

Секция 2

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК: 535.3

К. I. Ermolaeva, P. V. Petrov

PHOENIX REFRACTIVE LENS FOR NEUTRON AND X-RAYS

Phoenix lens system is a new type of refractive lens. Phoenix lens system consists of arrays of refractive lenses and can be used for focusing X-rays and thermal neutrons. Optical properties Phoenix lens for X-rays and thermal neutrons are discussed.

Up to now using refractive optics for X-rays and neutrons were unreasonable due to small value of refraction index and large value of absorption and scattering. Real part of refraction index n is negative both for X-rays and neutrons:

$$n=1-\delta+i(\lambda/4\pi)\mu \quad (1)$$

The focal length R of the individual refractive neutron or X-ray concave lens is more than 100 m and it is inappropriate for practical using:

$$F=R/2\delta \quad (2)$$

The focal distance of stack of N refractive lenses is N times smaller than the focal distance of individual lens due to the geometrical optics. So the stack of the biconcave refractive lenses can be suitable for X-rays and neutron experiments.

The refractive X-ray optics starts after publication results of focusing experiments of 18 keV X-rays by Al plate containing 30 holes [1]. Now X-ray refractive lenses are used with most powerful synchrotrons of the third generation: APS (USA), ERSF (France), SPring-8 (Japan). Used in experiments refractive neutron MgF_2 lenses have focal distance 8,7m and transmission 50% for 1.32nm neutron beam, and measured gain was 9,7 [3]. As it was proposed in 1999 refractive neutron lenses can be used for new forms of neutron microscopes [4]. Microcapillary refractive lens was developed at Belarussian State University [2]. The optical properties of the material for X-rays and thermal neutrons are very similar, so refractive neutron lenses worked out the same principle as X-ray lens. Holes and bubbles in material can be used as focusing refractive lenses.

Here we focused on the problem severe radiation load during work of the refractive lenses. Radiation damages lead to small lens work time. It is proposed to produce arrays of bubble lenses for focusing X-rays and thermal neutrons – “Phoenix lens” from liquid. The Phoenix lens can be produced, destroyed or regenerated during one experiment. Optical properties of Phoenix lens depends on structure type of refractive arrays.



Fig.1. Photo of Phoenix lens

Lens material should be liquid under room temperatures, with low absorption and scattering coefficients for neutrons or X-rays. Experiments with water solution which melting point close to 273 K (0°C) and liquid nitrogen 77 K (-196°C) show ability to produce hardened 3-D arrays of refractive lens fig.1. 3-D arrays of refractive lens made inside of glass tube with 5 mm in diameter. Number of bubbles in layer is equal to 31. Bubble (lens) diameter is 150 μm. Tube length is 10.2 cm. Number of bubble layers is 124. Number of lens for focus calculations is 62. Phoenix lens systems for generation and regeneration of arrays of refractive lenses is proposed. Focusing properties of refractive Phoenix lens are investigated

References

1. A.Snigirev, V.Kohn, I.Snigireva, B.Lengeler, "A compound refractive lens for X-ray focus", Nature 384 (1996) 49.
2. Yu.I.Dudchik, N.N.Kolchevsky "A microcapillary lens for X-rays", Nucl.Instr.Meth.A 421(1999)361.
3. J. Kohlbrecher et.al., // PSI Annual Report. -- 2000.
4. US patent # 5,888,478, 1999.

Phoenix lens system is a new type of refractive lens. Phoenix lens system consists of arrays of refractive lenses and can be used for focusing X-rays and thermal neutrons. Optical properties Phoenix lens for X-rays and thermal neutrons are discussed.

Ермолаева Кристина Игоревна, студентка 3 курса факультета радиофизики и компьютерных технологий БГУ, Минск, Беларусь.

Научный руководитель – Кольчевский Николай Николаевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники и нанотехнологий БГУ, Минск, Беларусь.

УДК 539.2

Ю. Н. БОРИСЕВИЧ

ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ ДЕБАЯ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Анализируется использование температуры Дебая θ_D и размерных факторов при определении теплофизических свойств веществ. Предложена методика расчета зависимости размерного фактора от температуры.

Температура Дебая, являясь характеристической величиной, табулируется для различных веществ. Она возникла при анализе поведения теплоемкости при низких температурах. Исходной позицией при ее определении является выбор частоты Дебая ω_D . Поскольку в природе отсутствуют кристаллы, реальная теплоемкость которых при разных температурах была бы равна теплоемкости из модели Дебая при одном значении θ_D , то эту температуру следует считать подгоночным параметром. Этот фактор следует учитывать при сравнении экспериментальных и расчетных данных (например, по теплоемкости).

Зависимость $\theta(T)$ для разных веществ имеет характерный минимум рис. 1. Насколько критичен разброс температур Дебая, решается в каждом конкретном случае.

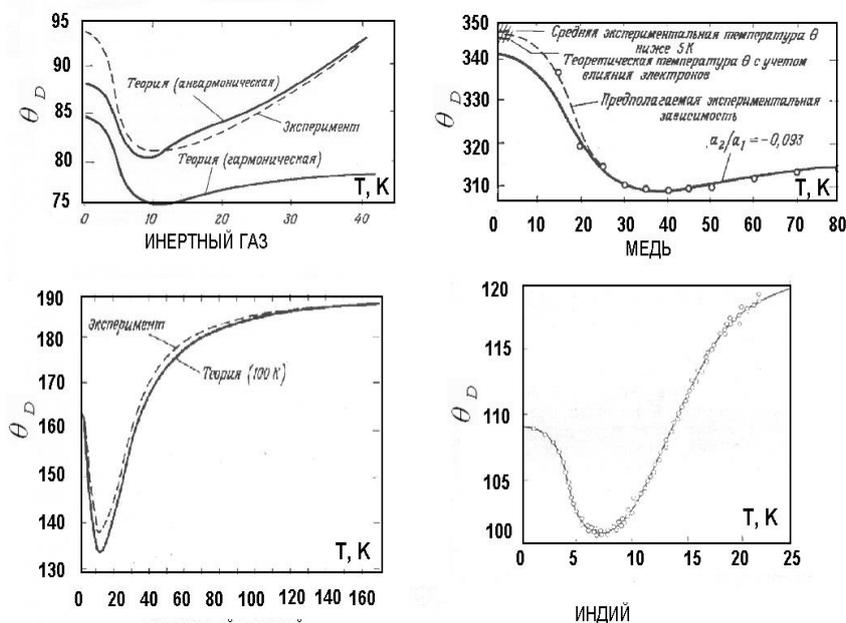


Рисунок 1 – Зависимость температуры Дебая от температуры [2,3]

Предложены уравнения, которым должна следовать зависимость температуры Дебая θ_D от температуры, чтобы вычисляемые на ее основе термодинамические функции удовлетворяли как третьему началу термодинамики, так и закону о равномерном распределении энергии по степеням свободы:

$$\theta(T) = \theta_0 \exp[-\gamma(T/\theta_0)^\beta] + \theta_\infty \exp[-\alpha\theta_\infty/T] \quad (1)$$

где θ_0, θ_∞ соответственно «низкотемпературная» температура Дебая, «высокотемпературная» температура Дебая, α, β, γ параметры, определяемые по методике [2].

На основе различных подходов: на основании теорем Блоха, на основании соотношения неопределенностей, с использованием уравнения Шредингера и дебаевской длиной волны – получена формула (Лиопо) для расчета размерной границы между макро- и нанозонами, в которую входит температура Дебая [4]:

$$L_0 = \sqrt{0,5/(km)\hbar\theta_D^{-0,5}} \quad (2)$$

где k, m, \hbar, θ_D – постоянная Больцмана, масса, постоянная Планка, температура Дебая. Подстановка (1) в (2) позволяет получить зависимость размерного фактора от температуры.

Список литературы

1. Блейкмор, Дж. Физика твердого тела : пер. с англ. / Дж. Блейкмор. – М. : Мир, 1988. – 608 с.
2. Магомедов, М. Н. Об определении температуры Дебая из экспериментальных данных. / М. Н. Магомедов // Физика твердого тела, 2003. – Т. 45, Вып. 1. – С. 33–36.
3. Рейсленд, Дж. Физика фононов : пер. с англ. / Дж. Рейсленд. – М. : Мир, 1975. – 362 с.
4. Лиопо, В. А. Размерные факторы фононных спектров / В. А. Лиопо, А. В. Струк, А. В. Никитин // Вестник ГрГУ им. Я. Купалы. Серия 2. – 2010. – № 3 (102). – С. 59–64.

