

## Секция 2

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

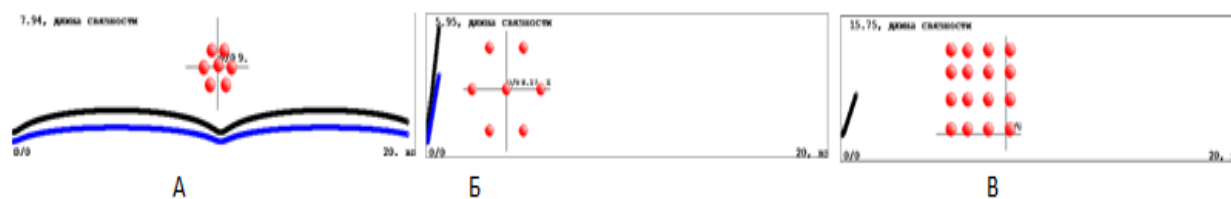
УДК 530.161

А. Ю. АКСЕНОВА

## ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ

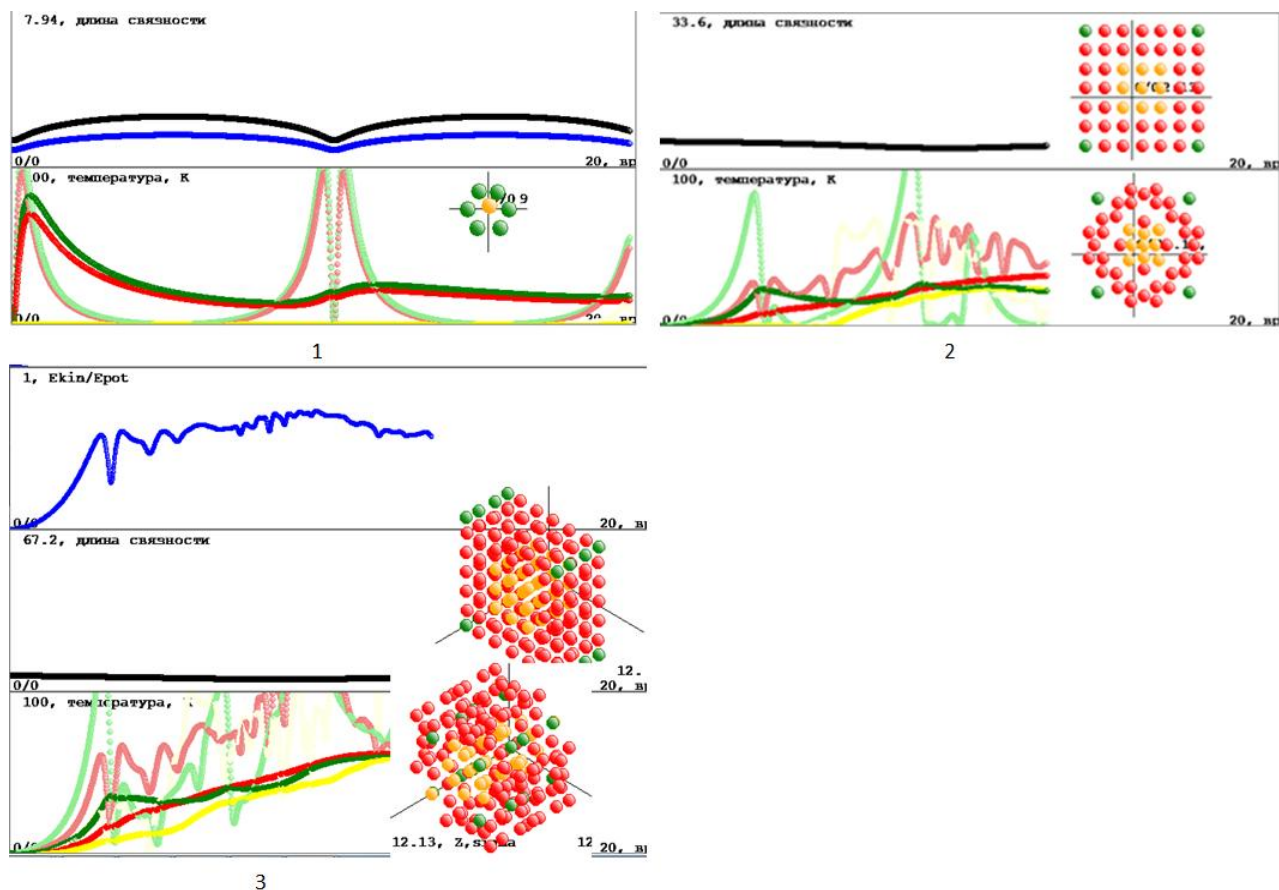
Известно, что физические свойства веществ зависят от их размеров. Почему же малые частицы обладают отличными свойствами в сравнении со свойствами того же вещества большего объема. Здесь влияние оказывает множество различных факторов. В первую очередь, к данным факторам относятся квантово-механические эффекты.

В настоящей работе на примере молекулярного кристалла мы исследовали конфигурацию и динамику атомов в молекулярном кристалле с точки зрения размерных эффектов. Влияние размерных факторов на динамику молекул в наноклстерах рассмотрим на примере молекулярных кластеров инертных газов [2]. Этот объект выбран нами для исследования, поскольку, он достаточно простой, однако размерные эффекты свойственны и ему. Данное взаимодействие обусловлено тремя факторами: конфигурационным, индукционным и дисперсионным. Мы не будем вдаваться в подробности этого взаимодействия, а воспользуемся в рассматриваемой нами модели полуэмпирическим потенциалом Леннарда-Джонса. Нами разработана компьютерная модель, с помощью которой методом вычислительного эксперимента можно определять геометрические и динамические характеристики кластера. В качестве исходных данных задаются: тип начальной конфигурации, число атомов, дистанция между атомами, временной шаг. Имеются поля, на которых отображается движение атомов в кластере, графики параметров кластера. При моделировании системы задается ее начальная энергия. Это можно сделать разными способами. В нашей работе начальные скорости принимаются равными нулю, задается параметр, определяющий дистанцию между атомами. Далее система предоставляется самой себе и автоматически перераспределяется потенциальная и кинетические энергии между атомами. В зависимости от начальной дистанции кластер может быть устойчивым и неустойчивым (распадается). На рис. А, Б представлены результаты вычислительного эксперимента устойчивого и неустойчивого кластеров. Кластер устойчив, когда начальное расстояние между атомами находится в пределах от 1 до  $2(\sigma)$ . Устойчивость либо неустойчивость в первом приближении может характеризоваться радиусом гирации. Если он монотонно возрастает, то кластер неустойчив. Если он периодически изменяется в определенных пределах, то кластер – устойчивый. Если радиус гирации постоянный, то кластер отсутствует.



На рисунке В представлен кластер с большим числом атомов. Из рисунка видно, что в общем случае начальная дистанция, обеспечивающая устойчивость зависит от числа атомов. Исходная конфигурация кластера создается автоматически. Задается минимальное расстояние между атомами, которое определяет потенциальную энергию системы. Начальные скорости принимаются равными нулю. Устойчивость численного решения проверяется постоянством полной энергии системы. Наша программа позволяет определять все динамические параметры системы. Вычисляется кластерная температура. Имеется возможность выбирать группы атомов, для которых отдельно можно определить кластерную температуру. Изменяя начальную полную энергию кластера можно определить условия фазового перехода. В связи с чем, можно определить температуру фазового перехода, которая зависит для кластера от числа частиц и межатомного потенциала. На рис.6 показан устойчивый кластер из семи атомов. График, отображающий температуры внутренних и внешних атомов, свидетельствует о том, что кинетические параметры внутренних и наружных атомов различны. Зеленая и желтая кривые отображают среднюю по времени температуру наружных и внутренних атомов. Салатовая кривая отображает среднюю по внешним атомам по кластеру температуру. Красная кривая – среднюю по времени температуру кластера. Розовая кривая – среднюю по кластеру температуру. Рисунок 1 – устойчивый

кластер: число атомов  $N=7$ , период решетки  $1.3\sigma$ . На рисунке 2 представлен кластер с количеством атомов 49, начальная конфигурация ОЦ, период решетки  $1.6\sigma$ . Кривые температур, отвечающие наружным и внутренним атомам имеют аналогичный с предыдущими характер. На рисунке представлена начальная конфигурация атомов и конфигурация атомов по прошествии некоторого времени. На рисунке 3 представлен результат вычислительного эксперимента для объемного кластера. Это устойчивый объемный кластер: число атомов  $N=196$ , начальная конфигурация ОЦ, период решетки  $1.6\sigma$ . Характерно, что средняя по кластеру температура и средняя по времени значительно отличаются – то есть не подтверждается эргодическая гипотеза. Это говорит о том, что в системах с малым числом частиц законы равновесной и статистической физики неприменимы.



Получаем что, для устойчивости кластера начальные параметры расстояния между атомами при нулевой начальной скорости должен лежать в пределах от 1 до  $2(\sigma)$  и зависят от числа атомов в кластере. А так же характерно, что средняя по кластеру температура и средняя по времени значительно отличаются - то есть не подтверждается эргодическая гипотеза. Это говорит о том, что в системах с малым числом частиц законы равновесной и статистической физики неприменимы.

Using the example of energy characteristics, we show that the dynamics of surface atoms and atoms inside a cluster is different. It is shown that a cluster consisting of a small number of particles is a nonequilibrium system. The model developed by us allows us to study the configuration and dynamics of atoms in a cluster by molecular dynamics methods using various semiempirical potentials.

Список литературы

1. Пул, Ч. Нанотехнологии / Ч. Пул, Ф. Оуэн. – М : Техносфера, 2005. – 336 с.
2. Берри, Р. С., Смирнов, Б. М. УФН 175 (4) 367 (2005).
3. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике / Х. Гулд, Я. Тобочник. – М. : Мир, 1990. – часть 1, 2 – 350, 400 с.
4. Ансельм, А. И. Основы статистической физики и термодинамики. / А. И. Ансельм. – М. : Наука, 1973. – 426 с.

Аксенова Анастасия Юрьевна, ГУО «Лицей № 1 г. Гродно», Гродно, Беларусь, nik.person444@gmail.com.

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

Маслов Игорь Сергеевич, магистр педагогических наук, учитель физики высшей категории ГУО «Лицей № 1 г. Гродно», Гродно, Беларусь, imaslov@mail.ru.

## РАННИЕ СТАДИИ РАЗВИТИЯ ПЛАЗМЕННОГО ФАКЕЛА ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА МЕТАЛЛ

Статья посвящена исследованию динамики изменения плотности и скорости движения различных частиц на ранних стадиях формирования лазерного факела при воздействии импульсного лазерного излучения умеренной интенсивности на металлический образец.

Исследование воздействия лазерного излучения на твердое тело, ставшее актуальным практически одновременно с появлением лазеров, в наши дни является одним из приоритетных направлений в науке и уже привело к появлению ряда новых отраслей техники и технологий [1]. Тем не менее, в настоящее время доля лазерного оборудования, используемого в народном хозяйстве, невелика. Одним из важнейших факторов, сдерживающих широкое внедрение лазеров в промышленность и другие отрасли экономики, является недостаточный уровень понимания основных физических процессов, определяющих специфику взаимодействия лазерного излучения с веществом и, в частности, возникновения и развития лазерного факела [2].

При увеличении плотности мощности потока лазерного излучения удельная поглощенная энергия становится сравнимой с удельной теплотой испарения вещества мишени. Вследствие этого оно начинает интенсивно испаряться (испарительный режим воздействия лазерного излучения на вещество).

