

СЕКЦИЯ 2.
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 539.12

A. V. IVASHKEVICH, O. A. VASILYUK

ON GEOMETRICAL MODELING OF CONSTITUTIVE RELATIONS IN ELECTRODYNAMICS

Vacuum Maxwell equations being considered on the background of any pseudo-Riemannian space-time may be interpreted as equations in Minkowski space but specified in some effective medium, which constitutive relations are determined by metric of the curved space-time. In that context, we have considered de Sitter, anti de Sitter, and Schwarzschild models. Also we have studied hyperbolic Lobachevsky and spherical Riemann models, parameterized by coordinates with spherical or cylindrical symmetry. We have proved that in all examined cases, effective tensors and of electric permittivity and magnetic permeability obey one the same condition.

Let us start with Maxwell equations in the medium when using coordinates (x^σ) and metric $G_{\alpha\beta}(x)$:

$$\partial_\alpha F_{\beta\gamma} + \partial_\beta F_{\gamma\alpha} + \partial_\gamma F_{\alpha\beta} = 0, \quad \frac{1}{\sqrt{-G}} \partial_\beta \sqrt{-G} H^{\alpha\beta} = J^\alpha, \quad (1)$$

where $G = \det[G_{\alpha\beta}(x)]$ stands for a determinant of the metric tensor. We are to use two electromagnetic tensors, $F_{\alpha\beta}(x)$ and $H^{\alpha\beta}(x)$, related to each other by means of some constitutive equations. Also, let us assume that a certain Riemannian space-time model is parameterized by formally similar coordinates (x^σ) with respective metric $g_{\alpha\beta}(x)$. Maxwell vacuum equations in that space-time have the form

$$\partial_\alpha f_{\beta\gamma} + \partial_\beta f_{\gamma\alpha} + \partial_\gamma f_{\alpha\beta} = 0, \quad \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_\beta \sqrt{-g} h^{\beta\alpha} = j^\alpha, \quad (2)$$

$$h_{\alpha\beta}(x) = \varepsilon_0 f_{\alpha\beta}(x), \quad h^{\alpha\beta}(x) = \varepsilon_0 g^{\alpha\rho}(x) g^{\beta\sigma}(x) f_{\rho\sigma}(x). \quad (3)$$

we have specified vacuum constitutive relations; $g = \det[g_{\alpha\beta}(x)]$. Let us define new variables

$$F_{\alpha\beta}(x) = f_{\alpha\beta}(x), \quad H^{\beta\alpha}(x) = \frac{\sqrt{-g}}{\sqrt{-G}} h^{\beta\alpha}(x), \quad J^\alpha(x) = \frac{\sqrt{-g(x)}}{\sqrt{-G(x)}} j^\alpha(x), \quad (4)$$

then eqs. (2) may be understood as Maxwell equations of the form (1) in flat space-time:

$$\partial_\alpha F_{\beta\gamma} + \partial_\beta F_{\gamma\alpha} + \partial_\gamma F_{\alpha\beta} = 0, \quad \frac{1}{\sqrt{-G}} \partial_\beta \sqrt{-G} H^{\alpha\beta} = J^\alpha; \quad (5)$$

relationship between two electromagnetic tensors is described by the formula

$$H^{\alpha\beta}(x) = \varepsilon_0 \frac{\sqrt{-g(x)}}{\sqrt{-G(x)}} g^{\alpha\rho}(x) g^{\beta\sigma}(x) F_{\rho\sigma}(x). \quad (6)$$

In that context, we will consider several space-time models. First, restrict ourselves to spherically symmetric cases comparing them with flat space (for definiteness we take in mind de Sitter, anti de Sitter, and Schwarzschild models):

$$dS^2 = \varphi dt^2 - r^2 d\theta^2 - r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 - \varphi^{-1} dr^2, \quad dS_0^2 = dt^2 - r^2 d\theta^2 - r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 - dr^2. \quad (7)$$

Taking into account the metric tensor (numerating coordinates as $x^\alpha = (t, \theta, \phi, r)$), we get constitutive relations modified by the Riemannian metric:

$$H^{01} = \frac{1}{\varphi} \left(-\frac{\varepsilon_0}{r^2}, F_{01} \right), \quad H^{02} = \frac{1}{\varphi} \left(-\frac{\varepsilon_0}{r^2 \sin^2 \theta} F_{02} \right), \quad H^{03} = -\varepsilon_0 F_{03},$$

$$H^{23} = \varphi \left(\frac{\varepsilon_0}{r^2 \sin^2 \theta} F_{23} \right), \quad H^{31} = \varphi \left(\frac{\varepsilon_0}{r^2} F_{31} \right), \quad H^{12} = \left(\frac{\varepsilon_0}{r^4 \sin^4 \theta} F_{12} \right).$$

The last formulas may be re-written differently:

$$D^\theta = \frac{1}{\varphi} \varepsilon_0 \frac{E_\theta}{r^2}, \quad D^\phi = \frac{1}{\varphi} \varepsilon_0 \frac{E_\phi}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad D^r = \varepsilon_0 E_r;$$

$$H^\theta = \varphi \frac{1}{\mu_0} \frac{B_\theta}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad H^\phi = \varphi \frac{1}{\mu_0} \frac{B_\phi}{r^2}, \quad H^r = \frac{1}{\mu_0} \frac{B_r}{r^4 \sin^4 \theta}; \quad (8)$$

where we have used the identity $c^2 = 1 / \varepsilon_0 \mu_0$ and definitions for two tensors

$$(F_{ab}) = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -cB^3 & +cB^2 \\ E^2 & +cB^3 & 0 & -cB^1 \\ E^3 & -cB^2 & +cB^1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (H^{ab}) = \begin{pmatrix} 0 & -D^1 & -D^2 & -D^3 \\ D^1 & 0 & -H^3/c & +H^2/c \\ D^2 & +H^3/c & 0 & -H^1/c \\ D^3 & -H^2/c & +H^1/c & 0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

The constitutive relations (9) can be presented with the help of electric permittivity and magnetic permeability tensors:

$$D^i(x) = \varepsilon_0 \varepsilon_{ij}(x) E^{(j)}(x), \quad H^i(x) = \frac{1}{\mu_0} \mu_{ij}(x) B^{(j)}(x),$$

$$[\varepsilon_{ij}(r)] = \begin{vmatrix} \varphi^{-1}(r) & 0 & 0 \\ 0 & \varphi^{-1}(r) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad [\mu_{ij}(r)] = \begin{vmatrix} \varphi(r) & 0 & 0 \\ 0 & \varphi(r) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (10)$$

$$E^{(j)} = \frac{E_j}{h_j}, \quad B^{(1)} = \frac{B_1}{h_2 h_3}, \quad B^{(2)} = \frac{B_2}{h_3 h_1}, \quad B^{(3)} = \frac{B_3}{h_1 h_2}, \quad (11)$$

where $dS_0^2 = dt^2 - h_1 d\theta^2 - h_2 d\phi^2 - h_3 dr^2$. Let us specify the effective constitutive equations for four models:

$$\begin{aligned} \text{Minkowski, } r \in (0, +\infty), \quad \varepsilon &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \mu = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \\ \text{de Sitter, } r \in (0, +1), \quad \varepsilon &= \begin{vmatrix} (1-r^2)^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & (1-r^2)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \mu = \begin{vmatrix} (1-r^2) & 0 & 0 \\ 0 & (1-r^2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \\ \text{anti de Sitter, } r \in (0, +\infty), \quad \varepsilon &= \begin{vmatrix} (1+r^2)^{-1}(r) & 0 & 0 \\ 0 & (1+r^2)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \mu = \begin{vmatrix} (1+r^2) & 0 & 0 \\ 0 & (1+r^2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \\ \text{Schwarzschild } r \in (1, +\infty), \quad \varepsilon &= \begin{vmatrix} (1-1/r)^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & (1-1/r)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \mu = \begin{vmatrix} (1-1/r) & 0 & 0 \\ 0 & (1-1/r) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

That interpretation is possible also for other curved spaces. For instance, let us discuss hyperbolic Lobachevsky and spherical Riemann models being compared with Minkowski one:

$$dS_0^2 = dt^2 - r^2 d\theta^2 - r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 - dr^2,$$

$$dS^2 = dt^2 - \sinh^2 r d\theta^2 - \sinh^2 r \sin^2 \theta d\phi^2 - dr^2, \quad (12)$$

$$dS^2 = dt^2 - \sin^2 r d\theta^2 - \sin^2 r \sin^2 \theta d\phi^2 - dr^2.$$

For Lobachevsky space we have

$$H^{01} = -\frac{\varepsilon_0}{r^2} F_{01}, \quad H^{02} = -\frac{\varepsilon_0}{r^2 \sin^2 \theta} F_{02}, \quad H^{03} = -\frac{\sinh^2 r}{r^2} \varepsilon_0 F_{03},$$

$$H^{23} = \frac{\varepsilon_0}{r^2 \sin^2 \theta} F_{23}, \quad H^{31} = \frac{\varepsilon_0}{r^2} F_{31}, \quad H^{12} = \frac{r^2}{\sinh^2 r r^4 \sin^4 \theta} \varepsilon_0 F_{12}, \quad (13)$$

which may be re-written in terms of effective tensors as follows:

$$D^i(x) = \varepsilon_0 \varepsilon_{ij}(x) E^{(j)}(x), \quad H^i(x) = \frac{1}{\mu_0} \mu_{ij}(x) B^{(j)}(x),$$

$$[\varepsilon_{ij}(r)] = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sinh^2 r / r^2 \end{vmatrix}, \quad [\mu_{ij}(r)] = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 / \sinh^2 r \end{vmatrix}. \quad (14)$$

For spherical Riemann model we have similar results with the change $\sinh^2 r, r \in (0, +\infty) \Rightarrow \sin^2 r, r \in (0, \pi)$.

Let us consider examples with cylindrical symmetry. For flat Minkowski space we have (numerate coordinates as $x^\alpha = (t, r, \phi, z)$) in spherical Riemann space an analogous metric is

$$g_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sin^2 r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\cos^2 z \end{vmatrix}, \quad r \in (0, \frac{\pi}{2}), \quad z \in (-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}). \quad (15)$$

Generated by this metric constitutive relations have the form

$$D^i(x) = \varepsilon_0 \varepsilon_{ij}(x) E^{(j)}(x), \quad [\varepsilon_{ij}(r, z)] = \begin{vmatrix} \frac{\sin r \cos z}{r} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{r \cos z}{\sin r} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sin r}{r \cos z} \end{vmatrix},$$

$$H^i(x) = \frac{1}{\mu_0} \mu_{ij}(x) B^{(j)}(x), \quad [\mu_{ij}(r, z)] = \begin{vmatrix} \frac{r}{\sin r \cos z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sin r}{r \cos z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{r \cos z}{\sin r} \end{vmatrix}, \quad (16)$$

referring to cylindrical coordinates in Minkowski space electromagnetic components are

$$E^{(j)} = \frac{E_j}{h_j}, \quad B^{(1)} = \frac{B_1}{h_2 h_3}, \quad B^{(2)} = \frac{B_2}{h_3 h_1}, \quad B^{(3)} = \frac{B_3}{h_1 h_2},$$

In the case of hyperbolic Lobachevsky space, we have similar results with evident modifications

$$D^i(x) = \varepsilon_0 \varepsilon_{ij}(x) E^{(j)}(x), \quad [\varepsilon_{ij}(r, z)] = \begin{vmatrix} \frac{\sinh r \cosh z}{r} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{r \cosh z}{\sinh r} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sinh r}{r \cosh z} \end{vmatrix},$$

$$H^i(x) = \frac{1}{\mu_0} \mu_{ij}(x) B^{(j)}(x), \quad [\mu_{ij}(r, z)] = \begin{vmatrix} \frac{r}{\sinh r \cosh z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sinh r}{r \cosh z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{r \cosh z}{\sinh r} \end{vmatrix}.$$

For all examples, effective tensors obey one the same condition: $\varepsilon_{ij}(x) \mu_{jk}(x) = \delta_{ik}$.

References

1. Spinor Maxwell Equations in Riemannian Space-Time and Modeling Constitutive equations / A. V. Ivashkevich [et al.] // Chapter in: Understanding Quaternions / eds. Du Peng, Haibao Hu, Dong Ding, and Zhouyue Li. – New York : Nova Science Publishers Inc., 2020. – P. 105–150.

Вакуумные уравнения Максвелла в псевдоримановом пространстве-времени интерпретируются как уравнения в пространстве Минковского, но в некоторой эффективной среде. Материальные уравнения таких сред определяются метрикой пространства-времени. В таком контексте рассматриваем модели де Ситтера, анти де Ситтера и Шварцшильда, также гиперболическую и сферическую геометрии Лобачевского и Римана; эффективные тензоры электрической и магнитной проницаемостей подчиняются условию $\varepsilon_{ij}(x) \mu_{jk}(x) = \delta_{ik}$.

Alina V. Ivashkevich, Graduate Student, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus, ivashkevich.alina@yandex.by.

Olga A. Vasiluyk, Teacher, Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Republic of Belarus, olya.vasiluyk.97@yandex.by.

Supervisor – **Viktor M. Red'kov**, Dr. Sc. (Physycs and Mathematics), Chief Researcher of the center «Fundamental Interactions and Astrophysics», B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus, v.redkov@ifanbel.bas-net.by.

УДК 539.12

A. V. IVASHKEVICH, O. A. VASILYUK

ON SOLUTIONS OF THE MAXWELL EQUATIONS IN SPHERICAL SPACE

Maxwell equations in Riemannian space-time are interpreted as the ordinary equations in Minkowski space but in some effective medium. In that context, we have constructed exact solutions of the Maxwell equations in spherical space. This model simulates the closed domain of space with discrete spectrum of frequencies for electromagnetic field.