We analyze the use of the Debye temperature and dimensional factors in determining the thermal properties of substances. The method of calculation of the size factor depending on the temperature.

Борисевич Юрий Николаевич, студент 5 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, kassik0boks@gmail.com.

Научный руководитель – *Никитин Александр Викторович*, кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической физики и теплотехники ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, nik@grsu.by.

УДК 004.942

Т. В. ГРИГОРЬЕВА, В. Ю. БОРИС

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЖИТТЕРА ПРИ ПАКЕТНОЙ ПЕРЕДАЧЕ ИНФОРМАЦИИ

Переход к цифровым методам передачи и коммутации помимо преимуществ, обусловленных новыми технологиями связи, вызвал множество проблем, одной из которых является джиттер. В связи с этим встает необходимость изучения джиттера: создание модели с использованием экспериментально полученных данных, которая позволит получить визуальное представление джиттера.

Джиттер (англ. jitter — дрожание) — нежелательные фазовые и/или частотные случайные отклонения передаваемого сигнала. Возникают вследствие нестабильности задающего генератора, изменений параметров линии передачи во времени и различной скорости распространения частотных составляющих одного и того же сигнала.

Например, джиттер сигнала тактового генератора возникает по причине того, что фронт импульса реального и идеального генераторов различаются, что, кстати говоря, совершенно нормально. В отличие от достижимого в теории идеального сигнала, точка пересечения нуля фронта реального сигнала для разных импульсов различается по времени. Говоря иначе, джиттер — это фазовая модуляция формы цифрового сигнала.

Составляющая джиттера может быть извлечена из тактового или самотактующегося цифрового сигнала и проанализирована в отдельности. Среди наиболее полезных путей изучения влияния джиттера является исследование частотной характеристики и выявление главных частотных компонентов джиттера.

Можно выделить следующие причины появления джиттера:

1. Влияние сети.

Во-первых, неустойчиво и плохо предсказуемо время прохождения пакета через сеть. Если нагрузка сети относительно мала, маршрутизаторы и коммутаторы могут обрабатывать пакеты практически мгновенно, а линии связи бывают доступны почти всегда. Если нагрузка сети относительно велика, пакеты могут довольно долго ожидать обслуживания в очередях. Чем больше маршрутизаторов, коммутаторов и линий в маршруте, по

которому проходит пакет, тем больше время его *запаздывания* и тем больше вариация этого времени, то есть джиттер.

2. Влияние операционной системы.

Большинство операционных систем не могут контролировать распределение времени центрального процессора между разными процессами с точностью, превышающей несколько десятков миллисекунд, и не могут обрабатывать за такое же время более одного прерывания от внешних устройств. Это приводит к тому, что задержка в продвижении данных между сетевым интерфейсом и внешним устройством речевого вывода составляет, независимо от используемого алгоритма кодирования речи, величину такого же порядка или даже больше.

3. Влияние джиттер-буфера.

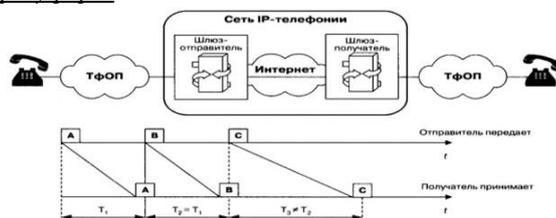


Рисунок 1 – Различие интервалов между моментами прибытия пакетов (джиттер)

Задержка прохождения пакетов по сети T_i может быть представлена как сумма постоянной составляющей T (время распространения плюс средняя длительность задержки в очередях) и переменной величины j , являющейся результатом джиттера: $T_i = T \pm j$.

Для того чтобы компенсировать влияние джиттера, в терминалах используется так называемый джиттер-буфер. Этот буфер хранит в памяти прибывшие пакеты в течение времени, определяемого его объемом. Пакеты, прибывающие слишком поздно, когда буфер заполнен, отбрасываются. Интервалы между пакетами восстанавливаются на основе значений временных меток RTP-пакетов. В функции джиттер-буфера обычно входит и восстановление исходной очередности следования пакетов, если при транспортировке по сети они оказались "перепутаны".

Проверим работоспособность джиттера по Лапласу с помощью средств моделирования Mat LAB.

Наша модель основывается на распределении оператора Лапласа, где мы моделируем джиттер задержки. Распределение временных интервалов, полученных на основе программы, имеет плотность вероятности, хорошо описываемую функцией Лапласа, что показано на рисунке 2а.

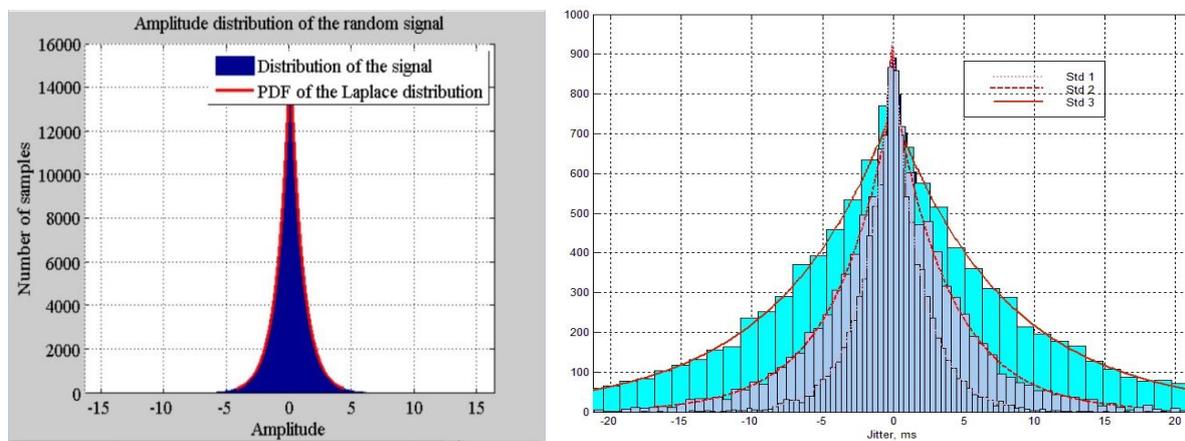


Рисунок 2 –а), б) Графики распределения в Mat LAB (джиттер)

В зависимости от различных значений средне-квадратического отклонения std получены следующие кривые воздействия джиттера на передаваемые данные (или передаваемые пакеты) в сетях передачи данных информации. В зависимости от средне-квадратического значения std джиттера (или распределения джиттера) происходит изменение отображения значений на кривой (на графике 2б).

Список литературы

1. Д. Данн, Джиттер. Виды джиттера, измерения джиттера/Джулиан Данн - 64с.
2. D. Nehring, Oscillator Jitter FAQ/Dan Nehring-8с.

3. НОУ Интуит [Электронный ресурс]– Режим доступа: <http://www.intuit.ru/studies/courses/8/8/lecture/243> - Дата доступа: 18.02.2016.

In this contribution, we propose a simple model for forward link packet delay jitter. We propose a Laplacian distribution with forward link system simulation.

Григорьева Татьяна Валерьевна, студентка 3 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, jatagr@mail.ru.

Борис Виктория Юрьевна, студентка 3 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь.

Научный руководитель – *Ассанович Борис Алиевич*, кандидат технических наук, доцент кафедры информационно-измерительных систем и технологий ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, bas@grsu.by.

УДК 621.315.592.3

А. Н. ДЕРЕВЯГО

ДРЕЙФОВАЯ ПОДВИЖНОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В ВЫРОЖДЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Развита модель подвижности, в которой время релаксации квазиимпульса электрона c -зоны (или дырки v -зоны) предполагается равным времени пролета его сквозь сферическую область с ионом примеси в центре (радиус сферы равен половине среднего расстояния между ионами примеси). Результаты расчета по этой модели сравниваются с расчетами по моделям Конуэлл–Вайскопфа и Брукса–Херринга.

В данной работе, используя подход, развитый в работах [1,2], дано описание упругого рассеяния электрона c -зоны (или дырки v -зоны) на ионах водородоподобной примеси ($|Z| = 1$) в сильно легированных вырожденных полупроводниках. Пусть N — концентрация основной примеси, KN — концентрация неосновных примесей, K — степень компенсации основных примесей неосновными, тогда $n = (1 - K)N$ — концентрация основных носителей заряда (электронов в c -зоне) в кристаллическом полупроводнике; $N_i = (1 + K)N = [(1 + K)/(1 - K)]n$ — общая концентрация ионов примесей. В модели рассеяния электрона проводимости на одном ионе в сильно легированных вырожденных полупроводниках должны выполняться 2 условия.