При дальнейшем увеличении плотности мощности светового потока происходит оптический пробой паров вещества мишени. У поверхности облучаемого образца образуется плазменный сгусток, причем из-за экспоненциального нарастания степени ионизации и, следовательно, коэффициента поглощения лазерного излучения. Образование плазменного слоя имеет характер резкой «вспышки» (лазерный факел).

Начало образования плазменного сгустка при действии светового излучения на поверхность твердого тела имеет эрозионную природу. Это подтверждается слабым изменением давления у мишени в момент плазмообразования при замене указанного газа. Окончанию испарительного режима и возникновению плазмы соответствует резкий подъем температуры и первый пик давления, наблюдаемого у мишени. Уменьшение давления у мишени после образования плазменного сгустка связано с экранировкой облучаемого образца от излучения лазера. В результате этого испарение замедляется, образуется первый (испарительный) максимум давления. Размеры области первоначального плазменного образования определяются диаметром пятна лазерного излучения.

Сформировавшаяся в момент «вспышки» ударная волна в ходе своего распространения вовлекает в движение массы холодного газа, окружающего мишень. Плазменное облако также начинает расширяться. Механизм развития лазерного факела на этой стадии зависит от плотности мощности лазерного излучения и от параметров газа, окружающего мишень (его начальной плотности и т.п.).

Ударные волны, формирующиеся в области вблизи облучаемого образца, действуют на предварительно прогретую в ходе доиспарительного и испарительного режимов области мишени. Это приводит к ее деформации.

Известно, что при лазерном воздействии на образец с параметрами излучения (длиной волны, пространственно-временной структурой) у поверхности мишени формируется лазерный факел (плазменное образование). При лазерном воздействии на металл, окруженный газом при давлении  $10^5$  Па, лазерный факел может достигать размеров в несколько сантиметров. Исследование проводится современными методами численного решения систем дифференциальных уравнений. Проводятся плазодинамические расчеты, описывающие ранние стадии развития плазменного образования, формирующегося при воздействии лазерного излучения на металлические образцы. Имеют место компоненты – продукты эрозии облучаемого образца, в нашем случае – плотности газа (плазмы). Уравнения движения этих компонент имеют вид:

$$\rho \frac{\partial \vec{g}}{\partial t} + \rho (\vec{g} \cdot \nabla) \vec{g} = -\nabla p$$

(уравнение Эйлера),

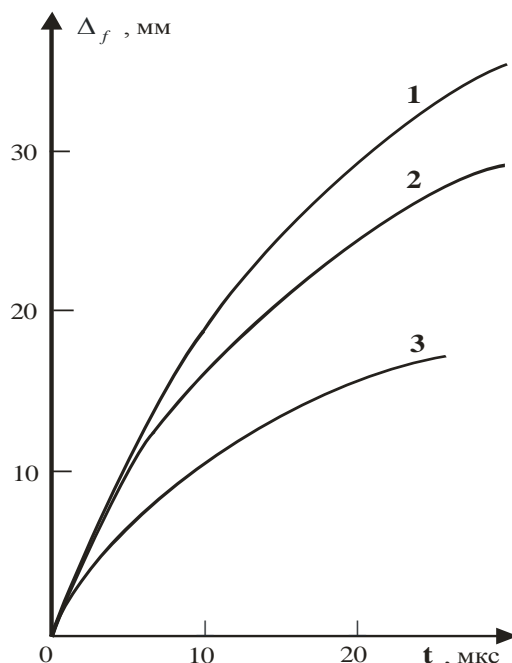
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{g}) = A(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

(уравнение непрерывности).

Здесь  $\rho$  – плотность газа (плазмы),  $\vec{g}$  – скорость движения частиц,  $p$  – парциальное давление газа (плазмы),  $A(t)$  – плотность мощности продуктов абляции,  $\vec{r} - \vec{r}_0$  – уравнение границы плазменного факела [3].

Расчет данных уравнений показывает, что в первые 10 мкс сразу после воздействия возникает интенсивное (взрывное) испарение мишени, что приводит как к образованию радианной плазмы, так и к формированию ударных волн из-за очень высокой плотности газа (плазмы).

На рисунке 1 представлены временные зависимости смещения фронта ударной волны (кривая 1) и фронта лазерной эрозионной плазмы (кривая 2) от поверхности металлических образцов. На этом же рисунке приведена временная зависимость смещения фронта светящегося плазменного образования (кривая 3).



**Рисунок 1 – Временные зависимости смещения фронта ударной волны (кривая 1), ЛЭПФ (кривая 2) и светящегося плазменного образования (кривая 3) от поверхности алюминиевого образца, подвергающегося воздействию лазерного излучения с плотностью потока 22 МВт/см<sup>2</sup>**

*Список литературы*

1. Иванов, А. Ю. Акустическая диагностика процесса лазерной обработки материалов : монография / А. Ю. Иванов. – Гродно : ГрГУ, 2007. – 208 с.
2. Гладуш, Г. Г. Особенности сварки металлов излучением импульсно-периодического Nd:YAG-лазера малой мощности / Г. Г. Гладуш, А. Ф. Глова, С. В. Дробязко // Квантовая электроника. – 2006. – Т. 36, № 11. – С. 1080 – 1082.
3. Tarasenko, N. N. Laser treatment of nanoparticles in liquids. / N. N. Tarasenko, A. V. Butsen, N. V. Tarasenko, V. V. Pankov // VII International conference “Plasma physics and plasma technology” (Minsk, Belarus, September 17 – 21, 2012). Contributed papers. In two volumes. – Minsk, “Kovcheg”. – 2012. – Volume II. – P. 479–482.

The article is devoted to the study of the dynamics of changes in the density and velocity of motion of various particles in the early stages of laser torch formation under the influence of pulsed laser radiation of moderate intensity.

*Берёза Екатерина Анатольевна*, магистрант физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь; [katerina.bereza@inbox.ru](mailto:katerina.bereza@inbox.ru).

Научный руководитель – *Иванов Алексей Юрьевич*, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и теплотехники ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, [ion\\_ne@mail.ru](mailto:ion_ne@mail.ru).

УДК 538.911

Д.Ч. ГВОЗДОВСКИЙ, М.С. БАРАНОВА, В.Р. СТЕМПИЦКИЙ

**ВЛИЯНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКИ НА СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА. АВ ИНИТЮ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Неоднородность пространственного заряда в графене, возникающая из-за особенностей структуры поверхности подложки, приводит к деградации электронных свойств графена. Посредством моделирования в программном комплексе VASP исследовано влияния различных металлических подложек на структуру и электронные свойства графена. Определены значения энергии адсорбции и межслоевые расстояния между графеном и подложками *d*-металлов.

Графен обладает уникальными свойствами, в частности высокой подвижностью носителей заряда, рекордной прочностью, гибкостью [1]. Уникальная электронная структура графена характеризуется линейным законом дисперсии электронных состояний вблизи уровня Ферми, благодаря чему носители заряда подчиняются релятивистскому уравнению Дирака для безмассовых частиц. Проводимость графена модулируется (изменяется) с помощью электрического поля, что позволяет рассматривать его как перспективный материал в микро- и нанoeлектронике [2].

Направление использования графена определяет тип материала подложки, например, в электронике интерес представляют в основном полупроводниковые и диэлектрические подложки, в спинтронике применяют подложки из магнитных металлов, приводящих к спиновой поляризации электронов в графене. В зависимости от выбранного материала и поставленной задачи, используются различные подходы к синтезу графена: жидкофазное и микромеханическое расслоение графита, окисление графита, химическое осаждение из газовой фазы (CVD), получение в электрической дуге, термическое разложение SiC, эпитаксиальное выращивание на металлической поверхности [4]. Возможность контролируемого формирования графена моноатомной толщины обеспечивается значительным снижением скорости осаждения второго слоя графена. Это объясняется тем, что при завершении формирования первого слоя графена энергия адсорбции углерода из газовой фазы существенно снижается, так как химически активная поверхность металла оказывается пассивирована графеном. Синтез CVD методом осуществляется в основном на поверхностях металлов, таких как Ni, Cu, Co, Fe, Pt, Ir, Rh, Ru, Re, Pd, а также карбидов металлов, включая TaC, TiC, WC, HfC.

Материал подложки оказывает существенное энергетическое влияние на электрофизические свойства графена, что позволяет управлять проводимостью [3]. Актуальной задачей является моделирование воздействия подложек на электронные свойства графена с целью выбора материала обеспечивающего его адсорбцию и эффективное применение. Взаимодействие атомов углерода с атомами поверхности определяется энергией связи атомов графена с поверхностью подложки. Существенным является расположение атомов углерода относительно атомов подложки, поэтому среди прочих задач также исследованы варианты расположения атомов углерода относительно положения приповерхностных атомов подложек металлов.

Расчеты периодических структур выполнялись на основании теории функционала плотности (DFT) [5], реализованной в Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) [6]. Электронные волновые функции учитывались с помощью базисного набора проекционных присоединенных волн (PAW). Построены суперячейки графена и подложек *d*-металлов с ориентацией (111). Для устранения влияния волновых функций друг на друга из-за особенностей реализации квантово-механических расчетов в программном комплексе (трансляции ячеек) в суперячейках создан вакуумный слой толщиной 20 Å вдоль кристаллографического направления *z*. Значение энергии обрезания составляло 520 эВ.

Наименьшая разница между рассчитанными и экспериментальными значениями параметров кристаллических решеток графита и выбранных для моделирования *d*-металлов, соответствует функционалу Пердю-Бюрке-Эрнцерхофа в сочетании со схемой дисперсионной коррекции Гринна и поправками Бекке-Джонсона (PBE-D3(BJ)) [7]. Следовательно, дальнейшее моделирование взаимодействия графена с поверхностью подложек *d*-металлов проводилось с использованием данного обменно-корреляционного функционала.

На рисунке 1 представлены 4 варианта расположения атомов углерода относительно положения приповерхностных атомов исследуемых подложек.

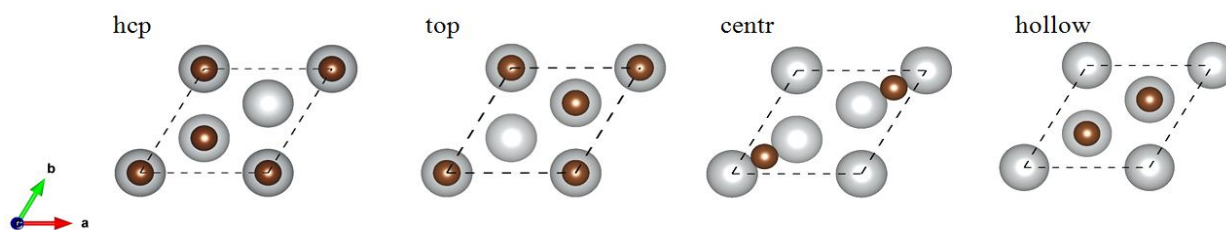


Рисунок 1 – Различные варианты положения атомов углерода на поверхности подложки

Оптимизация геометрии исследуемых структур считалась достигнутой, когда изменение энергии между двумя шагами составляло менее  $10^{-6}$  эВ. Статические самосогласованные расчеты выполнялись с привлечением метода тетраэдра и поправок Блоха. Интегрирование в импульсном пространстве осуществлялось по сетке *k*-точек  $11 \times 11 \times 1$ . Кристаллические структуры и зарядовые плотности визуализированы в программе VESTA.