Let us consider spinor Maxwell equations [1, 2] in cylindrical coordinates of the spherical Riemann model, it is specified by the formulas

$$dS^2 = dt^2 - dr^2 - \sin^2 r d\phi^2 - \cos^2 r dz^2, x^\alpha = (t, r, \phi, z), \quad (1)$$

these coordinates belong to $r \in [0, +\pi/2]$, $\phi \in [-\pi, +\pi]$, $z \in [-\pi, +\pi]$. In this model Maxwell equations in spinor form take the form

$$\left[\partial_t + \sigma^1 \partial_r - \frac{i\sigma^2}{2} (\sigma^3 \otimes I + I \otimes \sigma^3) \frac{\cos r}{\sin r} - \frac{i\sigma^3}{2} (\sigma^2 \otimes I + I \otimes \sigma^2) \frac{\sin r}{\cos r} + \frac{\sigma^2}{\sin r} \partial_\phi + \frac{\sigma^3}{\cos r} \partial_z \right] \xi = 0. \quad (2)$$

The structure of this equation allows the following substitution for symmetric electromagnetic spinor

$$\xi(t, r, \phi, z) = e^{-i\omega t} e^{im\phi} e^{ikz} \begin{pmatrix} f(r) & h(r) \\ h(r) & g(r) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

so we derive the system of 4 equations:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{m}{\sin r} - \frac{\sin r}{\cos r} \right) h + \left(-i\omega + \frac{ik}{\cos r} \right) f &= 0, \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{m}{\sin r} - \frac{\sin r}{\cos r} \right) h + \left(-i\omega - \frac{ik}{\cos r} \right) g &= 0; \\ \left(\frac{d}{dr} + \frac{m}{\sin r} + \frac{\cos r}{\sin r} - \frac{1}{2} \frac{\sin r}{\cos r} \right) g + \frac{1}{2} \frac{\sin r}{\cos r} f + \left(-i\omega + \frac{ik}{\cos r} \right) h &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{m}{\sin r} + \frac{\cos r}{\sin r} - \frac{1}{2} \frac{\sin r}{\cos r}\right)f + \frac{1}{2} \frac{\sin r}{\cos r} g + \left(-i\omega - \frac{ik}{\cos r}\right)h = 0.$$

Summing and subtracting equations in each pair, we obtain (let $F = f + g$, $G = f - g$)

$$\begin{aligned} \frac{ik}{\cos r} F - i\omega G + \frac{2m}{\sin r} h = 0, \quad \frac{ik}{\cos r} G - i\omega F + 2\left(\frac{d}{dr} - \frac{\sin r}{\cos r}\right)h = 0, \\ -\frac{2ik}{\cos r} h - \frac{m}{\sin r} F + \left(\frac{d}{dr} + \frac{\cos r}{\sin r} - \frac{\sin r}{\cos r}\right)G = 0, \\ -2i\omega h - \frac{m}{\sin r} G + \left(\frac{d}{dr} + \frac{\cos r}{\sin r}\right)F = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Let us express from 1-st, 2-nd, and 4-th equations the variables ωG , ωF , $2i\omega h$, and substitute them into the third equation, this results in the identity $0 \equiv 0$. Therefore, only three equations in (5) are independent:

$$\begin{aligned} \frac{ik}{\cos r} F - i\omega G + \frac{2m}{\sin r} h = 0, \\ \frac{ik}{\cos r} G - i\omega F + 2\left(\frac{d}{dr} - \frac{\sin r}{\cos r}\right)h = 0, \quad -2i\omega h - \frac{m}{\sin r} G + \left(\frac{d}{dr} + \frac{\cos r}{\sin r}\right)F = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

taking into account the formulas

$$F = \frac{1}{\sin r} \bar{F}, \quad \left(\frac{d}{dr} + \frac{\cos r}{\sin r}\right)F = \frac{1}{\sin r} \frac{d\bar{F}}{dr}; \quad h = \frac{1}{\cos r} \bar{h}, \quad \left(\frac{d}{dr} - \frac{\sin r}{\cos r}\right)h = \frac{1}{\cos r} \frac{d\bar{h}}{dr}.$$

we may simplify equations (6):

$$\begin{aligned} \frac{ik}{\cos r} \frac{1}{\sin r} \bar{F} - i\omega G + \frac{2m}{\sin r} \frac{1}{\cos r} \bar{h} = 0, \\ \frac{ik}{\cos r} G - i\omega \frac{1}{\sin r} \bar{F} + \frac{2}{\cos r} \frac{d\bar{h}}{dr} = 0, \quad -2i\omega \frac{1}{\cos r} \bar{h} - \frac{m}{\sin r} G + \frac{1}{\sin r} \frac{d\bar{F}}{dr} = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Let it be $2i\bar{h} = \bar{H}$. Then the last system is presented as follows

$$\begin{aligned} \omega G = \frac{k\bar{F} - m\bar{H}}{\cos r \sin r}, \\ \frac{k}{\cos r} \omega G - \frac{\omega^2}{\sin r} \bar{F} - \frac{\omega}{\cos r} \frac{d\bar{H}}{dr} = 0, \quad -\omega^2 \frac{1}{\cos r} \bar{H} - \frac{m}{\sin r} \omega G + \frac{\omega}{\sin r} \frac{d\bar{F}}{dr} = 0. \end{aligned}$$

Excluding the function G , we derive

$$\begin{aligned} \frac{1}{\cos r} \left(\omega \frac{d}{dr} + \frac{km}{\cos r \sin r}\right) \bar{H} + \frac{1}{\sin r} \left(\omega^2 - \frac{k^2}{\cos^2 r}\right) \bar{F} = 0, \\ \frac{1}{\sin r} \left(\omega \frac{d}{dr} - \frac{km}{\sin r \cos r}\right) \bar{F} + \frac{1}{\cos r} \left(-\omega^2 + \frac{m^2}{\sin^2 r}\right) \bar{H} = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Let us transform this system to new variable $\sin r = \sqrt{z}$, $z \in [0, 1]$, then we arrive at

$$\left[2\omega \frac{d}{dz} + \frac{km}{z(1-z)}\right] \bar{H} + \frac{\omega^2 - k^2 - \omega^2 z}{z(1-z)} \bar{F} = 0, \quad \left[2\omega \frac{d}{dz} - \frac{km}{z(1-z)}\right] \bar{F} + \frac{m^2 - \omega^2 z}{z(1-z)} \bar{H} = 0. \quad (9)$$

Note that from (9) straightforwardly follows two differential equations with 4 singular points:

$$\bar{H}, \quad z = 0, 1, \infty, (1 - \frac{k^2}{\omega^2}); \quad \bar{F}, \quad z = 0, 1, \infty, \frac{m^2}{\omega^2}.$$

There exists possibility to reduce the problem to equations with three singular points. Indeed, let us define new variables, $\bar{H} = V + W, \bar{F} = V - W$, then the system (8) reads

$$\begin{aligned} \left[2\omega \frac{d}{dz} + \frac{km}{z(1-z)} \right] (V + W) + \frac{\omega^2 - k^2 - \omega^2 z}{z(1-z)} (V - W) &= 0, \\ \left[2\omega \frac{d}{dz} - \frac{km}{z(1-z)} \right] (V - W) + \frac{m^2 - \omega^2 z}{z(1-z)} (V + W) &= 0. \end{aligned}$$

Summing and subtracting these equations we get

$$\begin{aligned} \left[4\omega \frac{d}{dz} + \frac{\omega^2 - k^2 + m^2 - 2\omega^2 z}{z(1-z)} \right] V - \frac{\omega^2 - (k+m)^2}{z(1-z)} W &= 0, \\ \left[4\omega \frac{d}{dz} W - \frac{\omega^2 - k^2 + m^2 - 2\omega^2 z}{z(1-z)} \right] W + \frac{\omega^2 - (k-m)^2}{z(1-z)} V &= 0. \end{aligned} \tag{10}$$

We readily derive a 2-nd order equation for $W(z)$:

$$z(z-1)W'' + (2z-1)W' + \left\{ -\frac{\omega(\omega+2)}{4} - \frac{k^2}{4(z-1)} + \frac{m^2}{4z} \right\} W = 0. \tag{11}$$

Near the points $z = 0, 1$, solutions behave as

$$z \rightarrow 0, W = z^A, A = \pm \frac{|m|}{2}; \quad z \rightarrow 1, W = (z-1)^B, B = \pm \frac{|k|}{2}. \tag{12}$$

In all region of z , solutions are searched in the form $W(z) = z^A (z-1)^B \bar{W}(z)$. After needed calculation we arrive at

$$\begin{aligned} (z-1)z\bar{W}'' + [2A(z-1) + 2Bz + (2z-1)]\bar{W}' + \\ + \left((A+B)(A+B+1) - \frac{\omega(\omega+2)}{4} - \frac{k^2}{4(z-1)} + \frac{B^2}{z-1} + \frac{m^2}{4z} - \frac{A^2}{z} \right) \bar{W} &= 0. \end{aligned}$$

Imposing restrictions

$$A = +\frac{|m|}{2}, B = +\frac{|k|}{2}, \gamma = |m| + 1, \alpha = \frac{|k| + |m| - \omega}{2}, \beta = \frac{|k| + |m| + \omega}{2} + 1,$$

we obtain

$$z(1-z)\bar{W}'' + [2A+1 - (2A+2B+2)z]\bar{W}' - [(A+B)(A+B+1) - \frac{1}{4}\omega(\omega+2)]\bar{W} = 0. \tag{13}$$

which is identified with the equation of hypergeometric type

$$z(1-z) \frac{d^2 F}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z] \frac{dF}{dz} - \alpha\beta F = 0.$$

Let us fix parameters A and B so that solutions be finite at the points $z = 0, 1$:

$$A = +\frac{|m|}{2}, B = +\frac{|k|}{2}, \gamma = |m| + 1, \alpha = \frac{|k| + |m| - \omega}{2}, \beta = \frac{|k| + |m| + \omega}{2} + 1, \tag{14}$$

and accept the standard requirement for polynomials:

$$\alpha = -n, \quad \omega = 2n + |k| + |m|, \quad \beta = n + 1 + |m| + |k|,$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, \quad W(z) = z^{|m|/2} (z-1)^{|k|/2} F(\alpha, \beta, \gamma; z). \quad (15)$$

Now, let us turn to equation for the second function $V(z)$. There exist symmetry between two equations (10): the system is invariant under the formal changes

$$V \longleftrightarrow W, \quad \omega \longleftrightarrow -\omega, \quad m \longleftrightarrow -m. \quad (16)$$

Therefore, from the 2-nd order equation (10) for $VW(z)$, without any calculation we obtain a respective equation for $V(z)$:

$$z(z-1)V'' + (2z-1)W' + \left[-\frac{\omega(\omega-2)}{4} - \frac{k^2}{4(z-1)} + \frac{m^2}{4z}\right]V = 0. \quad (17)$$

We are to apply the same substitution $V(z) = z^A (z-1)^B \bar{V}(z)$. After the needed calculation we get an equation for $\bar{V}(z)$:

$$(z-1)z\bar{V}'' + [2A(z-1) + 2Bz + (2z-1)]\bar{V}' + \\ + [(A+B)^2 + A+B - \frac{1}{4}\omega(\omega-2) - \frac{k^2}{4(z-1)} + \frac{B^2}{z-1} + \frac{m^2}{4z} - \frac{A^2}{z}]\bar{V} = 0.$$

Imposing evident restrictions on A и B , we arrive at an equation of hypergeometric type

$$z(1-z)\bar{V}'' + [2A+1 - (2A+2B+2)z]\bar{V}' - [(A+B)(A+B+1) - \frac{1}{4}\omega(\omega-2)]\bar{V} = 0. \quad (18)$$

with parameters

$$A = +\frac{|m|}{2}, \quad B = +\frac{|k|}{2}, \quad \gamma' = |m|+1, \quad \alpha' = \frac{|k|+|m|+\omega}{2}, \quad \beta' = \frac{|k|+|m|-\omega}{2} + 1. \quad (19)$$

Further, applying polynomial condition, we find needed solutions

$$\beta' = -n', \quad \omega = 2(n'+1) + |k| + |m|, \quad \alpha' = n' + 1 + |m| + |k|, \\ n' = 0, 1, 2, \dots, \quad V(z) = z^{|m|/2} (z-1)^{|k|/2} F(\alpha', \beta', \gamma'; z). \quad (20)$$

A relative coefficient between two functions, $\bar{W}(z)$ and $\bar{V}(z)$, may be found with the use of first order relations, related these function.

References

1. Spinor Maxwell Equations in Riemannian Space-Time and Modeling Constitutive equations / A. V. Ivashkevich, [et al.] // Chapter in: Understanding Quaternions / eds. Du Peng, Haibao Hu, Dong Ding, and Zhouyue Li. – New York : Nova Science Publishers Inc., 2020. – P. 105–150.
2. Ivashkevich, A. V. Solving spinor Maxwell equations in cylindrical parabolic coordinates, and spinor space structure / A. V. Ivashkevich, V. M. Red'kov // Proceedings of Balkan Society of Geometers. – 2020. – Vol. 27. – P. 45–68.

Вакуумные уравнения Максвелла в псевдоримановом пространстве-времени интерпретируются как уравнения в пространстве Минковского, но в некоторой эффективной среде. В этом контексте построены точные решения уравнений Максвелла в сферическом пространстве. Показано, что в замкнутой ограниченной области пространства электромагнитное поле может существовать только с дискретным спектром частот.

Alina V. Ivashkevich, Graduate Student, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, 220072, Minsk, Republic of Belarus, ivashkevich.alina@yandex.by.

Olga A. Vasiluyk, Teacher, Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Republic of Belarus, olya.vasiluyk.97@yandex.by.

Supervisor – **Viktor M. Red'kov**, Dr. Sc. (Physycs and Mathematics), Chief Researcher of the center «Fundamental Interactions and Astrophysics», B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus, v.redkov@ifanbel.bas-net.by.

Д. А. КЛЕЗОВИЧ

СРАВНИТЕЛЬНАЯ НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА МОЩНЫХ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ В КЕРРОВСКИХ СРЕДАХ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ЗАРЯДА

Рассмотрена сравнительная нелинейная динамика мощных фемтосекундных лазерных импульсов в керровских средах в зависимости от их топологического заряда.

Как известно, при распространении в керровских средах фемтосекундных лазерных импульсов тераваттной мощности происходит их пространственная локализация, получившая название филаментации. Другими словами, происходит формирование устойчивого динамического волновода, в котором распространяется лазерный импульс. Филамент представляет собой самоорганизованную структуру, образованную в результате конкуренции таких процессов как, дифракция, керровская нелинейность, а также плазма, генерируемая в условиях многофотонной ионизации или туннельных механизмов. Для ультракоротких импульсов света в результате конкуренции указанных выше процессов и аномальной дисперсии групповой скорости (ДГС) может быть реализован один из режимов филаментации – генерация световых пульс (СП), локализованных в пространстве и во времени. Световые пули имеют большой потенциал для практических применений, в частности для микрообработки поверхности твердых тел, для наноструктурирования и т. д. В то же время закономерности распространения ультракоротких мощных импульсов света в форме СП до конца не выявлены. Существуют противоречивые интерпретации природы образования СП. Так, например, согласно работе [1], устойчивость СП обусловлена их полихроматической бесселеподобной структурой, состоящей из резко локализованного высокоинтенсивного ядра и слабой, делокализованной низкоинтенсивной периферии, уравновешивающей потери энергии в центральном ядре. В работе [2] авторы объясняют свои результаты как рождение пули на переднем фронте и ее аннигиляцию на заднем фронте лазерного импульса. Поэтому согласно [2] распространение импульса в протяженной керровской среде представляет собой многопулевой режим. В настоящей работе теоретически исследуются условия распространения фемтосекундных лазерных импульсов в режиме световых пульс как для гауссовых, так и для вихревых импульсных пучков. Проводится сравнительный анализ нелинейной динамики импульсов в зависимости от топологического заряда. Как будет показано ниже, для формирования пульс необходимо выполнение определенных соотношений между радиусом и длительностью входного импульса. Соотношения зависят от параметров среды и импульса.

В данной работе рассматривается модель, корректно описывающая взаимодействие мощного фемтосекундного импульса света и среды с керровской нелинейностью. Модель основана на системе обобщенного нелинейного уравнения Шредингера для комплексной огибающей электрического поля $E = E(r, z, t)$ и кинетического уравнения для плотности плазмы ρ :

$$\frac{\partial E}{\partial z} = \frac{i}{2k} \nabla_{\perp}^2 E - i \frac{\beta}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + i k_0 n_2 |E|^2 E - \frac{\sigma}{2} (1 + i \omega_0 \tau_c) \rho E - \frac{\beta^{(K)}}{2} |E|^{2K-2} E; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\beta^{(K)}}{2} |E|^{2K}. \quad (2)$$

В уравнении (1) первое слагаемое в правой части описывает дифракцию импульса, второе – аномальную дисперсию групповой скорости, третье – влияние керровской нелинейности и, наконец, четвертое – влияние плазмы, индуцированной за счет многофотонной ионизации. В этой модели многофотонное поглощение является основным механизмом потерь энергии интенсивных световых импульсов, распространяющихся в прозрачной среде. Мы анализируем распространение фемтосекундных импульсов тераваттной мощности в плавленом кварце и предполагаем, что длина волны излучения равна 1.5 мкм, а отношение мощности входного импульса к критической мощности для самофокусировки может варьироваться от 10 и выше. В данной спектральной области необходимое число поглощенных квантов для ионизации среды в лазерном поле $K = 11$. Предполагаем, что длительность входного импульса такова, что справедливо приближение медленно меняющихся амплитуд ($10 \text{ фс} < \tau_p < 100 \text{ фс}$).

