.



**Фиг. 21.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за липиден филм с дебелина 20  $\mu\text{m}$

От характерната форма на диаграмите и за трите дебелини може да се извади заключение, че най-удобен еквивалентен  $RC$ -модел за описание на импеданското поведение е простата схема на успоредно свързани съпротивление и кондензатор (фиг. 4, 5). Известно е, че в този случай съпротивлението  $R_p$  може да бъде намерено от диаграмата на Найкуист, тъй като тя представлява допирателна към ординатата полуокръжност с център върху абсцисата и радиус  $R_p/2$ . Така за стойностите на това съпротивление при трите различни дебелини на филмите се получават 15  $M\Omega$ , 32  $M\Omega$  и 120  $M\Omega$ , съответстващи на 20, 70 и 300  $\mu\text{m}$  респективно. Тези стойности звучат много правдоподобно, като се вземе предвид, че удовлетворяват една почти идеална линейна зависимост на  $R_p$  от дебелината (фиг. 22А), както би трябвало да се очаква. Друг интересен резултат е експоненциалната зависимост на

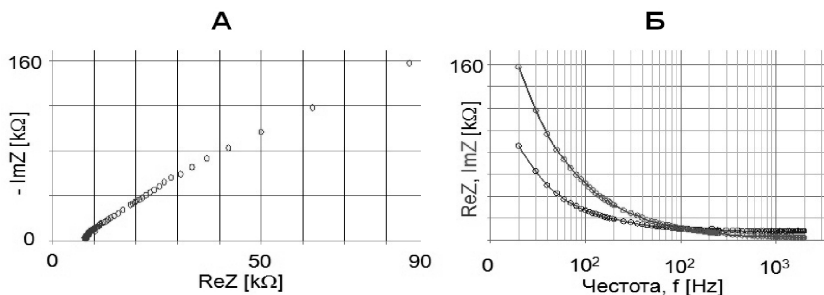
критичната честота  $f_c$  (отговаряща на пресечната точка на реалната и имагинерната част на импеданса в диаграмата на Боде) от дебелината (фиг. 22Б), който за момента обаче ще се въздържим да дискутираме.



**Фиг. 22.** Зависимост на еквивалентното паралелно съпротивление  $R_p$  (А) и критичната честота  $f_c$  (Б) от дебелината на липидните филми

Както казахме, за тези дебелини на филма поведението на импеданса се доминира от  $R_p C_p$ -модела на „обемната” фаза. С използваната тук конфигурация електроди не сме в състояние да постигнем по-тънки филми, каквито са наблюдавани в работа [12], където са използвани електроди от полирани месингови повърхности с леко сферична форма.

Втория пример, който ще дадем, касае импеданса на пенни филми. Обикновено те се образуват чрез изтъняването на течна прослойка от разтвор на детергент, която се намира във въздушна среда [13]. Добре известно е, че този тип филми в крайното си равновесно положение представляват бислой, в който амфифилните молекули са ориентирани с хидрофилните глави навътре, към водната фаза (евентуално съдържаща електролит), и с въглеродородните вериги навън, към газовата фаза. В нашия случай пените филми са смесени, т.е. освен детергент съдържат и липид. Те са получавани с добавянето на воден разтвор (0,1KCl) на натриев додецил сулфат (SDS) към основния липиден формиращ разтвор. Смесването на двата разтвора е възможно поради отмиващото действие на детергента [14, 11].



**Фиг. 23.** Импедансни диаграми на Найкуист (А) и Боде (Б) за смесен детергент-липиден филм

Заслужава да отбележим, че в литературата се срещат импедансни измервания на пенни филми, повечето от които обаче са изградени само от детергент [15, 16]. Освен това тези изследвания са с чисто фундаментална физикохимична насоченост. Ето защо не е странно, че нашите резултати не съвпадат с получените в цитираните работи. За това могат да се изтъкнат най-малко две основни причини: 1) както споменахме, нашите филми освен детергент съдържат и липид, който драстично променя както структурата на филма, така и диелектричната му проницаемост; 2) в цитираните работи за измерване на импеданса е използвана професионална, скъпо струваща апаратура с много по-широк обхват на честотите. Естествено, биха могли да се добавят и редица други различия в условията на експеримента. В случая за нас е от значение изобщо възможността да се провеждат такъв род измервания с конструираното просто устройство, което имаме на разположение.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Целта на настоящата работа беше да се намери сравнително евтино и просто техническо решение за изследване на моделни мембранни системи с използването на методи, базиращи се върху концепцията за импеданса. Изпълнението на поставените задачи доведе до конструирането на устройство, състоящо се от звуковата карта на РС и съгласуващ предусилвател, способно да измерва импеданса на различни химични системи със задоволителна точност. Неговото софтуерно обезпечаване се осигурява от програмата PhysLab5.0, разработена от Палто за трансформиране на звуковата карта в редица виртуални физични уреди, като генератор на сигнали, осцилоскоп, фазово чувствителен детектор и т.н. Проведените тестови измервания на прости еквивалентни електрични модели показаха, че експериментално получените данни се напасват с теоретичните в рамките на грешката за стойно-



стите на електронните елементи. От друга страна, изследването с помощта на описаното устройство на някои липидни системи дава резултати, които качествено се вписват в очакванията за поведението на техния импеданс. Нещо повече, в случая на липидни филми върху подложка намереното еквивалентно успоредно съпротивление  $R_p$  удовлетворява изискването за линейно нарастване с дебелината на филмите. В крайна сметка, получените експериментални резултати дават основание да се направи недвусмислено заключение за надеждността на проектираното и изработено устройство за изучаване на импеданса на различни химични и биологични образци. То може с успех да бъде използвано както за научна дейност, така и за нуждите на лабораторния студентски практикум. Като се има предвид, че то практически не е сложно за реализиране и цената му е пренебрежима, не е трудно да си представим, че е възможно да се окаже едно ценно помагало за редица лаборатории.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Alberts, B., A. Johnson, D. Bray, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter. *Molecular Biology of the Cell*, 4th ed. New York, 2002.
- [2] Mouritsen, O. *Life as a Matter of Fat. The emerging science of lipidomics*. Springer Verlag, Heidelberg, 2005.
- [3] Yudin, S. G., L. M. Blinov, V. V. Lazarev, S. P. Palto. Distribution and amplification of an electric field in ferroelectric-dye heterostructures. *Physics of the Solid State*, 2012, Volume 54, Issue 5, pp 940–944.
- [4] Bard, A. J., L. R. Faulkner. *Electrochemical methods: Fundamentals and applications*, 1st ed., 717 pp. John Wiley & Sons, New York, 1980.
- [5] Debye, P., E. Hückel (1923). Zur Theorie der Elektrolyte. I. Gefrierpunktserniedrigung und verwandte Erscheinungen. – *Physik. Z.*, **24**: 185–206.
- [6] Cole, K. S., R. H. Cole (1941), Dispersion and Absorption in Dielectrics. I. Alternating Current Characteristics. – *J. Chem. Phys.*, **9**: 341–351.
- [7] Ландау, Л. Д., Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*. Москва, Наука, 1982.
- [8] 7.1 Channel High Definition Audio Codec Trac ID: *JATR-1076-21 Rev. 1.3*.
- [9] Palto, S. Doctoral Dissertation (Inst. Kristallogr. Ros. Akad. Nauk, Moscow, 1998).
- [10] Karabaliev, M., V. Kochev (1993). Glassy carbon as a solid substrate for thin liquid film based sensors. – *Anal. Lab.*, **2**(2): 88–97.
- [11] Адамсон, А. *Физическая химия поверхностей*. Москва, Мир, 1979.
- [12] Karabaliev, M. (2001). Formation and investigation of solid supported thin liquid films of lipids. Possibilities for development of sensor elements, Ph.D. thesis, University of Sofia.
- [13] Ежерова, Д., Р. М. Kruglyakov. *Foam and Foam Films*, pp. 773. Elsevier, Amsterdam, 1998.
- [14] Шелудко, А. *Колоидна химия*. София, Наука и изкуство, 1966.
- [15] Yaros, H. D., J. Newman, and C. J. Radke (2003). Evaluation of DLVO theory with disjoining-pressure and film-conductance measurements of common-black films stabilized with sodium dodecyl sulphate. – *J. Colloid Interface Sci.*, **262**: 442–455.
- [16] Kostoglou, M., E. Georgiou, and T. D. Karapantsios (2011). A new device for assessing film stability in foams: Experiment and theory. – *Colloid Surf. A: Physicochem. Eng. Aspects*, **382**: 64–73.

## НЯКОИ КРУПНОМАЩАБНИ ЕФЕКТИ, СВЪРЗАНИ С ХОРИЗОНТАЛНИ ТЕРМИЧНИ НЕЕДНОРОДНОСТИ В АТМОСФЕРНИЯ ГРАНИЧЕН СЛОЙ

ЕВГЕНИ СИРАКОВ, ЙЕНС БОНЕВИЦ

*Катедра „Метеорология и геофизика“  
Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“*

*Евгени Сираков, Йенс Боневитц.* НЯКОИ КРУПНОМАЩАБНИ ЕФЕКТИ, СВЪРЗАНИ С ХОРИЗОНТАЛНИ ТЕРМИЧНИ НЕЕДНОРОДНОСТИ В АТМОСФЕРНИЯ ГРАНИЧЕН СЛОЙ (АГС)

Наред с орографията  $z_0(x,y)$ , термичните хоризонтални нееднородности  $\delta\theta(x,y) = \theta_{top} - \theta_0(x,y)$  в АГС оказват съществено влияние върху крупномашабните атмосферни процеси. Показано е, че тези ефекти се параметризират чрез два основни безразмерни параметъра – планинско число на Росби  $\tilde{R}_0(x,y)$  и обобщен интегрален параметър на стратификация  $\tilde{S}(x,y)$ . На тази основа и климатични карти за  $\delta\theta(x,y)$  са установени някои крупномашабни корелационни връзки между осите на „ $\delta\theta$ -топографията” и основни фронтални климатични процеси в атмосферата.

*Evgeni Syrakov, Jens Bonewitz.* SOME LARGE SCALE EFFECTS, RELATED TO HORIZONTAL THERMAL NONHOMOGENEITIES IN THE ATMOSPHERE BOUNDARY LAYER (ABL)

Together with the orography  $z_0(x,y)$ , the thermal horizontal nonhomogeneities  $\delta\theta(x,y) = \theta_{top} - \theta_0(x,y)$  in the ABL exert significant influence on large scale atmospheric processes. It is shown that these effects are parameterized through two main dimensionless parameters – the mountain number of Rossby  $\tilde{R}_0(x,y)$  and the generalized integral parameter of stratification  $\tilde{S}(x,y)$ . On this base and climatic maps for  $\delta\theta(x,y)$  are determined some large scale correlation correspondences between the axes of “ $\delta\theta$ -topography” and main frontal climatic processes in the atmosphere.

**Keywords:** integral coefficient of turbulent exchange induced vertical velocity, orographic-thermal nonhomogeneities, surface friction, baroclinity, climatic fronts.

**PACS number:** 92.60 ± e

---

*За контакти:* Евгени Сираков, Катедра „Метеорология и геофизика“, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучер“ 5, 1164 София, тел.: +359 2 8161-312, E-mail: esyrakov@phys.uni-sofia.bg

## 1. УВОД

Известно е, че хоризонталните нееднородности съвместно с триенето оказват съществено влияние върху атмосферните процеси в синоптичен мащаб. Наред с орографията трябва да бъдат отчетени и други по тип хоризонтални нееднородности – термични, влажностни и бароклини ефекти. Въз основа на метод на интегрална параметризация в работата се определя средният коефициент на турбулентност и се въвежда обобщен параметър на хоризонтална нееднородност, обединяващ споменатите по-горе неорографски ефекти. Това позволява сложни взаимодействия на граничния слой със свободната атмосфера да се изразят във формат планинско число на Росби  $\tilde{R}$  и обобщен външен, термично влажностен бароклинен параметър на стратификация  $\tilde{S}$ .

Целта на работата е да се въведе на тази основа обобщен израз за вертикалната скорост на горната граница на атмосферата и да се направят някои сравнения с реални климатични данни.