1) Условие вырождения газа основных носителей заряда выполняется, когда средняя кинетическая энергия электрона $3\zeta_F/5$ более чем в два раза превышает его среднюю тепловую энергию $3k_B T/2$:

$$\frac{3}{5}\zeta_F = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_d} (3\pi^2 n)^{2/3} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right] > 2 \frac{3}{2} k_B T, \quad (1)$$

где $\zeta_F = E_F [1 - (\pi^2/12)(k_B T/E_F)^2]$ — химический потенциал, E_F — энергия Ферми, $m_d = v^{2/3} m_{d1}$ — эффективная масса плотности состояний для электронов, v — число долин, m_{d1} — эффективная масса плотности состояний в одной долине.

2) В пределе низких температур (при $T \rightarrow 0$) условие (1) неприменимо, поэтому используем условие концентрационного фазового перехода изолятор–металл (перехода Мотта). Согласно этому условию фазовый переход изолятор–металл происходит, когда концентрация основных носителей заряда превышает пороговую концентрацию электронов (n_M), соответствующую переходу Мотта [3]:

$$\frac{n_M^{1/3} a_B}{v^{2/3}} = \frac{0.1}{(1 - K)^{2/3}} = \frac{\zeta_M}{v^{2/3}}, \quad (2)$$

где $a_B = 4\pi\epsilon_r\epsilon_0\hbar^2/m_{d1}e^2$ — боровский радиус электрона (дырки) в одной из v долин, $\epsilon = \epsilon_r\epsilon_0$ — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника, ϵ_0 — электрическая постоянная, e — элементарный заряд.

При рассеянии электронов на ионах примеси дрейфовая подвижность электронов проводимости $\mu_i = e\langle\tau_i\rangle/m_\sigma$, где m_σ — эффективная масса электропроводности, определяется (см., например, [1,2]) средним временем $\langle\tau_i\rangle$ релаксации квазиимпульса

$$\langle\tau_i\rangle = \int_0^\infty \tau_i(E) E^{3/2} \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE \left[\int_0^\infty E^{3/2} \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE \right]^{-1}, \quad (3)$$

где $\tau_i(E)$ — время релаксации квазиимпульса электрона (с кинетической энергией E); $f(E) = \{1 + \exp[(E - \zeta_F)/k_B T]\}^{-1}$ — равновесная функция распределения Ферми–Дирака. В случае сильного вырождения из (3) следует, что $\langle\tau_i\rangle \approx \tau_i(\zeta_F)$. Значение времени релаксации квазиимпульса электрона c -зоны $\tau_i(E)$ с квазиимпульсом Ферми $\hbar k_F$, согласно работам [1, 2], при $E = \zeta_F$ определяется следующим образом:

$$\left(\frac{1}{\tau_i(\zeta_F)} \right)_{PВУК} = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \right)^2 \frac{n^{2/3}}{\hbar\zeta_F} \left(\frac{1+K}{1-K} \right)^{2/3} \ln \left[1 + \left(\frac{8\pi\epsilon_r\epsilon_0 R_i \zeta_F}{e^2} \right)^2 \right], \quad (4)$$

где индекс PВУК — первые буквы фамилий авторов статьи [1].

Из формулы $\mu_i = e\langle\tau_i\rangle/m_\sigma$ и (4) следует формула для дрейфовой подвижности электронов c -зоны

$$\left(\frac{1}{\mu_i}\right)_{\text{PВУК}} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \frac{m_\sigma}{e} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0}\right)^2 \frac{n^{2/3}}{\hbar\zeta_F} \left(\frac{1+K}{1-K}\right)^{2/3} \ln(1+x^2), \quad (5)$$

где $x = 8\pi\epsilon_r\epsilon_0 R_i \zeta_F / e^2$ — безразмерный параметр.

Далее результаты вычислений по (5) сравниваются с расчетами по известным моделям. Согласно модели Конуэлл–Вайскопфа [4] подвижность имеет вид:

$$\left(\frac{1}{\mu_i}\right)_{\text{CW}} = \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/3} \frac{m_\sigma}{e} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0}\right)^2 \frac{v^{1/3} n^{2/3}}{\hbar\zeta_F} \left(\frac{1+K}{1-K}\right) \ln(1+y^2), \quad (6)$$

где $y = 8\pi\epsilon_r\epsilon_0 b \zeta_F / e^2$ — безразмерный параметр, $b = N_i^{-1/3}/2$, индекс CW — первые буквы фамилий авторов статьи [4]. В модели Брукса–Херринга (см., например, [5]) подвижность носителей заряда определяется так:

$$(\mu_i)_{\text{ВН}} = \frac{3\pi}{2} \left(\frac{\hbar}{e}\right)^3 \left(\frac{4\pi\epsilon_r\epsilon_0}{m_{dl}}\right)^2 \frac{(1-K)/(1+K)}{\ln(1+b)-b/(1+b)}, \quad (7)$$

где $b = (\hbar/e)^2 (4\pi\epsilon_r\epsilon_0/m_{dl})(3\pi^5 n)^{1/3}$; индекс ВН — первые буквы фамилий авторов модели Брукса–Херринга.

В работе [6] методом теории возмущения было получено выражение для подвижности, ограниченной электрон–электронным рассеянием:

$$\mu_{e-e} = (\exp(1) - 1)(\mu_i)_{\text{ВН}} \approx 1.72(\mu_i)_{\text{ВН}}. \quad (8)$$

Итоговая подвижность μ_t , учитывающая электрон–ионный и электрон–электронный механизмы рассеяния, находится из правила Матиссена:

$$\mu_t^{-1} = \mu_i^{-1} + \mu_{e-e}^{-1}. \quad (9)$$

На рис. 1 приведен график зависимости дрейфовой подвижности электронов μ_t от их концентрации в некомпенсированных кристаллах *n*-Ge при температуре $T \rightarrow 0$.

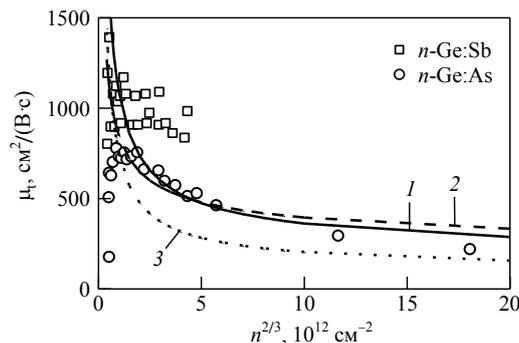


Рисунок 1 – Подвижность электронов проводимости в зависимости от их концентрации в сильно легированном вырожденном *n*-Ge при температуре $T \rightarrow 0$. Экспериментальные данные из работы [7] обозначены кружками (*n*-Ge:As) и квадратами (*n*-Ge:Sb). Линии — расчет: сплошная 1 — по (5), штриховая 2 — по (7), пунктирная 3 — по (6) с учетом (8) и (9)

Список литературы

1. A semiclassical approach to Coulomb scattering of conduction electrons on ionized impurities in nondegenerate semiconductors / N.A. Poklonski [et al.] // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 93, № 12. – P. 9749–9752.
2. A comparison of two-particle models for conduction electron scattering on hydrogen-like impurity ions in non-degenerate semiconductors / N.A. Poklonski [et al.] // Phys. Status Solidi B. – 2007. – Vol. 244, № 10. – P. 3703–3710.
3. Электростатические модели концентрационных фазовых переходов изолятор–металл и металл–изолятор в кристаллах Ge и Si с водородоподобными примесями / Н.А. Поклонский [и др.] // ФТТ. – 2004. – Т. 46, № 6. – С. 1071–1075.
4. Theory of impurity scattering in semiconductors / E. Conwell [et al.] // Phys. Rev. – 1950. – Vol. 77, № 3. – P. 388–390.
5. Ionized impurity scattering of charge carriers in crystalline semiconductors / N.A. Poklonski [et al.] // Phys. Status Solidi B. – 1998. – Vol. 206, №. 2. – P. 713–721.
6. Quantum transport theory of impurity-scattering-limited mobility in *n*-type semiconductors including electron-electron scattering / M. Luong [et al.] // Phys. Rev. B. – 1971. – Vol. 4, № 8. – P. 2436–2441.
7. Ionized-impurity scattering in the strong-screening limit / J.R. Meyer [et al.] // Phys. Rev. B. – 1987. – Vol. 36, № 11. P. 5989–6000.