Для каждого варианта взаимного расположения графена и подложки рассчитана полная энергия системы. По результатам расчетов выбраны основные конфигурации по энергетическому критерию (наиболее стабильному состоянию соответствует минимальное значение энергии). Для количественной оценки связи подложки и листа графена рассчитана энергия адсорбции. В таблице 1 приведены результаты моделирования систем «графен/подложка», где  $a$  – значение постоянной решетки  $d$ -металла;  $E_{ads}$  – энергия адсорбции графена на поверхности  $d$ -металла;  $l$  – расстояние между листом графена и подложкой;  $Pos$  – наиболее стабильный вариант положения атомов углерода относительно положения приповерхностных атомов подложки.

Таблица 1 – Результаты моделирования системы “графен/подложка”

Параметр	Исследуемые подложки $d$ -металлов								
	Co	Ni	Cu	Ru	Pd	Ag	Ir	Pt	Au
$a, \text{Å}$	2,46	2,46	2,57	2,67	2,75	2,88	2,72	2,78	2,90
$E_{ads}, \text{kJ/mol}$	16,10	8,59	8,03	36,20	28,60	12,50	26,20	22,40	8,31
$l, \text{Å}$	2,03	3,12	3,04	2,11	2,13	2,62	2,23	2,18	3,01
$Pos$	centr	hcp	hcp	centr	centr	hcp	centr	centr	hcp

Для изучения электронных свойств системы «графен/подложка» проведено моделирование и определены энергетические зонные диаграммы. Расположение  $\sigma$ - и  $\pi$ -зон графена под воздействием подложки не изменяется. Изменения электронных состояний наблюдаются в непосредственной близости уровня Ферми, однако характер и расположение энергетических уровней ответственных за проводимость во многом остается прежним. В зонном спектре графена, находящегося под влиянием подложки  $d$ -металлов, возникает запрещенная зона от 10 до 40 мэВ между связывающей и антисвязывающей  $\pi$ -зонами графена. Данный разрыв возможно связан с неэквивалентным расположением атомов подложки по отношению к атомам углерода.

Таким образом, величина энергии адсорбции атомов углерода на металлическую подложку, позволяет выявить наличие физической адсорбции графена на поверхности  $d$ -металлов. Типичные оценки энергии связи при физадсорбции составляют 6–35 кДж/моль, что согласуется с результатами расчетов. Анализ зонных структур систем «графен/подложка» показал, что электронная структура адсорбированного графена не испытывает серьезных изменений, однако связь с подложкой существует. Подобный механизм характерен для физадсорбции, то есть атомы углерода связываются с атомами подложки посредством слабых связей Ван-дер-Ваальса.

Работа проводилась в рамках задания гранта 3.02 Белорусской национальной научно-исследовательской программы «Конвергенция 2020».

*Список литературы*

1. Geim, A. K. Graphene: Status and Prospects // Science. – 2009. – Vol. 324. – Pp. 1530–1534.
2. Novoselov, K. S. Electric field effect in atomically thin carbon films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov // Science. – 2004. – Vol. 306. – Pp. 666–668.
3. Preobrajenski, A. B. Controlling graphene corrugation on lattice-mismatched substrates / A. B. Preobrajenski, May Ling Ng, A. S. Vinogradov, N. Martensson // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78. – P. 073401.
4. Usachov, D.Yu. Epitaxial B-Graphene: Large-Scale Growth and Atomic Structure / D.Yu. Usachov, A.F. Fedorov, A.E. Petukhov, O. Yu. Vilkov // ACS Nano. – 2015. – Vol. 9. – Pp. 7314–7322.
5. Parr, R.G. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules / R.G. Parr, W. Yang // Oxford University Press. – 1989. – ISBN 0-19-504279-4.
6. G. Kresse, M. Marsman and J. Furthmüller. VASP the GUIDE: tutorial / Computational Materials Physics, Faculty of Physics, Universität Wien. – 2016. – P. 238.
7. Grimme, S. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu / S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and S. Krieg // J. Chem. Phys. – 2010. – Vol. 132. – P. 154104.

The inhomogeneity of the space charge in graphene, which arises from the specific features of the surface structure of the substrate, leads to degradation of the electronic properties of graphene. The influence of various metal substrates on the structure and electronic properties of graphene was studied using the software VASP. The adsorption energies and interlayer distances between graphene and various  $d$ -metal substrates are calculated.

*Гвоздовский Дмитрий Чеславович*, магистрант кафедры МНЭ, БГУИР, Минск, Беларусь, gvozdovsky@bsuir.by.

*Баранова Мария Сергеевна*, аспирант кафедры МНЭ, БГУИР, Минск, Беларусь, baranova@bsuir.by.

Научный руководитель – *Стемпницкий Виктор Романович*, кандидат технических наук, доцент кафедры МНЭ, БГУИР, Минск, Беларусь, vstem@bsuir.by.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕТРОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СТАНДАРТНЫХ ОБРАЗЦОВ СОСТАВА ВОДНО-СПИРТОВЫХ СМЕСЕЙ.

Разработана автоматизированная методика оценивания концентрации составляющих в стандартных образцах состава водно-спиртовых смесей.

Обеспечение единства измерений является важнейшей составляющей частью метрологии. Для этого разрабатываются системы воспроизведения величин и передачи их размеров рабочим средствам измерений с установленной точностью с использованием мер (эталонов), к которым относят и стандартные образцы. Основной областью применения стандартных образцов является калибровка средств аналитических измерений, что относится к актуальным и сложным метрологическим задачам. В частности, в настоящее время возникла потребность в повышении качества и эффективности метрологического контроля средств измерения массовой концентрации этанола (алкометров) с применением стандартных образцов.

Единство измерений – это такое состояние измерений, при котором все результаты выражены в узаконенных единицах, а погрешности известны с заданной вероятностью [1]. Воспроизведение единицы физической величины – это совокупность операций по материализации единицы ФВ с наивысшей в стране точностью посредством государственного эталона или исходного образцового СИ.

Воспроизведение величины заданного размера осуществляется посредством меры величины. Мерой физической величины называют СИ, предназначенное для воспроизведения и (или) хранения физической величины одного или нескольких заданных размеров, значения которых известны с необходимой точностью.

Особый класс мер представляют стандартные образцы. Стандартный образец – образец вещества (материала) с установленными в результате метрологической аттестации значениями одной или более величин, характеризующими свойство или состав этого вещества (материала) [2]. Стандартные образцы применяются в системе обеспечения единства измерений для поверки, калибровки, градуировки средств измерений, а также контроля метрологических характеристик при проведении их испытаний, в том числе с целью утверждения типа.

При калибровке (поверке) алкотестеров применяются стандартные образцы состава водных растворов этанола и генераторы спирто – воздушных смесей (ГСВС). Стандартные образцы состава водных растворов этанола (ВРЭ-2) предназначены для приготовления спирто-воздушной смеси в устройствах типа ГСВС-МЕТА, ТОХИТЕСТ, MARK II и др., предназначенных для градуировки и поверки средств измерений содержания паров этанола в выдыхаемом воздухе (алкометров, алкотестеров).

В настоящей работе создана методика оценивания метрологических характеристик стандартных образцов состава водно-спиртовых смесей.

В измерительной задаче используются следующие математические модели.

Массовая концентрация спирта в водно-спиртовом растворе:

$$C_{ж} = \frac{C_{г}}{K} \text{ (г/дм}^3\text{)}, \quad (1)$$

где  $C_{ж}$  – массовая концентрация спирта в водно-спиртовом растворе, г/дм<sup>3</sup>;

$C_{г}$  – требуемая концентрация спирта в спирто-воздушной смеси, мг/м<sup>3</sup>;

$K$  – коэффициент распределения этилового спирта (абсорбционный коэффициент Бунзена), зависящий от температуры ( $K=233$  для  $t=26^{\circ}\text{C}$ ).

Требуемый объем исходного раствора:

$$V_{исх} = \frac{100 \cdot V_p \cdot C_{ж} \cdot A}{\rho \cdot C_m}, \quad (2)$$

где  $V_{исх}$  – требуемый объем исходного раствора, см<sup>3</sup>;

$V_p$  – объем рабочего раствора, дм<sup>3</sup>;

$C_{ж}$  – массовая концентрация спирта в водно-спиртовом растворе, г/дм<sup>3</sup>;

$A$  – кратность разбавления при получении исходного раствора, ( $A=10$ );

$\rho$  – плотность спирта, измеряемая с точностью до третьего знака ареометром, г/см<sup>3</sup>;

$C_m$  – массовая доля спирта в спирте – ректификате.

Для автоматизации процесса оценивания метрологических характеристик стандартных образцов разработана прикладная компьютерная программа. Интерфейс бюджета неопределенности этой программы приведен на рисунке 1.

Величина $X_i$	Значение оценки $x_i$	+/- г	Тип неопределенности	Распределение вероятностей	Стандартная неопределенность $u(x_i)$	Коэффициент чувствительности $c_i$	Вклад неопределенности $u_i(y)$
Объем исходного раствора $V_{исх}$ , см <sup>3</sup>	26	0,0234	B	прямоугольное	0,01351	17,74691	0,2397607
Объем рабочего раствора $V_p$ , дм <sup>3</sup>	1	0,0136	B	прямоугольное	0,007851964	-461,4196	-3,62305
Массовая доля спирта в спирте – ректификате $St$ , %	94,5	0,002	B	прямоугольное	0,001154701	4,882748	0,005638112
Плотность спирта, измеряемая с точностью до третьего знака ареометром $\rho$ , г/см <sup>3</sup>	0,806	0,0031	B	прямоугольное	0,001789786	572,481	1,024618
Кратность разбавления при получении исходного раствора $A$	10	0,0058	B	треугольное	0,00236784	-46,14196	-0,1092568
Коэффициент распределения этилового спирта (абсорбционный коэффициент Бунзена) $K$	233	0,001	B	треугольное	0,0004082483	1,980342	0,0008084712
Определяемое значение массовой концентрации эталона в спирто-воздушных смесях $C_g$ , мг/м <sup>3</sup>	461,4196				3,77436		

Рассчитать

Рисунок 1 – Интерфейс бюджета неопределённости программы оценивания метрологических характеристик стандартных образцов

Работа инициирована РУП «Гродненский центр стандартизации, метрологии и сертификации».

*Список литературы*

- ГОСТ 16263-70. Государственная система обеспечения единства измерений. Метрология. Термины и определения, 1983. –39с.
- ГОСТ 8.315–97. Стандартные образцы состава и свойств веществ и материалов. – Минск. : Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 1997. – 24 с.

An automated method for estimating the concentration of constituents in standard samples of the composition of water-alcohol mixtures was developed.

*Кобылянец Ярослав Дмитриевич*, студент 4 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, lomidolomger1@gmail.com.

*Купчевский Артур Тадеушевич*, студент 4 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, Arturkupchevskii@mail.ru.

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

УДК 536.2

А. С. КРЕНТИК

**МОДЕЛИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НАПОЛНЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ**

Исследуется теплопроводность композитов на основе политетрафторэтилена с металлическим наполнителем для различных концентраций. Выполнены измерения теплопроводности данных образцов. Проведены расчеты теплопроводности аналогичных композиционных систем с помощью использования численных методов. При высоких концентрациях наполнителя на теплопроводность композиционной системы начинают влиять образующиеся воздушные включения. Предложена модель структурной ячейки, которая позволяет учесть дополнительное термическое сопротивление. Выполнено сравнение расчетных и экспериментальных данных.

Ключевые слова: эффективный коэффициент теплопроводности, наполненный полимер, численный метод.