## 2. ОСНОВНИ УРАВНЕНИЯ И ИНТЕГРАЛНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ

При изучаване на процесите над орографски и други нееднородности ще излезем от обичайната система уравнения, описваща динамиката на бароклинен, хоризонтално-нееднороден атмосферен граничен слой (АГС):

$$\frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial u}{\partial z} + f [v - v_g(z)] = N_x, N_x = u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial v}{\partial z} + f [u - u_g(z)] = N_y, N_y = u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \quad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3)$$

при обичайни гранични условия на долната граница (орографията) и горната граница  $H$  на АГС. Тук  $u, v, w$  са компоненти на скоростта,  $k_z$  – коефициент на вертикален турбулентен обмен,  $f$  – параметър на кориолис,  $u_g(z), v_g(z)$  – компоненти на геострофния вятър,  $u_g = u_{g0} + \lambda_x z$ ;  $v_g = v_{g0} + \lambda_y z$ ;  $\lambda_x, \lambda_y$  – размерни параметри на бароклиност;  $u_{g0}, v_{g0}$  – баротропни значения на  $u_g, v_g$  при земята. При баротропни условия ( $\lambda_x = \lambda_y = 0$ ) и в линейно приближение

( $N_x = N_y = 0$ ), замествайки  $u, v$ , изразени от (1) и (2) в (3), получаваме следния израз за  $w(z)$  в АГС:

$$w(z) = -\int_0^z D dz, \quad (4)$$

където дивергенцията  $D$  има вида

$$D = \frac{1}{f} \left( \nabla \times \frac{\partial \vec{\tau}}{\partial z} \right) = \frac{1}{f} \frac{\partial}{\partial z} \text{rot}_z \vec{\tau}. \quad (5)$$

Тук  $\nabla = (\partial / \partial x, \partial / \partial y)$ ,  $\vec{\tau} = (k_z \partial u / \partial z, k_z \partial v / \partial z)$  е вектор на напреженията на Рейнолдс.

При извода на (4) и (5) е отчетено, че  $k_z$  е произволна функция само на вертикалната координата  $z$ . В частния случай на Екманов граничен слой  $k_z = k = \text{const}$  от (4) следва (вж. [1])

$$w(z) = c \Omega_{g_0} \left[ 1 - e^{-az} (\sin az + \cos az) \right], \quad (6)$$

където  $\Omega_{g_0} = \partial v_{g_0} / \partial x - \partial u_{g_0} / \partial y$ ,  $c = \sqrt{2k / f}$  – коефициент на триене,  $a = \sqrt{f / 2k}$ .

От (6) за  $w_H$  на горната граница на граничния слой при  $z = H (z \rightarrow \infty)$  получаваме:

$$w(z = H) = c \Omega_{g_0} \cong w(\infty). \quad (7)$$

С отчитане и на чисто кинематичната скорост  $w_I$  на идеално обтичане на орографията  $z_0(x, y)$ , за сумарната скорост  $w_H$  на горната граница на Екмановия граничен слой получаваме израза

$$w_H = w_I + c \Omega_{g_0}, \quad (8)$$

където  $w_I$  е кинематичната скорост на идеално обтичане на орографията:

$$w_I = u_{g_0} \frac{\partial z_0}{\partial x} + v_{g_0} \frac{\partial z_0}{\partial y}. \quad (9)$$

Ще отбележим, че (8) представлява адитивен сбор от два независими фактора – чисто кинематичен ефект на обтичането и ефект на триенето.

Важно е да се отбележи, че и при  $k_z \neq \text{const}$ , но зависещ само от  $z$ , т.е.  $k_z = k_z(z)$ , остава в сила аналогична на (8) формула за  $w_H$ , с тази разлика, че за параметъра  $c$  се получава по-сложен израз. По-подробният анализ (вж. [2, 3]) показва, че нови допълнителни ефекти, извън съдържанието на формула

(8), могат да се получат само ако  $k_z$  зависи от хоризонталните координати  $x$  и  $y$ . Поради това величината  $\bar{k}(x, y) = (1/H) \int_0^H k_z dz$  играе основна роля при изучаване на споменатите допълнителни ефекти. Възниква основният въпрос за определяне вида на  $\bar{k}$ . Въз основа на метод на интегрална параметризация, базиран на уравнението на турбулентната кинетична енергия, явният вид на  $\bar{k}$  и височината  $H$  на стратифициран и бароклинен АГС се определя в [1, 4, 5]:

$$\bar{k} = k_0 \Phi^2, H = H_0 \Phi, \quad \Phi = \frac{1}{\sqrt{m\tilde{S}} + \sqrt{m\tilde{S}^2 + 1}}, \quad (10)$$

където

$$k_0 = 2m \frac{G_0^2}{f}, \quad \sqrt{m} = P_1 c_{g_0}; \quad H_0 = 2\pi \sqrt{m} \frac{G_0}{f} \quad (11)$$

са стойностите на  $\bar{k}, H$  и коефициента на съпротивление  $c_g = u_*/G_0$ , и баротропни условия,  $P_1 = 0,4$ . Обобщеният безразмерен параметър на стратификация  $\tilde{S}$  има вида

$$\tilde{S} \equiv \beta \delta \tilde{\theta} / f G_0 = S + S_1 + S_{\delta k}, \quad (12)$$

където  $S = \beta \delta \theta / f G_0$  е интегрален външен параметър на температурна стратификация,  $\delta \theta = \theta_H - \theta_0$  – дефект на температурата в АГС,  $S_1 = 0,6 g \delta q / f G_0$  – аналогичен интегрален параметър на стратификация на специфичната влажност  $q$ ,  $\delta q = q_H - q_0$  – дефект на специфичната влажност в АГС,  $G_0 = (u_{g_0}^2 + v_{g_0}^2)^{1/2}$  – модул на геострофния вятър при земята,  $\theta_0$  и  $q_0$  са съответно приземни стойности на потенциалната температура  $\theta$  и специфичната влажност  $q$ .  $S_{\delta k} = (-\pi/f)(\tilde{u}_{g_0} \eta_x + \tilde{v}_{g_0} \eta_y)$  е параметър на стратификация, обусловен от адвективни причини (бароклинност),  $\tilde{u}_{g_0} = u_{g_0}/G_0, \tilde{v}_{g_0} = v_{g_0}/G_0$ . Отчитайки (12), разкриваме вида на обобщения температурен дефект в АГС [1]:

$$\delta \tilde{\theta} = \delta \theta(x, y) + \alpha_1 \delta q + \alpha_2 \delta b \quad (13)$$

като адитивен сбор от въведените по-горе три фактора – термичен, влажностен и бароклинен,  $\alpha_1 = 0,6 g / \beta$ ,  $\alpha_2 = -\pi G_0 / \beta$ ,  $\delta b = u_{g_0} \lambda_x + v_{g_0} \lambda_y$ . Трите компоненти в (13) характеризират както вертикалната температурна стратификация, така и хоризонталната изменчивост на термичните, влажностните и адвективно-бароклинните хоризонтални нееднородности:

$$\delta\theta(x, y) = \theta_H - \theta_0(x, y), \quad \delta q = q_H - q_0(x, y), \quad \delta b = \delta b(x, y), \quad (14)$$

в които основен принос има приземната хоризонтална нееднородност. Над орографски терен  $z_0(x, y)$  коефициентът на съпротивление  $c_{g_0}$  в (11) зависи от планинското число на Росби  $\tilde{R}_0 = \frac{G_0}{fz_0(x, y)}$ , т.е.  $c_{g_0} = c_{g_0}(\tilde{R}_0)$ , чрез което се отчита и зависимостта на  $\bar{k}$  от орографията  $z_0(x, y)$ . По аналогия с орографията  $z_0(x, y)$  величината  $\delta\theta(x, y)$  може да бъде условно наречена „ $\delta\theta$ -топография” (и аналогично за  $\delta q(x, y)$ ). Вижда се, че най-общо  $\bar{k}$  зависи от четири типа хоризонтални нееднородности: термични, влажностни, адвективно-бароклини и орографски. Тъй като ефектите от първите три фактора са обединени в обобщения параметър  $\delta\tilde{\theta}$ , то в крайна сметка  $\bar{k}$  зависи от две основни хоризонтални нееднородности –  $\delta\tilde{\theta}(x, y)$  и  $z_0(x, y)$ , или, по-точно казано, от съответните безразмерни числа  $\tilde{S}$  и  $\tilde{R}_0$ , т.е.

$$\bar{k}(x, y) = \bar{k}[\tilde{R}_0(x, y), \tilde{S}(x, y)]. \quad (15)$$

Ще отбележим, че от формула (10) за  $H$  (при  $S_1 = S_{\delta k} = 0$ , т.е.  $\tilde{S} \equiv S$ ) като частни случаи следват някои широко известни формули. Така например при  $S = 0$  получаваме

$$H = H_0 = 2\pi\sqrt{m} \frac{G_0}{f}, \quad (16)$$

въведена от Гандин и Дубов, като тук сме определили и коефициента на пропорционалност в (16). При  $S = \infty$  (силна устойчивост) и  $S = -\infty$  (силна неустойчивост) от (10) следват като частни случаи широко известните формули

$$\begin{aligned} H &\sim G_0 / \beta\delta\theta \quad \text{при } S = \infty, \\ H &\sim \beta|\delta\theta| / f^2 \quad \text{при } S = -\infty, \end{aligned} \quad (17)$$

въведени от Хана-Лайхтман и Деардорф (вж. обзорната работа [6]).

### 3. ОБОБЩЕН ИЗРАЗ ЗА СИНОПТИЧНАТА ВЕРТИКАЛНА СКОРОСТ НАД ХОРИЗОНТАЛНО НЕЕДНОРОДЕН ТЕРЕН

Тук ще се интересуваме от общия случай на АГС при хоризонтално-нееднородни условия, когато са в сила (10), (14) и (15). Прилагайки в този случай метод, аналогичен на (4) и (5) в линейно ( $N_x = N_y = 0$ ) и нелинейно

$(N_x \neq N_y \neq 0)$  приближение, и задаването им в итерационно приближение чрез нулевото такова [1, 2], след редица преобразувания и пренебрегване на някои малки членове, получаваме следната обща формула за вертикалната скорост  $w_H$  на горната граница на АГС [1, 5] :

$$w_H = w_I + c \textcircled{g} + ''w \quad \Delta w = \Delta w_{\tilde{R}_0} + \Delta w_{\tilde{S}} + \Delta w_{\delta k} \quad (18)$$

където

$$\Delta w_{\tilde{R}_0} = a_{\tilde{R}_0} \left( u_{g0} \frac{\partial \tilde{R}_0}{\partial x} + v_{g0} \frac{\partial \tilde{R}_0}{\partial y} \right) + b_{\tilde{R}_0} \left( v_{g0} \frac{\partial \tilde{R}_0}{\partial y} - u_{g0} \frac{\partial \tilde{R}_0}{\partial x} \right) - d_{\tilde{R}_0} G_0^2 \left( \frac{\partial^2 \tilde{R}_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{R}_0}{\partial y^2} \right) \quad (19)$$

$$\Delta w_{\tilde{S}} = a_{\tilde{S}} \left( u_{g0} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial x} + v_{g0} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial y} \right) + b_{\tilde{S}} \left( v_{g0} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial y} - u_{g0} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial x} \right) - d_{\tilde{S}} G_0^2 \left( \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial y^2} \right) - e_{\tilde{S}} (u_{g0}^2 - v_{g0}^2) \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial x \partial y} \quad (20)$$

като

$$a_{\tilde{R}_0} = \frac{\partial c}{\partial \tilde{R}_0}, \quad b_{\tilde{R}_0} = \frac{\partial c}{\partial \tilde{R}_0}, \quad d_{\tilde{R}_0} = \frac{\sqrt{2}}{60} \frac{1}{f} a_{\tilde{R}_0}, \quad e_{\tilde{R}_0} = \frac{5}{2} d_{\tilde{R}_0}$$

$$a_{\tilde{S}} = \frac{\partial c}{\partial \tilde{S}}, \quad b_{\tilde{S}} = \frac{\partial c}{\partial \tilde{S}}, \quad d_{\tilde{S}} = \frac{\sqrt{2}}{60} \frac{1}{f} a_{\tilde{S}}, \quad e_{\tilde{S}} = \frac{5}{2} d_{\tilde{S}}$$

$$\Delta w_{\delta k} = -\frac{H}{\theta} \left( u_{g0} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} + v_{g0} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} \right). \quad (21)$$

Тук, в сравнение с (8), новите членове ( $w \neq 0$ ) описват влиянието на хоризонталните нееднородности при формиране на  $w_H$ .

Първите два члена в (19) и (20) описват линейни ефекти на взаимодействие на орографията и обобщените термични нееднородности с приземното триене, а последните два – съответните нелинейни ефекти, свързани с формата (лапласиани и смесени втори производни) на хоризонталните нееднородности. Членът (21) описва приноса на бароклинност във  $w_H$ . Членовете (19) и (20) отразяват новите ефекти  $\Delta w$  във формат  $(\tilde{R}_0 - \tilde{S})$ , т.е. зависят от конфигурацията и „формата” на тези два безразмерни параметъра.