Mobility model in which the quasimomentum relaxation time of the electron of *c*-band (or hole of *v*-band) is assumed to be equal to the time of its flight through spherical region with an impurity ion in the center (the radius of the sphere is equal to half the average distance between impurity ions) is developed. The results are compared with the results of calculations by Conwell–Weisskopf and Brooks–Herring models.

Деревяго Александр Николаевич, студент 5 курса физического факультета БГУ, Минск, Беларусь, deralexn@list.ru.

Научный руководитель – *Поклонский Николай Александрович*, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники физического факультета БГУ, Минск, Беларусь, poklonski@bsu.by.

УДК 539.2:546.8:546.04

М. С. ЗЕЛЕНИНА, В. А. СКАЧКОВА, О. А. КОЗЛОВА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПИНЦИПОВ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ZnO:X (Sc, Mn)

Представлены результаты моделирования магнитных свойств оксида цинка легированного переходными металлами: марганцем и скандием. Проведена оценка магнитного момента исследуемых систем.

В рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в программном комплексе VASP [1, 2], исследованы электронные и магнитные свойства оксида цинка с примесными атомами переходных металлов в узлах кристаллической решетки (скандий и марганец).

На первом этапе выполнены предварительные расчеты для определения сходимости энергии в зависимости от числа k -точек в зоне Бриллюэна и энергии обрезания. Установлено, что для процедуры согласования и расчета плотности электронных состояний необходимо использовать расчетную сетку $8 \times 8 \times 8$ k -точек и энергию обрезания - 550 эВ.

Моделирование магнитных свойств проводилось с учетом периодических условий. Для исключения влияния примесей переходных металлов друг на друга, использовалась суперячейка состоящая из 128 атомов (рисунок 1). С целью учета всех возмущений, возникающих в процессе релаксации атомов в их устойчивое положение, гексагональная структура была преобразована в орторомбическую.

Воспроизведены модели структур ZnO с примесными атомами замещения (Mn и Sc). Процентное содержание дефектов в суперячейке составляло 0,78 % и 2,34 % для марганца и скандия, соответственно (ZnO:Mn_{0,78}, ZnO:Mn_{2,34}, ZnO:Sc_{0,78}, ZnO:Sc_{2,34}).

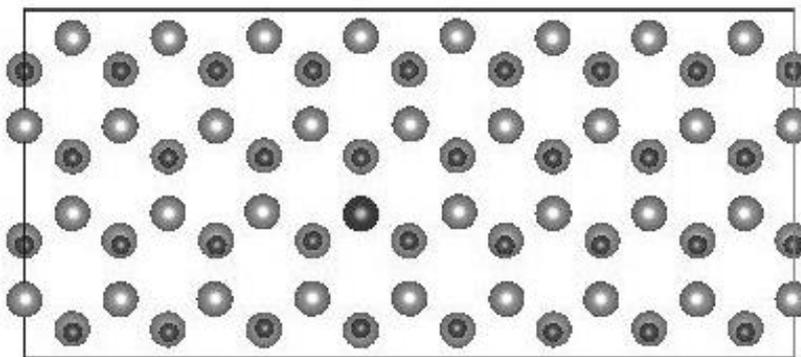


Рисунок 1 – Суперячейка оксида цинка в структурной модификации вюрцит

Исследуемые структуры оксида цинка с дефектами замещения, где в качестве атомов примеси выступают переходные металлы, приобретают металлические свойства. В системе с примесью Mn имеются электроны с нескомпенсированными спинами. В случае, когда атомами замещения является скандий, отсутствует проявление ферромагнитных свойств.

Рассчитанные значения магнитных моментов для исследуемых структур представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Значения магнитного момента для ZnO:X

Наименование структуры	Магнитный момент (μ_B)
ZnO:Mn(0,78)	2,57
ZnO:Mn(2,34)	11,99
ZnO:Sc(0,78)	0,0017
ZnO:Sc(2,34)	0,0231

Полученные значения магнитных моментов можно объяснить особенностями строения электронных оболочек примесных атомов. В частности, у марганца на $3d$ орбитали находится пять нескомпенсированных по спину электронов, а у скандия один нескомпенсированный электрон.

Основным магнитным состоянием системы является ферромагнитное состояние, поскольку при моделировании систем, минимальным значением полной энергии обладают системы, которым были заданы ферромагнитные параметры.

Все исследованные структуры являются стабильными, т.е. общая энергия системы не превышает суммарную энергию атомов системы. Системы, в которых примесные кластеры Sc образуют линейную конфигурацию, более устойчивы, чем кластеры с конфигурацией окружности. В системах с примесными кластерами Mn ситуация обстоит обратным образом: наиболее устойчивы системы с кластерами конфигурации окружности.

Установлено, что зависимость магнитного момента системы “ZnO + Sc” от размера примесного кластера имеет прямопропорциональный характер, а наличие в структуре ZnO примесных атомов Sc никак не влияет на ферромагнитное состояние системы.

Работа проводилась в рамках задания 1.8.05 ГПНИ «Информатика и космос», а также гранта БРФФИ на тему «Изучение структурных, электронных и магнитных свойств дефектных соединений ZnO и ZnSnAs₂, легированных переходными 3d – элементами посредством ab-initio (из первых принципов) моделирования».

[1] Kresse, G. and Joubert, J. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse // Phys. Rev. B - 1999. - Vol.59-P.1758-1765

[2] Kresse, G. VASP the guide: tutorial / G. Kesse // Austria, University of Vienna. – 2003.

Research have been performed with the aim to detect physical features of properties of ZnO crystals with transition metal impurities. It was carried out via ab initio simulation for seeking the conditions and parameters of the optimal technology for creation of the materials with required functional properties for spintronics and sensor devices.

Зеленина Мария Сергеевна, магистрант БГУИР, Минск, Беларусь, pooliateen@mail.ru.

Скачкова Вероника Андреевна, аспирант БГУИР, Минск, Беларусь veranika.burko@gmail.com.

Козлова Ольга Александровна, аспирант БГУИР, Минск, Беларусь olga.bsuir@gmail.com.

Научный руководитель – *Стемпицкий Виктор Романович*, кандидат технических наук, доцент, факультет радиотехники и электроники, БГУИР, Минск, Беларусь, vstem@bsuir.by.

УДК 004.421

В. С. КОМАР, В. А. РИМОШЕВСКИЙ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМА ДИНАМИЧЕСКОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ВРЕМЕНИ

Алгоритм динамической трансформации времени (DTW-алгоритм, от англ. Dynamic time warping) — алгоритм, позволяющий найти оптимальное соответствие между временными последовательностями. Впервые применен в распознавании речи, где использован для определения того, как два речевых сигнала представляют одну и ту же исходную произнесенную фразу. Впоследствии были найдены применения и в других областях таких, как интеллектуальный анализ данных, распознавание жестов, робототехника, медицина, биоинформатика, верификация подписи.

Целью нашей работы является моделирование обработки сигналов на основе алгоритма динамической трансформации времени.

Временной ряд (timeseries) T — упорядоченная последовательность t_1, t_2, \dots, t_N (где N — длина последовательности) вещественных значений, каждое из которых ассоциировано с отметкой времени.

Подпоследовательность (subsequence) T_{im} временного ряда T представляет собой непрерывное подмножество T , начинающееся с позиции i , и имеющее длину m , т.е. $T_{im} = t_i, t_{i+1}, \dots, t_{i+m-1}$, где $1 \leq i \leq N$ и $i + m \leq N$.

Запрос (query) Q — временной ряд, поиск которого необходимо осуществить во временном ряде T . Пусть n — длина запроса, $n \ll N$.