Для анализа распространения вихревых и гауссовских импульсных пучков в керровской среде с учетом аномальной ДГС и фотоиндуцированной плазмы мы использовали двухмасштабный вариационный подход. Представим огибающую и фазу вихревого лазерного импульса представлен в следующей форме:

$$E(r, z, t) = A(r, z, t) \square \exp(i\psi), \quad \psi(r, z, t) = \varphi(r, z, t) + m\varphi, \quad (3)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, m – топологический заряд, а амплитуда имеет вид:

$$A(r, z, t) = \sqrt{\frac{2^{m+1}\sqrt{2}}{m!} \frac{W_{in}}{\pi\sqrt{\pi}a^2(z)\tau_p(z)} \frac{r^m}{a^m(z)}} \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{a^2(z)} - \frac{t^2}{\tau_p^2(z)}\right). \quad (4)$$

Полагая $m = 0$, легко получить амплитуду и фазу гауссова импульсного пучка. Подставляя (3) и (4) в (1) и предполагая форму пучка неизменной, получим гамильтониан задачи в общем виде:

$$H = \frac{1}{2k} \left(\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)^2 - \frac{\beta_2}{2} \left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2kA} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial r^2} + \frac{\partial A}{\partial r} - \frac{\beta_2 k}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2}\right) + 2kk_0n_2A^2 - k\sigma\omega_0\tau_c\rho - \frac{m^2}{r^2}, \quad (5)$$

где первые два слагаемых формально представляют кинетическую энергию, а оставшаяся часть – потенциальную энергию. Зная вид потенциальной функции $V(R, T)$, можно получить систему уравнений движения как для временного $T(z)$, так и для пространственного $R(z)$ радиусов распространяющегося светового пучка:

$$\frac{d^2}{dz^2} \begin{pmatrix} R \\ T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial R} \\ \beta_2 \frac{\partial}{\partial T} \end{pmatrix} V(R, T). \quad (6)$$

Выражения для потенциальных функций для гауссова и вихревого импульсов имеют следующий вид:

$$V^G(R, T) = -\frac{1}{k} \frac{1}{R^2} + \frac{\beta_2}{T^2} - C_k^G \frac{1}{R^2 T} + C_{pl}^G \frac{1}{R^{2K} T^{K-1}}, \quad (7a)$$

$$V^V(R, T) = \frac{2m}{k} \frac{1}{R^2} + \frac{\beta_2}{T^2} - C_k^V \frac{1}{R^2 T} + \frac{C_{pl}^V \sqrt{\pi} (1 + \text{Erf}(\sqrt{2K}))}{2\sqrt{2K}} \frac{1}{R^{2K} T^{K-1}}. \quad (7b)$$

На рисунке 1 представлена форма потенциальных ям, описывающих поведение радиусов и длительностей безвихревых (а) и вихревых (б) импульсных пучков. Стационарные значения указанных параметров соответствуют минимумам потенциальных ям.

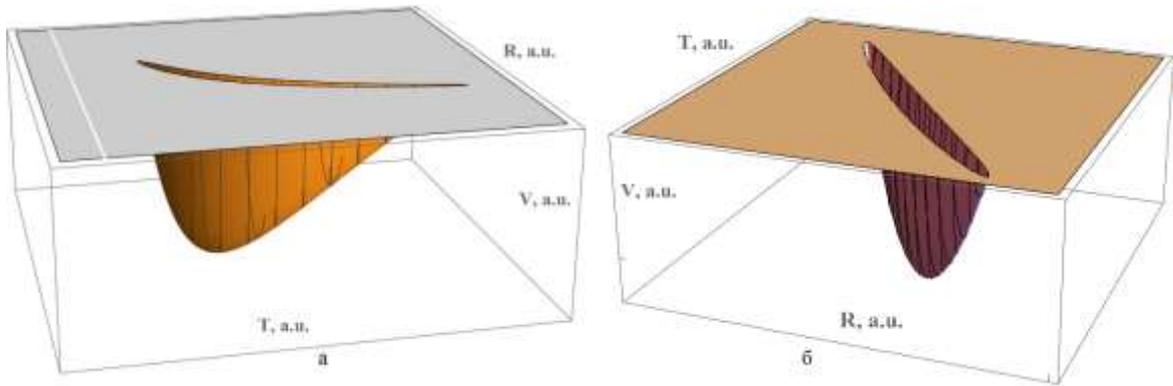


Рисунок 1 – Потенциальные поверхности гауссовых (а) и вихревых (б) импульсов

Нами получены уравнения движения для радиуса и длительности гауссова пучка, представленные ниже:

$$\frac{d^2 R}{dz^2} = -\frac{2}{k^2} \frac{1}{R^3} - \frac{2C_k^G}{k} \frac{1}{R^3 T} + \frac{2KC_{pl}^V}{k} \frac{1}{R^{2K+1} T^{K-1}}; \quad (8)$$

$$\frac{d^2 T}{dz^2} = \frac{2\beta_2^2}{T^3} - C_k^V \beta_2 \frac{1}{R^2 T^2} + \frac{\beta_2 C_{pl}^V (K-1)}{R^{2K} T^K}, \quad (9)$$

где $C_k^G = k_0 n_2 \frac{2\alpha F_{cr}}{\pi \epsilon^4}$, $C_{pl}^G = \sigma \tau_c \frac{\beta^{(K)}}{4\sqrt{2K} K \hbar} \left(\frac{2\alpha F_{cr}}{\pi \epsilon^4}\right)^K (1 + \text{Erf}(\sqrt{2K}))$.

Система уравнений (8–9) позволяет получить соотношение между параметрами импульса, распространяющегося в режиме световой пули. Более того, легко получить стационарные решения для обоих

параметров импульса и описать их нелинейную эволюцию при значительном отклонении начальных значений на входе среды от стационарных значений.

Уравнения движения для обоих параметров вихревого пучка демонстрируют явную зависимость от топологического заряда и имеют следующий вид:

$$\frac{d^2R}{dz^2} = \frac{2m}{k^2} \frac{1}{R^3} - \frac{2C_k^V}{k} \frac{1}{R^3 T} + \frac{KC_{pl}^V \sqrt{\pi} (1 + \text{Erf}(\sqrt{2K}))}{k \sqrt{2K} R^{2K+1} T^{K-1}}; \quad (10)$$

$$\frac{d^2T}{dz^2} = \frac{2\beta_2^2}{T^3} - C_k^V \beta_2 \frac{1}{R^2 T^2} + \frac{\beta_2 C_{pl}^V \sqrt{\pi} (K-1) (1 + \text{Erf}(\sqrt{2K}))}{2\sqrt{2K} R^{2K} T^K}, \quad (11)$$

где $C_k^V = k_0 n_2 \frac{2^m}{m!} \frac{2\alpha F_{cr}}{\pi \epsilon^4}$, $C_{pl}^V = \sigma \tau_c \frac{\beta^{(K)}}{2K\hbar} \left(\frac{2^m}{m!}\right)^K \left(\frac{2\alpha F_{cr}}{\pi \epsilon^2}\right)^K$.

Соотношения между стационарными значениями R_0 и T_0 для гауссова (а) и вихревого (б) радиусов, полученные при условии $\frac{d^2R}{dz^2} = 0$, $\frac{d^2T}{dz^2} = 0$, следующие

$$R_0^G = \left(\frac{C_k^G k - 2(K-1)}{2\beta_2 K k} \right)^{\frac{1}{2}} T_0; \quad (12a)$$

$$R_0^V = \left(\frac{2(K-1)m + C_k^V k}{2K|\beta_2|k} \right)^{\frac{1}{2}} T_0. \quad (12b)$$

В заключение следует отметить, что нелинейная эволюция гауссовых пуль в плавленом кварце при аномальных ДГС близка к вихревым. Однако область устойчивости для гауссовых пуль более узкая по сравнению с вихревыми пулями. Условия формирования световых пуль в гауссовых импульсных пучках определяются средой, в то время как в вихревых пучках условия формирования пуль явно зависят от топологического заряда. Минимуму потенциальных функций соответствуют стационарные значения для параметров импульсов, которые при распространении в среде не изменяются. Если начальный радиус и длительность входных пучков отклоняются от их стационарных значений, то их поведение при распространении в среде соответствует динамике связанных нелинейных осцилляторов. При этом длительность импульса и его радиус могут колебаться в фазе или в противофазе.

Список литературы

1. Nature of Spatiotemporal Light Bullets in Bulk Kerr Media / D. Majus [et al.] // Phys. Rev. Lett. 112, 193901 (2014).
2. Femtosecond laser pulse filamentation under anomalous dispersion in fused silica / E. Smetanina [et al.] // Quant Electr. – 2012. – Vol. 42. – P. 913–919.

This work is devoted to problems of singular and Gaussian light bullets (LB) formation in Kerr medium and comparison of their nonlinear dynamics. We theoretically investigate the propagation conditions of femtosecond laser pulses in the LB regime for both Gaussian and vortex pulse beams. Two-scale approach allows to reveal LB formation conditions.

Клезович Диана Александровна, студентка физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь, diestardom@gmail.com.

Научный руководитель – *Хасанов Олег Хайруллович*, ведущий научный сотрудник Научно-практического центра Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, кандидат физико-математических наук, Минск, Беларусь, olkhas@mail.ru.

УДК 537.611.2

В. О. КОЗЛОВА

ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ ИЗИНГА ДЛЯ РАСЧЁТА ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

Модель Изинга позволяет качественно оценить поведение системы спинов при различных температурах и энергиях. На основе данной модели с помощью разработанного инструментария возможен анализ установления динамического равновесия системы при моделировании микроканонического и канонического ансамблей. Модель позволяет рассчитать намагниченность и энергию системы спинов.

Модель Изинга – решёточная математическая модель статистической физики, предназначенная для описания магнитных свойств вещества. Каждому узлу кристаллической решётки (двумерный случай) сопоставляется число, называемое спином σ и равное +1 или -1 (спин ориентирован «вверх»/спин ориентирован «вниз»). То есть в этой модели рассматриваются два состояния частиц. Эти состояния чаще всего характеризуются спином по аналогии, например, со спином систем, образуемых элементарными частицами. Параметр σ для магнитных систем может определять направление спина (или магнитного момента). Таким образом, решетка из N числа спинов может находиться в 2^N состояниях. Каждому из возможных вариантов расположения спинов без учёта внешнего магнитного поля приписывается энергия, получающаяся из попарного взаимодействия спинов соседних атомов [1]:

$$E_{ij} = \begin{cases} -J\sigma_i\sigma_j, & \text{если спины} \\ & \text{являются ближайшими соседями;} \\ 0, & \text{в других случаях.} \end{cases}$$

где J – константа обменного взаимодействия, которая является мерой силы между ближайшими соседними спинами, выражение $-j\sigma_i\sigma_j$ называется гамильтонианом Гейзенберга. Определение константы обменного взаимодействия не входит в нашу задачу, поэтому только отметим, что эта константа может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Порядок значений константы обменного взаимодействия для электронов 1–0,17 эВ. Полная энергия и намагниченность всех спинов соответственно будут равны:

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{i,j}^N \sigma_i \sigma_j$$

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

Как известно, система стремится к своему равновесию, которому соответствует минимум энергии. В нашем случае – это, когда полная энергия отрицательна. Поэтому при $j > 0$ состояния с наименьшей полной энергией (полная энергия отрицательна) реализуются, когда спины сонаправлены ($\downarrow\downarrow$ или $\uparrow\uparrow$). Это соответствует системам, которые называются ферромагнетиками. При $j < 0$, с точки зрения минимума энергии предпочтительнее состояния с антипараллельными спинами соседей ($\downarrow\uparrow$ или $\uparrow\downarrow$), полная энергия отрицательна. Это соответствует системам, которые называются антиферромагнетиками. В антиферромагнетиках спиновые магнитные моменты электронов самопроизвольно ориентированы антипараллельно друг другу.

Спины, обладая внутренним моментом импульса, могут иметь и собственный магнитный момент. Это значит, что они могут взаимодействовать с магнитным полем. При наличии внешнего магнитного поля h гамильтониан системы из N спинов принимает вид [2]:

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{i,j}^N \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

Принимаем, что h измеряется в таких единицах, что произведение магнитного момента на спин равняется 1. Коэффициент «0.5» учитывает, что при суммировании пар спинов каждый спин в энергии взаимодействия учитывается дважды. Второй член определяет энергию взаимодействия спина и внешнего магнитного поля.

На рисунке 1 представлен интерфейс разработанной программы. Исходными данными являются число спинов, константа обменного взаимодействия, напряженность внешнего поля, количество спин-шагов, E_{base} – масштаб по оси y , E_{demon} – энергия демона для реализации модели в микроканоническом ансамбле, T – температура для реализации модели в каноническом ансамбле. Можно выбрать упорядоченность спинов системы: случайная и ориентированная.

Рассмотрим системы спинов при отсутствии внешнего магнитного поля:

Применим метод Монте-Карло для реализации эволюции системы для микроканонического ансамбля [2]:

1. Задаем (произвольно) начальную конфигурацию спинов.
2. Задаем энергию демона E_{demon} .
3. Определяем энергию системы E_s .
4. Случайным образом выбираем спин и опрокидываем его.
5. Вычисляем новое значение энергии системы E_{sm} .
6. Находим разность энергий $\Delta E = E_{sm} - E_s$.

7. Если $\Delta E \leq 0$, то конфигурация принимается, энергия демона E_{demon} увеличивается на величину $|\Delta E|$, и переходим к шагу 10.
8. Если $\Delta E > 0$ и $\Delta E \leq E_d$, то конфигурация принимается, и энергия демона E_{demon} уменьшается на ΔE , в противном случае конфигурация остается прежней.
9. Накапливаем значения намагниченности и энергии системы, а также спин-шагов N_s .
10. Переходим к пункту 3 (либо прерываем процесс).
11. Вычисляем средние значения намагниченности и энергии.

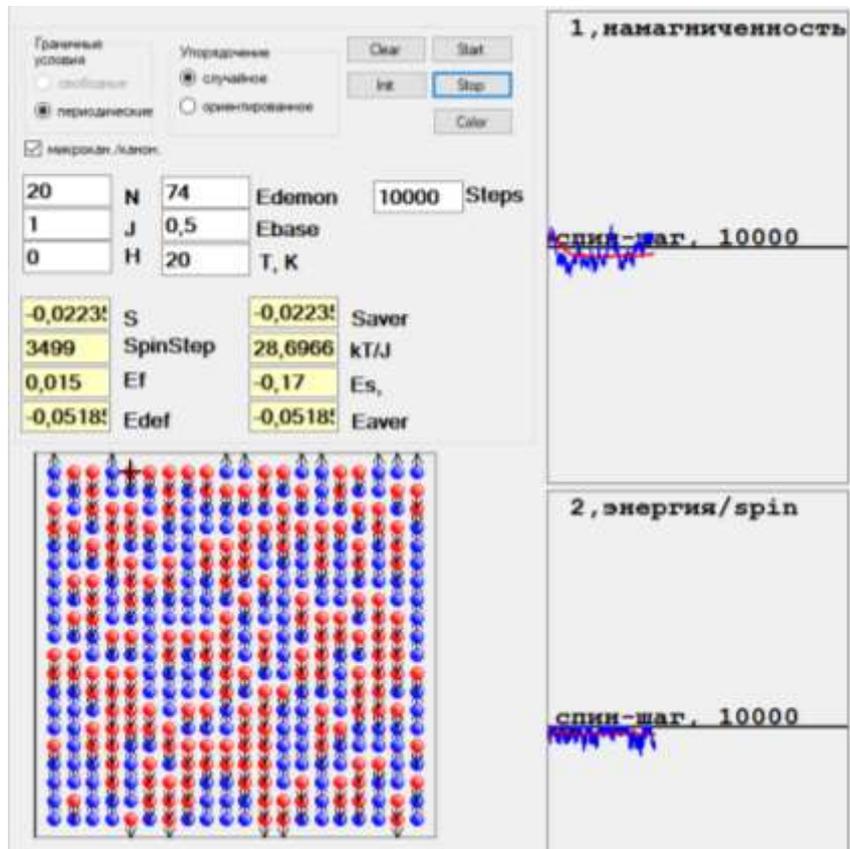


Рисунок 1 – Интерфейс программы

Реализация моделирования канонического ансамбля базируется на следующем алгоритме Метрополиса [3]:

1. Задаем (произвольно) начальную конфигурацию спинов.
2. Определяем энергию системы E_s .
3. Случайным образом выбираем спин и опрокидываем его.
4. Вычисляем новое значение энергии системы E_{sm} .
5. Находим разность энергий $\Delta E = E_{sm} - E_s$.
6. Если $\Delta E \leq 0$, то конфигурация принимается и переходим к шагу 10.
7. Если $\Delta E > 0$, вычисляем по Больцману вероятность изменения энергии системы: $W = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$, где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура.
8. Генерируем случайное число v .
9. Если $W \leq v$ и $\Delta E \leq E_d$, то конфигурация принимается, в противном случае конфигурация остается прежней.
10. Накапливаем значения намагниченности и энергии системы, а также спин-шагов N_s .
11. Переходим к пункту 3 (либо прерываем процесс)
12. Вычисляем средние значения намагниченности и энергии

Анализ результатов.