Ще отбележим, че производните по  $x$  и  $y$  в (19) и (20) имат вида

$$\frac{\partial \tilde{R}_0}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{R}_0}{\partial Z_0} \frac{\partial Z_0}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{R}_0}{\partial G_0} \frac{\partial G_0}{\partial x}, \quad \frac{\partial \tilde{S}}{\partial x} \equiv \frac{\partial \tilde{S}}{\partial \delta\theta} \frac{\partial \delta\theta}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{S}}{\partial G_0} \frac{\partial G_0}{\partial x} \quad \text{и т.н.} \quad (22)$$

От общата формула (18) за  $w_H$  могат да бъдат получени редица частни случаи. Така например при пренебрегване на членовете, съдържащи  $\frac{\partial G_0}{\partial x}$  и  $\frac{\partial G_0}{\partial y}$ , при баротропни условия ( $\Delta w_{\delta k} = 0$ ,  $\delta k = 0$  и  $\delta q = 0$  (т.е.  $\delta\tilde{\theta} \equiv \delta\theta$ )) получаваме

$$\begin{aligned} \Delta w_{\tilde{R}_0} = \Delta w_{Z_0} = a_{Z_0} \left( u_{g0} \frac{\partial z_0}{\partial x} + v_{g0} \frac{\partial z_0}{\partial y} \right) + b_{Z_0} \left( v_{g0} \frac{\partial z_0}{\partial x} - u_{g0} \frac{\partial z_0}{\partial y} \right) \\ - d_{Z_0} G_0^2 \left( \frac{\partial^2 z_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_0}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \Delta w_{\tilde{S}} = \Delta w_{\delta\theta} = a_{\delta\theta} \left( u_{g0} \frac{\partial \delta\theta}{\partial x} + v_{g0} \frac{\partial \delta\theta}{\partial y} \right) + b_{\delta\theta} \left( v_{g0} \frac{\partial \delta\theta}{\partial x} - u_{g0} \frac{\partial \delta\theta}{\partial y} \right) \\ - d_{\delta\theta} G_0^2 \left( \frac{\partial^2 \delta\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta\theta}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \quad (24)$$

където

$$a_{Z_0} = b_{Z_0} = \frac{\partial c}{\partial z_0}, \quad d_{Z_0} = \frac{\sqrt{2}}{60} \frac{1}{f} a_{Z_0}, \quad e_{Z_0} = \frac{5}{2} d_{Z_0}$$

$$a_{\delta\theta} = b_{\delta\theta} = \frac{\partial c}{\partial \delta\theta}, \quad d_{\delta\theta} = \frac{\sqrt{2}}{60} \frac{1}{f} a_{\delta\theta}, \quad e_{\delta\theta} = \frac{5}{2} d_{\delta\theta}.$$

Първата формула – (23), е въведена в [7] и е използвана за анализ на влиянието на орографията върху различни синоптични процеси [1, 2, 3, 8, 9].

Втората формула – (24), въведена в [1, 5], описва съответни ефекти, свързани с „ $\delta\theta$ -топографията“.

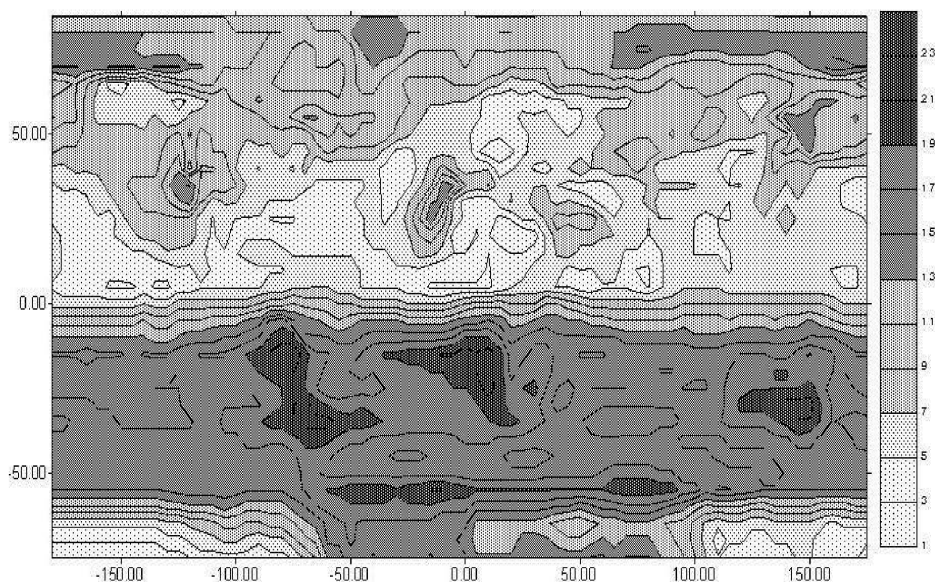
Очевидно наред с орографията, „ $\delta\theta$ -топографията“ играе съществена роля при формиране на синоптичните процеси (вж. [1]).



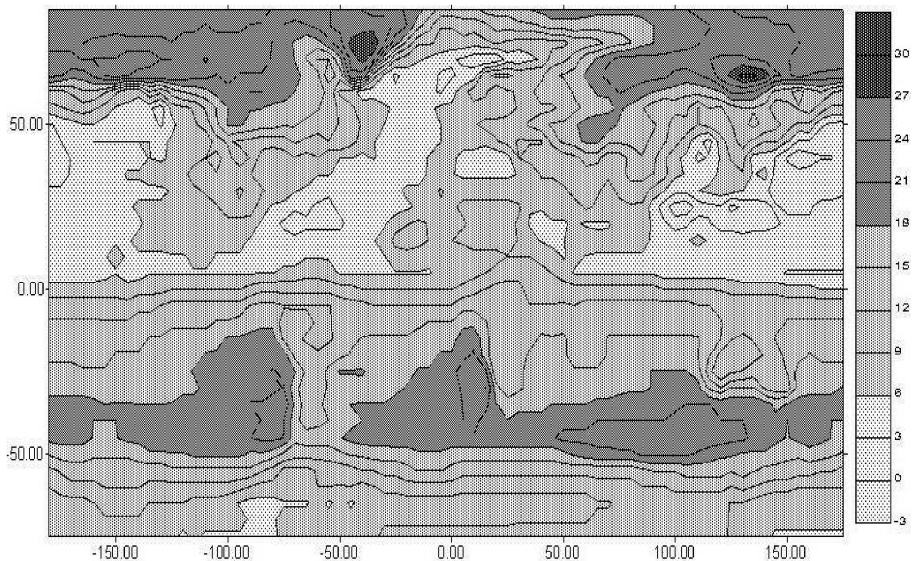
#### 4. НЯКОИ ВРЪЗКИ НА „ $\Delta\theta$ -ТОПОГРАФИЯТА“ С КЛИМАТИЧНИТЕ ПРОЦЕСИ

Тук ще фокусираме вниманието си върху изследване на някои крупномасабни връзки между „ $\Delta\theta$ -топографията“ и климатични процеси. На фиг. 1 и фиг.2 са показани изчислените от нас климатични карти на разпределение на параметъра  $\delta\theta(x,y)$  при типични зимни (януари) и летни (юли) условия. Те са получени въз основа на съответни експериментални климатични данни за температурата при земята и на ниво 850 hPa [10] при представяне на резултатите с хоризонтална дискретизация – стъпка  $\Delta = 5 \times 5^\circ$  (географски градуси).

Както се вижда от фиг.1 и фиг.2,  $\delta\theta(x,y)$ -полето оформя редица основни и локализирани върху големи площи термични конфигурации (т.е. по-едрите и изразени  $\delta\theta(x,y)$ -нееднородности), които образно ще наричаме  $\delta\theta(x,y)$ -долини. Бе направена съпоставка между картите за  $\delta\theta$  (фиг.1 и фиг.2).



**Фиг. 1.** Климатично разпределение на изчисления параметър  $\delta\theta$  в градуси по температурата през януари

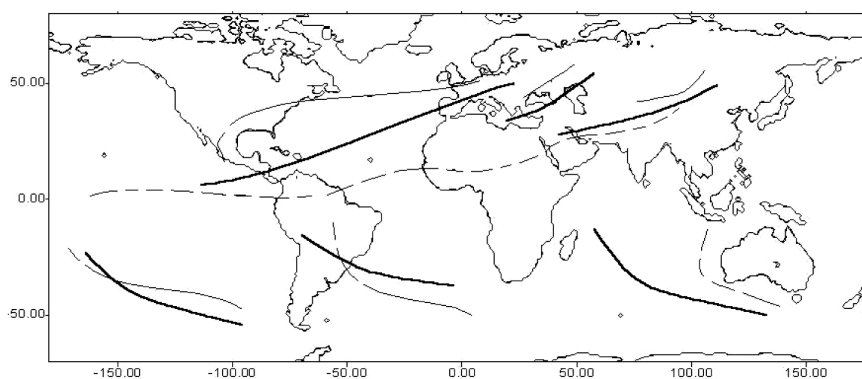
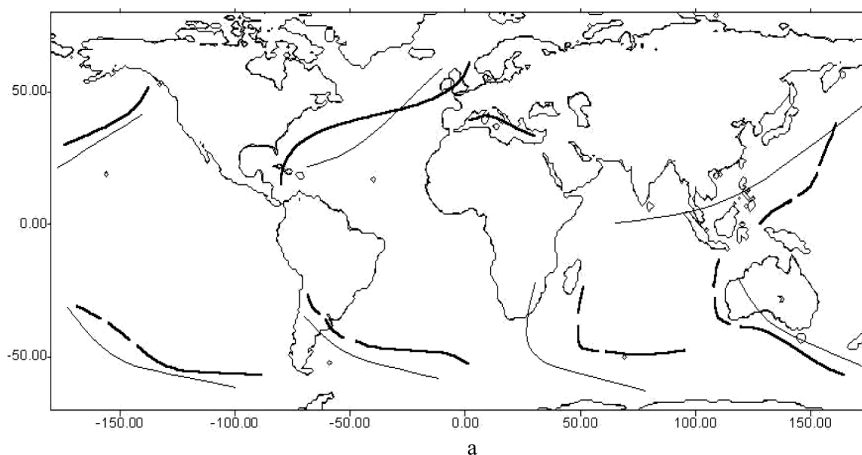


**Фиг. 2.** Климатично разпределение на изчисления параметър  $\delta\theta$  в градуси по температурата през юли

На фиг. 3 са нанесени осите на основните долини на  $\delta\theta$ -топографията спрямо разположението на основните климатични фронтове [11]. Както през януари, така и през юли фронтовете се разполагат успоредно на осите на  $\delta\theta$ -долините, като се изместват малко в западната част на долината. Възможно е този факт да е породен от ефекта на напречно обтичане на  $\delta\theta$  -вдълбната форма от преобладаващия западен поток.

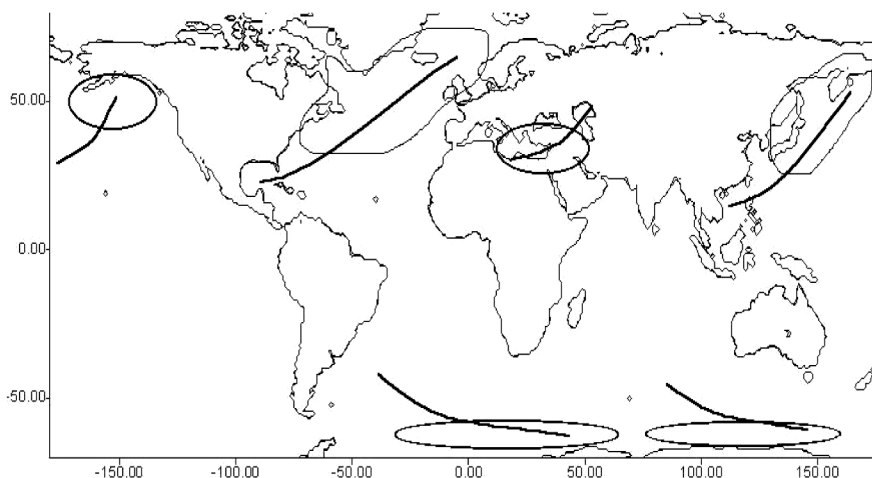
От линейната част на (24) ще следва, че по западната част на долината в посока изток  $\frac{\partial\delta\theta}{\partial x} < 0$  и ще се стимулира циклонична атмосферна дейност от възходящи движения, докато в източната част индуцираните от термичните нееднородности скорости са низходящи и ще действат в посока на стабилизиране на устойчивостта на стратификация на слоя.

Ще отбележим, че доколкото главните фронтове възникват в деформираното поле, образувано от центровете на действие в атмосферата, то за определяне местоположението на климатичните фронтове се използва комплексен анализ на карти на многогодишното разпределение на редица метеорологични елементи: налягане, вятър, орография, типове въздушни маси и др. Циклоничната и антициклоничната повтораемост, траекториите и генезът участват също като изходен материал при оформяне на климатичните карти. Това насочва вниманието към евентуална връзка между голямата повтораемост на циклоните и влиянието на термичните фактори. Нашите съ-



**Фиг. 3.** Разположение на климатичните фронтове (плътна черна линия) и осите на основните  $\delta\theta$ -долини (бледа линия) през: а) януари; б) юли

поставки между областите с голяма климатична повтаряемост на циклоните [12] и съответните разположени в тези области  $\delta\theta$ -долини (фиг.1, фиг.2) потвърждават тази връзка. Максимумите на повтаряемост на циклони и през двата сезона лежат около  $45^\circ$  с.ш.,  $170^\circ$  и.д. и в района на Исландия, където през цялата година се намират и областите на най-голяма неустойчивост в атмосферата. В южното полукълбо най-интензивната циклонична дейност е съсредоточена около Антарктида, с изключение само на Амундсеново море и прилежащата му част от Тихия океан. Там откриваме и области с малки стойности на  $\delta\theta$  (увеличена неустойчивост). Съответния извод с обратен знак можем да направим и между районите с преобладаваща антициклонична активност и тези, характеризиращи се със засилена устойчивост на стратификацията (непоказано тук).