Прогнозирование тепловых свойств полимерных композиционных систем невозможно без учета тех структурных изменений, которые происходят в системе под воздействием поверхности наполнителя. Зависимость физических свойств, в частности теплопроводность, от внешних факторов и условий формирования композита чрезвычайно важна для организации эффективного технологического процесса получения композита с требуемыми свойствами. Часто исследуемое свойство зависит от большого числа факторов и в комплексе трудно выделить влияние каждого по отдельности. Наиболее оптимальным методом исследования теплопроводности композита следует считать объединение реального и вычислительного экспериментов. В данной работе получены экспериментальные результаты по теплопроводности для полимерных композитов на основе ПТФЭ с медным наполнителем для различных концентраций. Предложен численный метод для теоретического расчета теплопроводности.



В качестве объектов исследований использовали политетрафторэтилен (ПТФЭ) марки Ф4-ПМ (ГОСТ 10007-80). В качестве модификатора использовали порошок медный электролитический высокодисперсный (ТУ 1793-094-00194429-2002).

Композиционная система, теплопроводность которой нужно рассчитать, моделируется в виде куба, разбитого на ячейки [1]. Каждая ячейка может быть заполнена либо материалом матрицы, либо материалом наполнителя. На противоположных боковых гранях этого куба задаются различные температуры. В результате вдоль одного из направлений создается температурный градиент. Тепловой поток через остальные грани куба отсутствует. Далее необходимо решать уравнение теплопроводности для полученной системы, чтобы найти температурное поле и общий тепловой поток  $q$ . Эффективный коэффициент теплопроводности определяется по формуле

$$\lambda = \frac{qL}{T_2 - T_1} \quad (1)$$

где  $\lambda$  – эффективный коэффициент теплопроводности,  $L$  – длина ячейки куба, вдоль которой создан градиент температуры,  $T_2 - T_1$  – разность температур противоположных граней.

Изменение температуры в веществе с течением времени описывает дифференциальное уравнение теплопроводности. Оно имеет следующий вид:

$$c(p)\rho(p)\frac{\partial T}{\partial \tau} = \nabla[(p)\nabla T], \tau > 0, p \in \Omega \quad (2)$$

где  $p = \{x_1, x_2, x_3\}$  обозначает координаты декартовой системы координат,  $c(p)$  – теплоемкость в данной точке пространства,  $\rho(p)$  – плотность в данной точке пространства,  $T$  – температура,  $\tau$  – время,  $\lambda(p)$  – коэффициент теплопроводности в данной точке пространства,  $\Omega = \Omega(x_1, x_2, x_3)$  – конечная пространственная область,  $\nabla$  – оператор Гамильтона.

Будем решать нестационарное уравнение теплопроводности (1) методом конечных разностей [2]. Суть данного метода состоит в следующем. Заменяем область непрерывного изменения аргументов  $\Omega$  искомой функции  $T$  некоторым конечным множеством точек, лежащих в этой области. Это множество назовем разностной сеткой, сами точки – узлами сетки, а функции, определенные тем или иным способом на этой сетке, – сеточными функциями. Дифференциальный оператор, входящий в уравнение, заменим некоторым разностным оператором, а также сформулируем разностный аналог для краевых условий и начальных данных.

В результате такой замены получим систему алгебраических уравнений, называемых еще разностной схемой. Решая полученную алгебраическую систему, найдем приближенное (разностное) решение в узлах сетки.

При переходе от непрерывной среды к некоторой ее дискретной модели естественно требовать, чтобы для описываемого физического процесса выполнялись законы сохранения. Схемы, для которых данное требование выполняется, называются консервативными. При построении разностного аналога для дифференциальных операторов, входящих в уравнение (1) был использован интегро-интерполяционный метод. Суть метода состоит в следующем. Область изменения независимых переменных разбивается на элементарные ячейки. Затем исходное дифференциальное уравнение интегрируют по ячейке и приходят к интегральным соотношениям. Интегралы и производные, входящие в эти соотношения, заменяются разностными отношениями так, чтобы не нарушались законы сохранения. Для одномерного случая получим следующую разностную аппроксимацию:

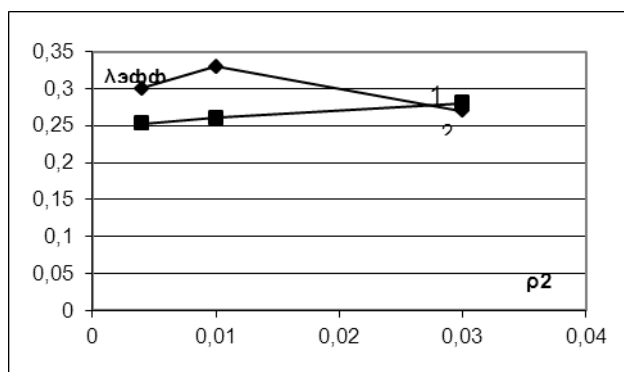
$$\frac{u_k^{i+1} - u_k^i}{\eta} = \frac{1}{2c_k \rho_k h} \left[ \left( \lambda_{k+1/2} \frac{u_{k+1}^{i+1} - u_k^{i+1}}{h} - \lambda_{k-1/2} \frac{u_k^{i+1} - u_{k-1}^{i+1}}{h} \right) + \left( \lambda_{k+1/2} \frac{u_{k+1}^i - u_k^i}{h} - \lambda_{k-1/2} \frac{u_k^i - u_{k-1}^i}{h} \right) \right] \quad (3)$$

где  $u_k^i$  – температура в момент времени  $t$  в  $k$ -ом узле сетки,  $u_k^{i+1}$  – температура в момент времени  $t + \eta$ ,  $t + \eta$ ,  $\eta$  – временной шаг,  $h$  – шаг сетки (расстояние между соседними узлами сетки),  $\lambda_k$  – теплопроводность в  $k$ -ом узле сетки.

Полученная схема (2) содержит в каждом уравнении несколько неизвестных значений функции на новом временном слое; подобные схемы называются неявными. Для получения  $u_k^{i+1}$  необходимо решать одновременно всю систему линейных уравнений. Для ее решения используется метод прогонки.

Для реализации поставленной задачи в трехмерном случае используются экономичные неявные схемы, основанные на расщеплении пространственного оператора по координатам. Мы использовали локально-одномерные схемы. Для решения каждого разностного уравнения схемы используется метод прогонки. На промежуточных слоях полученная система разностных уравнений не аппроксимирует исходную задачу. Погрешности аппроксимации промежуточных слоев суммируются и компенсируются так, что на целом слое аппроксимация есть. При этом разностное решение следует сравнивать с точным только на целых слоях. Говорят, что имеет место суммарная аппроксимация.

На рис. 1 представлены расчетные и экспериментальные данные эффективного коэффициента теплопроводности композиции политетрафторэтилен – медь при объемных концентрациях 0,4–3 %, а на рис. 3 – при концентрациях 4,4–13 %.



**Рисунок 1 – Эффективный коэффициент теплопроводности композиции политетрафторэтилен – медь при объемных концентрациях 0,4–3 % (1 – эксперимент, 2 – расчёт)**

*Список литературы*

1. Бачурина, А. Ю. Модель межмолекулярной теплопроводности аморфной фазы полимера / А. Ю. Бачурина, А. В. Белко, А. В. Никитин. – М. : Наука, 2016. – 7 с.
2. Калиткин, Н. Н. Численные методы / Н. Н. Калиткин ; под ред. А. А. Самарского. – М. : Наука, 1978. – 512 с.

In this paper islets thermal conductivity composites based on polytetrafluoroethylene with Metallic polling for different focus. Thermal conductivity measurements of these samples were performed. The calculations of the thermal conductivity of analog composition systems using the island methods are proved. At high focus politely on the thermal conductivity of the composition of the system begins to influence the resulting air pockets. A model of the cell structure is proposed, which allows taking into account the additional resistance of the termite. An experimental comparison of reset and data is performed. Keywords: effective coefficient of thermal conductivity, Poland polymer, island method.

*Крентик Александр Сергеевич*, магистрант физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, [sanya.krentik@mail.ru](mailto:sanya.krentik@mail.ru).

Научный руководитель – *Никитин Александр Викторович*, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь.

УДК 006.9:53.089.6

А. Т. КУПЧЕВСКИЙ, Я. Д. КОБЫЛЯНЕЦ

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТОВ ГАЗОВОЙ СМЕСИ ДЛЯ КАЛИБРОВКИ СРЕДСТВ ИЗМЕРЕНИЙ**

Разработана методика определения концентрации компонентов газовой смеси для калибровки средств измерений.

Проверка и калибровка средств аналитических измерений (измерений концентрации и состава вещества) в настоящее время является важнейшей и сложной метрологической задачей. Для повышения качества и эффективности метрологического контроля средств аналитических измерений применяют стандартные образцы состава и свойств веществ и материалов. В частности, оптимизация метрологического контроля средств измерения доли и концентрации компонентов газовых смесей требует разработки современных высокоточных способов приготовления газовых смесей для градуировки этих средств измерений [1].

Существуют следующие основные методы приготовления градуировочных газовых смесей:

Хромато-десорбционный

Гравиметрический

Наиболее точным методом приготовления градуировочных газовых смесей является гравиметрический метод [2], схема которого приведена на рисунке 1.

Искомые значения масс  $m_i$  – каждого  $i$ -го компонента:

$$m_i = \frac{x_i M_i}{\sum_{j=1}^N x_j M_j} \cdot m_f \tag{1}$$

где  $x_i$  – молярная доля  $i$ -го компонента,  $x_j$  – молярная доля  $j$ -го компонента,  $M_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента,  $M_j$  – молярная масса  $j$ -го компонента,  $N$  – число компонентов в окончательной смеси,  $m_f$  – масса окончательной смеси.

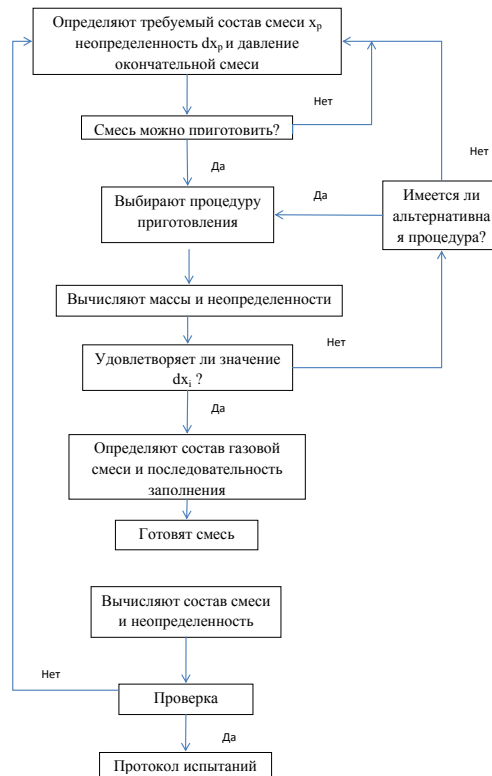


Рисунок 1 – Схема гравиметрического метода приготовления градуировочных газовых смесей

Определение состава (испытуемой) газовой смеси состоит в определении содержания (молярной доли)  $x$  и его неопределенности  $u(x)$  каждого отдельного анализта. Для любого анализта определение этих значений проходит в три этапа.

1. Определяют отклик  $y$  на содержание анализта и его неопределенность  $u(y)$ . В качестве этих значений рекомендуется использовать среднее значение десяти независимо измеренных откликов  $y_1, y_2, \dots, y_{10}$  и среднее квадратическое отклонение этого среднего значения.

$$y = \frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} y_j \quad , \quad (2)$$

$$u(y) = \frac{1}{\sqrt{90}} \sqrt{\sum_{j=1}^{10} (y_j - y)^2} \quad , \quad (3)$$

2. При помощи аналитической функции, вычисляют содержание анализта  $x = G(y)$ . Исходное значение для этого вычисления – отклик  $y$ .