На рисунке 2 представлены кривые установления равновесного состояния системы спинов для различных энергий системы. Заметные флуктуации намагниченности связаны с относительно малым числом спинов. На

рисунке красная линия соответствует средней намагниченности, синяя – мгновенной намагниченности. Как видим, система стремится к динамическому равновесию. Расчеты выполняются в относительных единицах. Переход к размерным единицам осуществляется после выбора коэффициента обменного взаимодействия и значений магнитных моментов спина. На данном этапе разрабатывается компьютерная модель, поэтому целесообразно расчеты выполнять в безразмерных единицах.

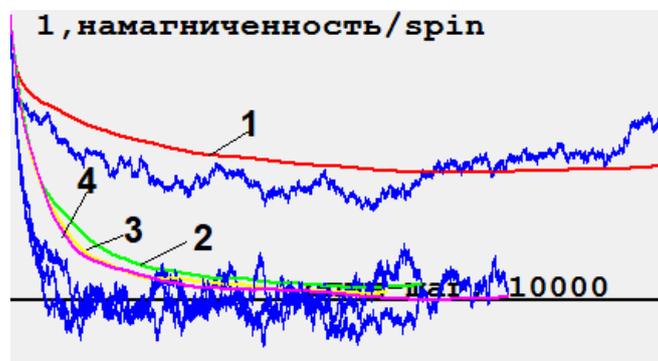


Рисунок 2 – Установление равновесного состояния системы спинов в отсутствие внешнего магнитного поля

Были выполнены расчеты с целью определения равновесных параметров для различных энергий системы спинов. Расчеты представлены в таблице 1. Энергия определяется в единицах константы обмена J. Параметр kT/J характеризует безразмерную температуру.

Таблица 1 – Равновесные параметры системы из 400 спинов в расчёте на 1 спин

Микроканонический ансамбль					Канонический ансамбль					
№	Еполн.	$\langle E_{sys} \rangle$	$\langle M \rangle$	kT/J	цвет	№	$\langle E_{sys} \rangle$	$\langle M \rangle$	kT/J	цвет
0	-2	-2	1	0		0	-2	1	0	
1	-1	-1.01	0.45	71	красная	1	-0.91	0.45	71	красная
2	0	-0.056	0.056	361	зеленая	2	-0.055	0.045	361	зеленая
3	1	0.073	0.027	5295	желтая	3	0.070	0.027	5295	желтая
4	2	0.090	0.006	13700	сиреневая	4	0.080	0.009	13700	сиреневая

Из данных таблицы 1 следует, что для расчета намагниченности и энергии системы спинов можно использовать как микроканоническое распределение, так и каноническое. Первое целесообразно применять, когда задается энергия системы, а второе – когда температура.

Список литературы

1. Дайсон, Ф. Устойчивость и фазовые переходы / Ф. Дайсон, Э. Монролл, М. Кац, М. Фишер. – М. : Мир, 1973. – 368 с.
2. Гулд, Ч. Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2 / Ч. Гулд, Я. Тобочник. – М. : Мир, 1990. – 400 с.
3. Биндер, К. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике: Введение / К. Биндер, Д. В. Хеерман ; пер. с англ. В. Н. Задкова. – М. : Наука. Физматлит, 1995. – 144 с. – (Сер. «Компьютеры в физике»).

The Ising model makes it possible to qualitatively evaluate the behavior of the spin system at different temperatures and energies. On the basis of this model, with the help of the developed program, it is possible to analyze the establishment of a dynamic equilibrium of the system when modeling the microcanonical and canonical ensembles. The model allows calculating the magnetization and energy of the spin system.

Козлова Виктория Олеговна, студентка 4-го курса физико-технического факультета Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, Гродно, Беларусь, KozlovaViktoria1@yandex.by.

Научный руководитель – **Никитин Александр Викторович**, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, кандидат технических наук, Гродно, Беларусь, nik@grsu.by.

А. А. КОРНИЕНКО, М. Л. ЛАПКО

**ПРОБЛЕМЫ ВЗАИМОСОГЛАСОВАННОГО ОПИСАНИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ИНТЕНСИВНОСТЯМ ПОЛОС
ПОГЛОЩЕНИЯ И ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ МУЛЬТИПЛЕТА $^4I_{13/2}$ ЭРБИЯ
В ОКСИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Для объяснения противоречия между измеренной силой осциллятора абсорбционного перехода иона эрбия в оксидном кристалле Lu_2O_3 на первый возбужденный уровень $^4I_{13/2}$ и временем его жизни предложено рассмотреть процессы резонансного двухфотонного поглощения в системе из трех уровней $^4I_{15/2}$, $^4I_{13/2}$, $^4I_{9/2}$ с эквидистантным расположением.

Процессы двухфотонного и двухступенчатого поглощения в системе из трех эквидистантно расположенных уровней под действием интенсивного лазерного излучения хорошо изучены экспериментально и теоретически в физике атома [1]. При экспериментальном изучении спектроскопических характеристик лазерных материалов, активированных редкоземельными ионами, применяется излучение малой интенсивности, при которой двухфотонные и двухступенчатые процессы мало существенны на фоне однофотонных процессов. Однако вклад двух фотонного поглощения может быть сравним с однофотонным поглощением при строгом выполнении резонансных условий. Обсуждению этих проблем посвящена данная работа.

В некоторых работах (см., например, [2]) по изучению спектроскопических свойств оксидных лазерных материалов, активированных ионами тулия и эрбия, было установлено, что время жизни мультиплета $^4I_{13/2}$, вычисленное на основе экспериментального значения силы осциллятора абсорбционного перехода $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$, в два раза меньше экспериментально измеренного.

Так как между первым возбужденным уровнем и основным нет промежуточных уровней, то между временем жизни первого возбужденного уровня и силой осциллятора абсорбционного перехода на него существует взаимно однозначное соответствие. По этой причине более точный учет конфигурационного взаимодействия [3] по сравнению с теорией Джадда-Офельта [4,5] не в состоянии обеспечить улучшение взаимосогласованного описания интенсивностных характеристик поглощения и излучения.

Противоречие между интенсивностными характеристиками поглощения на переходе $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ иона эрбия и излучения с уровня $^4I_{13/2}$ можно устранить, если предположить, что в полосе перехода $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ существует дополнительное поглощение. Такая ситуация может реализоваться в трехуровневой системе с эквидистантным расположением (рисунок 1).

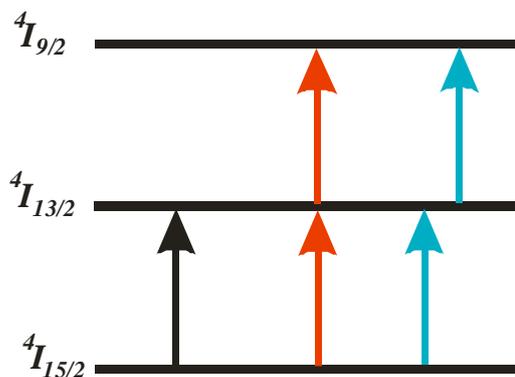


Рисунок 1 – Схемы поглощения:

однофотонного – черная стрелка; двухфотонного – красные стрелки; двухступенчатого – зеленые стрелки

Дополнительное поглощение на переходе $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ может обеспечить резонансное двухфотонное поглощение по схеме $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$ и двухступенчатое поглощение $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2} + ^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$ при условии выполнения эквидистантности и резонансных соотношений. В такой ситуации только часть интенсивности относится к силе осциллятора однофотонного поглощения, а только сила осциллятора однофотонного поглощения ответственна за время жизни мультиплета $^4I_{13/2}$. Уменьшение силы осциллятора соответствует увеличению вычисленного времени жизни, что должно способствовать устранению противоречия между измеренной силой осциллятора абсорбционного перехода на уровень $^4I_{13/2}$ и экспериментальным временем его жизни.

Теоретическое изучение процессов поглощения в системе трех эквидистантных уровней наиболее просто можно выполнить в полуклассическом приближении, используя уравнение движения для матрицы плотности ρ :

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho],$$

где гамильтониан можно записать в виде:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} E_{\alpha}^0 |\alpha\rangle\langle\alpha| - \sum_{\alpha \neq \beta} |\alpha\rangle\langle\alpha| (\vec{d} \cdot \vec{E}) |\beta\rangle\langle\beta|,$$

где E_{α}^0 – энергия невозмущенного состояния $|\alpha\rangle$, \vec{d} – эффективный оператор электрического дипольного момента, \vec{E} – напряженность электрического поля электромагнитной волны внешнего излучения.

Запишем матрицу гамильтониана для трех уровней системы с учетом двухфотонных процессов:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{12} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{13} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{21} & E_2^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{23} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{31} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{32} & E_3^0 \end{pmatrix}$$

Здесь \vec{d}_{13} – эффективный оператор электрического дипольного момента для двух фотонного поглощения. Если рассматривать резонансное поглощения в переходах между соседними уровнями или однофотонное и двухступенчатое поглощение, то матрица гамильтониана становится немного проще:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & -E \cdot d_{12} & 0 \\ -E \cdot d_{21} & E_2^0 & -E \cdot d_{23} \\ 0 & -E \cdot d_{32} & E_3^0 \end{pmatrix},$$

где $-\vec{E} \cdot \vec{d}_{ij}$ запишем как $-E \cdot d_{ij}$ т. е. d – это проекция дипольного момента на направление поля. После подстановки гамильтониана в уравнение движения для матрицы плотности получим систему дифференциальных уравнений:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} & \dot{\rho}_{12} & \dot{\rho}_{13} \\ \dot{\rho}_{21} & \dot{\rho}_{22} & \dot{\rho}_{23} \\ \dot{\rho}_{31} & \dot{\rho}_{32} & \dot{\rho}_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{12} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{13} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{21} & E_2^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{23} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{31} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{32} & E_3^0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_1^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{12} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{13} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{21} & E_2^0 & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{23} \\ -\vec{E} \cdot \vec{d}_{31} & -\vec{E} \cdot \vec{d}_{32} & E_3^0 \end{pmatrix}$$

Проинтегрировать эти уравнения можно в системе компьютерной математики «MAPLE». Однако решение получается очень громоздким и малоприменимым для сравнительного анализа однофотонного и двухступенчатого поглощения. Анализируя результаты численного решения системы дифференциальных уравнений, удалось установить, что двухступенчатое поглощение усиливает абсорбционную полосу ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ на 20%.

Таким образом, если исключить двухступенчатое поглощение из абсорбционной полосы ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ получится удовлетворительное согласие между вычисленным временем жизни мультиплетта ${}^4I_{15/2}$ и измеренным. Это устраняет противоречие между интенсивностными характеристиками поглощения и излучения.

Список литературы

1. Perez-Arjona, I. Two-photon absorption / I. Perez-Arjona, G. J. de Valcarcel, E. Roldan // Revista mexicana de fisica. – 2003. – Vol. 49. – P. 91–100.
2. Spectroscopy and diode-pumped laser operation of transparent Tm:Lu₃Al₅O₁₂ ceramics produced by solid-state sintering / F. Yue [et al.] // Optics Express. – 2020. – Vol. 28. – P. 28400.
3. Dunina, E. B. Influence of Excited Configurations on the Intensities of Electric Dipole Transitions of Rare Earth Ions / E. B. Dunina, A. A. Kornienko // Optics and Spectroscopy. – 2014. – Vol. 116, No. 5. – P. 706–711.
4. Judd, B. R. Optical absorption intensities of rare-earth ions / B. R. Judd // Phys. Rev. – 1962. – Vol. 127, № 3. – P. 750–761.
5. Ofelt, G. S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions / G. S. Ofelt // J. Chem. Phys. – 1962. – Vol. 37, № 3. – P. 511–520.

To explain the contradiction between the measured oscillator strength of the absorption transition of the erbium ion in the Lu_2O_3 oxide crystal to the first excited level $^4I_{13/2}$ and its lifetime, it is proposed to consider the processes of resonant two-photon absorption in a system of three levels $^4I_{15/2}$, $^4I_{13/2}$, $^4I_{9/2}$ with equidistant location.

Корниенко Антон Алексеевич, студент Витебского государственного университета имени П. М. Машерова, Витебск, Беларусь, anton.kornienko2000@mail.ru.

Ланко Максим Леонидович, студент Витебского государственного технологического университета, Витебск, Беларусь, monstrmaks666@mail.ru.

Научный руководитель – **Дунина Елена Брониславовна**, доцент кафедры информационных систем и автоматизации производства Витебского государственного технологического университета, кандидат физико-математических наук, Витебск, Беларусь, L.Dun@mail.ru.

УДК 53.043:535.015

А. А. КУРАПЦОВА

ВЛИЯНИЕ СВОЙСТВ КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКИ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПЛЁНКИ ОКСИДА ТИТАНА TiO_2 ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ

Приводятся результаты моделирования влияния длины волны солнечного излучения, энергии залегания дефектов в оксиде титана и степени, типа легирования кремниевой подложки на концентрацию носителей заряда, плотность электрического заряда на поверхности пленки оксида титана и величины электрического напряжения в пленке оксида титана.

Оксид титана сейчас востребован для производства в процессах фотокатализа, при фотолизе воды, очистке воздуха и воды от загрязнений, в том числе от тяжелых металлов и органических соединений. Оксид титана существует в трех модификациях: рутил, брукит и анатаз [1]. Анатаз проявляет наибольшую каталитическую активность и был использован в данном моделировании. Электрофизические свойства гетероструктур кремний – оксид титана представляют интерес в связи с доступностью и дешевизной оксида титана и обработанностью кремниевой технологии. Фотокаталитические свойства покрытий из оксида титана связаны с процессами переноса электрического заряда и электрическими характеристиками данных гетероструктур [2].

В зависимости от технологии нанесения пленки диоксида титана и ее стехиометрического состава в оксиде могут возникать дефектные состояния: различные вакансии атомов кислорода или титана, пространственные дефекты и т. д. [3]. Энергия уровня дефектов варьируется в широком диапазоне и оказывает влияние на электрофизические свойства материала.

Целью данной работы является исследование концентраций носителей заряда, плотности электрического заряда и электрического напряжения в пленке оксида титана и на ее поверхности на кремниевой подложке от длины волны падающего излучения, энергии ионизации (глубины залегания) дефектов в оксиде титана и свойств кремниевой подложки.

Моделирование проводилось в программном пакете Comsol Multyphysics на основании модели Андерсона для полупроводниковых гетеропереходов, решения уравнения Пуассона, уравнений непрерывности для электронов и дырок и уравнений Максвелла для электромагнитных волн. Моделирование проводилось на основании двумерной модели. Толщина пленки оксида титана 0,1 мкм, толщина кремниевой подложки 0,5 мкм, глубина залегания дефектов E_c задавалась внутри запрещенной зоны, считая от дна зоны проводимости. Мощность излучения $1 \cdot 10^{-8}$ Вт, что соответствует плотности мощности солнечного излучения 1 кВт/м². Излучение было направленно перпендикулярно поверхности пленки. Основные параметры полупроводников представлены в таблице 1 [4; 5].