Задача поиска локально похожих подпоследовательностей следующим образом. Пусть D является мерой схожести, $\varepsilon > 0$ — пороговое значение меры и L означает результирующее множество подпоследовательностей. Тогда $T_{im} \in L \Leftrightarrow T_{im}$ удовлетворяет следующим условиям:

1. $m = n$;
2. $D(T_{im}, Q) < \varepsilon$;
3. $i = \arg i = \operatorname{argmin} D(T_{jm}, Q)$.

$$j \in \{i-1, i, i+1\}$$

Динамическая трансформация шкалы времени (DynamicTimeWarping, DTW) представляет собой меру схожести двух временных рядов. Расстояние на основе DTW между двумя временными рядами X и Y , где $X = x_1, x_2, \dots, x_N$ и $Y = y_1, y_2, \dots, y_N$, обозначается как $D(X, Y)$ и определяется следующим образом.

$$D(X, Y) = d(N, N),$$

$$d(i, j) = |x_j - y_j| + \min \begin{cases} d(i-1, j), \\ d(i, j-1), \\ d(i-1, j-1) \end{cases}$$

$$d(0, 0) = 0; d(i, 0) = d(0, j) = \infty; i = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, N$$

При помощи средств моделирования и построения графиков двух сигналов получим результат, представленный на рис.1. Первая часть рисунка демонстрирует два сигнала без применения алгоритма DTW, а вторая часть – после применения. Алгоритм динамического трансформирования времени (DTW) вычисляет оптимальную последовательность трансформации (деформации) времени между двумя временными рядами. Алгоритм вычисляет оба значения деформации между двумя рядами и расстоянием между ними. Таким образом, мы получим сигнал, который будет иметь наименьшее искажение.

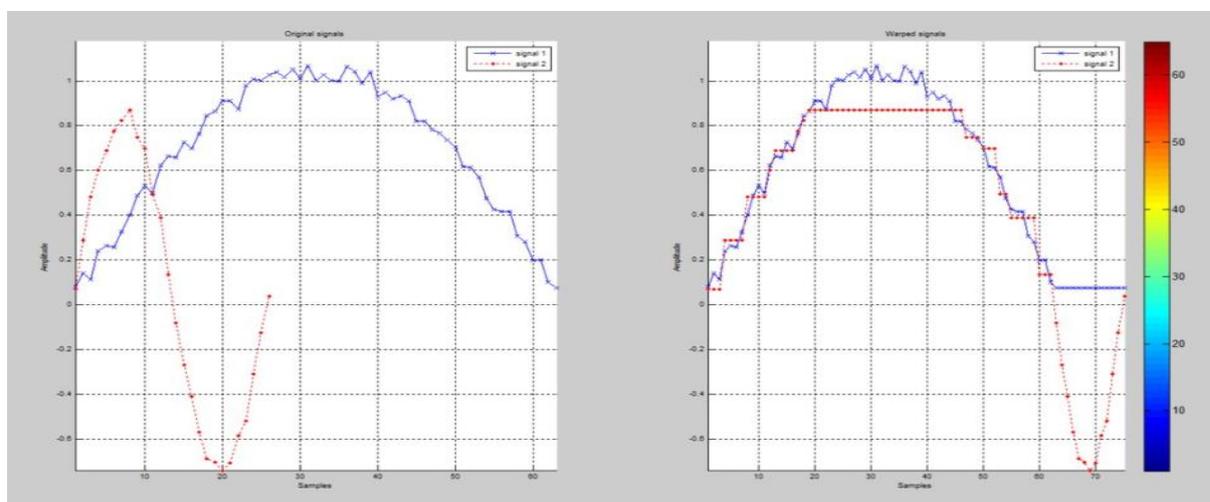


Рисунок 1 – Сигналы до и после обработки с помощью алгоритма

В конце стоит отметить, что DTW остается простым в реализации алгоритмом, открытым для улучшений и подходящим для приложений, которым требуется простое распознавание слов: телефоны, автомобильные компьютеры, системы безопасности и т.д.

Список литературы

1. Cory Myers, Lawrence R. Rabiner, Aaron E. Rosenberg, Performance Tradeoffs in Dynamic Time Warping Algorithms for Isolated Word Recognition, Ieee Transactions On Acoustics, Speech, And Signal Processing, Vol. Assp-28, No. 6, December 1980.
2. Rakthanmanon T., Campana B., Mueen A., Batista G., Westover B., Zhu Q., Zakaria J., Keogh E. Searching and Mining Trillions of Time Series Subsequences under Dynamic Time Warping // The 18th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Beijing, China, 12–16 August, 2012. ACM, 2012. P. 262–270.
3. Электронный ресурс – Режим доступа: <https://habrahabr.ru/post/135087/> - Дата доступа: 19.02.2016.

Simulation of signal processing based on the dynamic time warping algorithm (DTW). DTW calculates the optimal sequence of transformation (deformation) between two time series. The algorithm calculates two values of the strain between the two rows and the distance between them.

Комар Виктор Сергеевич, студент 3 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, vitya.komar.95@mail.ru.

Римошевский Вадим Андреевич, студент 3 курса ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь.

Научный руководитель – Ассанович Борис Алиевич, кандидат технических наук, доцент кафедры информационно-измерительных систем и технологий ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, bas@grsu.by.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ФЛУКТУАЦИЙ СПОНТАННОГО ИСПУСКАНИЯ НА ВЫХОДНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОВЕРХНОСТНО ИЗЛУЧАЮЩИХ ЛАЗЕРОВ

Используя ранее разработанный метод описания поляризованного излучения в полупроводниковых лазерах, проведено детальное теоретическое исследование роли флуктуаций спонтанного испускания в формировании статистических характеристик выходного излучения поверхностно излучающих лазеров. Исследование включало статистическое моделирование при импульсном и стационарном возбуждении, расчеты спектров шумов и функции отклика в приближении слабой модуляции инжекционного тока. Анализ полученных результатов указывает, что флуктуации спонтанного излучения не являются определяющими статистические свойства выходного излучения, однако пренебрежение ими может привести к существенным искажениям результатов.

Ранее отмечалось, что считающееся классическим утверждение о доминирующем влиянии флуктуаций спонтанного излучения на статистические свойства параметров выходного излучения в полупроводниковых лазерах, для поверхностно излучающих лазеров подвергается определенному сомнению. На предыдущей конференции докладывались некоторые результаты по этому направлению и, как было показано, для некоторых случаев флуктуации спонтанного излучения не могут рассматриваться как доминирующий фактор, хотя их влияние может быть существенно лишь при определенных условиях. Поэтому в настоящей работе поставлена задача детального исследования их влияния, при этом основное внимание обращается на область поляризационных переключений, поскольку вследствие неустойчивости поляризационных состояний в этой области статистические свойства выходного излучения должны проявляться наиболее ярко.

Все модельные расчеты выполнялись в рамках ранее разработанного метода [1,2]. В рамках метода решаются уравнения Ланжевеновского типа для поляризационных компонент. Особое внимание обращается на случай возбуждения коротким импульсом, сопоставимым со временем жизни неравновесных носителей в поверхностно излучающих лазерах. Именно в этом случае влияние флуктуаций спонтанного излучения должно проявляться наиболее ярко, поскольку именно спонтанное излучение отвечает за «запуск» генерации. Однако моделирование проводилось и для возбуждения импульсами большей длительности, в пределе переходя к квазистационарному возбуждению.

Проведенное моделирование не выявило существенной зависимости функции распределения интенсивности генерации от значения дисперсии функции распределения шумов, длительности импульсов возбуждения и времени выборки – она оказывается достаточно узкой с дисперсией значения меньше, чем наблюдаемые на эксперименте. Функция распределения степени поляризации оказывается значительно шире и, значение дисперсии примерно того же порядка (хотя и ниже), что и наблюдаемое на эксперименте. Само поведение функции распределения степени поляризации достаточно логично укладывается в рамки указанной модели, однако не проявляет тех особенностей, которые наблюдаются на эксперименте.

Чтобы устранить возможные сомнения относительно адекватности используемой модели был проведен численный расчет спектров шумов при различных условиях возбуждения. Полученные результаты демонстрируют характерный тип спектров шумов с явно выраженным максимумом в области частоты релаксационного резонанса, для подтверждения последнего было проведено моделирование функции отклика в режиме слабой модуляции тока, которое подтверждает сделанные выводы.

Весь комплекс полученных результатов подтверждает ранее сделанные выводы о том, что флуктуации спонтанного излучения не являются определяющими статистические свойства выходного излучения, однако пренебрежение ими может привести к существенным искажениям результатов.

Список литературы

1. Джадан, М. Буров, Л.И., Горбачевич, А.С., Соколов, Е.С. Динамика переключения поляризации излучения в одномодовом инжекционном полупроводниковом лазере. // Журн. прикл. спектр. - 2010. - Т. 77. - С. 74-81.
2. Джадан, М., Буров, Л.И., Горбачевич, А.С., Соколов, Е.С. Переключения поляризации излучения в одномодовом инжекционном полупроводниковом лазере. // Журн. прикл. спектр. - 2009. – Т. 76, № 5. - С. 717-724.