**Фиг. 4.** Разпределение на областите с най-голяма климатична повтаряемост на циклонична дейност през двата сезона (означена схематично със затворените криви) и средните положения на осите на  $\delta\theta$ -долините.

От фиг. 4 се вижда една значителна корелация между двата обекта. Известна допълнителна теоретична обосновка на този резултат може да се даде въз основа на теоретичните и експерименталните резултати относно влиянието на  $\delta\theta$ -топографията върху траекториите на баричните образувания (получени в [1, 12]).

Известно отклонение на осите на  $\delta\theta$  долините в най-долните две области на активна циклонична дейност на фиг. 4, вероятно се дължи на климатичното влияние на неотчетените тук орографски фактори, въпрос, който се нуждае от допълнително изследване.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящата работа се обсъждат някои основни теоретични резултати относно влиянието на хоризонталните нееднородности (орографски, термични, влажностни, бароклинни) върху синоптични/ климатични процеси. Това влияние се проявява чрез обобщения израз (18) за вертикалната скорост  $w_H$  на горната граница на АГС.

В практически план са намерени някои корелационни връзки между „ $\delta\theta$ -топографията” и климатичните атмосферни фронтове.

Както се вижда от (23) и (24), взаимодействието на АГС в синоптични

машаби освен чрез „ $\delta\theta$ -топографията” съществено зависи и от нейните втори производни – основно от  $\delta\theta$ -лапласиана

$$\nabla^2 \delta\theta = \frac{\partial^2 \delta\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta\theta}{\partial y^2},$$

а също и от лапласиана на орографията

$$\nabla^2 z_0 = \frac{\partial^2 z_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_0}{\partial y^2}.$$

Влиянието на тези важни елементи отделно се обсъждат в работа [13].

В заключение ще подчертаем, че, както бе показано по-горе в работата, крупномашабното взаимодействие на хоризонталните нееднородности с атмосферните процеси основно се параметризира във формата  $R(x,y) - S(x,y)$ . Това силно опростява задачата и позволява чрез по-детайлно проследяване разпределението и формата на тези две полета да се анализират широк спектър синоптични/климатични процеси в атмосферата, включително да се използват при параметризиране на числените прогностични и климатични модели.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Сираков, Е. Атмосферен граничен слой – структура, параметризация, взаимодействия. София, 2011.
- [2] Годав, Н. Синоптична метеорология. София, 1976.
- [3] Панчев, С. Бълг. Геоф. Стисание, 1977, **VIII**, 22.
- [4] Сираков, Е. IX-та межд. конф. по метеор., Карпат, 1979.
- [5] Сираков, Е. *Zb. Met. i Hidr. Rad*, 1985, **12**, P.97
- [6] Arya, G., S. P. S. Parameterization the height of the stable Atmospheric Boundary Layer. – *J. Appl. Meteor.*, 1981, **20**, P.1192.
- [7] Годав, Н. *Arch. Met. Geograph. Biokl.*, 1970, **A19**, P.299.
- [8] Yordanov, D., N. Godev. *Boundary-Layer Meteor.* **5**, 1973, 309–320.
- [9] Godev, N., E. Syrakov. *Proc. Nowcasting – II symposium*, Sweden, 1984 (ESA SP-208), 315–319.
- [10] Aeroklimaticeskii atlas severnogo polushariya. Temperatura, plotnost i vlazhnost, L., 1963.
- [11] Хромов, С. П. Изд. "Природа", 1956, **1**, P.480.
- [12] Syrakov, E., M. Tsankov, J. Bonewitz. *Bulg. Geophys. J.* 2007, **33**, 44–52.
- [13] Сираков, Е., Й. Боневиц. *Год. СУ, Физ. фак.*, 2012, **106**, (предложена за печат).

## ВЪРХУ ВРЪЗКАТА НА ТЕРМИЧНИЯ И ОРОГРАФСКИЯ ЛАПЛАСИАН С ОСНОВНИ КЛИМАТИЧНИ ПРОЦЕСИ В АТМОСФЕРАТА

ЕВГЕНИ СИРАКОВ, ЙЕНС БОНЕВИЦ, СИЛВИЯ ПЕТРОВА<sup>1</sup>

*Катедра „Метеорология и геофизика“*

*Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“*

<sup>1</sup> *НИМХ София*

*Евгени Сираков, Йенс Боневци, Силвия Петрова. ВЪРХУ ВРЪЗКАТА НА ТЕРМИЧНИЯ И ОРОГРАФСКИЯ ЛАПЛАСИАН С ОСНОВНИ КЛИМАТИЧНИ ПРОЦЕСИ В АТМОСФЕРАТА*

Разглежда се ролята на термичния  $\nabla^2\delta\theta$  и орографския  $\nabla^2z_0$  лапласиан като важни параметри, параметризиращи основни климатични процеси в атмосферата. Те генерират вертикални крупномасштабни скорости  $w_H(\nabla^2\delta\theta)$  и  $w_H(\nabla^2z_0)$  на горната граница на атмосферния граничен слой (АГС). Тези вертикални скорости (описващи важни крупномасштабни взаимодействия на АГС със свободната атмосфера) са инвариантни относно координатната декартова система (в която са записани) и не зависят от посоката на вятъра, което обуславя тяхното важно климатично значение. Това е потвърдено въз основа на реални данни, като е установено съществена корелация на тези  $w_H$ -вертикални скорости (т.е. на  $\nabla^2\delta\theta$  и  $\nabla^2z_0$ ) с основни климатични фактори – цикло-и антициклогенез и центрове на действие на атмосферата.

*Evgeni Syrakov, Jens Bonewitz, Silvia Petrova. ON THE RELATION OF THERMAL AND OROGRAPHIC LAPLACIAN WITH MAIN KLIMATIC PROCESSES IN THE ATMOSPHERE*

It is shown the role of the thermal  $\nabla^2\delta\theta$  and orographic  $\nabla^2z_0$  laplacian as important parameters, which parameterized main climatic processes in the atmosphere. They generate vertical large scale velocities  $w_H(\nabla^2\delta\theta)$  and  $w_H(\nabla^2z_0)$  on the top border of the atmospheric boundary layer (ABL). These vertical velocities (which describe important large scale interactions of the ABL with the free atmosphere) are invariant according to the Cartesian coordinate system (within are described) and

---

*За контакти:* Евгени Сираков, Катедра „Метеорология и геофизика“, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучер“ 5, 1164 София, тел.: +359 2 8161-312, E-mail: esyrakov@phys.uni-sofia.bg

don't depend of the wind direction. Therefore they have an important climatic aspect. This is confirmed on base of real data as it is established significant correlation of these  $w_H$ -vertical velocities (i.e. of  $\nabla^2\delta\theta$  and  $\nabla^2z_0$ ) with main climatic factors – genesis of cyclones and anticyclones and centers of activity in the atmosphere.

**Keywords:** induced synoptic vertical velocity, thermal and orographic laplacians, invariance, climatic correlations.

**PACS number:** 92.60 ± e

## 1. УВОД

Докато синоптичните процеси се характеризират с твърде голяма изменчивост, крупномасштабните процеси, разгледани в климатичен аспект, т.е. получени при многогодишни усреднения, се оказват типични, устойчиви и малко изменящи се в рамките на даден сезон. При смяна на сезоните (например лято – зима) обаче се забелязва значително преустройство в конфигурацията на полето на метеоелементите, което е свързано с влияние на термичните фактори. Поради това ще проведем съответни разглеждания за два основни климатични сезона: зима и лято, като за някои от тях ще се ограничим с територията на Северното полукълбо.

Изучаването на влиянието на орографско-термичните нееднородности представлява основен проблем, който има отношение към построяването на моделите на климата и редица други глобални метеорологични процеси. Термично и орографски нееднородният АГС и тук запазва ролята си на своеобразен „буферен“ слой. При климатично значимите атмосферни процеси се „губят“менящите се с по-къси временни периоди синоптични метеорологични вариации и остават само тези фактори, които в рамките на даден сезон се натрупват и имат доминиращо влияние. В голяма част от климатичните разглеждания редица климатични характеристики на взаимодействието на земната повърхност с глобалните климатични процеси се задават чрез локални параметризационни схеми. Тук ще се постареем да представим подход за оценка на изменящото се от точка в точка (в рамките на възприет мащаб) крупномасштабно влияние на лапласианите на  $z_0(x,y)$  и  $\delta\theta(x,y)$ -нееднородностите върху основни климатични процеси.

## 2. ПОСТАНОВКИ НА ЗАДАЧАТА

Основна характеристика на взаимодействието между планетарния граничен слой (ПГС) и свободната атмосфера е вертикалната скорост  $w_h$  на горната му граница  $H$ . В общия случай  $w_h$  се формира в резултат на съвместното

влияние на орографията  $z_0(x,y)$ , термичните хоризонтални нееднородности  $\theta_H - \theta_0 = \delta\theta(x,y)$  ( $\delta\theta$ -топография), триенето и бароклинните ефекти:

$$w_H = w_I + c\Omega_{g_0} + \Delta w, \quad \Delta w = \Delta w_{or} + \Delta w_T + \Delta w_{BK} \quad (1)$$

където

$$\Delta w_{or} = a(\bar{\nabla}z_0 \cdot \bar{c}_{g_0}) + b(\bar{\nabla}z_0 \times \bar{c}_{g_0})_3 - dG_0^2 \nabla^2 z_0 - e(u_{g_0}^2 - v_{g_0}^2) \partial^2 z_0 \frac{\partial^2 z_0}{\partial x \partial y}, \quad (2)$$

$$w_T = a_1(\bar{\nabla}\delta\theta \cdot \bar{c}_{g_0}) + b_1(\bar{\nabla}\delta\theta \times \bar{c}_{g_0})_3 - d_1 G_0^2 \nabla^2 \delta\theta - e_1 \frac{\partial^2 \delta\theta}{\partial x \partial y} (u_{g_0}^2 - v_{g_0}^2), \quad (3)$$

$$w_{BK} = -f_1 \left( u_{g_0} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} + v_{g_0} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \right) \equiv -f_1 (\bar{\nabla}T \cdot \bar{c}_{g_0}) \quad (4)$$

Тук  $\bar{c}_{g_0} = (u_{g_0}, v_{g_0})$ ,  $G_0$  е вектор и модул на приземния геострофен вятър,  $c = \sqrt{2k/f}$ ,  $k = k[z_0(x,y)]$  – осреднен по височината коефициент на вертикален турбулентен обмен;  $\Omega_g = \frac{\partial v_{g_0}}{\partial x} - \frac{\partial u_{g_0}}{\partial y}$  е геострофен вихър,  $w_I = u_{g_0} \frac{\partial z_0}{\partial x} + v_{g_0} \frac{\partial z_0}{\partial y}$  – вертикална скорост при идеално обтичане на  $z_0(x,y)$ ;  $f_1 = (\pi/\bar{T})c$ ;  $\bar{T}$  – осреднена по височината температура в ПГС;  $a, b, d, e$ ;  $a_1, b_1, d_1, e_1$  са тегловни коефициенти.

Формула (2), отчитаща орографските ефекти, е дадена в [1]. Формули (3) и (4), отчитащи допълнителните ефекти, свързани съответно с хоризонталните термични нееднородности и бароклинността, са получени в [2, 3].

Съгласно формулата на Марчук [4], тенденцията на геопотенциала  $\partial\Phi/\partial t$  за дадена изобарна повърхност  $S_p$  се изразява във вида

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \iint_{S_p} M_w w_n dx dy. \quad (5)$$

Отчитайки, че положителната функция на влияние  $M_w$  е бързо намаляваща по хоризонталните координати, с достатъчна точност можем да смятаме, че

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} = c_0 w_H, c_0 = 0,3. \quad (6)$$

За  $w_H$  ще използваме въведената по-горе формула (1). От (6) следва, че при  $\partial\Phi/\partial t > 0$  се реализира антициклогенез ( $w_H > 0$ ), а при  $\partial\Phi/\partial t < 0$  –



циклогенез ( $w_H < 0$ ). Типът на съответния генез се обуславя от сумарния ефект на описаните от (1) ефекти.