Таблица 1 – Параметры материалов

	Si	n-TiO ₂
Ширина запрещенной зоны, эВ	1,124	3,2
Сродство к электрону, эВ	4,05	4,3
Относительная диэлектрическая проницаемость	11,7	40
Время жизни электронов, мкс	10	0,024
Время жизни дырок, мкс	10	0,0023
Концентрация примеси, см ⁻³	N_t	10^{16}
Подвижность электронов, см ² /(В·с)	1450	4
Подвижность дырок, см ² /(В·с)	500	0,1

Были получены зависимости логарифма концентраций электронов и дырок на поверхности пленки для различных типах проводимости и степени легирования кремниевой подложки от глубины залегания дефектов в оксиде титана E_c (рисунок 1а, б). Как видно из рисунка, тип легирования подложки сильно влияет на концентрацию электронов в пленке оксида. Концентрация дырок практически не зависит от типа проводимости и степени легирования подложки. Также наблюдается незначительное изменение концентрации носителей заряда при глубине залегания дефектного уровня $E_c \approx 1$ эВ, которое уменьшается с увеличением длины волны падающего излучения. Концентрация электронов при использовании кремниевой подложки n-типа проводимости слабо зависит от степени легирования подложки и вовсе не зависит от длины волны падающего излучения.

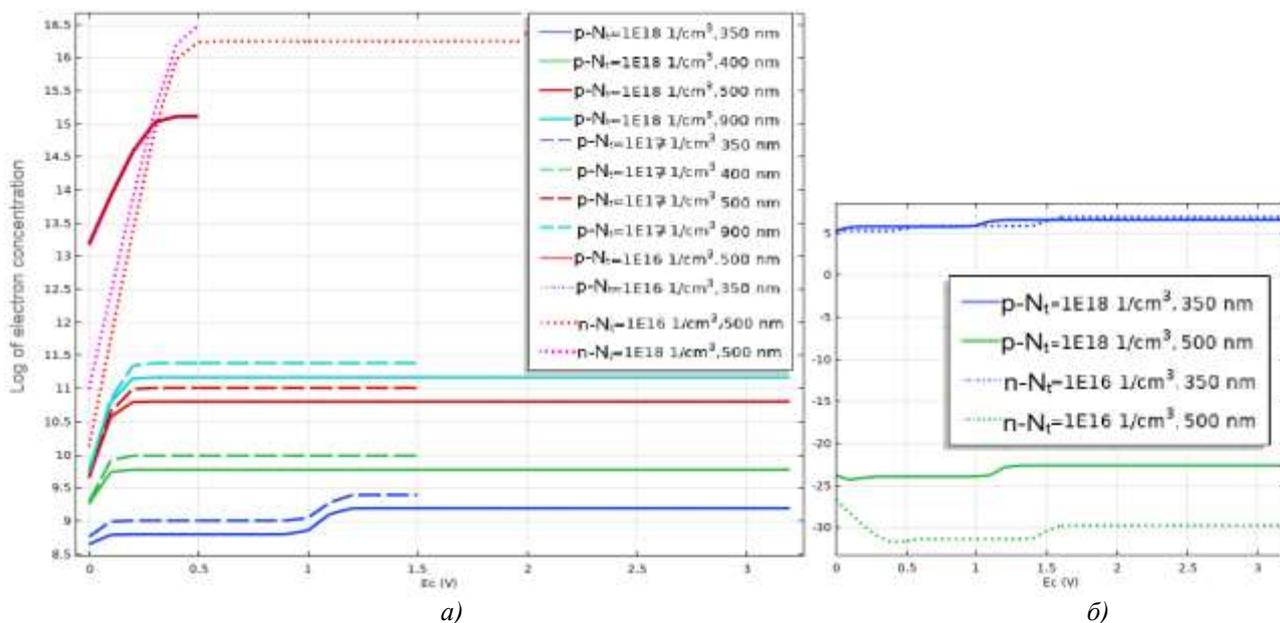


Рисунок 1 – Логарифм концентрации а) электронов, б) дырок на поверхности плёнки оксида титана. $p-N_t$ и $n-N_t$ – кремниевая подложка p-типа и n-типа проводимости соответственно

Зависимость плотности электрического заряда на поверхности пленки оксида титана от энергии ионизации ловушек E_c показана на рисунке 2.

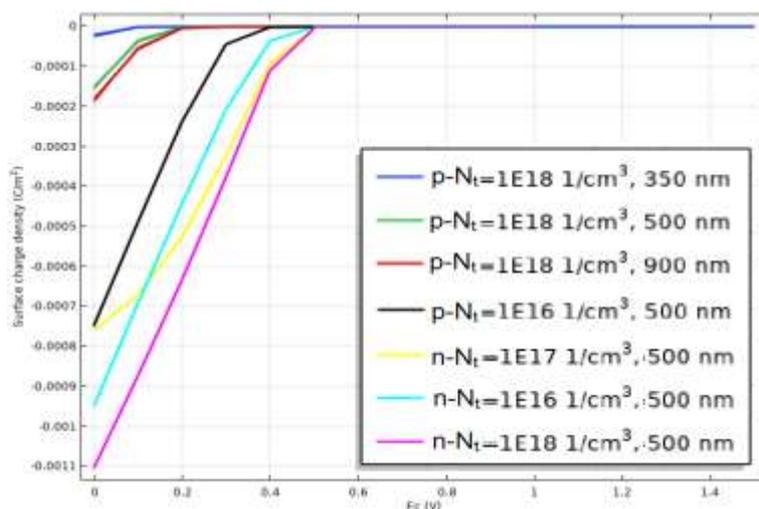


Рисунок 2 – Плотность электрического заряда на поверхности плёнки оксида титана

В пленке оксида титана возникает разность потенциалов, ее зависимость от глубины залегания уровня дефектов в оксиде титана представлена на рисунке 3 для различных типов проводимости и степени легирования кремниевой подложки.

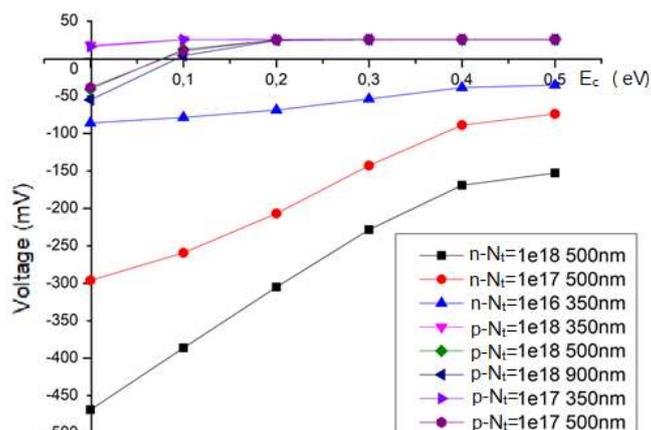


Рисунок 3 – Напряжение на плёнке оксида титана

Наибольшие значения напряжения в пленке возникали при использовании кремниевой подложки n-типа проводимости, которые не зависели от длины волны падающего на пленку излучения, но возрастали при увеличении степени легирования подложки. При энергии залегания дефектного уровня больше 0,5 эВ напряжение на пленке не меняется.

В результате моделирования структуры пленка оксида титана на кремниевой подложке наблюдается зависимость плотности электрического заряда на поверхности пленки и электрического напряжения в пленке от свойств кремниевой подложки. Зависимость от длины волны падающего излучения проявляется слабо или не наблюдается вовсе. Таким образом при создании фотокаталитических устройств на основе оксида титана необходимо уделять внимание, помимо свойств оксида титана, еще и электрофизическим свойствам материала, используемого в качестве подложки.

Список литературы

1. Ievlev, V. M. Absorption spectra of thin TiO₂ films synthesized by reactive high-frequency magnetron sputtering of titanium / V. M. Ievlev // Physics and technology of semiconductors. – 2014. – Vol. 48, № 7. – P. 875–884.
2. Механизм проводимости пленок оксида титана и структур металл – TiO₂ – Si / В. М. Калыгина [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2016. – Т. 50, вып. 8. – С. 1036–1040.
3. Смирнова, О. В. Дефектные структуры диоксида титана как каталитические центры / О. В. Смирнова, А. Г. Грибенюк, В. В. Лобанов // Поверхность. – 2017. – Вып. 9. – С. 44–56.
4. Ola, O. Review of material design and reactor engineering on TiO₂ photocatalysis for CO₂ reduction / O. Ola, M. M. Maroto-Valer // Journal of Photochemistry and Photobiology C : Photochemistry Reviews. – 2014. – Vol. 24. – P. 16–42.
5. Materials pushing the application limits of wire grid polarizers further into the deep ultraviolet spectral / T. Siefke [et al.] // Advanced Optical Materials. – 2016.

In this work the results of modeling the effect of the wavelength of solar radiation, the energy of defect states in titanium oxide and the alloying degree and type of the silicon substrate on the concentration of charge carriers, the electric charge density on the surface of the titanium oxide film and the value of the electric voltage in the titanium oxide film were presented.

Курапцова Анна Андреевна, аспирант факультета радиотехники и электроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь, anku21qwerty@gmail.com.

Научный руководитель – *Данилюк Александр Леонидович*, кандидат физико-математических наук, доцент, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь, danilyuk@nano-center.org.

УДК 551.521.3,583

М. Р. РАХИМОВ, М. Н. РАХМАТОВ, С. Ф. АБДУЛЛАЕВ

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ ТЯЖЁЛЫХ МЕТАЛЛОВ И МЫШЬЯКА В АЭРОЗОЛЕ И В ПОЧВЕ СЕВЕРНОГО ТАДЖИКИСТАНА

Обсуждаются результаты экспериментальных исследований элементного состава проб атмосферного аэрозоля и почв Северного Таджикистана, собранных с 2013 по 2019 год. В статье изучены вариации статистических характеристик содержания тяжелых металлов (ТМ) в пробах атмосферного аэрозоля и почв Северного Таджикистана. Для элементов первого класса опасности – Pb, As и Zn – установлено максимальное превышение содержания ТМ, для почвы это превышение от нескольких сот до тысячи раз, в пробах атмосферного аэрозоля это превышение от нескольких десятков до

двухсот раз больше по сравнению с фоновым значением ТМ. Для остальных элементов это соотношение исчисляется числом до десяти раз.

Более подробное описание мест отбора проб, включая координаты и время сбора, приведено в [1]. Концентрации элементов в пробах определяли в лабораторных условиях методом рентгенофлуоресцентного анализа. Измерения проводились на волнодисперсионном рентгенофлуоресцентном спектрометре «Спектроскан МАКС-G» (ООО «СПЕКТРОН», Россия) [2; 3]. Статистический анализ результатов измерений выполнялся в среде пакета прикладной статистики стандартных программ Excel.

Оказалось, что содержание некоторых исследованных веществ в пробах атмосферного аэрозоля и в пробах почв существенно отличается.

На рис. 1 в логарифмических координатах изображена линия, аппроксимирующая соотношение содержания (оксидов) тяжелых металлов и мышьяка в почве и аэрозоле, она соответствует коэффициенту корреляции $r = 0.98$. Если рассматривать Северный Таджикистан как замкнутую область, то прямая линия – зависимость между веществом, оседающим из аэрозоля на поверхность почвы и аэрозолем, рожденным на территории Северного Таджикистана подвижными воздушными массами (ветрами). При замкнутости объёма и равной вероятности выветривания пород должен выполняться баланс. Точки, расположенные ниже этой прямой, обусловлены двумя возможными причинами: неодинаковой вероятностью выветривания различных пород; выносом вещества аэрозоля за пределы Северного Таджикистана. Точки, расположенные выше прямой линии, относятся к аэрозолям, происхождение которых является не только местным, но и внешним.

Гистограмма на рис. 1б показывает, что элементы, содержание которых выше в аэрозоле, чем в почве, содержатся в местных соединениях, содержащихся в породах, которые легко выветриваются.

Статистическая обработка результатов.

В табл. 1 и 2 приведены характеристики проб почв и проб атмосферного аэрозоля. Параметры, полученные при статистической обработке результатов измерений пробы почв и аэрозоля, производилась с помощью пакета стандартных программ Excel. Для выборки величин x вычислялись средние ($\langle C \rangle$), минимальные (C_{\min}), максимальные (C_{\max}) значения содержания элементов в пробах пылевого аэрозоля и почв. Соответственно, среднеквадратичное отклонение (σ), коэффициент вариации ($V = \sigma / \langle C \rangle$), погрешность ($S_n = \sigma / n$), интегральный индекс загрязнения ($IPI = 0.98x/x_{\min}$), геохимический индекс загрязнения ($I = 2x/3x_{\min}$), N – количество проб, отношение концентраций ($D = C_{\max}/C_{\min}$), $t_c = \sigma/\sqrt{n}$ (критерий Стьюдента), $\delta = (t_c \cdot \sigma/\sqrt{n})$ – доверительный интервал.

Таблица 1 – Статистические данные проб аэрозоля (104 пробы за 2013–2019 гг.).

Параметр	Sr	Pb	As	Zn	Cu	Ni	Co	Fe ₂ O ₃	MnO	Cr	V	TiO ₂
$\langle C \rangle$	174,4	61,3	18,2	1056	56	41	10,1	4,5	305	96,3	63,3	0,5
C_{\max}	523	740	236	9719	299	109	58,3	11	1008	138	194	0,8
C_{\min}	88	4,3	1,1	65,2	16,5	17,7	2,5	2,0	89,1	63,6	16,9	0,1
σ	72	130	27	1724	10	15	10	1,3	274	10	27	0,2
V	0,4	2	1,5	1,6	0,2	0,36	1	0,3	0,1	0,1	0,4	0,4
S_n	0,7	1,3	0,34	19	0,1	0,15	0,1	0,01	2,65	0,09	0,26	0,005
I	0,39	3,43	3,43	2,83	1,16	0,62	1,41	0,55	1,16	0,01	1,32	1,77
D	5,91	201,4	210	64,8	18,1	6,15	23,10	5,46	10,6	2,16	11,5	8,05
t_c	2,87	2,87	3	2,91	2,88	2,9	2,85	2,87	2,88	2,87	2,88	3,37
δ	0,36	0,22	0,15	0,96	0,21	0,18	0,09	0,06	0,48	0,27	0,22	0,06

Таблица 2 – Статистические данные проб почв (144 пробы за 2013–2019 гг.).