On the base of the early proposed method to describe the semiconductor laser polarization, the detailed theoretical investigation of output radiation statistical properties of VCSEL have been fulfilled. The investigation included the statistical modeling under pulse and stationary excitation, noise spectra and frequency response function calculations. The result analysis showed, that fluctuations of spontaneous emission are not the crucial factor that determined the output radiation statistical properties, but its neglecting can lead to significant distortions of the results.

Лобацевич Павел Михайлович, магистрант физического факультета БГУ, Минск, Беларусь, pavel.lobatsevich@mail.ru.

Научный руководитель – *Буров Леонид Иванович*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики физического факультета БГУ, Минск, Беларусь, burrov@bsu.by.

УДК 538.245:537.226.1

А. И. ПРОХОДЦОВ, Е. И. МАКОЕД

ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ РЕШЕТОЧНЫХ СПЕКТРОВ МУЛЬТИФЕРРОИКОВ $R\text{BiFeO}_3$

Экспериментально исследованы оптические спектры мультиферроиков, полученных при изовалентном замещении в BiFeO_3 катионов висмута катионами редкоземельных элементов. Исследованы корреляции между структурой и оптическими свойствами в зависимости от химического состава образцов.

Мультиферроики – материалы с большими потенциальными возможностями использования в устройствах современной спинтроники. Среди мультиферроиков особое место занимает феррит висмута BiFeO_3 (BFO), благодаря наличию в нем сосуществования сегнетоэлектрической и магнитной фаз с высокими температурами упорядочения ($T_c = 1083 \text{ K}$, $T_N = 673 \text{ K}$) [1]. Объемные керамические образцы BFO проявляют антиферромагнитные свойства из-за реализации в данном соединении пространственной спин-модулированной структуры с периодом 0.62 нм, при разрушении которой становится возможным возникновение слабого ферромагнитного момента.

Эффективным методом подавления спиновой циклоиды является замещение катионов висмута изовалентными катионами группы лантаноидов – редкоземельных элементов (РЗЭ). Вызванные замещением структурные превращения, влекут за собой изменения диэлектрических и оптических характеристик. Представляет интерес исследование оптических свойств керамик $R_x\text{Bi}_{1-x}\text{FeO}_3$ (RBFO) ($x=0; 0.05; 0.10; 0.15; 0.20$, $R=\text{La, Nd, Gd, Dy, Er}$) в зависимости от степени замещения катионов Bi^{3+} катионами РЗЭ. Целью работы является исследование корреляций особенностей структуры и оптических свойств мультиферроиков RBFO с концентрациями и типами замещающих катионов РЗЭ на основании результатов дисперсионного анализа решеточных спектров образцов.

Общим для ИК спектров компонент диэлектрической проницаемости веществ подобного типа является их резонансное поведение, отражающее колебательные свойства кристаллической решетки. Перспективным для изучения наблюдаемых при этом явлений, является метод расчета диэлектрических спектров в модели квазигармонических осцилляторов, учитывающей особенности кристаллического строения изучаемых систем, тип химической связи в решетке, межионные расстояния, массу, валентность и поляризуемость ионов.

Методами диэлектрической спектроскопии восстановлены оптические функции образцов. Выполнено их осцилляторное моделирование. Параметры осцилляторов в первом приближении рассчитаны на основании простой ионной модели межатомного взаимодействия в сочетании с оптимизацией величин эффективных зарядов ионов и параметров элементарной ячейки. Резонансные частоты и коэффициенты затухания определяли с помощью данных предварительной обработки спектров коэффициента отражения по методу Крамерса-Кронига. Величины коэффициентов затухания принимали равными полуширине максимумов мнимой составляющей диэлектрической проницаемости. Силы осцилляторов подбирали с помощью программы Reffit [1].

На полученной в инфракрасной области спектральной зависимости коэффициента отражения образцов выражены решеточные резонансы, характеризующие колебательные свойства кристаллической решетки. Вид спектров коэффициента отражения и восстановленные на их основе спектры компонент диэлектрических и оптических функций подтверждают преобладание в данных соединениях ионного типа химической связи и наличие механизмов диэлектрической поляризации, связанных с упругими смещениями ионов и электронов. На основании результатов дисперсионного анализа спектров выполнено их разложение на составляющие. Исследованы концентрационные зависимости параметров осцилляторов, выявлены корреляции их величин с составом и структурой образцов.

Список литературы

1. Catalan, G. Physics and application of bismuth ferrite / G. Catalan, J.F. Scott // Adv. Mater. – 2009. – Vol. 21, p. 2463–2485.
2. Kuzmenko, A.B. Kramers-Kronig-constrained variational analysis of optical data / A.B. Kuzmenko // Rev. Sci. Instrum. – 2005. – Vol. 76, – p. 083108– 083112.

There was held an experimental investigation of the optical spectra of multiferroics obtained by isovalent substitution in BiFeO_3 bismuth cations by cations of rare earth elements. The correlation between the structure and optical properties depending on multiferroic chemical composition was studied.

Проходцов Алексей Игоревич, студент 5 курса физико-математического факультета БрГУ им. А.С. Пушкина, Брест, Беларусь.

Макоед Екатерина Игоревна, студентка 1 курса БГУИР, Минск, Беларусь.

Научный руководитель – *Макоед Игорь Иванович*, кандидат физико-математических наук, доцент БрГУ им. А.С. Пушкина, Брест, Беларусь, makloed@brsu.brest.by.

УДК 539.1.06:681.3

Д. М. СОЛОДКИЙ

КОМПОЗИЦИОННЫЙ АНАЛИЗ СПЛАВОВ АЛЮМИНИЯ ПО ДАННЫМ ИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В СЕРВИСЕ iRB.Space

Описывается способ анализа композиционного состава вещества по данным резерфордовского обратного рассеяния. Рассмотрен алгоритм выполнения исследования на примере быстрозатвердевших сплавов алюминия с хромом в сервисе iRB.Space. Выполнено экспериментальное подтверждение конкурентоспособности сервиса.

Одним из неразрушающих и быстрых способов изучения элементного состава вещества является метод резерфордовского обратного рассеяния. Он заключается в облучении вещества ускоренными ионами с заданной энергией при известной геометрии эксперимента. После столкновения ионов с элементами вещества детектируется конечная энергия рассеянных ионов. Используя закон сохранения энергии определяют потери энергии, что впоследствии позволяет сделать выводы о микроструктуре и элементном составе исследуемого вещества [1]. Полученный в ходе эксперимента график называется спектром обратного рассеяния.

Обработка спектра рассеяния может выполняться как вручную, так и с помощью программных комплексов. В первую очередь требуется построить график, отображающий количество рассеянных на заданный угол ионов с определенной энергией, зарегистрированных детектором. Затем исследователем определяются положения сигналов от основных элементов образца. Составляется система уравнений, решение которой позволяет определить процентное соотношение элементов и примесей в исследуемом веществе. Расчеты можно выполнять вручную в общеинженерных приложениях для расчетов типа Mathcad и Origin, либо в специализированных комплексах SimNRA, RUMP и PlotMath. Недостатком ручного метода являются большие трудозатраты и возможность человеческой ошибки, недостаток приложений определяется их системными требованиями (практически все работают только на платформе PC с операционной системой Windows) и конечной стоимостью приобретения программного продукта [2].

С целью устранения недостатков существующих решений автором настоящей работы разрабатывается программный комплекс iRB.Space [3] для обработки спектров резерфордовского обратного рассеяния. Комплекс представлен в виде онлайн-инструмента, распространяемого по модели «программное обеспечение как сервис» (SaaS) и доступного на любых современных устройствах (компьютеры, планшеты и смартфоны) с веб-браузером и доступом в Интернет. Помимо общего алгоритма имеется ряд преимуществ, а именно: возможность одновременной работы нескольких исследователей над данными; актуальная и открытая база химических элементов; возможность доступа к результатам моделирования в любое время.