Нека сега съставим климатични карти за величините  $\nabla^2\delta\theta$  и  $\nabla^2z_0$  за цялото земно кълбо. Изходна информация за тази цел черпим от известните аерологични климатични атласи [5] и реални данни за орографията. Въз основа на обработка на тези данни за летен и зимен сезони са построени климатични карти за лапласианите чрез традиционното четириточково тяхно представяне в крайни разлики в мрежа с определена дискретизация:

- разпределение на лапласиана  $\nabla^2\delta\theta = \frac{\partial^2\delta\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\delta\theta}{\partial y^2}$ , изчислен за мрежа с дискретизация  $5 \times 5$  географски градуса (фиг. 1, фиг. 2);
- разпределение на лапласиана  $\nabla^2z_0 = \frac{\partial^2z_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2z_0}{\partial y^2}$ , изчислен за три вида осреднения :  $2 \times 2$  и  $5 \times 5$  географски градуса (фиг. 3).

Както лесно се съобразява, нелинейните членове в (1), съдържащи лапласианите на  $z_0(x,y)$  и „ $\delta\theta(x,y)$ -топографията“

$$w_H = -G_0^2 (d\nabla^2z_0 + d_1\nabla^2\delta\theta), \quad (7)$$

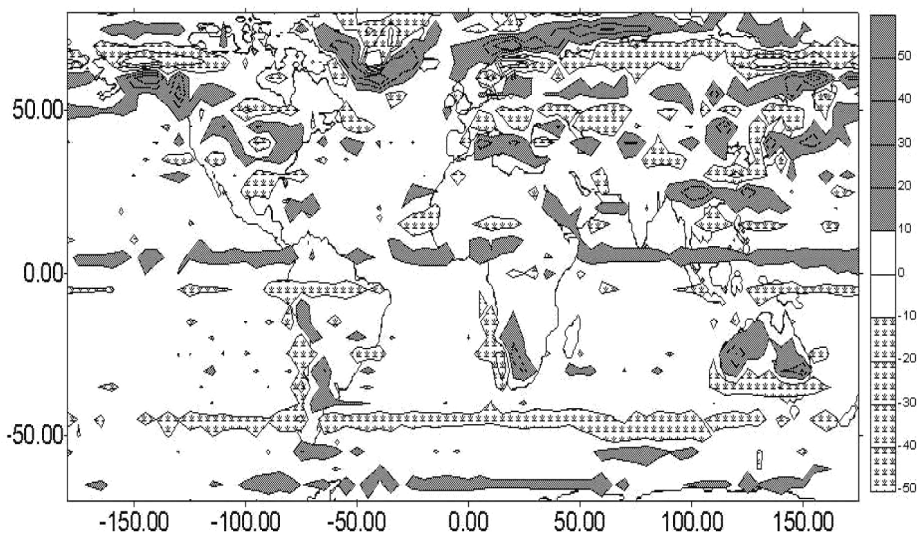
са инвариантни относно координатната система и не зависят от посоката на вятъра. Поради тази причина те могат да имат съществена климатична значимост. Въз основа на (2), (3) и (7)

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Phi_{or}}{\partial t} &= -c_0G_0^2d\nabla^2z_0 \\ \frac{\partial\Phi_T}{\partial t} &= -c_0G_0^2d_1\nabla^2\delta\theta \end{aligned} \quad (8)$$

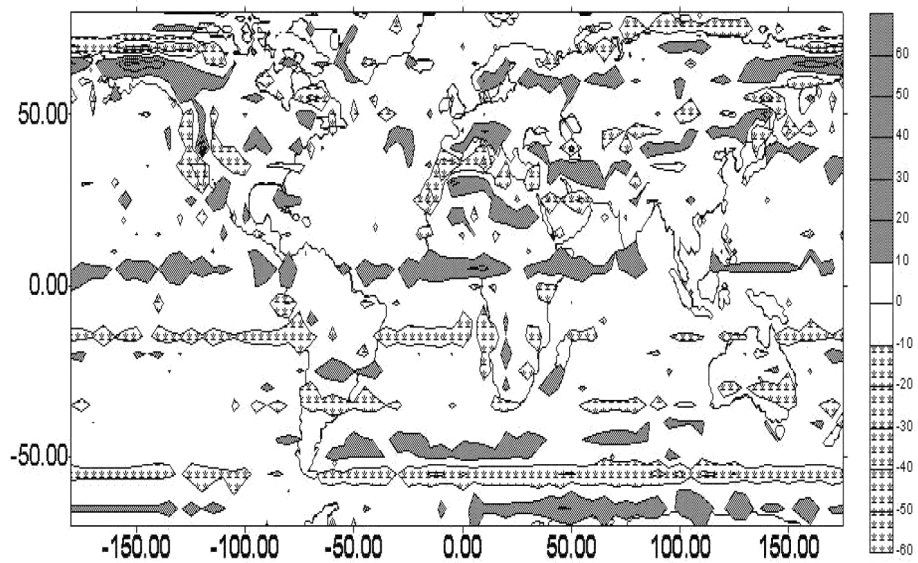
където  $d > 0, d_1 < 0$ . От (8) следва, че при  $\frac{\partial\Phi}{\partial t} > 0$  се реализира антициклогенез ( $\nabla^2z_0 < 0, \nabla^2\delta\theta > 0$ ), а при  $\frac{\partial\Phi}{\partial t} < 0$  – циклогенез ( $\nabla^2z_0 > 0, \nabla^2\delta\theta < 0$ ).

### 3. КОРЕЛАТИВНИ ВРЪЗКИ НА ТЕРМИЧНИ И ОРОГРАФСКИ ЛАПЛАСИАНИ С КЛИМАТИЧНИ ПРОЦЕСИ

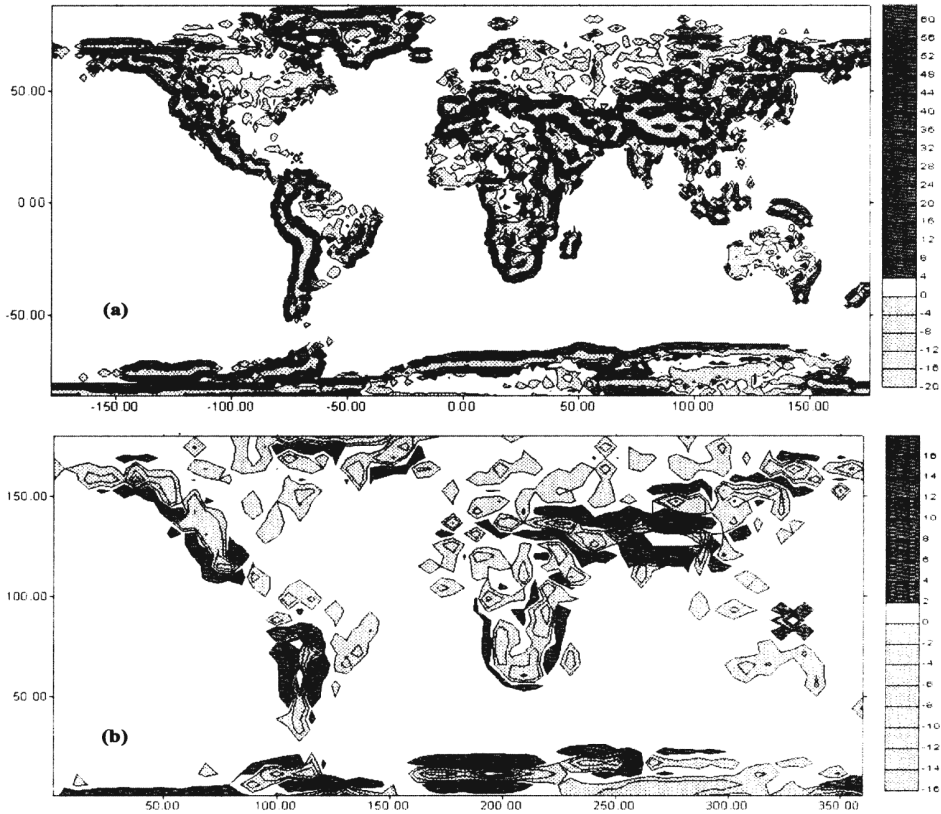
Горните теоретични изводи до голяма степен се потвърждават от съпоставката на изчислените лапласиани (фиг. 1 и фиг. 2) с областите на активен цикло- и антициклогенез по Петерсен [6].



Фиг. 1. Разпределение на термичния лапласиан  $\nabla^2\delta\theta$  в условни единици през януари



Фиг. 2. Разпределение на термичния лапласиан  $\nabla^2\delta\theta$  в условни единици през юли



**Фиг. 3.** Форма и разпределение на орографския лапласиан  $\nabla^2 z_0$ , изчислен с осреднение 2×2 географски градуса (a) и 5×5 географски градуса (b)

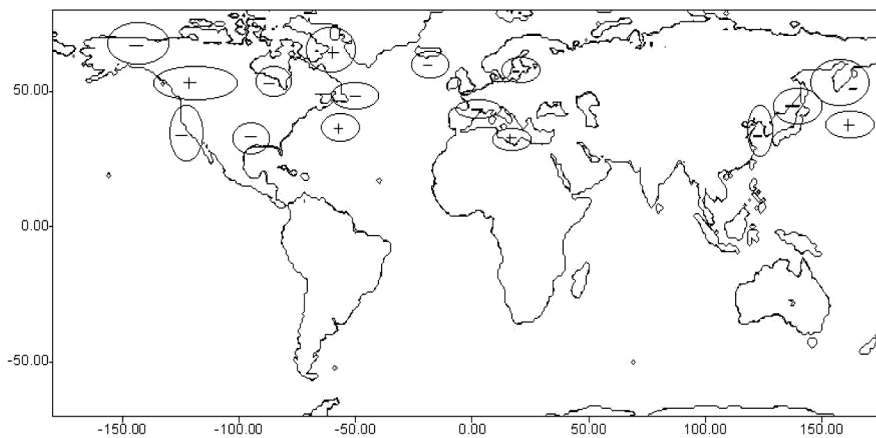
Резултатите са представени на фиг. 4 и фиг. 5, където са съпоставени районите с голяма процентна повторемост на цикло- или антициклогенетичните процеси и знаците на термичния лапласиан на същите места. Например източно и западно от планинския масив Кордилери в Северна Америка и през двата сезона забелязваме области с повишена циклогенетична дейност (0,6 единици). На същите ширини върху получените въз основа на многогодишни наблюдения климатични карти откриваме отрицателни стойности на термичния лапласиан ( $\nabla^2 \delta \theta < -10$ ). На тези карти е отразено и сезонното отместване на разглежданите зони на циклогенез: през лятото те са локализирани между 30° и 50° с.ш., а през зимата се обособяват около 30° и 60° с.ш. (залив Аляска). В полето на  $\nabla^2 z_0$  в тези райони знакът на лапласиана е положителен заради вдлъбнатата форма на релефа от двете страни на препятствието. Подобни корелации откриваме и за други области на интензивен

циклогенез като: Мексиканския залив (през зимата,  $\nabla^2\delta\theta < -25$ ), западните части на Средиземно море през лятото (Генуезки залив, процентна повтаряемост на циклогенеза  $> 0,6$  единици и  $\nabla^2\delta\theta < -10$ ), районите източно от Азия и Северна Америка (между  $30^\circ$  и  $40^\circ$  с.ш. през зимата и над  $45^\circ$  с.ш. през лятото). В добавка, във всички тези райони  $\nabla^2z_0 > 0$  и те представляват вдлъбнати по отношение на средния релеф дъги (вж. фиг. 3).

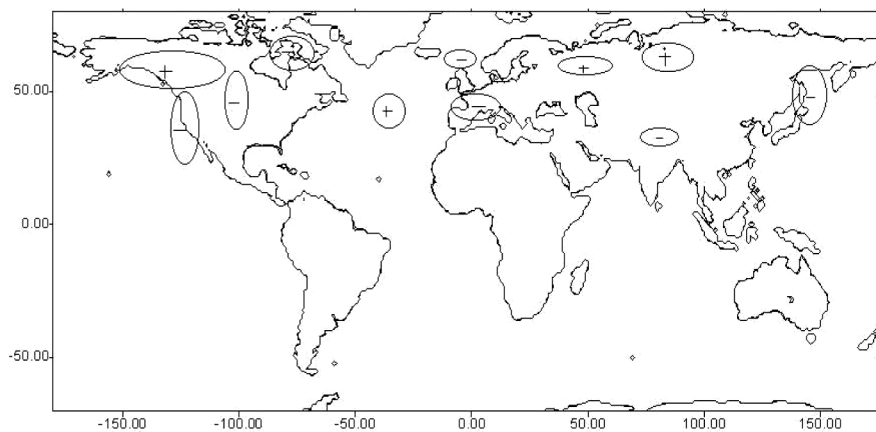
Наблюдаваното съответствие между области с повишен антициклогенез и такива с  $\nabla^2\delta\theta > 0$  подсилва направения извод за влиянието на термичните средноклиматично изразени нееднородности върху сезонното разпределение на атмосферната активност. От фигурите се вижда, че както за лятото, така и за зимата, зоните, в които се зараждат баричните системи с ниско и високо налягане, са строго локализирани и ако на всяка от тях съответства област с екстремни стойности на термичния лапласиан, то обратното не е вярно. Това показва, че наличието на екстремни стойности на  $\nabla^2\delta\theta$  е само необходимо, но не и достатъчно условие за активен генез. Очевидно важна роля могат да играят и други фактори.