Параметр	Sr	Pb	As	Zn	Cu	Ni	Co	Fe ₂ O ₃ %	MnO	Cr	V	TiO ₂ %
$\langle C \rangle$	164,5	134,8	51	994,8	37	109	11,7	4	394	98	90	0,5
C_{\max}	416,0	2826,4	392,11	2096	85,1	84,0	44,0	12,3	1514	112	208	4,2
C_{\min}	45,0	3,03	0,26	27,8	33,0	10,2	0,63	2,08	88	63,4	3	0,05
σ	65	432	72,4	2677	2	9	9	1,3	339	9	33	0,08
V	0,4	3,2	0,6	19	0,01	0,25	1	0,3	1	0,09	0,47	1
S_n	0,4	2,96	0,55	22,2	0,0	0,1	0,06	0,01	2	0,05	0,18	0,01
IPI	3,6	43,6	189	35	1,3	3,5	18	2	4	1,5	23	9
I	1,3	4,9	7	5	-0,1	1,3	3,64	0,37	2	0,04	3,97	3,15
D	9,2	933	1495	753	2,6	8,2	69,9	5,9	17	1,8	69	81
Кларк	300	10	5	50	20	40	10	3,8	850	200	150	4,2
t_c	2,7	2,70	2,75	2,7	2,7	2,7	2,7	2,70	3	2,70	2,72	3,03
δ	14,5	96,4	17,5	721,8	0,8	1,7	1,9	0,3	67	1,8	6	0,2
ПДК/ОДК	-	32	2	100	55	85	5	-	2373	6	150	0,8

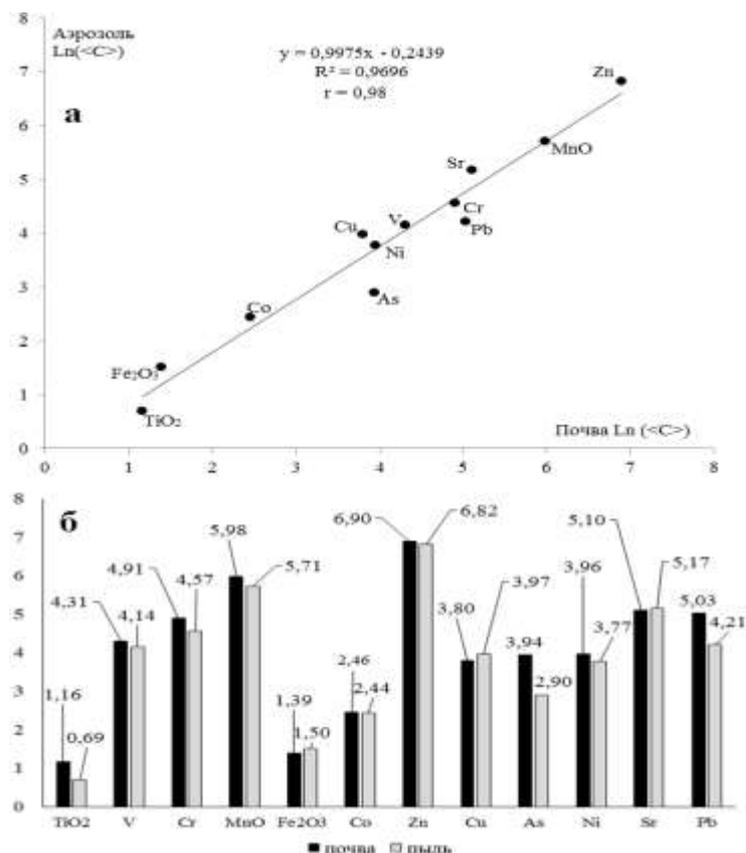


Рисунок 1 – Соотношение содержания ТМ в пробах почв и аэрозоля:
 а – отношение концентраций ТМ в пробах аэрозоля и почв в виде корреляционно-регрессионных связей;
 б – отношение концентраций ТМ в пробах аэрозоля и почв в виде гистограммы

Список литературы

1. Рахматов, М. Н. Элементный состав атмосферного аэрозоля и почв Северного Таджикистана / М. Н. Рахматов, С. Ф. Абдуллаев, В. А. Маслов, Х. Х. Расулзода // Ученые записки ХГУ. – 2018. – № 3 (46). – С. 56.
2. Абдуллаев, С. Ф. Элементный состав атмосферного аэрозоля и почв Таджикистана / С. Ф. Абдуллаев, В. А. Маслов, Х. Х. Расулзода, М. Н. Рахматов // Вестн. Тадж. нац. ун-та. Сер. естественных наук. – 2018. – № 1. – С. 77–82.
3. Рахматов, М. Н. Вариация статистических характеристик содержания тяжелых металлов в пробах атмосферного аэрозоля и почв Северного Таджикистана / М. Н. Рахматов, С. Ф. Абуллаев, В. А. Маслов // Политехнический вестник ТГУ. – 2019. – № 3 (47). – С. 17–22.

The article discusses the results of experimental studies of the elemental composition of samples of atmospheric aerosol and soils of Northern Tajikistan, collected from 2013 to 2019. The article studies variations in the statistical characteristics of the content of heavy metals (HM) in samples of atmospheric aerosol and soils of Northern Tajikistan. For the elements of the first hazard class – Pb, As and Zn – the maximum excess of the HM content was established, for the soil this excess is from several hundred to a thousand times, in atmospheric aerosol samples this excess is from several tens to two hundred times greater than the background value of HM. For the rest of the elements, this ratio is calculated up to ten times.

Рахимов Мардонкул Рахимкулович, магистрант физико-технического факультета Худжандского государственного университета имени академика Бободжона Гафурова, Худжанд, Таджикистан, rahimzoda.1997@mail.ru.

Рахматов Мухамади Нуридинович, преподаватель кафедры общей физики и твердого тела Худжандского государственного университета имени академика Бободжона Гафурова, Худжанд, Таджикистан, muhamadi.rahmatov@yandex.com.

Абдуллаев Сабур Фузайлович, заведующий лабораторией физики атмосферы Физико-технического института имени С. У. Умарова НАНТ, доктор физико-математических наук, профессор, Душанбе, Таджикистан, sabur.f.abdullaev@gmail.com.

Научный руководитель – **Абдуллаев Сабур Фузайлович**, заведующий лабораторией физики атмосферы Физико-технического института имени С. У. Умарова НАНТ, доктор физико-математических наук, профессор, Душанбе, Таджикистан, sabur.f.abdullaev@gmail.com.

**РАСЧЁТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ
ПРОЗРАЧНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ**

Проведен расчет изменения температуры на поверхности облучаемого образца при действии на его поверхность серии пиков лазерного излучения с интервалами 1 мкс (что соответствует реальной форме импульса свободной генерации рубинового лазера). Получен график зависимости температуры поверхности облучаемого образца $\Theta(\vec{r}, t)$.

Проведен расчет изменения температуры $\Theta(\vec{r}, t)$ на поверхности вещества, подвергаемого воздействию лазерного излучения. Решалось уравнение:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \alpha \left(\frac{d^2\theta}{dx^2} + \frac{d^2\theta}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\theta}{dr} \right)$$

С начальными и граничными условиями:

$$q = -\lambda \text{grad}T$$

$$q = 0 \Rightarrow \text{grad}T = 0 \Rightarrow \frac{d\theta}{dx}(x = 0, x = l) = 0 \Rightarrow \frac{d\theta}{dr}(r = r_1) = 0$$

$$\theta(t_0 = 0) = T_0, r \rightarrow 0$$

Решение уравнения искалось в виде:

$$\theta = e^{-\alpha t} X(x) R(r)$$

Подставив в исходное, получим:

$$-\alpha XR = \alpha \left(\frac{d^2X}{dx^2} R \right) + \left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} \right) X$$

$$\alpha \frac{d^2X}{dx^2} = -\alpha \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \alpha = 0$$

$$\alpha \frac{d^2X}{dx^2} = \alpha \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \alpha = -K$$

Находим X:

$$\alpha \frac{d^2X}{dx^2} = -KX$$

$$\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{K}{\alpha} X = 0$$

$$X = A_1 \cos\left(\frac{K}{\alpha} x\right) + A_2 \sin\left(\frac{K}{\alpha} x\right)$$

Находим R [1]:

$$\alpha \frac{d^2R}{dr^2} + \alpha \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + (K + \alpha)R = 0$$

$$R = J_0\left(\sqrt{\frac{K + \alpha}{\alpha}} r\right)$$

где J_0 – функция Бесселя нулевого порядка.

Для определения констант A_1 и A_2 , а также коэффициента a воспользуемся начальным и граничными условиями:

$$\frac{d\theta}{dx} = e^{-\alpha t} \left(-A_1 \sin\left(\frac{K}{\alpha} x\right) \frac{K}{\alpha} + A_2 \cos\left(\frac{K}{\alpha} x\right) \frac{K}{\alpha} \right) R$$

$$x = 0 \Rightarrow e^{-\alpha t} A_2 \frac{K}{a} R = 0; A_2 = 0$$

$$x = l \Rightarrow e^{-\alpha t} \left(-A_1 \sin\left(\frac{K}{a} l\right) \frac{K}{a} \right) R = 0$$

$$\frac{K}{a} l = \pi n; \frac{K}{a} = \frac{\pi n}{l}; n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Подставим K в выражения для R :

$$R = J_0\left(\sqrt{\frac{\alpha}{a} + \frac{\pi n}{l}} r\right)$$

$$r = r_a: \frac{d\theta}{dr} = e^{-\alpha t} X \left(-\sqrt{\frac{\alpha}{a} + \frac{\pi n}{l}} J_1\left(\sqrt{\frac{\alpha}{a} + \frac{\pi n}{l}} r\right) \right) = 0$$

Так как $J_1(0) = 0$ [2], то:

$$\alpha = -\frac{\pi n a}{l}$$

Подставим α в выражение для R и найдем A_1 из начальных условий:

$$A_1 = T_0 \frac{1}{J_0\left(\sqrt{\frac{K}{a} - \frac{\pi n}{l}} r\right)}$$

Так как $J_0(0) = 1$ [2], то:

$$A_1 = T_0$$

В конечном счете получаем выражение:

$$\theta = T_0 \cos\left(\frac{K}{a} x\right) J_0\left(\sqrt{\frac{K}{a} - \frac{\pi n}{l}} r\right) e^{-\alpha t}$$

Для получения результата в случае расчета нагревания вещества при воздействии реального импульса, данное выражение подставляется в:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \alpha \left(\frac{d^2\theta}{dx^2} + \frac{d^2\theta}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\theta}{dr} \right) + A e^{-K_1 x} e^{-\frac{t}{\tau}} e^{-K_2^2 r^2}$$

Получен график зависимости температуры поверхности облучаемого образца от расстояния до центра облучения:

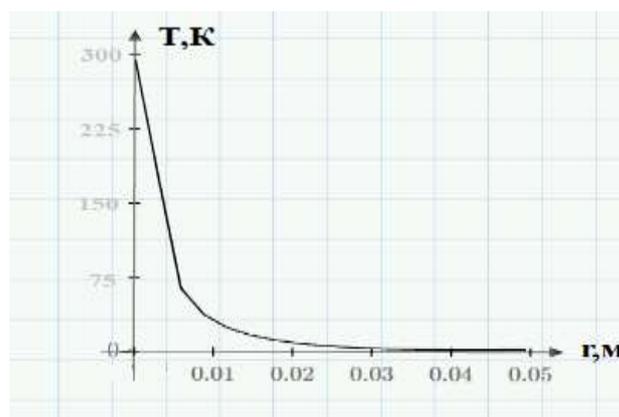


Рисунок 1 – Зависимость температуры от расстояния

Список литературы

1. Камке, Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям / Э. Камке. – М. : Наука, 1971. – 576 с.
2. Абрамовиц, М. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган. – М. : Наука, 1979. – 208 с.

The calculation of the temperature change on the surface of the irradiated sample under the action of a series of laser radiation spikes on its surface at intervals of 1 μs (which corresponds to the real pulse shape of the free generation of a ruby laser) A graph of the dependence of the surface temperature of the irradiated sample $\Theta(\vec{r}, t)$ is obtained.

Семенчук Евгений Олегович, аспирант физико-технического факультета Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, Гродно, Беларусь, Unata1976-2010@mail.ru.

Научный руководитель – **Иванов Алексей Юрьевич**, заведующий кафедрой теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, доктор физико-математических наук, Гродно, Беларусь, ion_pe@mail.ru.

УДК 535.343.32

А. Ф. ЧАЙКОВСКИЙ, К. Я. ВЛАДЫКО

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ ГЕМОГЛОБИНА

Представлен краткий обзор методов квантовой химии, использующихся для оптимизации геометрии различных органических макромолекул, в том числе гемов, и для расчёта энергии электронов на молекулярных орбиталях. Дана сравнительная характеристика основных подходов квантовой химии, а также проведён анализ основных её применений к расчёту химических свойств производных порфиринов.

Общеизвестно, что для теоретического описания состояния электронов в атомных и молекулярных системах необходимо использовать уравнение Шрёдингера [1]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1)$$

Однако даже при небольшом числе атомов молекулярные системы становятся многоэлектронными, что существенно осложняет решение этого уравнения из-за многократного увеличения числа степеней свободы. В такой ситуации, используя физические приближения, накладывают ограничения на уравнения Шрёдингера и преобразуют его к виду, поддающемуся разрешению. Во-первых, если гамильтониан явно не зависит от времени, уравнение (1) преобразуют к стационарному уравнению Шрёдингера [1–2]:

$$\hat{H} | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle. \quad (2)$$

В рамках первого приближения оператор Гамильтона можно представить в виде суммы кинетических энергий всех ядер и электронов и потенциальных энергий взаимодействия электронов между собой, ядер между собой и электронов с ядрами [1–2]:

$$\hat{H} = \hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{U}_{ee} + \hat{U}_{nn} + \hat{U}_{en}. \quad (3)$$

Исключив первое слагаемое, получим чисто электронный гамильтониан. Решение уравнения Шрёдингера с таким гамильтонианом позволит найти его собственные функции и соответствующие им собственные значения, которые являются энергией электронной подсистемы. Решение электрон-ядерной системы в целом можно представить в виде разложения по собственным функциям электронов, коэффициенты в котором являются ядерными функциями. В адиабатическом приближении волновая функция полагается равной лишь произведению электронной функции на ядерную, что следует из того соображения, что при небольших деформациях молекулы электронное состояние не меняется в силу отсутствия обмена энергией между электронной и ядерной подсистемами [2]. В результате получается следующая формула:

$$(\hat{T}_n + E_k(\mathbf{R}) + \langle \phi_k | \hat{T}_n | \phi_k \rangle) \phi_k(\mathbf{R}) = E \phi_k(\mathbf{R}), \quad (4)$$

которая представляет собой ядерное уравнение Шрёдингера в *адиабатическом приближении*. Если не учитывать небольшое возмущение, возникающее при некотором влиянии движения ядер на электронную подсистему, то мы придём к *приближению Борна-Оппенгеймера*, смысл которого заключается в том, что электронная подсистема имеет гораздо меньшие характерные времена, чем ядерная:

$$(\hat{T}_n + E_k(\mathbf{R})) \phi_k(\mathbf{R}) = E \phi_k(\mathbf{R}). \quad (5)$$

Получить решению задачи электронной подсистемы можно, сделав допущение о том, что, несмотря на неизвестность волновой функции всех электронов, известны все возможные волновые функции электронов по отдельности (*одноэлектронное приближение*) [1–2]. В результате волновую функцию молекулы можно представить в виде суммы определителей (определители Слэтера), образованных из спектра одночастичных

волновых функций электронов. В рамках однодетерминантного подхода волновая функция принимается равной лишь одному определителю. Затем, энергия электронной подсистемы полагается функционалом одночастичных электронных функций. Минимум энергии ищется путем вариации этих функций с учётом их ортогональности. В конечном итоге, после всех необходимых математических преобразований приходим к уравнению Хартри-Фока:

$$\hat{F}\tilde{\psi}_k = \tilde{\epsilon}_k\tilde{\psi}_k, \quad (6)$$

где $\hat{F} = \hat{h} + \sum_{j=1}^N (\hat{J}_j - \hat{K}_j)$ – оператор Фока, в котором \hat{J}_j и \hat{K}_j – кулоновский и обменный операторы, явно зависящие от одноэлектронных волновых функций; $\tilde{\epsilon}_k$ – орбитальная энергия [1]. В методе Хартри-Фока одноэлектронную волновую функцию можно представить в виде произведения орбитальной волновой функции и спиновой волновой функции электрона. Исходная функция носит название спин-орбитали. Сам метод Хартри-Фока здесь делится на два типа: ограниченный (*RHF*) и неограниченный (*UHF*). Первый отличается от второго тем, что орбитальные функции всегда одинаковы у двух некоторых спин-орбиталей, а спиновые отличаются. В неограниченном же методе орбитальные функции тоже должны отличаться, что приводит к различной энергии двух любых спин-орбиталей. Решение уравнения Хартри-Фока ищут в виде разложения орбитальной функции по некоторому известному базису. В этом случае необходимо лишь найти матрицу коэффициентов перехода от этого базиса **C**:

$$FC = SCE, \quad (7)$$

где **S** – матрица интегралов перекрытия, **F** – матрица оператора Фока, явно зависящая от **C**, и **E** – диагональная матрица, состоящая из орбитальных энергий. Здесь реализуется *метод самосогласованного поля (SCF)* [1], в котором подбирается начальная матрица коэффициентов **C**, и первое решение находится при использовании оператора Фока, зависящего именно от этой матрицы. Далее осуществляется итерационный процесс до достижения приемлемой точности.