В качестве примера использования сервиса выполнено определение композитного состава быстрозатвердевших фольг алюминия с хромом. Исследователю необходимо загрузить спектры обратного рассеяния исследуемого вещества, выбрать элементы (Al и Cr) и указать условия эксперимента (угол рассеяния, тип и энергию частиц и т.д.). Сервис выполняет поиск опорных точек на графике, составляет и рассчитывает профили концентрации в зависимости от глубины анализа образца. Результат вычислений сохраняется в системе и может быть доступен для дальнейшего использования другими исследователями. Результаты исследования на фольгах сплава алюминия представлены в таблице 1. Полученные значения композиционного состава совпадают с результатами исследований, проведенных над образцами ранее с помощью программ RUMP и PlotMath [4, 5].

Таблица 1 - Значения концентрации хрома в фольгах сплавах Al-0.4 ат % Cr

Исследуемый образец	Концентрация Cr на поверхности, % ат.	Концентрация Cr на глубине, % ат.	Глубина анализа, мкм.
Al-0.4% ат. Cr без отжига	0,70	1,02	1,83
Al-0.4% ат. Cr отжиг 300°C (1 ч.)	0,56	0,69	1,82
Al-0.4% ат. Cr отжиг 500°C (1 ч.)	0,60	0,78	1,99

Разрабатываемый сервис iRB.Space подтверждает свою эффективность при анализе композиционного состава веществ по данным спектров рассеяния. Современные технологии и возможность совместной работы и обработки результатов делают сервис не только конкурентоспособным, но и передовым в своей области. Дальнейшее развитие сервиса предполагает математическое моделирование послойного элементного состава многокомпонентных образцов с высокой точностью.

Список литературы

1. Ташлыкова-Бушкевич, И.И. Метод резерфордовского обратного рассеяния при анализе состава твердых тел: учебно-метод. пособие / И.И. Ташлыкова-Бушкевич. – Минск: БГУИР, 2003. – 52 с.
2. Солодкий, Д.М. Композиционный анализ состава твердых тел методом резерфордовского обратного рассеяния: программные комплексы / Д.М. Солодкий, И.И. Ташлыкова-Бушкевич // Актуальные направления научных исследований XXI века: сб. науч. трудов. – Воронеж: ВГЛУ, 2015. – № 8 ч.1 – С. 275-278.
3. iRB.Space – Intelligence in IBA processing [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://irb.space/>. – Дата доступа: 22.02.2016.
4. Солодкий, Д.М. Композитный анализ быстрозатвердевших сплавов Al-Cr с применением компьютерного моделирования программой Plotmath / Д.М. Солодкий // XIX Республиканский конкурс научных работ студентов – Минск: 2012 – 26 с.
5. Ташлыкова-Бушкевич, И.И. Влияние композиционного состава поверхности на смачиваемость быстрозатвердевших фольг алюминия / И.И. Ташлыкова-Бушкевич, В.С. Куликаускас, С.М. Барайшук, Ю.С. Яковенко, Д.М. Солодкий // Сборник тезисов XLII Международной Тулиновской конференции по Физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами – Москва, 2012 – С. 167.

A new approach for compositional analysis of solids using Rutherford backscattering spectroscopy data has been developed. The algorithm of assignment and interpretation process in web service iRB.Space is shown by an example presented for rapidly solidified Al-Cr alloys. For the service, advantages of its application are experimentally demonstrated.

Солодкий Дмитрий Михайлович, магистрант кафедры информатики БГУИР, Минск, Беларусь, ms@d0s.org.

Научный руководитель – *Ташлыкова-Бушкевич Ия Игоревна*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики БГУИР, Минск, Беларусь, iya.itb@bsuir.by.
УДК 537.533.2 (075.8)

А. Г. ТРАФИМЕНКО

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТУННЕЛЬНОЙ ПРОЗРАЧНОСТИ В ВАКУУМНЫХ ТРАНЗИСТОРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Представлены результаты моделирования коэффициента туннельной прозрачности потенциального барьера металл/вакуум в вакуумной транзисторной наноструктуре методом фазовых функций с учетом сил изображения и приложенного электрического поля. Установлены зависимости коэффициента прозрачности от волнового вектора (энергии) туннелирующего электрона и напряженности электрического поля. Показано, что с ростом энергии туннелирующего электрона наблюдаются немонотонные зависимости коэффициента прозрачности. Полученные зависимости объясняются интерференцией падающих, отраженных электронных волн и надбарьерного прохождения.

В настоящее время активно развиваются исследования в области вакуумной наноэлектроники (ВНЭ), использующей преимущества движения электронов в вакууме. Одной из актуальных задач ВНЭ является моделирование автоэлектронной эмиссии с катода Спиндта [1,2]. Данная задача может быть решена как путем применения уравнения Шредингера, так и использованием модели Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ приближение). Однако в первом случае для определения коэффициента туннельной прозрачности необходимо аппроксимировать потенциальный барьер узкими прямоугольными потенциалами и сшивать полученные в каждой области решения уравнения Шредингера. Для потенциалов достаточно сложного вида эта процедура является весьма трудоемкой, кроме того, затруднена оценка погрешности получаемых результатов. ВКБ приближение не всегда применимо для расчетов коэффициента туннелирования из-за ограничения на форму потенциального барьера. В данной работе представлены результаты моделирования туннельной эмиссии с катода Спиндта в вакуум методом фазовых функций [3]. Суть метода фазовых функций в том, что в этом подходе вычисляется не сама волновая функция, а только ее изменение вследствие действия потенциала. Простота фазового уравнения состоит в том, что оно является обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка (уравнением Риккати). Имеется также возможность использования потенциальных барьеров различного вида, в том числе и зависящих от импульса электрона.

Физический смысл фазовой функции заключается в том, что она является фазой рассеяния на соответствующей части потенциального рельефа. Уравнение для функции отражения $B(z)$ для определенного потенциального барьера $U(z)$ имеет вид [3]:

$$\frac{dB(z)}{dz} = -\frac{U(z)}{2ik} [\exp(ikz) + B(z)\exp(-ikz)] \quad (1)$$

где z координата направления туннелирования, $k=(8\pi^2m^*E/h^2)^{1/2}$ - волновой вектор туннелирующего электрона, эффективный потенциал имеет вид

$$U(z) = (8\pi^2m^*/h^2)(U_0 + k_{||}^2 - qV(z) - q\phi(z)) \quad (2)$$

где q – заряд электрона, m^* – эффективная масса электрона для соответствующей спиновой компоненты, E – энергия туннелирующего электрона, h – постоянная Планка, U_0 – начальная высота потенциального барьера,

$V(z)$ – потенциал внешнего поля, $\varphi(z)$ – потенциала сил изображения, k_{\parallel} - параллельная компонента волнового вектор туннелирующего электрона.

Величина квадрата модуля функции отражения имеет смысл коэффициента отражения от потенциального барьера:

$$R(z) = |B(z)|^2 \quad (3)$$

Принимая, что $B(z)=a(z)+ib(z)$ и разлагая $\exp(\pm ikz)$, получим следующую систему уравнений для нахождения компонент функции отражения:

$$\frac{da(z)}{dz} = \frac{U(z)}{2k} [-\sin(2kz) - 2b + (a^2 - b^2)\sin(2kz) - 2ab\cos(2kz)] \quad (4)$$

$$\frac{db(z)}{dz} = \frac{U(z)}{2k} [\cos(2kz) + 2a + (a^2 - b^2)\cos(2kz) - 2ab\sin(2kz)] \quad (5)$$

Коэффициент туннельной прозрачности барьера при этом равен:

$$T = \exp\left[\frac{1}{k} \int_a^d U(z)[b(z)\cos(2kz) - a(z)\sin(2kz)]dz\right] \quad (6)$$

где d – толщина барьера.

Система уравнений (4-6) позволяет рассчитать зависимость коэффициента туннельного прохождения от волнового вектора для барьера, описываемого эффективным потенциалом $U(z)$. На рис.1 показана такая зависимость без учета параметра k_{\parallel} для различных значений напряженности электрического поля F .

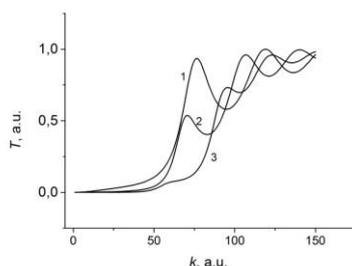


Рисунок 1 – Коэффициент туннельной прозрачности катода Спиндта в зависимости от волнового вектора и напряженности электрического поля. Высота барьера $U_0=120$ кВТ, температура $T=300$ К: 1- $F=10^9$ В/см, 2- $F=7 \times 10^8$ В/см, 3- $F=5 \times 10^8$ В/см.