Добро качествено съвпадение се наблюдава и между областите с различни знаци на термичния лапласиан и активните центрове на действие в атмосферата – известните многогодишни климатични карти на приземното атмосферно налягане на цялото земно кълбо за зима и лято [6]. На следващите фиг. 6 и фиг. 7 е направена съответна съпоставка между изчислените лапласиани (фиг. 1 и фиг. 2) и тези карти.

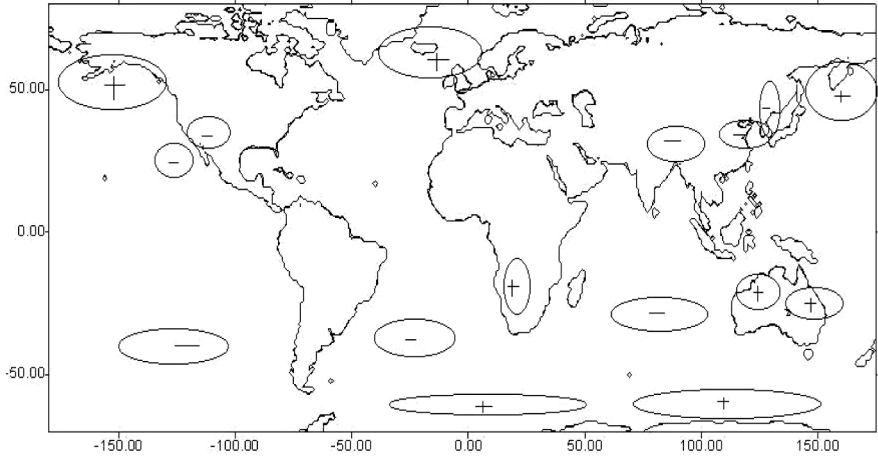
Исландският и Алеутският минимум, характеризиращи се с ниско налягане през цялата година, върху картите на температурния лапласиан са покрити от области с  $\nabla^2\delta\theta > 10$  единици, като през зимата стойностите им нарастват в съответствие с разширяването и задълбочаването на депресиите. Азорският и Арктическият максимум съвпадат със зони, в които  $\nabla^2\delta\theta < 0$  и през двата сезона. Тези резултати са в пълно съответствие с теоретичната постановка (5), (6). В център на ниско атмосферно налягане би следвало вертикалната скорост да е възходяща ( $w_H > 0$ ), следователно  $\nabla^2\delta\theta > 0$ , а  $\nabla^2z_0 < 0$ .



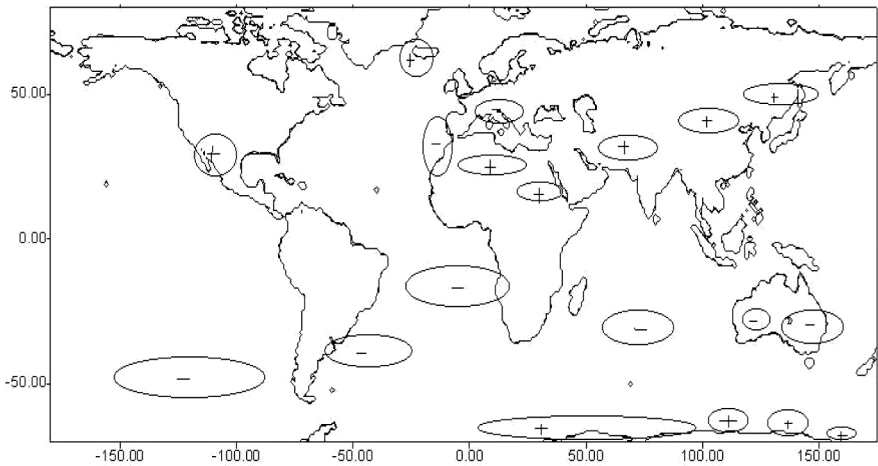
**Фиг. 4.** Разпределение на областите с екстремални стойности и съответни знаци (+,-) на  $\nabla^2\delta\theta$  и оградените зони с максимален циклогенез и антициклогенез през януари ( $\nabla^2\delta\theta < 0$  – циклогенез,  $\nabla^2\delta\theta > 0$  – антициклогенез)



**Фиг. 5.** Разпределение на областите с екстремални стойности и съответни знаци (+,-) на термичния лапласиан  $\nabla^2\delta\theta$  и оградените зони с максимален цикло- и антициклогенез през юли ( $\nabla^2\delta\theta < 0$  – циклогенез,  $\nabla^2\delta\theta > 0$  – антициклогенез)



**Фиг. 6.** Разположение на центровете на действие в атмосферата (оградените зони) и екстремни стойности и съответни знаци (+,-) на лапласиана на температурата  $\nabla^2\delta\theta$  през януари



**Фиг. 7.** Разположение на центровете на действие в атмосферата (оградените зони) и екстремни стойности и съответни знаци (+,-) на термичния лапласиан  $\nabla^2\delta\theta$  през юли

Подобни корелации между теоретичните съображения и климатичните данни установяваме и за други райони на земното кълбо, в които целогодишно преобладават ниски или високи стойности на налягането. Южноатлантическият, Южотихоокеанският и Южноиндийският антициклон са под-

чертани от области с отрицателни стойности на  $\nabla^2\delta\theta$ . Предантарктическият пояс на ниско налягане съответства на зони с  $\nabla^2\delta\theta > 0$  (тук и лапласианът на релефа оказва своето влияние,  $\nabla^2\delta\theta < 0$ ). Дори по-слабо изразените Арктически антициклон и екваториална зона на понижено налягане на получените от нас карти на термичните лапласиани  $\nabla^2\delta\theta$  са покрити от области със съответен знак на термичния лапласиан.

Разпределението на  $\nabla^2\delta\theta$  в съпоставка със сезонните центрове на действие в атмосферата също дава добри резултати. През зимата Азиатският и Канадският максимум се характеризират с големи отрицателни стойности на  $\nabla^2\delta\theta$ , Южноафриканският циклон през януари и Южноазиатската депресия (в района на която  $\nabla^2\delta\theta < 20$  единици) през юли – с  $\nabla^2\delta\theta > 0$ .

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведените по-горе резултати потвърждават високата климатична значимост на лапласианите  $\nabla^2\delta\theta$  и  $\nabla^2z_0$  като фактори, силно корелиращи с основни климатични процеси. Основно място в работата бе обърнато на влиянието на термичния лапласиан. В отделна бъдеща работа по-подробно внимание ще се обърне на орографския лапласиан  $\nabla^2z_0$ .

Считаме, че използването на пълната формула (1) за  $w_H$ , включваща освен двата лапласиана и редица други ефекти, може да бъде много полезно при параметризиране на широк клас синоптични и климатични процеси и числените модели, които ги описват.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Годев, Н. *Arch. Met. Geograph. Biokl.*, 1970, **A19**, P. 299.
- [2] Сираков, Е. *Zb. Met. i Hidr. Rad.*, 1985, **12**, P. 97.
- [3] Сираков, Е. Атмосферен граничен слой – структура, параметризация, взаимодействия. София, 2011.
- [4] Marchuk, G. *Chislenni Metodi v prognoze pogodo*, Gidrometizdat. L., 1967.
- [5] *Aeroklimaticheskii atlas severnogo polushariya*. Temperatura, plotnost i vlazhnost. L., 1963.
- [6] Pettersen, S. *Weather analysis and forecasting*. London, 1956.

## ВЛИЯНИЕ НА ПОДРЕДЕНИТЕ СИНОПТИЧНИ ВЕРТИКАЛНИ ДВИЖЕНИЯ ВЪРХУ ВИСОЧИНАТА НА АТМОСФЕРНИЯ ГРАНИЧЕН СЛОЙ

ЕВГЕНИ СИРАКОВ, ЙЕНС БОНЕВИЦ

*Катедра „Метеорология и геофизика”*

*Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“*

*Евгени Сираков, Йенс Боневци. ВЛИЯНИЕ НА ПОДРЕДЕНИТЕ СИНОПТИЧНИ ВЕРТИКАЛНИ ДВИЖЕНИЯ ВЪРХУ ВИСОЧИНАТА НА АТМОСФЕРНИЯ ГРАНИЧЕН СЛОЙ*

Орографско-термичните нееднородности съвместно с триенето в атмосферния граничен слой (АГС) генерират на неговата горна граница подредени вертикални движения  $w_s$ . В настоящата работа се изследва тяхното влияние върху височината на АГС при различни условия в атмосферата. Анализирани са съответни случаи при различно взаимно разположение на земната повърхност, потвърждавайки значимостта на изследваните ефекти.

*Evgeni Syrakov, Jens Bonewitz. IMPACT OF THE ARRANGED SINOPTIC VERTICAL VELOCITIES ON THE HEIGHT OF THE ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER*

Orographic-thermal nonhomogeneities, together with friction in the atmospheric boundary layer (ABL) generate on its upper border arranged vertical velocities  $w_s$ . In the current work we research their impact of the ABL's height – for different conditions in the atmosphere. It were analyzed respectively cases for different position each other of the earth surface. This confirms the importance of the researched effects.

**Keywords:** orographic-thermal nonhomogeneities, surface friction, induced vertical velocity, height of the atmospheric boundary layer

**PACS number:** 92.60 ± e

---

*За контакти:* Евгени Сираков, Катедра „Метеорология и геофизика“, Физически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучер“ 5, 1164 София, тел.: +359 2 8161-312, E-mail: esyrakov@phys.uni-sofia.bg



## 1. УВОД

При стабилно стратифициран АГС, известната релаксационна формула за височината  $h$ :

$$\frac{dh}{dt} = \frac{h_e - h}{T}, \quad (1)$$

може да бъде обобщена при отчитане на ефектите на хоризонталните нееднородности и крупномасштабните вертикални движения [1]:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y} - w_s = k_h \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + \frac{h_e - h}{T}, \quad (2)$$

където  $h_e$  е нормировъчна височина,  $T$  – време на релаксация,  $h$  – реалната височина на АГС;  $w_s$  – вертикална крупномасштабна вертикална скорост на горната граница на АГС;  $u, v$  – хоризонтални компоненти на скоростта,  $k_h$  – коефициент на хоризонтален турбулентен обмен.

За  $T$  често се използва формулата

$$T = c_e / f, \quad (3)$$

където  $c_e$  е константа от порядъка на единица,  $f$  – параметър на Кориолис.

Лесно се съобразява, че при отчитане на (2) формула (3) може да се запише във вида

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y} = k_h \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + \frac{h_{ae} - h}{T}, \quad (4)$$

където

$$h_{ae} = \frac{w_s}{c_e f} \quad (5)$$

представлява така наречената квазинормировъчна височина [1], разграничаваща ефекта на  $w_s$  върху релаксационния процес в АГС.

В случай на неустойчиво стратифициран АГС за височина  $Z_i$  могат да се използват редица формули, като тук ще посочим две, придобили голямо разпространение.

Формулата на Деардорф [2] при отчитане на ефекта на хоризонтална нееднородност и крупномасштабни вертикални движения се записва във вида [3]

$$\frac{dZ_i}{dt} = \frac{\partial Z_i}{\partial t} + u \frac{\partial Z_i}{\partial x} + v \frac{\partial Z_i}{\partial y} - w_s = \frac{c_1 (w_*^3 + c_2 u_*^3 - c_3 u_*^2 f Z_i)}{\beta Z_i^2 \Gamma + c_4 w_*^2 + c_5 u_*^2}, \quad (6)$$

където  $Z_i$  е височината на конвективния АГС,  $w_* = (\beta q Z_i)^{1/3}$  е конвективният мащаб за скоростта,  $q$  – кинематичният поток на топлината при земята,  $\beta = g/\bar{T}$  – параметърът на конвекция (плаваемост),  $g$  – земното ускорение,  $\bar{T}$  – средната температура на въздуха в слоя,  $\Gamma$  – температурният градиент в свободната атмосфера,  $u_*$  – динамичната скорост.

Съгласно експериментални данни и теоретични съображения константите в (6) приемат типични стойности [2]:  $c_1 = 1,8$ ;  $c_2 = 1,1$ ;  $c_3 = 3,3$ ;  $c_4 = 9$ ;  $c_5 = 7,5$ .

Другата, широко използвана формула за височината на АГС при конвективни условия е [4]

$$\left\{ \frac{Z_i^2}{(1+2A)Z_i - 2B\kappa L} + \frac{Cu_*^2}{\Gamma\beta[(1+A)]Z_i - \beta\kappa L} \right\} \left( \frac{\partial Z_i}{\partial t} + u \frac{\partial Z_i}{\partial x} + v \frac{\partial Z_i}{\partial y} - w_s \right) = \frac{q}{\Gamma} \quad (7)$$

където  $L$  е мащабът на Монин-Обухов;  $\kappa = 0,4$  – константата на von Karman;  $A, B, C$  – константи с типични стойности  $A = 0,2$ ;  $B = 0,2$ ;  $C = 5$ .