Указанное выше представление орбитальных функций через базисные было развито Рутаном и получило название метода *МО ЛКАО (молекулярные орбитали как линейная комбинация атомных орбиталей)* [2]. Идея метода заключается в том, чтобы использовать в качестве базисных известные функции, вычисленные для простейших атомов. Таким образом, орбитальные функции, локализованные вблизи соответствующих атомов в молекуле, будут представляться в виде линейной комбинации орбитальных функций, существующих на этом атоме при отсутствии влияния других атомов. Для решения задачи необходимо построить начальное приближение для молекулярных орбиталей, что эквивалентно начальному приближению матрицы коэффициентов $C^{(0)}$. В *приближении голых ядер* пренебрегают межэлектронным взаимодействием. В этом случае оператор Фока максимально упростится: $\hat{F} = \hat{h}$.

В методе Хартри-Фока представление волновой функции молекулы в виде одного определителя вызывает существенные отклонения в оценке энергии на очень больших и очень малых межэлектронных расстояниях. Для их устранения необходимо использовать сумму нескольких определителей. Такой класс методов получил название *конфигурационного взаимодействия*, и подразумевает наличие вместе с основной конфигурацией возбуждённых. Он гораздо точнее, однако и гораздо требовательнее в ресурсном отношении. Однако в методе *KV* базисные функции не уточняются и варьируются только коэффициенты в разложении многоэлектронной функции. В рамках же метода *многоконфигурационного самосогласованного поля (MCSCF)* варьируются не только коэффициенты, но и все одноэлектронные функции, из которых построены определители.

В *полуэмпирических методах* для уменьшения вычислительных затрат, часто вводят различного рода параметры. Параметры подбираются таким образом, чтобы результаты расчета соответствовали результатам эксперимента (различные структурные и энергетические данные) [1; 3]. При этом нельзя получить хорошие оценки энергии для различных переходных состояний молекулярной системы, например, в ходе химической реакции, т. к. зачастую нет надежных данных о зависимости параметров от координаты процесса. В *валентном приближении* часть электронов рассматриваются как остовные, а часть как валентные. Остовные электроны в отличие от валентных не участвуют в образовании химических связей и не изменяют своего состояния при образовании молекулы. В *приближении нулевого дифференциального перекрытия* выбираются некоторые пары базисных функций χ_p и χ_q , для которых выполнено условие $\chi_p(r)\chi_q(r) \approx 0$. При этом данное условие может и не иметь под собой реального физического обоснования. Если выполнено это условие, то тогда интегралы вида $\langle \chi_p\chi_r | \chi_q\chi_s \rangle$ также будут равны нулю. Равенство нулю некоторых таких интегралов может привести к искажению физической картины молекулярной системы, т.к. они входят в выражение для взаимодействия электронов между собой. Поэтому необходимо введение различных параметров, заменяющих интегралы. Некоторые методы в рамках полуэмпирического подхода: *полное пренебрежение дифференциальным перекрытием (CNDO, CNDO/1,*

CNDO/2), частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (*INDO*, *MINDO/1*), пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием (*NDDO*, *MNDO*, *AM1*, *PM3*), расширенный метод Хюккеля (*EHT*), простой метод Хюккеля (*SHT*).

В теории функционала плотности (*DFT*) полагается, что энергия основного состояния молекулярной системы может быть представлена в виде функционала электронной плотности, который выражается следующим образом [3]:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2. \quad (8)$$

Сам функционал плотности, который носит название функционала Хюккеля-Кона, описывает только основное электронное состояние:

$$E_e[\rho] = \int \rho(\vec{r}_1) \left(-\sum_{\alpha=1}^K \frac{Z_{\alpha}}{R_{1\alpha}} \right) d\vec{r}_1 + \hat{V}_C + \hat{T}_S + \Delta\hat{V}_{ee} + \Delta\hat{T}, \quad (9)$$

где \hat{V}_C – оператор кулоновского потенциала, \hat{T}_S – оператор кинетической энергии электронов. Величину $E_{xc} = \Delta\hat{V}_{ee} + \Delta\hat{T}$ называют обменно-корреляционной энергией и предполагают, что E_{xc} есть функционал электронной плотности [3]. После вариации энергии основного состояния как функционала по аналогии с уравнение Хартри-Фока выводится уравнение Кона-Шэма:

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^K \frac{Z_{\alpha}}{R_{1\alpha}} + \int \frac{\rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_2 + \varepsilon_{xc} \right) \phi_i = \varepsilon_i \phi_i, \quad (10)$$

где оператор Кона-Шэма $\hat{F}_{KS} = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^K \frac{Z_{\alpha}}{R_{1\alpha}} + \int \frac{\rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_2 + \varepsilon_{xc}$.

Методы функционала плотности различаются по использованному функционалу $\varepsilon_{xc}[\rho]$ – обменно-корреляционная энергия в расчете на один электрон. Общего и теоретически обоснованного аналитического выражения для E_{xc} не существует. О качестве функционала E_{xc} судят по соответствию рассчитанной энергии атомизации, энергии ионизации, различным геометрическим параметрам и эксперименту. В большинстве случаев обменно-корреляционная энергия представляется в виде двух независимых величин: обменной и корреляционной [3]. При построении функционала сначала строит обменный функционал и затем строятся возможные корреляционные функционалы. Самое простое приближение для обменного функционала заключается в том, что $E_x[\rho]$ можно записать как:

$$E_x[\rho] = \int \varepsilon_x[\rho] \rho(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (11)$$

где $E_x[\rho]$ зависит только от функции ρ . При этом предполагается, что $\varepsilon_x[\rho] \propto \rho^{1/3}$, как у однородного электронного газа. Такая модель называется *приближением локальной плотности (LDA)* [3]. Это приближение практически не используется. Модификацией приближения локальной плотности является *приближение локальной спиновой плотности (LSDA)* [3], в котором энергию E_x представляют, как сумму двух вкладов для электронов в разных спиновых состояниях:

$$E_x = const \sum_{\sigma=\alpha,\beta} \int \rho_{\sigma}(r) \sigma^{4/3} dr, \quad (12)$$

Однако данное приближение не всегда работает хорошо и среднее отклонение энергии атомизации достигает 30–40 ккал/моль. Существенной поправкой к предыдущей конструкции является *обобщенно-градиентное приближение (GGA)*, в котором функция E_x представляется как:

$$E_x = \int f(\rho_{\alpha}, \rho_{\beta}, \nabla\rho_{\alpha}, \nabla\rho_{\beta}) dr, \quad (13)$$

Метод функционала плотности получил широкое распространение и в квантохимических расчётах свойств гембелков. Оптимизация геометрии гема была проведена с использованием обменной функции Беке (1988) и корреляционной функцией Пердю (1986) (*BP86*) [4]. Точные энергии были затем оценены одноточечными расчетами с использованием трехпараметрического гибридного метода Беке с приближением локальной спиновой плотности и корреляционного функционала Воско-Уилка-Нусаира и нелокальный корреляционный функционал Ли-Янга-Парра (*B3LYP*) [4]. *B3LYP*, вероятно, наиболее точный из общедоступных обменно-корреляционных функционалов для вычисления относительных энергий и частот. Методом *B3LYP/6-31G* нами

были вычислены энергии НОМО и LUMO орбиталей в молекуле Fe-протопорфирина IX по схеме, описанной в [5]. Тем не менее, авторы некоторых работ [4] утверждают, что *BP86* обеспечивает немного лучшую геометрию комплексов с металлом, чем *B3LYP*, и при этом требует значительно меньше вычислительных ресурсов. Кроме того, всё ещё используется обобщенно-градиентное приближение для, например, моделирования магнитной чувствительности производных гемов [6].

Список литературы

1. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н. Ф. Степанов. – М. : Мир, 2001. – 519 с.
2. Фларри, Р. Квантовая химия / Р. Фларри ; пер. с англ. Э. Д. Германа, Е. Л. Розенберга ; под ред. А. М. Бродского. – М. : Мир, 1985. – 472 с.
3. Сатанин, А. М. Введение в теорию функционала плотности : учеб.-метод. пособие / А. М. Сатанин. – Нижний Новгород, 2009. – 64 с.
4. Jensen, K. P. How O₂ Binds to Heme / K. P. Jensen, U. Ryde // The Journal of Biological Chemistry. – 2004. – Vol. 279, № 15. – P. 14561–14569.
5. Theoretical study of heme derivatives under DFT calculations / M. C. Rosales-Hernandez [et al.] // Journal of Molecular Structure. – 2007. – Vol. 804. – P. 81–88.
6. Density Functional Theory modeling of the magnetic susceptibility of heme derivatives / M. Mohammadi [et al.] // Chemical Physics. – 2019. – Vol. 527. – P. 110498–110505.

This article provides a brief overview of quantum chemistry methods used to optimize the geometry of various organic macromolecules, including hemes, and to calculate the energy of electrons in molecular orbitals. A comparative description of the main approaches of quantum chemistry is given as well as an analysis of its main application to the calculation of the chemical properties of porphyrin derivatives.

Чайковский Артур Фёдорович, аспирант, Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь, arthur.chaykovski@gmail.com.

Владыко Ксения Яковлевна, Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь, k.uladyka@ifanbel.bas-net.by.

Научный руководитель – **Лепешкевич Сергей Вольдемарович**, кандидат физико-математических наук, Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь, s.lepeshkevich@ifanbel.bas-net.by.

УДК 53.072

Э. В. ШВАЛЮК

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭПИДЕМИЙ И ФИЗИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СРЕДСТВ ЗАЩИТЫ

Работа посвящена изучению процесса распространения эпидемии инфекционного заболевания в условиях учебного класса школы, а также оценке эффективности средств защиты (защитных масок) экспериментальными методами. Исследована структура отверстий в защитных масках различного типа и разработана методика определения распределения отверстий по размерам, а также введен параметр проницаемости маски. Этот параметр может использоваться для определения фактора проницаемости капель или газа через маску. Разработаны «контактная» и конвективно-динамическая модели распространения эпидемии в учебном классе школы.

В XXI веке человечество подошло к осознанию важности общемировых задач обеспечения безопасности жизни людей. Болезнь, вызванная коронавирусной инфекцией COVID-2019, показала, что проблеме эпидемий следует уделять всестороннее внимание [1]. Эта проблема на современном этапе относится к разряду не только фармакологических (поиск вакцины/медицинских препаратов), но и организационных. Под организационной проблемой мы понимаем систему мер и мероприятий, направленных на минимизацию процесса распространения заболевания. В выполненном исследовании проблема эпидемий рассматривается нами с точки зрения физики.

Мы воспользовались методом моделирования и ограничили предмет изучением процесса распространения эпидемии инфекционного заболевания в условиях учебного класса школы, а также произвели оценку эффективности средств защиты (защитных масок) посредством физического эксперимента.

Цель работы: разработка моделей процесса распространения эпидемии на примере учебного класса школы и экспериментальная оценка эффективности персональных средств защиты.

Работа разделяется на два этапа. На первом этапе мы исследовали структуру защитных масок, чтобы в дальнейшем методами молекулярно-кинетической теории оценить их пропускаемость газа и влаги. В работе нами исследуется только геометрическая структура масок (экспериментальная часть работы). Вторая часть – посвящена моделированию процесса распространения инфекции в учебном классе методами молекулярно-кинетической теории. Предлагаются «контактная» и конвективно-динамические модели.

Рассмотрим более подробно «контактную» модель. Постановка задачи: построить графики (зависимость появления больных учеников в классе от времени) распространения инфекции в учебном классе в случае появления больных учеников. Метод: в работе был использован метод молекулярно-кинетической теории (тепловое движение молекул) [2].

Качественное описание задачи. В классе находится N учеников, из которых n – больные. В начальный момент времени (урок) ученики размещены в классе регулярно, непосредственное общение между ними отсутствует. Будем считать, что контакт между учениками происходит во время перемены. Движение учеников во время перемены представим как движение молекул идеального газа. При этом передача инфекции возможна в случае столкновения. Вероятность передачи инфекции от одного ученика другому обозначим символом P . Случайным образом задаем начальные скорости учеников V_i в диапазоне от 0 до V_{\max} . Систему предоставляем самой себе и отслеживаем во времени появление новых инфицированных учеников.

Математическая модель и алгоритм решения (газ дисков).

Уравнения движения (массы молекул одинаковые):

$$a_{ix} = 0, a_{iy} = 0$$

В промежутках между соударениями атомов их скорость определяется

$$\begin{aligned} v_{ix} &= v_{i0x} \\ v_{iy} &= v_{i0y} \end{aligned}$$

где v_{i0x}, v_{i0y} – компоненты скорости i -ого атома сразу после столкновения, м/с;

t_i – время, отсчитываемое с момента столкновения i -ого атома, с;

В промежутках между соударениями атомов их координаты определяются выражениями:

$$x_i = x_{i0} + v_{i0x}t_i; y_i = y_{i0} + v_{i0y}t_i$$

где: x_i, y_i – координаты i -ого атома в момент времени t_i , м; x_{i0}, y_{i0} – координаты i -ого атома в момент столкновения, м; t_i – время, отсчитываемое с момента столкновения i -ого атома, с;

Будем рассматривать одновременное столкновение только двух атомов – двухчастичное взаимодействие.

При этом учитываем законы сохранения импульсов и энергии:

$$\begin{aligned} v_{1x} + v_{2x} &= v'_{1x} + v'_{2x} \\ v_{1y} + v_{2y} &= v'_{1y} + v'_{2y} \\ v_{1x}^2 + v_{1y}^2 + v_{2x}^2 + v_{2y}^2 &= v'^2_{1x} + v'^2_{1y} + v'^2_{2x} + v'^2_{2y} \end{aligned}$$

Скорости, отмеченные апострофом, соответствуют скоростям атомов после соударения. Система уравнений, состоящая из трех уравнений, имеет четыре неизвестных. Дополнительное уравнение составим с учетом того, что при столкновении двух атомов происходит обмен их импульсами в направлении линии, соединяющей центры атомов (см. рис. 1).

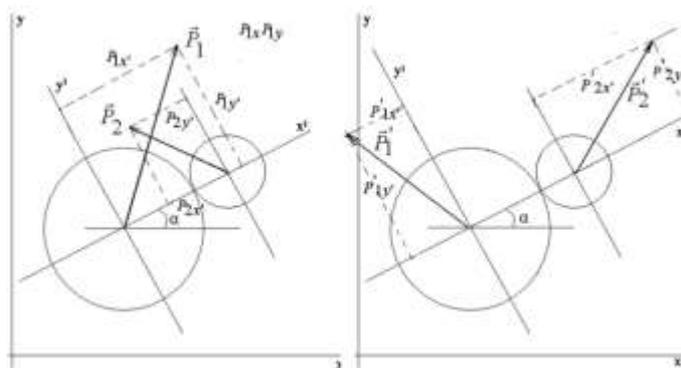


Рисунок 1 – Векторы импульсов шаров до и после столкновения

В качестве исходных данных задаются размеры класса x и y , число учеников в классе N , число больных учеников n , вероятность переноса инфекции при контакте P , максимальная скорость перемещения ученика по классу V_{\max} , эффективное сечение рассеяния σ . Слева отображаются ученики (молекулы) в исходном регулярном состоянии, справа графическое поле для отображения зависимости больных от времени. Поле «Трек» позволяет отобразить траектории больных учеников (рис. 2).

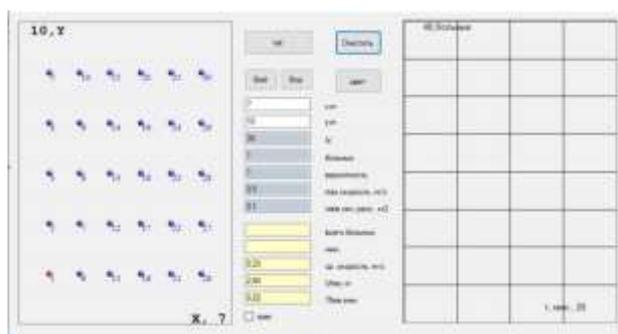


Рисунок 2 – Интерфейс программы

Разработанная программа позволяет варьировать большим числом исходных параметров для анализа процессов распространения заболеваний в ученической среде. В зависимости от вероятности заболевания (тип маски) при контакте время заражения определенного количества учеников достаточно сильно различается.