В результате проведенных вычислений установлено, что коэффициент туннельной прозрачности резко возрастает и переходит в колебательный характер при превышении определенной величины энергии, ниже полной высоты барьера. В этой области возникают существенные токи электронной эмиссии. При определенных сочетаниях высоты барьера U_0 и величины внешнего поля наблюдается всплеск (пик) туннельной прозрачности, затем спад и колебания. Полученные зависимости объясняются интерференцией падающих, отраженных электронных волн и надбарьерного прохождения. Они вызваны появлением резонансов, связанных с соотношением волнового вектора и эффективной толщины барьера. Такие рефлексы отсутствуют в квазиклассическом приближении ВКБ. Наблюдаемые нелинейные закономерности могут быть использованы для прогнозирования эмиссионных свойств катода Спиндта, применяемого в устройствах вакуумной микро- и нанoeлектроники.

Список литературы

1. Spindt С.А. A thin film field emission cathode // J. Appl. Phys. – 1968 - Vol. 39. - P. 3504-3505.
2. Spindt С.А., Brodie I., Humphrey L., Westerberg E. R. Physical properties of thin-film field emission cathodes with molybdenum cones // J. Appl. Phys. – 1976. - Vol. 47. - P. 5248-5263.
3. Бабилов В.В. Метод фазовых функций. Из-во «Наука», Москва, 1976.- 287 с.

The results of the simulation of the tunneling transparency coefficient of the metal/vacuum potential barrier in the vacuum transistor nanostructure using the phase method with image forces and the applied electric field are presented. The dependencies of the transparency coefficient on the wave vector (energy) of tunneling electron and the electric field intensity are determined. It is shown that with the increase of the energy of the tunneling electron the nonmonotonic dependencies of transparency coefficient are observed. The characteristics obtained are explained by the interference of the incident and reflected electron waves and passing above a barrier.

Трафименко Антон Геннадьевич, аспирант БГУИР, Минск, Беларусь, evdokimovithi@mail.ru.

Научный руководитель – Данилюк Александр Леонидович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры микро- и наноэлектроники, БГУИР, Минск, Беларусь, danilyuk@nano-center.org.

УДК 539.19

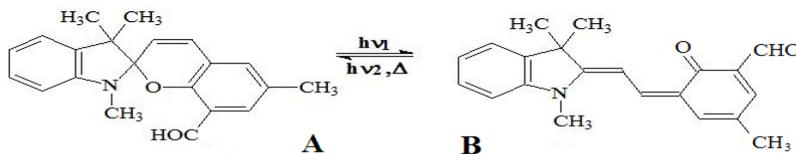
А. В. ШАПОВАЛОВ

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ ФОТОХРОМНЫХ СПИРОПИРАНОВ

С применением метода DFT (теории функционала плотности) получены и интерпретированы расчетные колебательные спектры (инфракрасного (ИК) поглощения и комбинационного рассеяния (КР) света) молекулы из класса фотохромных спиропиранов.

В элементах молекулярной электроники и фотоники часто применяются фотохромные материалы, в том числе на основе спиропиранов, проявляющих фотохромные свойства, как в растворах, так и в различных твердофазных матрицах [1]. Spirocyclic соединения могут применяться в устройствах оптической памяти и контролируемых молекулярных переключателях [2], а также в качестве химических сенсоров для определения содержания металлов в среде [3].

Фотохромные превращения спироциклических соединений обусловлены обратимой валентной фотоизомеризацией между открытой А и циклической В формами. Циклический бесцветный изомер А, поглощая УФ излучение, обратимо превращается в окрашенный (открытый) изомер В, который под действием видимого излучения, поглощаемого им, снова превращается в исходный циклический изомер. Фотоиндуцированные обратимые изменения структуры фотохромных молекул в различных матрицах могут проявляться наряду со спектрами электронного поглощения, также и в колебательных спектрах.



Для моделирования поведения молекул при создании новых материалов применяются методы квантовой химии. Квантовая химия — это направление химии, рассматривающее строение и свойства химических соединений, реакционную способность, кинетику и механизм химических реакций на основе квантовой механики [4]. С помощью вычислительной химии возможно описание молекулярных систем не для упрощенных моделей, а для реальных химических систем, в том числе испытывающих фотохромные превращения. Основной задачей квантовой химии является решение уравнения Шредингера и его релятивистского варианта (уравнение Дирака) для атомов и молекул. Решение уравнения Шредингера часто строится на уравнении Хартри-Фока. Метод Хартри — Фока — в квантовой механике приближенный метод решения уравнения Шредингера путём сведения многочастичной задачи к одночастичной в предположении, что каждая частица движется в некотором усреднённом самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными частицами системы. [5,6].

В представленной работе с применением программного пакета PC GAMESS 7.1.G (Firefly) [7,8] с использованием теории функционала плотности (DFT), трехпараметрического гибридного функционала Беке-Ли-Янга-Парра (B3LYP) в наборе базисных функций 6-31(d,p) рассчитана равновесная геометрия (рисунок 1) и колебательные спектры (рисунок 2) молекулы спиропирана Sp1 .

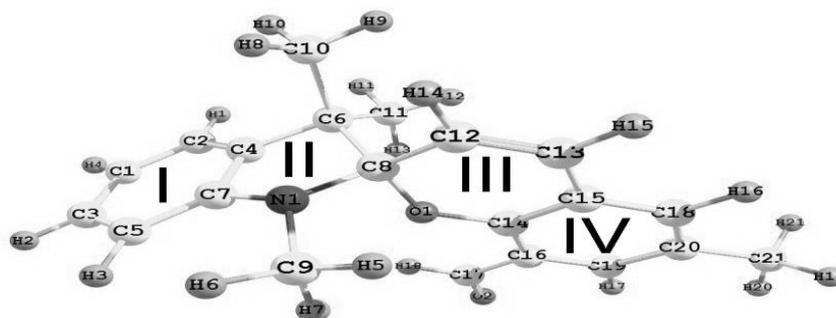


Рисунок 1 - Оптимизированная геометрия молекулы спиропирана Sp1 (циклическая форма)

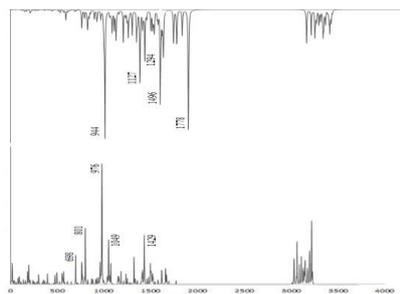


Рисунок 2 - Рассчитанные зависимости интенсивности ИК-поглощения (верхний график) и активности комбинационного рассеяния (нижний график) молекулы Sp1 (циклическая форма) от частоты

В расчетных спектрах спиропирана наиболее интенсивны полосы, обусловленные плоскими колебаниями связанных циклов.

Фотохромные превращения спиропирана Sp1 проявляются в фотоиндуцированном изменении относительной интенсивности полос около 944 см^{-1} , 1127 см^{-1} (ИК-спектр) и 698 см^{-1} , 1429 см^{-1} (КР-спектр), относящихся к колебаниям связи $\text{C}_8\text{-O}_1$, участвующей в реакции фотоизомеризации.

Список литературы

1. Холманский, А.С., Дюмаев, К.М. // успехи химии. –1987. – 56. – с. 241.
2. Minkin, V.I. // chem. Rev. – 2004. – 104. – p. 2751.
3. Брень, В.А. // успехи химии. – 2001. – 70. – с. 1152.
4. Давтян, О.К. Квантовая химия. — М.: Высшая школа, 1962. — 784 с. — с. 5.
5. Давыдов, А.С. Квантовая механика. — М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963. — С. 391—397. — 748 с. — 35 000 экз.
6. Игнатов, С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. — М.: Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2006.— 82 с.
7. Alex, A. Granovsky, Firefly version 8, www <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
8. M.W. Schmidt, K.K. Baldrige, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery, J. Comput. Chem. 14, 1347-1363 (1993).

Using DFT method (density functional theory) were obtained and interpreted calculated vibrational spectra (infrared (IR) absorption and Raman scattering (RS) of light) of the molecule from the class of photochromic spiropropan.

Шаповалов Андрей Васильевич, студент 5 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, andrewshap@mail.ru.

Научный руководитель – Василюк Геннадий Тимофеевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, vasilyuk@grsu.by.