3. Используя перенос неопределенностей на измеренный отклик и на параметры аналитической функции, вычисляют стандартную неопределенность в содержании анализта  $u(x)$ :

$$u^2(x) = \left(\frac{\partial G}{\partial y}\right)^2 u^2(y) + \sum_{j=0}^N \left(\frac{\partial G}{\partial b_j}\right)^2 u^2(b_j) + 2 \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{l=j+1}^N \left(\frac{\partial G}{\partial b_j}\right) \left(\frac{\partial G}{\partial b_l}\right) u(b_j, b_l) \quad , \quad (4)$$

где  $u(x)$  – неопределенность содержания анализта  $x$ , ( $x = G(y)$ ),  $u(y)$  – стандартная неопределенность отклика  $y$ , определенного в а), этап I,  $u^2(b_j)$  – вариация параметра  $b_j$  аналитической функции,  $u(b_j, b_l)$  – ковариация параметров  $b_j, b_l$  аналитической функции.

Исходные данные, необходимые для вычисления стандартной неопределенности  $u(x)$  согласно этому уравнению, определяют следующим образом. Частные производные  $(\partial G / \partial y)$  и  $(\partial G / \partial b_j)$  получают дифференцированием математического выражения аналитической функции.

Если несколько предполагаемых газов для калибровки анализируются при помощи одной и той же аналитической функции, результаты коррелируются.

Работа инициирована РУП «Гродненский центр стандартизации метрологии и сертификации».

Список литературы

1. ГОСТ 8.578 – 2014 Государственная поверочная схема для средств измерений содержания компонентов в газовых средах.
2. ИСО 6142:2001 (ISO 6142:2001) Анализ газов. Приготовление газовых смесей для калибрования. Гравиметрический метод.

A method for determining the concentration of gas mixture components for calibration of measuring instruments has been developed.

*Купчевский Артур Тадеушевич*, студент 4 курса физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь.

*Кобылянец Ярослав Дмитриевич*, студент 4 курса, физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь.

Научный руководитель – *Василюк Геннадий Тимофеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь.

УДК 53.043

А. А. КУРАПЦОВА

**ВЛИЯНИЕ СОЛНЕЧНОГО СВЕТА НА ВОЛЬТ-АМПЕРНУЮ ХАРАКТЕРИСТИКУ  
ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ КРЕМНИЙ – ОКСИД ТИТАНА**

В данной работе приводятся результаты моделирования влияния солнечного света на вольт-амперную характеристику гетероструктуры диоксид титана/кремний. Моделирование проводилось с использованием программы PC1D 5.9. Исследовалось влияние длины волны солнечного излучения на выходной фототок гетероструктуры n-TiO<sub>2</sub>/p-Si.

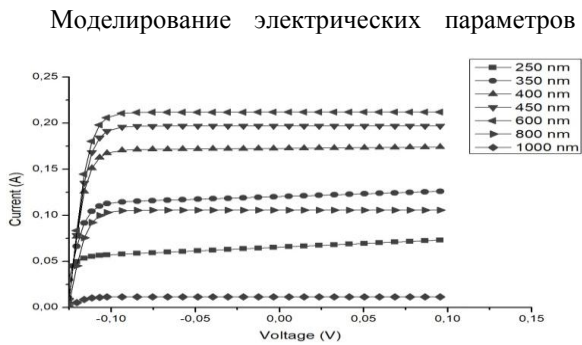
В настоящее время возрастает интерес к широкозонным полупроводникам, в частности к полупроводниковым оксидам металлов. Диоксид титана (TiO<sub>2</sub>) достаточно широко используются в разных устройствах фотовольтаики: в процессах фотокатализа, при фотолизе воды, очистке воздуха и воды от загрязнений, в том числе от тяжелых металлов и органических соединений. Анализ использования диоксида титана в фотокаталитических процессах показывает, что кристаллическая модификация анатаз, является наиболее каталитически активной по сравнению с двумя другими (рутил и брукит) [1]. В тоже время электронные переходы и процессы на поверхности оксида титана при солнечном облучении, определяющие фотокаталитические свойства, изучены еще не в полной мере (недостаточно). Указанные свойства тесным образом связаны с электрическими характеристиками и процессами переноса носителей заряда в используемых в фотокатализе гетероструктурах, таких, например, как оксид титана – кремний.

Целью данной работы является исследование электрических свойств гетероперехода оксид титана/кремний в условиях солнечного излучения.

Моделирование вольт-амперных характеристик (ВАХ) проводилось на основе диффузионно-дрейфовой одномерной модели. В этой модели решается система одномерных уравнений с использованием дискретной сетки. Система представлена уравнением Пуассона и двумя уравнениями переноса заряда в случае электронов и дырок [2]:

$$\begin{cases} \frac{\varepsilon \cdot \varepsilon_0}{q} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = p(x) + n(x) + N_d - N_a; \\ -\frac{1}{q} \frac{\partial j_n(x)}{\partial x} = G_n(x) - R_n(x); \\ -\frac{1}{q} \frac{\partial j_p(x)}{\partial x} = G_p(x) - R_p(x), \end{cases}$$

где  $\varepsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная,  $q$  – заряд электрона,  $p(x)$  и  $n(x)$  – концентрация дырок и электронов в слоях,  $\varphi$  – электростатический потенциал,  $N_D$  и  $N_A$  – концентрации доноров и акцепторов в слоях,  $j_n$  и  $j_p$  – плотности электронного и дырочного токов,  $G_n(x)$  и  $G_p(x)$  – скорости генерации электронов и дырок,  $R_n(x)$  и  $R_p(x)$  – скорости рекомбинации электронов и дырок.



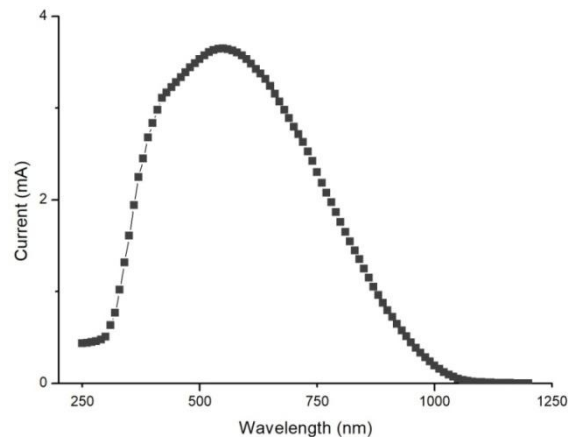
**Рисунок 1 – Вольт-амперные характеристики гетероструктуры n-TiO<sub>2</sub>/p-Si при различных длинах волн излучения**

Моделирование электрических параметров гетероструктуры n-TiO<sub>2</sub>/p-Si проводилось с помощью программы PC1D 5.9 [3]. Использованные параметры для оксида титана и кремния соответственно: толщина 1 мкм и 5 мкм; подвижность электронов 4 см<sup>2</sup>/(В·с) и 1417 см<sup>2</sup>/(В·с); подвижность дырок 0,1 см<sup>2</sup>/(В·с) и 470 см<sup>2</sup>/(В·с); относительная диэлектрическая постоянная 40 и 11,9; ширина запрещенной зоны 3,2 эВ и 1,12 эВ; сродство к электрону 4,3 эВ и 4,01 эВ; степень легирования N<sub>d</sub>= 10<sup>15</sup> см<sup>-3</sup> и N<sub>a</sub>= 10<sup>17</sup> см<sup>-3</sup>; время жизни электронов и дырок 25 мкс в оксиде титана и 500 мкс в кремнии. Площадь гетероперехода S= 10 см<sup>2</sup>, температура 300 К.

Коэффициент поглощения и коэффициент отражения солнечного света TiO<sub>2</sub> варьируются в зависимости от длины волны [4, 5].

Были рассчитаны ВАХ гетероперехода n-TiO<sub>2</sub>/p-Si при солнечном облучении, рис. 1 и зависимость тока короткого замыкания (фототока) от длины волны солнечного света, рис. 2. Мощность излучения 0,06 Вт/см<sup>2</sup> и 0,001 Вт/см<sup>2</sup> соответственно.

Из полученных ВАХ можно видеть, что они характеризуются насыщением тока при определенном внешнем смещении, величина которого ограничивается концентрацией генерированных солнечным излучением неравновесных носителей заряда. Полученная нелинейная зависимость тока насыщения обуславливается закономерностями генерации неравновесных носителей заряда солнечным излучением с различной длиной волн в оксиде титана и кремнии.



**Рисунок 2 – Зависимость тока короткого замыкания от длины волны излучения**

Максимум тока короткого замыкания 3,65 мА наблюдается при длине волны излучения  $\lambda=550$  нм, что соответствует энергии кванта 2,2 эВ. Это может быть вызвано фотогенерацией носителей заряда в кремнии в условиях прозрачности слоя оксида титана для излучения соответствующей длины волны. На длине волны 380-390 нм, которая соответствует ширине запрещенной зоны анатаза, наблюдается небольшой излом. Излучение с длиной волны 380 нм лежит в области ультрафиолетового излучения. Для расширения диапазона фотопоглощения, оксид титана легируют различными катионными и анионными примесями, что приводит к образованию полос поглощения в видимой области спектра.

Таким образом, проведенное моделирование электрических характеристик гетероструктуры показало, что ВАХ в условиях освещения солнечным светом характеризуется насыщением тока, величина которого нелинейным образом зависит от длины солнечного света. Ток короткого замыкания характеризуется максимумом при длине волны, соответствующей генерации носителей заряда в кремнии.

Полученные результаты необходимы для исследования электронных процессов, протекающих на поверхности оксида титана, которые обуславливают его фотокаталитические свойства.

#### Список литературы

1. Ahmed, A.Y. Photocatalytic activities of different well-defined crystal TiO<sub>2</sub> surfaces: anatase versus rutile / A. Y. Ahmed, T. A. Kandiel, T. Oekermann // Journal of Physical Chemistry Letters. – 2011. – V. 2. – P. 2461–2465.

2. Luque A., Hegedus S. Handbook of Photovoltaic Science and Engineering / A. Luque, S. Hegedus – New York: John Wiley & Sons Ltd, 2003. – 1117 p.

3. PC1D Version 5: 32-bit Solar Cell Modelling on Personal Computers, 26th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Anaheim, Sep-Oct 1997, pp.207–210.

4. Берсирова О.Л. Тонкие пленки оксидов титана и олова и полупроводниковые структуры на их основе, полученные пиролитической пульверизацией: изготовление, характеристика и коррозионные свойства / О. Л. Берсирова, Л. И. Брук, А. И. Дикусар, М. И. Караман, С. П. Сидельникова, А. В. Симашкевич, Д. А. Шербан, Ю. С. Японцева // Электронная обработка материалов. – 2007.

5. Иевлев В. М. Спектры поглощения тонких пленок  $TiO_2$ , синтезированных реактивным высокочастотным магнетронным распылением титана / В. М. Иевлев, С. Б. Кушев, А. Н. Латышев, Л. Ю. Леонова, О. В. Овчинников, М. С. Смирнов, Е. В. Попова, А. В. Костюченко, С. А. Солдатенко // Физика и техника полупроводников. – 2014, Т. 48, вып. 7 – С. 875–884.

In this paper, we report the results of modeling the influence of sunlight on the current-voltage characteristic of a titanium dioxide / silicon heterostructure. The simulation was carried out using the program PC1D 5.9. The effect of the wavelength of solar radiation on the output photocurrent of the n-TiO<sub>2</sub> / p-Si heterostructure was studied.