Най-общо казано, формули (4), (5) и (6) се формират от три основни фактора:

- локални условия на стратификацията и обмени / релаксационни процеси на турбулентните режими в АГС;
- нестационарни и хоризонтално нееднородни ефекти;
- ефекти, свързани с подредените крупномасщабни вертикални скорости  $w_s$  на горната граница на АГС, индуцирани от орографско-термичните хоризонтални нееднородности и триенето в синоптични аспекти.

## 2. ВЛИЯНИЕ НА КРУПНОМАЩАБНИТЕ ВЕРТИКАЛНИ ДВИЖЕНИЯ ВЪРХУ ВИСОЧИНАТА НА АГС

Тук ще се спрем на ефектите, породени от  $w_s$ , върху височината  $h$  или  $Z_i$  на АГС съответно за устойчиво и неустойчиво стратифицирана атмосфера.

Индуцираната от орографско-термичните нееднородности синоптична вертикална скорост  $w_s$  на горната граница на АГС може да бъде записана в променливи  $x, y$  (в декартова координатна система) или в ъглови променливи (за всяка околност на произволна точка  $x, y$ ). Тъй като последният запис е по-нагледен и подходящ за анализ, ще използваме тук именно него [3]:

$$\begin{aligned}
w_h = c\Omega_g + G_0 \nabla z_0 (1+a) * \\
\left\{ \cos\varphi \left[ 1 + \frac{\tilde{a}_1}{1+a} E \left( \cos\psi + \frac{b_1}{a_1} \sin\psi \right) \right] + \frac{b}{1+a} \sin\varphi \left[ 1 + \frac{\tilde{b}_1}{b} E \left( \cos\psi + \frac{a_1}{b_1} \sin\psi \right) \right] \right\} \\
- AcG_0 \Lambda \sin\varphi - dG_0^2 \left[ \nabla^2 z_0 + \frac{d_1}{d} \nabla^2 \delta\theta \right] - e(u_{g_0}^2 + v_{g_0}^2) \left[ \frac{\partial^2 z_0}{\partial x \partial y} + \frac{e_1}{e} \frac{\partial^2 \delta\theta}{\partial x \partial y} \right], \quad (8)
\end{aligned}$$

където  $\varphi$  е ъгълът между  $\vec{\nabla}z_0$  и  $\vec{c}_{g_0}$  (ъгъл на обтичане на орографията);  $\varphi_1$  е ъгълът между  $\vec{\nabla}\delta\theta$  и  $\vec{c}_{g_0}$ ;  $\psi = \varphi - \varphi_1$  (характеризира взаимното разположение на орографските и термичните нееднородности);  $\Phi$  е ъгълът между векторите  $\vec{c}_{g_0}$  и термичния вятър  $\vec{c}_T$  (характеризира геострофната адвекция на топлина или студ);  $\vec{\Lambda} = (\Lambda_x, \Lambda_y)$ ,  $\Lambda_x = (\chi^2/f) du_g/dz \equiv \Lambda \cos\Phi$ ,  $\Lambda_y = (\chi^2/f) dv_g/dz = \Lambda \sin\Phi$  са безразмерни външни параметри на бароклинност,  $\Lambda = |\vec{\Lambda}| = [\Lambda_x^2 + \Lambda_y^2]^{1/2}$ ;  $A = \pi f^2/\chi g$ ,  $\chi = 0,4$  е константата на фон Карман;  $\tilde{a}_1 = a_1 f^2/\beta$ ;  $\tilde{b}_1 = b_1 f^2/\beta$ ;  $\beta = g/\bar{T}$  е параметър на конвекция;  $E$  – безразмерен параметър, като

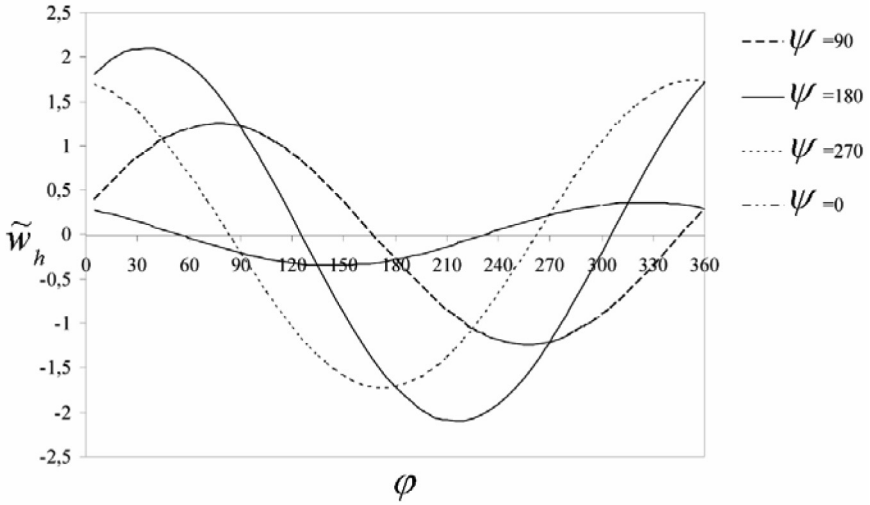
$$E = \frac{\beta \nabla \delta\theta}{f^2 \nabla z_0}. \quad (9)$$

Ще започнем изследване на тези ефекти при баротропни условия ( $\Lambda = 0$ ) в чист вид (при  $\Omega_{g_0} = 0$ ) при линейно приближение ( $d = e = 0$ ), когато от (5) следва:

$$\begin{aligned}
\tilde{w}_h = \cos\varphi \left[ 1 + \frac{\tilde{a}_1}{1+a} E \left( \cos\psi + \frac{a_1}{b_1} \sin\psi \right) \right] \\
+ \frac{b}{1+a} \sin\varphi \left[ 1 + \frac{\tilde{b}_1}{b} E \left( \cos\psi - \frac{a_1}{b_1} \sin\psi \right) \right] \quad (10)
\end{aligned}$$

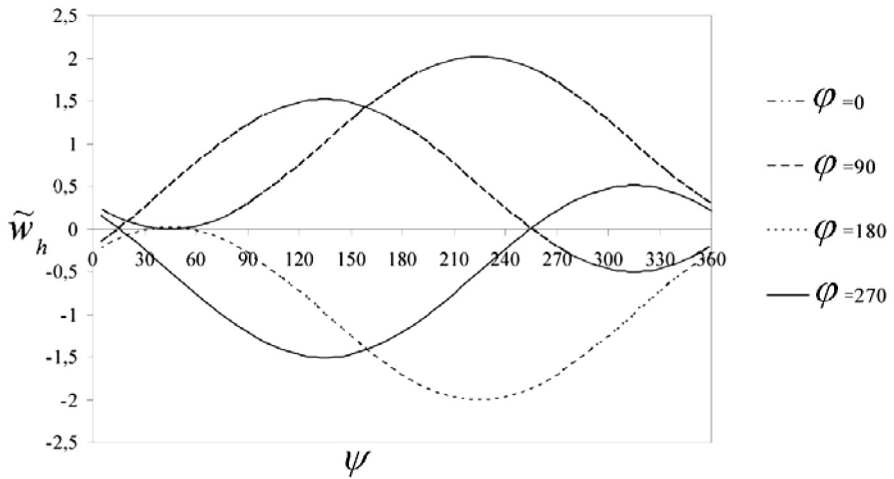
където  $\tilde{w}_h = w_h/G_0 \nabla z_0 (1+a)$  е обезразмерената вертикална скорост.

Сега ще изследваме зависимостта на  $\tilde{w}_h$  от (10) (при  $\Lambda = B = 0$ ) от двата ъгъла  $\varphi$  и  $\psi$ :  $\tilde{w}_h = \tilde{w}_{h\varphi}(\varphi)$  е показана на фиг. 1,  $\tilde{w}_h = \tilde{w}_{h\psi}(\psi)$  – на фиг. 2. В потвърждение на казаното по-горе от фиг. 1 се вижда, че най-голяма амплитуда и съответни екстремни стойности на  $\tilde{w}_h$  се получават при  $\psi = 180^\circ$ . В противовес на това при  $\psi = 0^\circ$  амплитудата на  $\tilde{w}_h$  е минимална.



**Фиг. 1.** Зависимост на  $\tilde{w}_h$  от (12) от ъгъла на обтичане  $\varphi$  при различни стойности на  $\psi$

На фиг. 2 е представена зависимостта на  $\tilde{w}_h$  от ъгъла  $\psi$  при различни фиксирани ъгли на обтичане:  $\varphi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$ . За останалите два ъгъла на обтичане амплитудите на  $\tilde{w}_h$  са по-малки и отместени на  $90^\circ$  градуса.



**Фиг. 2.** Зависимост на  $\tilde{w}_h$  от (10) от ъгъла  $\psi$  (определящ взаимното разположение на орографските и термични нееднородности) при различни стойности на  $\varphi$ .

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените резултати демонстрират сложното влияние на подредените крупномасщабни вертикални скорости  $w_S$  върху височината на АГС. Този ефект зависи съществено от взаимното разположение (конфигурация) на орографските и термичните нееднородности (ъгли  $\psi, \varphi, \varphi_1$  и  $\Phi$  между  $\bar{c}_{g0}$  и  $\bar{c}_{gr}$ , характеризиращ геострофната адвекция на топлина и студ). Сложността на това влияние се усилва и от факта, че при хоризонтална нееднородност взаимното разположение на тези ъгли ( $\psi, \varphi, \varphi_1, \Phi$ ) се мени от точка в точка. Разбира се, в практически план по траекторията, описвана от скоростта  $(u, v)$ , може да се разгледа последователна редица от локални области, във всяка от които оценките се правят по начина, показан по-горе. Другата възможност е да се запише  $w_S$  в променливи  $x, y$ , т.е.  $w_S(x, y)$  и във всяка точка  $(x, y)$  да се изчислява  $w_S$ . След съответна експертна оценка може да се ползват и подходящи осреднени стойности за  $w_S$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Zilintinkevich, S. S., and A. Baklanov. *Boundary-Layer Meteor.*, 2002, **105**, 389.
- [2] Deardorff, J.W. *J. Atmos. Sci.*, 1970, **27**, 1211.
- [3] Сираков, Е. Атмосферен граничен слой – структура, параметризация, взаимодействия. София, 2011.
- [4] Gryning, S.-E., and E. Batchvarova. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 1990, **116**, 87.

## ЧЕТИРИДЕСЕТ ГОДИНИ СПЕЦИАЛНОСТ „ИНЖЕНЕРНА ФИЗИКА“

НИЕ, ЧЕТИРИДЕСЕТГОДИШНИТЕ – А СЕГА, НАКЪДЕ ?

КОНСТАНТИН СТАЕВСКИ

*Катедра „Ядрена техника и ядрена енергетика“  
Физически факултет, Софийски университет „Св.Климент Охридски“*

Механичното съчетаване на две стари филмови заглавия маркира два факта , известни на академичния състав на Физическия факултет при Софийския университет, а именно:

– специалността „Инженерна физика“ е натрупала 40-годишен образователен опит;

– бъдещото развитие на тази специалност тъне в безпътна мъгла.

В последно време бързо се разпространява „модата“ да не се отбелязват 40-годишните юбилеи под предлог, че сакралното число съответства на тъжния помен, когато душата се възнася над тленните останки. Не зная дали мистичната аналогия е убедителна, но печалната истина е, че няма повод за юбилейни фанфари, отбелязващи кръглата годишнина от рождението на инженерната специалност във факултета. Причините за нерадостното състояние са комплексни, както е прието клиширано да се казва при подобни констатации. В този текст се прави опит за кратък анализ на състоянието на специалността, изпаднала в тежка „агония“, и се търсят пътища за евентуалното ѝ реанимиране. Всичко това е в контекста на силно девалвиралата ни и декапитализирана по отношение на кадровия потенциал образователна система. Система, която се лута без ориентири и за един кратък исторически период успя да произведе около 1 милион полуграмотни хора.

---

*За контакти:* Константин Стаевски, Катедра „Ядрена техника и ядрена енергетика“, Физически факултет, Софийски университет „Св.Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучер“ 5, 1164 София, тел: +359 2 8161 603, E-mail : [staev@phys.uni-sofia.bg](mailto:staev@phys.uni-sofia.bg)

Преди 10 години по аналогичен повод направих историческа ретроспекция за „ашладисването“ на инженерните познания в общофундаменталната универсалност на физическата наука. Плодовете на тази кръстоска бяха интердисциплинарните специалисти с етикет „инженер-физици“, които надграждаха физическия си базис с инженерно-приложни подходи, което ги правеше особено ценни и ефективни кадри за науката и практиката. Тук не искам да се спирам на „вътрешно-видовите“ боричкания във факултета за ролята, мястото и престижа на специалността.