*Курацова Анна Андреевна*, аспирант факультета радиотехники и электроники БГУИР, Минск, Беларусь, anku21qwerty@gmail.com.

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

УДК 539.122.04

К. О. МАКАРЕВИЧ, В. Ф. МИНЕНКО, С. А. КУТЕНЬ

### МОНТЕ–КАРЛО МОДЕЛЬ ГЕОМЕТРИИ ОБЛУЧЕНИЯ ЧЕЛОВЕКА ВО ВРЕМЯ РЕНТГЕНОДИАГНОСТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Представлена Монте–Карло модель геометрии облучения пациента для процедур стандартной рентгенодиагностики. Модель содержит описание анатомии пациента, геометрии облучения и характеристик источника излучения.

Вклад медицинского облучения в коллективную дозу облучения населения достигает 30 % и формируется за счет медицинских исследований, охватывающих все возрастные группы населения [1]. Несмотря на то, что ионизирующее излучение в ситуации медицинского облучения выступает как инструмент, который несет больше пользы, чем вреда, следует стремиться избегать ненужного облучения, т.к. с ростом лучевой нагрузки растут проявления соматической и наследственной патологий человека [2]. Поэтому разработаны международные и отечественные нормативные документы, которые рекомендуют по возможности ограничивать дозы рентгенологических исследований путем введения диагностических референтных уровней, оптимизации процедур рентгенодиагностики и контроля дозовых нагрузок [3–5].

Для определения величины дозы облучения человека необходимо знать распределение поглощенной энергии в органах и тканях организма. Однако получение такого распределения является нетривиальной задачей, т. к. оно не может быть измерено непосредственно в пациенте, находящимся под облучением. Получить дозовое распределение можно путем экспериментальных измерений с помощью термомюлюминесцентных детекторов на физическом фантоме тела человека. Но этот способ является ограниченным и не достаточно точным, т. к. с помощью физического фантома невозможно детально воспроизвести все структуры тела человека. Однако распределение поглощенной дозы более тщательно и точно можно оценить расчетным путем, используя компьютерную модель тела человека и моделируя транспорт рентгеновского излучения в теле пациента с помощью метода Монте–Карло.

Для реализации моделирования необходимо иметь вычислительную модель (фантом) тела человека с описанием внутренней структуры, положения органов, состава и плотностей тканей. Международная комиссия по радиологической защите (МКРЗ) для расчетов дозиметрических величин предложила использовать условные воксельные фантомы мужчины и женщины [6].

Воксельный фантом МКРЗ представляет собой модель тела человека, помещенного в прямоугольный параллелепипед, заполненный воздухом, и разделенный на ячейки (воксели) одинакового размера. Каждая ячейка содержит в себе номер органа, к которому она принадлежит, а каждому органу соответствует свой материал (ткань), обозначающий содержимое этой ячейки. Ячейки, не принадлежащие к фантому, заполнены воздухом. Данные фантомы содержат более 140 различных структур, состоящих из 50 типов тканей, для того, чтобы максимально соответствовать стандартному индивиду не только по месторасположению и форме органов, но также по составу вещества, из которого состоят органы и ткани тела.

В виду того, что фантомы содержат в себе миллионы вокселей (более  $14 \cdot 10^6$  для женского фантома и более  $7 \cdot 10^6$  для мужского фантома), не представляется возможным вручную создать входной файл для дальнейшего Монте–Карло моделирования. Поэтому была разработаны программы CreatePhantomMale.nb и

CreatePhantomFemale.nb, создающие необходимые входные файлы, содержащие описание мужского и женского фантомов соответственно. Пользователь имеет возможность задать тип проекции облучения (переднезадняя, заднепередняя, правая боковая и левая боковая), расстояние «источник-приемник изображения» (РИП), размеры поля облучения на приемнике изображения) и характеристики источника излучения (анодное напряжение, пульсация напряжения, фильтрация).

Следует отметить, что процесс Монте-Карло моделирования транспорта рентгеновского излучения в областях, расположенных на больших расстояниях вне прямого поля облучения, занимает длительное компьютерное время и сопровождается большими статистическими ошибками счета. По этой причине приходится прибегать к процедуре ограничения размеров рассматриваемого объема тела, но так, чтобы не увеличивать ошибки расчета дозы. Этому благоприятствует тот факт, что для целей медицинского облучения величина эффективной дозы может быть использована только в ограниченном качестве: для сравнения различных диагностических исследований, сходных рентгенологических процедур, различных технологий для одного и того же медицинского обследования [7]. При этом нет необходимости оценивать значение эффективной дозы с большой степенью точности с учетом всех органов и тканей. Следовательно, для моделирования транспорта рентгеновского излучения в теле человека можно использовать не весь фантом, а ограничиться лишь геометрической областью, в которой располагаются критические органы, попавшие в поле прямого и ближнего рассеянного излучения. Поэтому было принято при расчете эффективной дозы ограничиться учетом лишь тех органов и тканей, величина поглощенной энергии в которых составляет не менее 1% от максимального значения. Данное упрощение существенно не изменит оцениваемую величину эффективной дозы, но сократит время вычислений с приемлемой точностью расчета метода Монте-Карло.

Для решения поставленной задачи проведено моделирование транспорта рентгеновского излучения в водном фантоме, который представляет собой прямоугольный параллелепипед с геометрическими размерами, равными 178 см×54 см×27 см, что соответствует максимальным размерам референтных фантомов МКРЗ. Для поля облучения размером 10 см × 10 см и РИП= 100 см был рассчитан профиль поглощенной энергии во фронтальной плоскости водного фантома. Моделирование проводилось для источника рентгеновского излучения с анодным напряжением 80 кВ, без фильтра и без пульсации анодного напряжения. Перпендикулярно оси пучка располагался ряд сферических детекторов, внутри которых рассчитывалось значение поглощенной энергии в воде.

Проведенное моделирование показало, что для слоя среды в середине фантома можно выделить область, ограниченную расстоянием до 15 см от края поля, в которой значения поглощенной энергии составляют не менее 1% от максимального значения. Погрешность Монте-Карло вычислений при этом не превышает 10 %.

Для оценки обоснованности принятого упрощения были проведены сравнительные вычисления эффективной дозы на мужском фантоме. При одинаковых параметрах процедуры облучения было оценено два значения эффективной дозы: для всего мужского фантома и для части фантома, выбираемой согласно указанной выше схеме. Относительная разница полученных значений не превышает 0,1 %.

Таким образом, полученный результат позволяет при моделировании процедур облучения с использованием воксельных фантомов МКРЗ принимать во внимание только те органы и ткани, которые непосредственно попадают в поле облучения вместе с геометрической областью размером 15 см от каждого края поля. Поэтому программы CreatePhantomMale.nb и CreatePhantomFemale.nb были изменены так, чтобы из всего фантома выбирать только те слои, которые попадают в поле облучения, и добавлять еще по 15 см к верхнему и нижнему краям.

В качестве примера на рисунке 1 показана процедура облучения женщины при рентгенографии легких в заднепередней проекции (левый рисунок) и Монте-Карло модель этой процедуры для женского фантома (правый рисунок). Геометрические условия модели облучения: РИП= 100 см, размеры поля облучения 30 см × 40 см, положение центра пучка на теле фантома – 36,8 см от макушки.

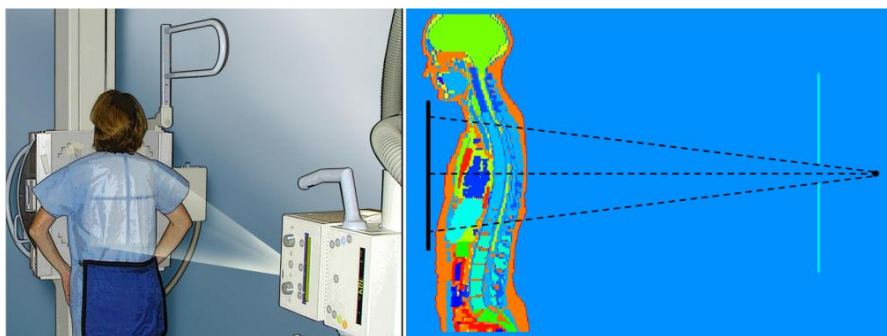


Рисунок 1 – Модель геометрии облучения для рентгенографии легких в заднепередней проекции

Список литературы

1. UNSCEAR. Effects of Ionizing Radiation. Volume I: Report to the General Assembly, Scientific Annexes A and B. INSCEAR 2006 Report. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation. United Nations sales publication E.08.IX.6. United Nations, New York, 2008.
2. Рекомендации Международной комиссии по радиационной защите от 2008 года. Радиационная защита в медицине. Публикация 105 МКРЗ. С.-Петербург, 2011.
3. Международные основные нормы безопасности для защиты от ионизирующих излучений и безопасного обращения с источниками излучения. Серия изданий по безопасности, №115, МАГАТЭ, Вена, 1997, – С. 113.
4. Гигиенический норматив «Критерии оценки радиационного воздействия». Утв. Пост. МЗ РБ от 28.12.2012 г. № 213
5. Санитарные нормы и правила «Требования к радиационной безопасности». Утв. Пост. МЗ РБ от 28.12.2012 г. № 213.
6. ICRP 2009. Adult Reference Computational Phantoms. ICRP Publication 110. Ann. ICRP 39(2).ICRP.
7. Рекомендации Международной комиссии по радиационной защите от 2007 года. Публикация 103 МКРЗ. Москва, Алана, 2009.

The Monte Carlo model of the irradiation geometry of the patient during X-ray diagnostics is presented. The model considers the description patient's anatomy, irradiation geometry and radiation source characteristics.

*Макаревич Кристина Олеговна*, аспирант физического факультета БГУ, Минск, Беларусь. kristinanevdokh@tut.by.

Научные руководители – *Миненко Виктор Федорович*, кандидат биологических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической физики и моделирования ядерных процессов, НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь, vminenko@list.ru.

*Кутень Семен Адамович*, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией теоретической физики и моделирования ядерных процессов, НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь, kut@inp.bsu.by.

УДК 519.8

А. К. ПУШКИНА

### МЕТОДЫ МИНИМИЗАЦИИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СЛОЖНОСТИ ЛОГИЧЕСКИХ ИГР

В современной алгоритмической комбинаторной теории игр существует огромное количество различных классов задач, решения которых являются темой для обсуждения в научных кругах. Как пример рассматриваются решения NP-сложных задач для оптимизации игры Тетрис. NP-сложные задачи – являются центральными в теории вычислительной сложности.

Популярным в настоящее время является обсуждение решения P- и NP-сложных задач. В основе их работы лежат такие понятия, как временная сложность алгоритма и детерминированное и недетерминированное полиномиальное время. Временная сложность оценивается путём подсчёта числа элементарных операций, осуществляемых алгоритмом, где элементарная операция занимает для выполнения фиксированное время. Алгоритм работает за полиномиальное время, если время работы алгоритма выражается полиномом или многочленом. Концепция полиномиального времени приводит к нескольким классам сложности в теории сложности вычислений, таких как P и NP. P – класс сложности задач разрешимости, которые могут быть решены в детерминированной машине Тьюринга за полиномиальное время. NP – класс сложности задач разрешимости, которые могут быть решены в недетерминированной машине Тьюринга за полиномиальное время. Решения P- и NP- сложных задач являются центральными в теории вычислительной сложности.

Концепция NP-полноты была введена в 1971 году, позднее был введен термин NP-complete. Наиболее важной характеристикой NP-полных проблем является то, что их быстрое решение не известно, то есть время, необходимое для решения проблемы с использованием любого известного в настоящее время алгоритма, увеличивается очень быстро по мере увеличения размера проблемы. Как следствие, определение того, можно ли быстро решить эти проблемы, называется проблемой P против NP, является одной из главных нерешенных проблем в информатике сегодня.

Некоторые математические методы могут быть применены для решения вычислительных задач в целом, и они часто приводят к значительно более быстрым алгоритмам. Например:

Аппроксимация: вместо поиска оптимального решения находится решение, которое близко к оптимальному, но более простое.

Рандомизация: используется случайный выбор, чтобы получить более быстрое среднее время работы и уменьшить количество систематических ошибок.

Ограничение: при ограничении начальных данных (например, для планарных графов), возможны более быстрые алгоритмы.

Параметризация: часто можно ускорить работу алгоритма, если фиксированы определенные начальные параметры.



Эвристика: алгоритмы, которые работают «достаточно хорошо» во многих случаях, но для которых случаев нет доказательств того, что они всегда быстры и всегда дают хороший результат.

Проблемы, связанные с NP, часто решаются с помощью эвристических методов и алгоритмов аппроксимации.

Одним из примеров NP-сложного решения является минимизация вычислительной сложности компьютерной игры Тетрис. Тетрис – популярная компьютерная игра, изобретенная математиком Алексеем Пажитновым в середине 1980-х годов. Всего через несколько лет после её изобретения, это была уже самая продаваемая игра в США и Англии, более 50 миллионов копий были проданы по всему миру.

Конкретно, игра Тетрис заключается в следующем: нам дается начальная игровое поле, которое представляет собой прямоугольную сетку из  $m$  строк и  $n$  столбцов (обычно 20 на 10), индексированных снизу-вверх и слева-направо. Ячейки начального игрового поля могут быть заполненными на сложных уровнях и пустыми на простых. Последовательность тетрисов (фигур в игре) генерируется, как правило, вероятно, а следующий тетрис появляется в середине верхнего ряда игрового поля. Пока он падает, игрок может вращать тетрис и перемещать по горизонтали. Он перестает падать, когда приземляется на заполненные ячейки и начинает падать новый тетрис. Игра продолжается до тех пор, пока не будет заполнена, хотя бы одна из верхних ячеек игрового поля, что означает проигрыш.

NP-полное решение может оптимизировать любую из нескольких естественных целевых функций для Тетрис, таких как:

- максимизация количества строк, очищенных при воспроизведении данной последовательности тетрисов;
- максимизация количества фигур, помещенных до конца игры;
- максимизация числа тетрисов – одновременная очистка четырех рядов;
- минимизация высоты самой высокой заполненной ячейки в течение игры.

Максимизацию количества строк, очищенных во время игры – это фундаментальная составляющая оценки игрока, но на самом деле оценка может быть более тесно связана с количеством тетрисов, то есть количеством раз во время игры, когда четыре строки очищаются одновременно.

Для решения NP-сложных задач в Тетрисе учёными были предложены различные стратегии. Например стратегия, рассмотренная Брустовским и Бургилем – это выживание: сколько фигур можно разместить в игровом поле до проигрыша? Брустовский, так же вычислил алгоритм, позволяющий оценить потерю ячеек для различных видов игровых полей. Кострев и Хартман рассматривают Тетрис с точки зрения теории управления, используя динамическое программирование для выбора фигуры.

Решение NP-сложных задач в игре Тетрис можно рассматривать с точки зрения различных модификаций правил Тетрис (например, введение определённых правил вращения фигур) или сокращения некоторых начальных данных в игре, минимизации вычислительной сложности игры путём максимально эффективного использования каждой ячейки игрового поля, относительно последовательности фигур. Часто рассматривают оптимизацию максимальной высоты заполненного игрового поля, количества очищенных строк и количества упавших тетрисов, сложенных без проигрыша при выполнении определённых условий, таких как ограничение правил вращений, ограничение числа форм тетрисов и т. п.

Все эти способы рассмотрения не позволяют найти общее оптимальное решение для NP-сложных задач в Тетрисе и имеют свои недостатки и противоречия. NP-сложные задачи образуют область алгоритмической комбинаторной теории игр, в которой за последние несколько лет было создано много новых результатов и до сих пор остаётся много нерешённых задач.

There are many different classes of problems whose solutions are the topic of discussion in the scientific community in the modern algorithmic combinatorial game theory. As an example, solutions of NP-complex problems for optimizing the Tetris game are considered. NP-complex problems are central in the theory of computational complexity.

#### *Список литературы*

1. Cormen, T. H. Chapter 34: NP-Completeness / T. H. Cormen., C. E. Leiserson, R. L. Rivest, Introduction to Algorithms // MIT Press and McGraw-Hill. – 2001. – P. 966–1021.
2. Liben-Nowell, D., Tetris is Hard, Even to Approximate / D. Liben-Nowell, E. D. Demaine, S. Hohenberger, Cornell University // Cornell University Technology Square. – 2008. – P. 56.

*Пушкина Анастасия Константиновна*, аспирант кафедры информационных технологий автоматизированных систем, БГУИР, Минск, Беларусь.

Научный руководитель – *Ревотюк Михаил Павлович*, кандидат технических наук, доцент кафедры информационных технологий автоматизированных систем БГУИР, Минск, Беларусь.

**МОДЕЛИРОВАНИЯ ЯВЛЕНИЯ ПРИЛИВОВ И ОТЛИВОВ**

Рассматривается проблема моделирования приливных явлений. Автором предлагается компьютерная модель приливов и отливов, построенная на алгоритме Эйлера-Кромера, позволяющая посредством варьирования параметров отображать различные ситуации, связанные с приливными эффектами на Земле.

Приливные явления порой столь неожиданные и актуальные, что многие физики с полным правом называют приливное взаимодействие «пятой фундаментальной силой», а математики развивают специальные методы для исследования приливных эффектов [1]. Важность изучения приливных сил обусловлена, прежде всего, их существенным влиянием на движение планет, звёзд и галактик, расположение созвездий, на погоду, навигацию, на рост растений и эволюцию биосферы.

В настоящей работе нами поставлена цель *построение компьютерной модели приливов и отливов*. Для ее реализации мы разработали математическую модель. Рассмотрим ее более детально.

Рассмотрим систему движения двух тел, взаимодействующих между собой в соответствии с законом всемирного тяготения. При отсутствии внешних сил и взаимодействии Земли и Луны в соответствии с законом всемирного тяготения постановка задачи имеет вид: [2].

движение (плоское) системы двух тел описывается системой уравнений:

$$m_1 \frac{d^2 y_1}{dt^2} = F_y + F_{1y}; m_1 \frac{d^2 x_1}{dt^2} = F_x + F_{1x}; m_2 \frac{d^2 y_2}{dt^2} = -F_y + F_{2y}; m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -F_x + F_{2x},$$

где:  $m_1, m_2$  – массы тел, кг;  $x_1, x_2, y_1, y_2$  – координаты первого и второго тел, м;  $t$  – время, с;  $F_x, F_y$  – компоненты  $x$  и  $y$  внутренних сил;  $F_{1x}, F_{1y}$  – компоненты  $x$  и  $y$  внешних сил.

Для решения задачи (2.1) должны быть заданы начальные условия в виде координат и скоростей обоих тел. При построении компьютерной модели приливов и отливов на Земле мы использовали упрощенную модель мирового океана в виде сплошной водной оболочки, полностью покрывающей всю Землю (упрощение было сделано из-за сложной структуры береговой линии и рельефа дна мирового океана). Мы применили численный алгоритм решения, который обеспечивает решение задачи и при сложных граничных и начальных условиях.

Наша компьютерная модель опирается на алгоритм Эйлера-Кромера [3][4]

*Этапы алгоритма:*

1. Задаем параметры вычислений, и начальные параметры: базовый временной шаг  $\Delta t = \Delta t_0$ ; время  $t = 0$ ; координаты планет  $x_1 = x_{10}; y_1 = y_{10}; x_2 = x_{20}; y_2 = y_{20}$ ; начальные скорости  $v_{1x} = v_{10x}; v_{1y} = v_{10y}; v_{2x} = v_{20x}; v_{2y} = v_{20y}$ ;

2. Определяем текущее время:  $t_{k+1} = t_k + \Delta t$

3. Определяем компоненты силы:  $r = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$ ;  
 $F = \frac{GM_1 M_2}{r^2}$ ;  $F_{1x} = F \frac{x_2 - x_1}{r}$ ;  $F_{2x} = F \frac{x_1 - x_2}{r}$ ;  $F_{1y} = F \frac{y_2 - y_1}{r}$ ;  $F_{2y} = F \frac{y_1 - y_2}{r}$

4. Вычисляем ускорение:

$$a_{1x} = F \frac{x_2 - x_1}{M_1 r^2}; a_{2x} = F \frac{x_1 - x_2}{M_2 r^2}; a_{1y} = F \frac{y_2 - y_1}{M_1 r^2}; a_{2y} = F \frac{y_1 - y_2}{M_2 r^2}$$

5. Для момента времени  $t_{k+1}$  определяем скорости и координаты планет:

$$v_{1x,k+1} = v_{1x,k} + a_{1x} \Delta t, v_{1y,k+1} = v_{1y,k} + a_{1y} \Delta t;$$

$$v_{2x,k+1} = v_{2x,k} + a_{2x} \Delta t, v_{2y,k+1} = v_{2y,k} + a_{2y} \Delta t;$$

$$x_{1,k+1} = x_{1,k} + \frac{v_{1x,k} + v_{1x,k+1}}{2} \Delta t, y_{1,k+1} = y_{1,k} + \frac{v_{1y,k} + v_{1y,k+1}}{2} \Delta t;$$

$$x_{2,k+1} = x_{2,k} + \frac{v_{2x,k} + v_{2x,k+1}}{2} \Delta t, y_{2,k+1} = y_{2,k} + \frac{v_{2y,k} + v_{2y,k+1}}{2} \Delta t;$$

6. Отображаем на экране положение планеты.

7. Переопределяем начальные данные:

$$x_{1k} = x_{1k+1}, y_{1k} = y_{1k+1}, v_{1xk} = v_{1x,k+1}, v_{1yk} = v_{1y,k+1}, x_{2k} = x_{2k+1}, y_{2k} = y_{2k+1}, v_{2xk} = v_{2x,k+1}, v_{2yk} = v_{2y,k+1}$$

8. Если принудительно не останавливаются вычисления (кнопка "Стоп"), то переходим к п.3.

9. Завершаем вычисления.

В качестве исходных данных в нашей программе можно задавать координаты и скорости Луны и Земли. А также массы. Конечно, все эти параметры известны. Однако для универсальности модели, возможности анализа движения при других параметрах планет эти величины могут изменяться.

Как мы знаем, Луна и Земля вращаются вокруг общего центра масс. Прилив со стороны Луны обусловлен гравитационным притяжением подвижной жидкости. Прилив с противоположной стороны Земли связан с центробежными силами, возникающими при вращении Земли вокруг общего центра масс.