За съжаление обществените условия силно се промениха през последните 20 и повече години, така че реализацията на тези абсолвенти все повече е подчинена на пазарната стихия, а както е известно, цели отрасли на модерните технологии, като оптоелектроника, лазерна и полупроводникова техника, космическо приборостроене, а в последно време дори и ядрената енергетика, са области със затихващи функции в нашата „демократична“ татковина. Така че тези специалисти търсят и намират своето място предимно в чужбина, където доста добре реализират своя образователен ценз. Естествено, свитото търсене на тези кадри силно стеснява и броя на кандидатстващите във Физическия факултет. Приемът се осъществява с елементарен тест или оценка от матура при успех от средното образование около много добър и въпреки ниската бариера, около 30% от отпуснатите по държавна поръчка места остават незаети. Слабо мотивираните и още по-слабо подготвени от средния курс студенти лесно „окапват“ още през първите две години от следването, така че успелите да завършат бакалавърска степен са по-малко от 50% от приетите. Ако трябва с по-прости числа да се онагледят реалността – от приети 30 студенти по инженерно-физическите специалности завършват не повече от 15 випусника. Специално за настоящата година във 2 курс потокът от специалностите „Инженерна физика“ и „Ядрена техника и енергетика“ наброява точно 10 студенти. Едно от логичните обяснения на този нерадостен факт е, че, както е известно, Софийският университет подготвя два основни профила вишисти – единият, силно привлекателен, в който се учат да пишат и говорят добре и където се влиза доста трудно, а другият – с улеснен прием, но където следването е свързано с усилен мисловна дейност, която не е по вкуса на „шопския ни манталитет“, познат ни от сентенцията „Мразим да мислим, оти че бъркам,..“ Общозвестно е също така, че в България е заплатен сравнително добре трудът на пишещите, показващите и ораторстващите, а не на знаещите, мислещите, търсещите и можещите. Всичко това действа демотивиращо и стеснява в количествено и в качествено отношение кръга на желаещите да се посветят на природните науки. Получените диспропорции са в основата на явлениято „структурна безработица“.

Без да откривам топлата вода, повече от ясно е, че растежът на брутния ни национален продукт, т.е. качеството на живота в страната, е тясно свързан с ефективната реализация на научно-техническия ни потенциал. За огромно съжаление именно през последните бурни години на преход, когато повечето процеси имаха стихийно развитие, тези кадри бяха изтласкани в периферията, което закономерно доведе до много ниски нива на иновационна дейност. Получи се омагьосан кръг, когато хората, които могат да бъдат мотор на развитието, са мачкани, законите имат предимно пожелателно-назидателен характер с лобистки оттенък и блестят главно с тяхното неспазване, а важните решения са хаотични и се вземат с крещяща некомпетентност.

Естественият въпрос в създадената ситуация е какво да се прави? Така зададен той звучи революционно, но реалността изисква еволюционен подход, включващ целенасоченост, системност, методичност, контрол и много, ама действително много, от така дефицитния по тези ширини управленски разум, който да насочва в правилната посока и да оптимизира влаганите средства и усилия.

Както в живота на всеки човек успешният резултат е пряко следствие от оптималния избор на приоритети, така и обществото трябва да определи своите приоритети, които да го водят към определени цели. В този смисъл, без да претендирам за оригиналност, от първостепенно значение е развитието на образованието в Република България, въпреки че и болшинството от другите ресори също са “презрели”, за реформиране. Това е дългосрочен процес, но сега за пореден път трябва да се положат основите му чрез съзидателна законотворческа реформа, обхващаща всичките му степени и взаимоотношения. Какво се има предвид?

На първо място, трябва да се издигне ролята на Учителя, и то така, че тази професия да има притегателна сила за младите кандидат-студенти и най-способните да търсят своето призвание в нея. Това, както е известно, се постига чрез съответните материални стимули и контролни механизми за изпълнението на определени цели, като например да няма отпадащи от училище. Именно на добрите учители би трябвало да се възлага и писането на учебници, защото квазинаучният стил на сега съществуващите учебни помагала силно отблъсква учениците. Друга конкретна мярка би била по-силната диференциация на образователния процес и свързането му с практиката, така че всеки да намери своята „писта“ на развитие. Тук своите големи отговорности има и бизнесът като основен потребител на кадри. Не е задължително всички да бъдат висшисти, т.е. висшето образование не трябва да е самоцел, защото масовизацията му, така препоръчвана от бюрократите в Брюксел, води в наши условия към девалвация и профанизация. Досегашният резултат от масовото навлизане на студенти през последните 20 години е



налице – свръх производство на кадри, които не работят по специалността си или заемат позиции за по-ниско квалифициран труд.

Изключително важно е да се възстанови много доброто ниво на обучение в природните науки чрез повишаване на хорариумите им и подобряване на модула за упражнения и усвояване, където имаме своите традиции и постижения, защото именно там пропадането в международен сравнителен план е най-чувствително. Струва ми се, че една от необходимите стъпки в тази насока е задължителна втора матура по математика, защото е известно, че това е науката, която развива логическото и иновационното мислене. Това предложение не е призив за дехуманизация на образованието, а за намирането на пропорции, съответстващи на обществените потребности. Така, по естествен път, ще се повиши нивото на зрелостните дипломи и ще се насочат завършващите средно образование към така наречените „положителни науки“, радатели на които бяха дарителите на Софийския университет Евлоги и Христо Георгиеви. Това би било и важна предпоставка за по-качествена подготовка на бъдещите специалисти и докторанти.

В рамките на този материал си позволих да надскоча конкретната проблематика, свързана с една юбилейна годишнина, не само поради факта, че това послание е своего рода „лебедова песен“ на един преподавател в предпензионна възраст, посветил 40 години от живота си на развитието на инженерната физика във Физическия факултет, но исках да споделя и изстрадани идеи за подобряване на образователния процес в неговата цялост. Крайно време е да се разбере, че не „далаверата“, а знанието е генератор за развитие и просперитет, че прилагането му в практиката е гаранция за повишаването на така желаната добавена стойност на труда ни. Не тая излишни илюзии, но се надявам нещо от това да интерферира с критичния разум на интелигентния читател.

Ако трябва да резюмирам написаното, основната цел на образованието, по моето скромно мнение, е да създава мислещи, търсещи и можещи личности, които да реализират потенциала си оптимално в живота, чувствайки удовлетворение от работата си и носещи полза за себе си и обществото. Имам абсолютната убеденост, че специалността „Инженерна физика“ е носител на горепосочените положителни характеристики и има всички предпоставки да стане инкубатор за кадри, генериращи иновационни идеи, реализирани в науката и практиката. Някаква надежда в тази посока ми дават лансираните в последно време идеи за създаването в обозримо бъдеще на така наречените технологични паркове, които със сигурност ще имат нужда от този тип специалисти. Би ми се искало да вярвам, че трудът ни не е отишъл напразно, че настоящият текст не е реквием за една предизвестена кончина, че след Голгота ще има Възкресение ...



# ГОДИШНИК НА СОФИЙСКИЯ УНИВЕРСИТЕТ „СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ“, ФИЗИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

**Обхват на списанието.** *Годишникът* включва всички научноизследователски направления във Физическия факултет. Той се издава веднъж годишно. Публикуването в него е безплатно.

**Изисквания към статиите.** Статиите се изпращат по електронната поща на главния редактор (vporov@phys.uni-sofia.bg). Представянето включва текста, написан на Word в DOC формат, с включени фигури (вж. Template във web-страницата на Годишника), фигурите в отделни файлове, както и придружаващо писмо с електронните адреси на трима потенциални рецензенти.

Изисква се ръкописът да не е бил и да не бъде публикуван в никое друго издание. Всички ръкописи ще бъдат рецензирани. Авторите ще бъдат уведомени при одобряване на статиите за публикуване. Редакторите си запазват правото да редактират ръкописите, когато е нужно, и да връщат тези, които не отговарят на изискванията и обхвата на списанието.

Авторите отстъпват авторските права върху ръкописа на Физическия факултет на Софийския университет „Св. Климент Охридски“. Това включва и правата за адаптиране и оформяне на статията с цел използване на компютърни програми и системи, необходими при отпечатването.

**Подготовка на ръкописа.** Желателно е ръкописите да не са по-големи от 20 стр. Те трябва да са напечатани едностранно на листове А4 и с достатъчно широки полета. Ръкописът трябва да има следната структура: заглавие, автор(и), месторабота, абстракт на английски, абстракт на български, PACS номер, ключови думи (на англ.), основен текст, благодарности, допълнения, литература (вж. Template). Името, пълен пощенски адрес, телефонен и факс-номер и електронен адрес на автора за кореспонденция трябва да са изписани на първата страница като бележка под черта.

*Фигурите* трябва да са поставени в текста, близо до първото им споменаване. Те трябва да са с високо качество (резолюция не по-малко от 300 dpi) и се представят в отделни файлове в EPS формат (за векторните изображения – черно-бели чертежи и графики) и JPG или TIF формат (за растерните изображения – снимки, рисунки). Всички цветни фигури трябва да са конвертирани в черно-бели.

*Таблиците* да са с минимален брой разграничителни линии, да са поместени в текста, близо до техния коментар и отделени с известно разстояние отгоре и отдолу. *Забележките под черта* да са минимален брой, кратки и последователно номерирани. *Литературата* да се цитира в квадратни скоби, например [3], [1, 3], [5, с./р. 98], [12, гл./Ch. 2.11], като номерирането е последователно, по реда на цитирането.

*Примери за оформяне списъка на литературата:*

[1] Haake, F. Quantum Signatures of Chaos. Berlin, 1991.

[2] Berlad, G. I., A. P. Dar, G. M. Eilam. *Phys. Rev. D*, 1980, **22**, 7, 1547.

[3] DeWitt-Morette, C. In: *NATO ASI Series B: Physics*, 1997, **361**, 51.

За по-подробна информация относно подготовката на ръкописа, моля, контактувайте с редакторите на адрес [annuaire@phys.uni-sofia.bg](mailto:annuaire@phys.uni-sofia.bg) или [cvet@phys.uni-sofia.bg](mailto:cvet@phys.uni-sofia.bg).

ANNUAIRE DE L'UNIVERSITE DE SOFIA  
"ST. KLIMENT OHRIDSKI", FACULTE DE PHYSIQUE

**Scope of the journal.** The *Annuaire* covers all areas of research at the Faculty of Physics. It is published once a year. There is no page charge.

**Submission of papers.** The papers are to be submitted by e-mail to the Editor-in-Chief (vpopov@phys.uni-sofia.bg). The submission of a paper includes the paper in Word DOC format with inserted figures (see Template), the figures as separate files, and a cover letter with the e-mail addresses of three potential Referees.

The submission of a paper implies that it has not been published previously, nor has been submitted for publication elsewhere. All papers will be subjected to a peer review. The authors will be notified of the acceptance of the paper. The Editors reserve the right to edit papers, where necessary, and refuse papers, which do not satisfy conditions of standard or contents.

The acceptance of a paper implies that the authors transfer the copyright to the Faculty of Physics of St. Kliment Ohridski University of Sofia including the right to adapt the paper for uses in conjunction with computer systems and programs, and also reproduction or publication in machine-readable form and incorporation in retrieval systems.

**Manuscript preparation.** The manuscripts should be no longer than 20 pages. The manuscripts must be typed on one side of A4 paper with wide margins.

The manuscript should have the following structure: Title, Author(s), Affiliation(s), Abstract in English, Abstract in Bulgarian, PACS codes and keywords, Main text, Acknowledgements, Appendices, References.

The name, complete postal address, telephone and fax numbers and the e-mail address of the corresponding author should be given as a footnote on the first page of the manuscript.

*Figures* must be inserted in the manuscript near their first reference with captions just below the figures. High-quality figures (at least 300 dpi) must be provided in the submission as separate files in EPS format (for black and white figures) and JPG or TIF format (for grey scale figures). Any color figure should be converted into a grey scale one before submission.

*Tables* should be with a minimum number of dividing lines and should be inserted in the text near their first reference.

*Footnotes* should be brief and kept to a minimum, and must be numbered consecutively.

*References* must be consecutively numbered in the text using square brackets, e.g., [3], [1, 3], [5, p. 98], [12, Ch. 2.11], etc. They must be listed by number in the Reference list.

*Examples:*

[1] Haake, F. Quantum Signatures of Chaos. Berlin, 1991.

[2] Berlad, G. I., A. P. Dar, G. M. Eilam. *Phys. Rev. D*, 1980, **22**, 7, 1547.

[3] DeWitt-Morette, C. In: *NATO ASI Series B: Physics*, 1997, **361**, 51.

For detailed information about manuscript preparation, please, contact the Editors at annuaire@phys.uni-sofia.bg or cvet@phys.uni-sofia.bg.