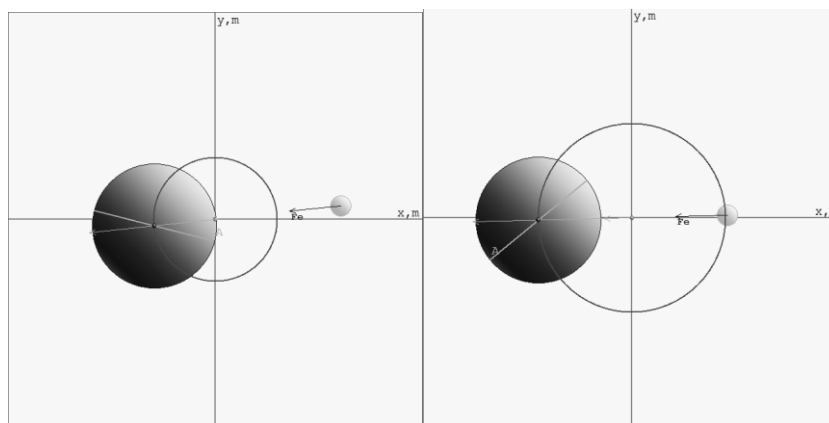


Рисунок (1, 2)

Постепенно начнём увеличивать массу Луны (рис.1) и в заключение будем считать массы Земли и Луны одинаковыми, при этом картина их движения представлена на рис. 2.

С помощью предложенной нами модели можно, варьируя начальными параметрами и массами планет, смоделировать различные ситуации и объяснить: почему приливы и отливы происходят два раза в сутки. Кроме того, модель предусматривает возможность внесения возмущений в систему «Земля–Луна», и анализировать траектории их движения.

#### Список литературы

1. Сурдин, В. Г. Пятая сила. / В. Г. Сурдин. – М. : Изд-во Изд-во МЦНМО, 2002. – 40 с.
2. Ольховский, И. И. Курс теоретической механики для физиков / И. И. Ольховский. – М. : Изд-во МГУ, 1978. – 575 с.
3. Никитин, А. В. Компьютерное моделирование физических процессов/ А. В. Никитин, А. И. Слободянюк, М. Л. Шишаков. – М: БИНОМ, 2013. – 678 .
4. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике / Х. Гулд, Я. Тобочник. – М. : Мир, 1990. – часть 1, 2 – 350, 400 с.

The problem of simulation of tidal phenomena is considered. The author proposes a computer model of tides, built on the Ayer-Cromer algorithm, which allows displaying various situations associated with tidal effects on the Earth through varying parameters.

*Соколовский Никита Олегович*, ГУО «Лицей № 1 г. Гродно», Гродно, Беларусь, nikitao11@bk.ru.

Научные руководители – *Маслов Игорь Сергеевич*, магистр педагогических наук, ГУО «Лицей № 1 г. Гродно», учитель физики высшей категории, imaslov@mail.ru.

*Никитин Александр Викторович*, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники, ГрГУ им. Я. Купалы, nik@grsu.by.

УДК 535.34

А. В. ФЕЛЬШЕРУК

### ПЛАЗМОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ГРАФЕНОВОЙ НАНОСТРУКТУРЕ

Представлены результаты математического моделирования коэффициентов распространения и поглощения электромагнитного излучения (ЭМИ) в наноструктуре металл/диэлектрик/графен в терагерцевом частотном диапазоне. Установлено, что ЭМИ в рассмотренном диапазоне частот может, как распространяться за счет плазмонных колебаний, так и усиливаться за счет них.

За последнее десятилетие исследователи пришли к выводу, что на границе между металлом (проводником) и диэлектриком возможно получить поверхностные плазмоны с той же частотой, что и внешние электромагнитные волны, но с намного меньшей длиной волны. Это позволит использовать плазмоны в наноструктурах для переноса информации внутри чипа. Плазмонные межсоединения стали бы настоящим прорывом в области повышения рабочих частот интегральных микросхем. В этом плане перспективным направлением для решения подобной задачи является исследование плазмонных колебаний в терагерцевом диапазоне частот и, в частности, с использованием графена на диэлектрической подложке. Однако на этом пути еще предстоит решить ряд не только технологических, но и физических задач по возбуждению,

распространению и детектированию плазмонных колебаний с контролируемыми параметрами.

В данной работе представлены результаты моделирования плазмонных эффектов в однослойной графеновой наноструктуре в зависимости от величины химического потенциала  $\mu$  и температуры  $T$  в терагерцевом частотном диапазоне. Ключевую роль в этом случае играет динамическая проводимость графена. В качестве модели проводимости графена было использовано следующее выражение [1]:

$$\sigma(\omega) = \left( \frac{e^2}{4\hbar} \right) \left\{ \frac{8kT\tau}{\pi\hbar(1-i\omega\tau)} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{\mu}{kT} \right) \right] + \tanh \left( \frac{\hbar\omega - 2\mu}{4kT} \right) - \frac{4\hbar\omega}{i\pi} \int_0^\infty \frac{G(\varepsilon, \mu) - G(\hbar\omega, \mu)}{(\hbar\omega)^2 - 4\varepsilon^2} d\varepsilon \right\}, \quad (1)$$

где  $\tau$  – время релаксации электронов,  $\hbar$  – редуцированная постоянная Планка,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $c$  – скорость света,  $e$  – заряд электрона,  $\omega$  – круговая частота, функции

$$G(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{\sinh \left( \frac{\varepsilon}{kT} \right)}{\cosh \left( \frac{\varepsilon}{kT} \right) + \cosh \left( \frac{\varepsilon'}{kT} \right)}, \quad (2)$$

Уравнения, характеризующие взаимодействие электромагнитного излучения (ЭМИ) с графеном, выводятся из уравнений Максвелла, а дисперсионное соотношение, содержащее коэффициенты поглощения и прохождения, из условия нетривиальности решений для таких уравнений [1]:

$$\sqrt{n^2 - p^2} + n^2 \sqrt{1 - p^2} + \frac{4\pi}{c\varepsilon_0} \sigma(\omega) \sqrt{n^2 - p^2} \sqrt{1 - p^2} = 0, \quad (3)$$

где  $n$  – показатель преломления на границе среды и образца,  $p$  – комплексный коэффициент прохождения (распространения) волны ЭМИ,  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная. Величина коэффициента поглощения ЭМИ определяется в виде  $\text{Im}(p\omega/c)$ , а величина коэффициента распространения (прохождения) ЭМИ определяется в виде  $\text{Re}(p)$ .

На рис. 1 приведена частотная зависимость коэффициента поглощения при различных значениях химического потенциала при температуре 300 К. Как видно из рис. 1, его величина немонотонно изменяться в данном частотном диапазоне, принимая как положительные значения, так и отрицательные. Это говорит о том, что в зависимости от соотношений параметров наноструктуры и частоты, могут реализоваться режимы как поглощения ЭМИ, так и его усиления за счет плазмонных колебаний, а с ростом показателя преломления на границе среды и образца поглощение ЭМИ усиливается.

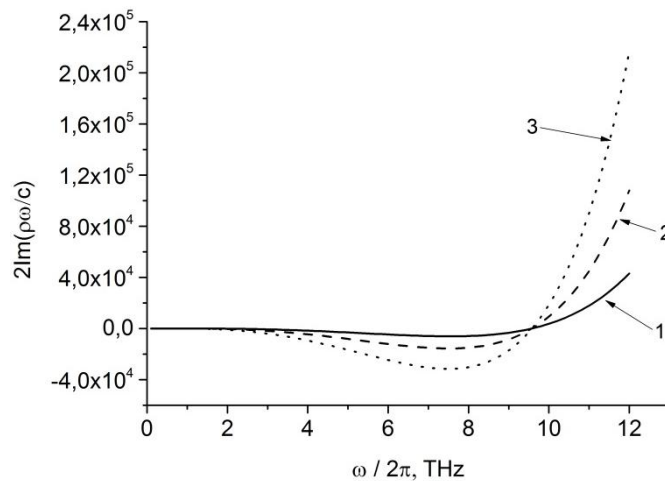
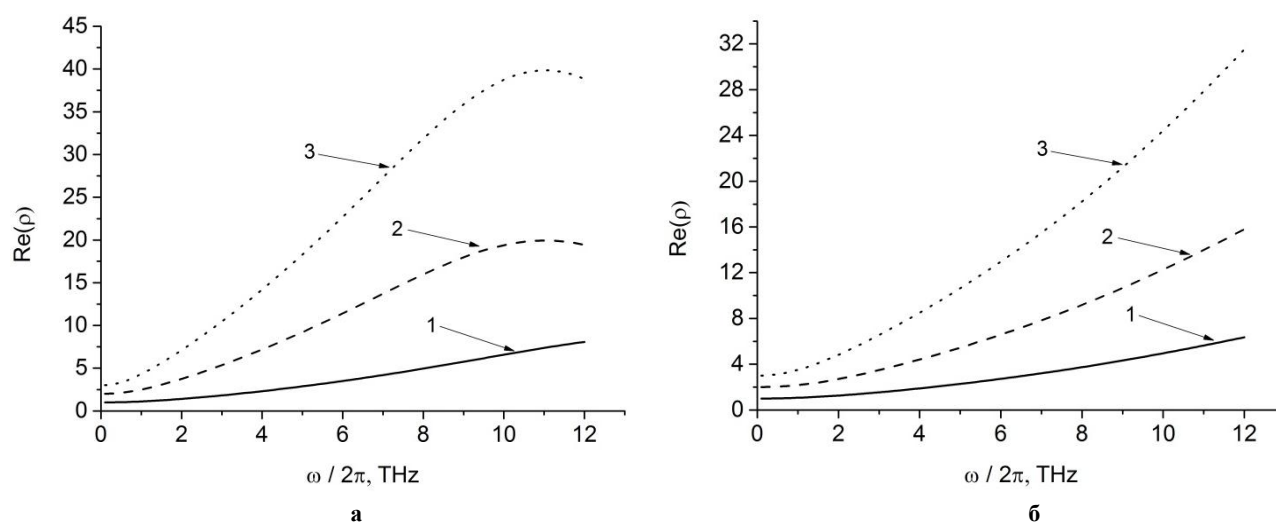


Рисунок 1 – Частотные зависимости коэффициента поглощения ЭМИ при различных  $n$  (1 —  $n = 1$ ; 2 —  $n = 2$ ; 3 —  $n = 3$ ) и при химическом потенциале  $\mu = 0,02$  эВ

На рис. 2 приведены частотные зависимости коэффициента распространения при различных значениях химического потенциала и показателях преломления на границе среды и образца. Как можно видеть, его величина может, как возрастать с частотой, так и немонотонно изменяться в данном частотном диапазоне.



**Рисунок 2 – Частотные зависимости коэффициента распространения ЭМИ при различных  $n$  (1 –  $n = 1$ ; 2 –  $n = 2$ ; 3 –  $n = 3$ ) и при различных химических потенциалах  $\mu$  а) 0,01 эВ и б) 0,02 эВ**

Таким образом, проведено моделирование плазмонных эффектов в однослойной графеновой наноструктуре в зависимости от химического потенциала и температуры. Полученные частотные зависимости коэффициентов распространения и поглощения ЭМИ показали, что в рассмотренном диапазоне частот ЭМИ может не только распространяться за счет плазмонных колебаний, но и усиливаться за счет них.

#### Список литературы

1. Dubinov, A. A. Terahertz surface plasmons in optically pumped graphene structures / A. A. Dubinov, V. Mitin, T. Otsuji // J. Phys.: Condens. Matter. – 2011. – Vol. 23, No. 14. – P. 145302.
2. Zebrev, G. I. Graphene Field Effect Transistors: Diffusion-Drift Theory / 23 Chapter in Physics and Applications of Graphene-Theory. Ed. by S. Mikhailov. – InTech, 2011. – P. 476–498.

The plasmon effects were modeled in a single-layer graphene nanostructure, depending on the chemical potential and refractive index at the boundary of the medium and the sample. The obtained frequency dependences of the EMR propagation and absorption coefficients have shown that in the frequency range considered, the EMR can not only propagate due to plasmon oscillations, but also be amplified by them.

*Фельшерук Андрей Викторович*, магистрант БГУИР, Минск, Беларусь, felsheruk1994@gmail.com.

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