С целью определения области заражения окружающего воздуха в результате дыхания больного ученика рассмотрим конвективно-динамическую модель. Предварительно нами были выполнены эксперименты по определению геометрических параметров порции выдыхаемого воздуха. Введем обозначения этих параметров: фактор дистанции – максимальная длина проникновения выдыхаемой струи воздуха, угловой фактор – угол раствора выдыхаемого потока. Сущность эксперимента заключалась в следующем. В эксперименте использовалось: средство фотосъемки, 6 видов защитных масок, фонарь, линейка, электронная сигарета (в качестве заправки использовался глицерин). Была выполнена видеосъемка выдыхаемого пара в случае, когда экспериментатор находится в защитной маске. Для каждого вида маски было выполнено по 3 эксперимента. Оценка параметров выдыхаемой порции пара производилась в процессе обработки полученного видеоматериала. Процесс распространения выдыхаемого пара представлен на рис. 3.



Рисунок 3 – Скриншоты выполненных экспериментов по определению геометрических параметров порции выдыхаемого воздуха

Фактор дистанции для одного вида защитных масок определялся как среднее арифметическое факторов, полученных из трех опытов для данной маски. Результаты измерений представлены в таблице.

Тип маски	1	2	3	4	5	6	Выдох без маски
Фактор дистанции, см	20	10	25	55	30	10	100
Угловой фактор, градусы	140	80	180	100	130	160	120

Предлагаемая нами конвективно-динамическая модель базируется на предположении о том, что больной ученик перемещается по классу так же, как и в динамической модели, случайным образом, совершая вдох и выдох. При выдохе соответствующая область окружающего воздуха может содержать вирусы. Размер этой области определяется фактором дистанции и угловым фактором. Интерфейс разработанной программы в случае конвективно-динамической модели представлен на рис. 4.

С помощью данной программы можно определить область заражения (площадь) больными учениками в зависимости от времени. При это можно выбрать несколько вариантов процесса заражения вирусом здоровых учеников: 1) здоровый ученик попадает в зону поражения, 2) больной ученик сталкивается (общается) со здоровым.

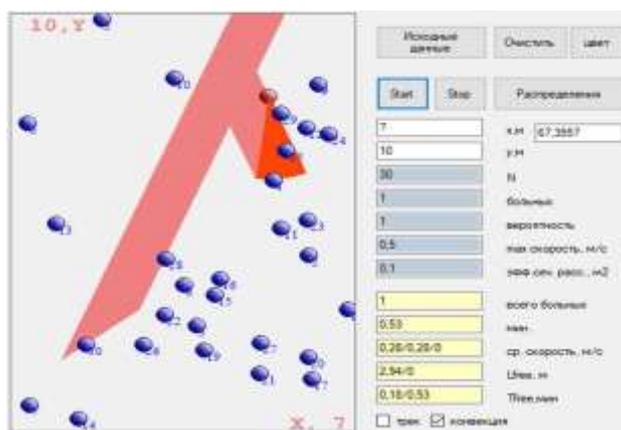


Рисунок 4 – Интерфейс программы в случае конвективно-динамической модели

Вместо заключения отметим основные выводы:

1. Проблема распространения вирусных инфекций многофакторная.
2. В настоящей работе исследована структура отверстий в масках различного типа и разработана методика определения распределения отверстий по размерам, а также введен параметр коэффициент маски.
3. Разработана «контактная» модель на основе молекулярно-кинетической теории распространения эпидемии в учебном классе в зависимости от числа учеников в классе, площади класса, вероятности заболевания при контакте, получены временные зависимости от числа первоначально заболевших учеников.
4. Использование методов теплового движения позволяет воспользоваться такими параметрами, как длина свободного пробега, время свободного пробега, которые можно увязать с минимально безопасными расстояниями между учениками (этот аспект является одним из направлений развития данной работы). В качестве параметра, влияющего на время заражения всех учеников в классе, можно выбрать время свободного пробега. По санитарным нормам существует такое понятие, как безопасное расстояние (1,5–2 м). Фактически это среднее расстояние между учениками в классе. Поскольку реализовать в течение учебного дня в ученической среде это расстояние между учениками весьма затруднительно (в любом случае имеет место перемещение), в контактной модели длина свободного пробега не должна быть меньше, чем безопасное расстояние. Однако в зависимости от скорости перемещения, изменяется число контактов, которые влияют на процесс заражения. В этой связи, наиболее информативным параметром является время свободного пробега.
5. «Контактная» модель на основе молекулярно-кинетической теории применима в случае контактной передачи вируса. Как показали эксперименты с каплями, уже на расстоянии одного метра их концентрация значительно уменьшается. В этом случае целесообразно использовать конвективно-динамическую модель.

Рассмотренные модели учитывают только часть факторов возможности заражения, и в первую очередь физических. Мы не рассматриваем вопросы концентрации вирусов в выдыхаемом воздухе, время жизни вирусов в выдыхаемом воздухе и другие физиологические факторы. Разумеется, они существенны и при необходимости модель можно расширить и усложнить.

Список литературы

1. Макеев, В. А. Возникновение новых инфекционных заболеваний – глобальная проблема человечества [Электронный ресурс] / В. А. Макеев. – Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/vozniknovenie-novyh-infektsionnyh-zabolevaniy-globalnaya-problema-chelovechestva/viewer>.
2. Никитин, А. В. Компьютерное моделирование физических процессов / А. В. Никитин, А. И. Слободянюк, М. Г. Шишаков. – М. : БИНОМ, 2013. – 676 с.

The work is devoted to the study of the spread of the epidemic of an infectious disease in the classroom of the school, as well as the assessment of the effectiveness of protection means (protective masks) by experimental methods. Developed "contact" and convective-dynamic models of the spread of the epidemic in the classroom of the school.

Швалюк Эмма Валерьевна, ГУО «Лицей № 1 г. Гродно», Гродно, Беларусь, emma1607emma@gmail.com.

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

Никитин Александр Викторович, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, кандидат технических наук, Гродно, Беларусь, nik@grsu.by.

В. В. ШЕКЕЛЕВСКИЙ

ВЛИЯНИЕ ПРОФИЛЯ ЗОНЫ ЭРОЗИИ МИШЕНИ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОСАЖДАЕМОГО МАТЕРИАЛА НА ПОДЛОЖКЕ ПРИ МАГНЕТРОННОМ РАСПЫЛЕНИИ

Представлен анализ влияния криволинейности профиля зоны эрозии мишени магнетронного распылительного устройства на неравномерность распределения осажденного материала на подложке в процессе выработки мишени с помощью численных расчетов и представлена методика учета искривления поверхности мишени при распылении мишени.

Современная промышленность в производстве изделий микро-, нано- и оптоэлектроники при нанесении тонкопленочных покрытий чаще всего использует магнетронное распыление. В связи с чем стоит актуальным вопрос по воспроизводимому осаждению равномерных покрытий на подложки больших площадей. Из-за того, что в процессе распыления мишень меняет конфигурацию своей поверхности, является важным вопрос о влиянии изменения поверхности мишени от планарного состояния на осаждение материала на подложке. Несмотря на то, что аналитические модели расчета осаждения материала мишени на подложке при распылении разработаны довольно давно, даже сейчас в научных работах по магнетронному распылению не уделяется достаточно внимания изменению планарности мишени в процессе распыления и его учету при расчетах [1].

В магнитной распылительной системе (МРС) силовые линии магнитного поля замыкаются между полюсами над поверхностью мишени, где создается магнитная ловушка аркообразной формы. Наличие этого замкнутого магнитного поля над поверхностью мишени позволяет локализовать плазму непосредственно у мишени, ионы которой распыляют мишень [2]. Однако неравномерность магнитного поля локализует плазму над мишенью в виде тора, в связи с чем мишень распыляется неравномерно по всей поверхности, с имеющимися в определенных участках выраженными максимумами распыления. Внешний вид распыленной мишени и ее схема распыления представлены на рисунке 1.

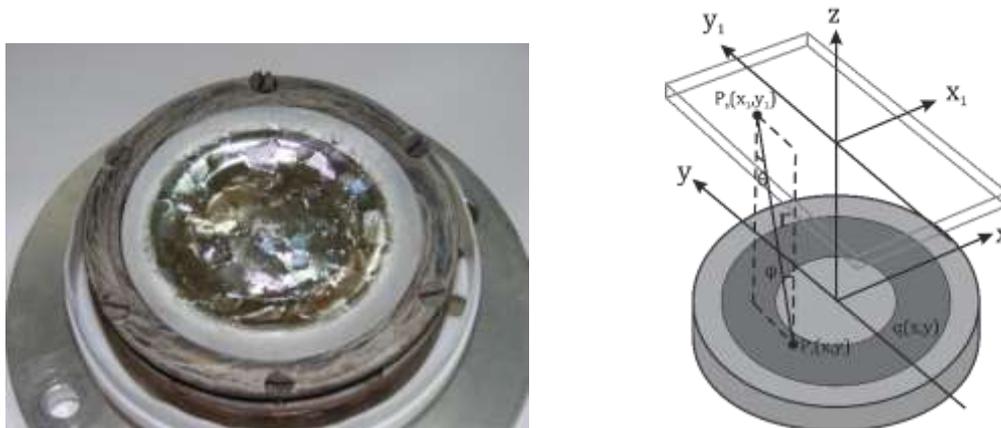


Рисунок 1 – Внешний вид распылённой мишени и схема её распыления

Для аналитических расчетов процессов испарения и распыления в настоящее время используется косинусный закон, который выражается следующим уравнением [1]:

$$T(x_1) = \iint_{q(x,y)} \frac{Q \cos \varphi^n \cos \theta}{r^2} dx dy \quad (1)$$

где $T(x_1)$ – толщина осажденного покрытия в точке x_1 на поверхности мишени, r – расстояние от элемента распыления до точки осаждения, θ – угол между нормалью к поверхности подложки и направлением осаждения, φ – угол между нормалью к поверхности распыления и направлением распыления, $q(x, y)$ – площадь поверхности распыления на мишени, Q – коэффициент, определяемый экспериментально, n – коэффициент, зависящий от свойств материала.

Для параллельных и соосных мишени и подложки, взяв $n = 0$, $Q = 1$, для двухмерного случая уравнение (1) можно расписать как:

$$T(x_1) = \int_a^b \frac{H^2}{(H^2 + (x - x_1)^2)^2} dx \quad (2)$$

где H – расстояние между точкой распыления и поверхностью подложки, x – координата точки распыления на мишени, x_1 – координата точки осаждения, a, b – координаты границ области распыления, $r = \sqrt{H^2 + (x - x_1)^2}$, $\cos \varphi = \cos \theta = H/r$.

Проводя интегрирование для разного x_1 , зависящего от размера изучаемой подложки, можно получить зависимости профиля неравномерности осажденного покрытия на разных участках подложки. Уравнение (2) применимо только для плоской зоны распыления с фиксированной глубиной. Для учета искривления распыляемой поверхности необходимо добавить зависимость H от x . Тогда уравнение (2) принимает следующий вид:

$$T(x_1) = \int_a^b \frac{H(x)^2}{(H(x)^2 + (x - x_1)^2)^2} dx \quad (3)$$

где $H(x)$ – функция зависимости расстояния между точкой распыления и поверхностью подложки вдоль оси x . Которая может быть найдена исходя аппроксимацией профиля зоны эрозии мишени, определяемого либо экспериментальными способами, либо аналитическими расчетами [3]. В нашем случае использовалось гауссово распределение для $H(x)$ выражаемое уравнением (4):

$$H(x) = -Ae^{-\frac{(x-B)^2}{C}} \quad (4)$$

где A, B, C – коэффициенты гауссовой функции, определяющие ее форму, A – определяет глубину зоны эрозии, B – сдвиг минимума функции относительно начала координат, C – ширину функции.

На каждом шаге интегрирования в функцию $H(x)$ вносится значение текущего x , что и учитывает изменение расстояния между мишенью и подложкой.

Результаты расчетов по уравнению (2) и (3) для круглого магнетрона диаметром 50 мм с минимальным и максимальным радиусом зоны эрозии мишени 8 мм и 31 мм и с коэффициентами A, B, C равными 2, 20, 15 соответственно, а также форма профиля зоны эрозии мишени глубиной 2 мм при расстояниях между мишенью и подложкой 10 мм (предельное расстояние, на котором поддерживается разряд) и 30 мм показаны на рисунке 2.

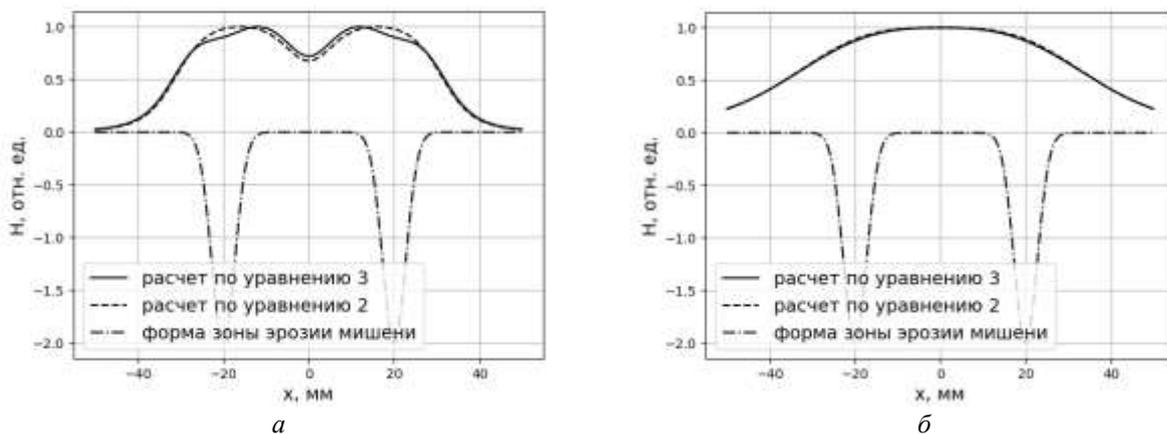


Рисунок 2 – Результаты расчётов нормированных профилей осаждённого покрытия на подложке при расстоянии между мишенью и подложкой 10 мм (а) и 30 мм (б)

Из расчетов для магнетронного устройства диаметром 50 мм видно, что при увеличении расстояния между мишенью и подложкой влияние кривизны поверхности мишени становится все менее существенным. Для такого устройства напыление пленок обычно производится при расстояниях больше 30 мм, при которых искривлением поверхности мишени можно пренебречь. Также следует отметить, что влияние усиливается при увеличении глубины зоны эрозии мишени. Несмотря на то, что для магнетронных распылительных устройств небольшого диаметра влияние непланарности поверхности мишени на распыление можно не учитывать, это нельзя делать для промышленных устройств, продольные размеры которых могут быть более 200 мм. Там данный эффект при

рабочих расстояниях между мишенью и подложкой становится более выраженным, с учетом более глубокой зоны эрозии мишени.

Таким образом, рассмотрено влияние криволинейности распыляемой мишени в процессе ее выработки и показан алгоритм учета этой криволинейности для двухмерного случая. Для трехмерного случая с круглым магнетроном графики имеют незначительные изменения, с сохранением общей закономерности. При этом $r = \sqrt{H^2 + (x - x_1)^2 + (y - y_1)^2}$, а интегрирование проводится по площади распыления.

Список литературы

1. Simulation and Optimization of Film Thickness Uniformity in Physical Vapor Deposition / Wang, Ben [et al.] // COATINGS. – 2018. – Vol. 8, № 9. – P. 325.
2. Данилин, Б. С. Магнетронные распылительные системы / Б. С. Данилин, В. К. Сырчин. – М. : Радио и связь, 1982. – 72 с.
3. Проблемы физики, математики и техники / Д. А. Голосов [и др.]. – 2010. – Т. 2, № 3. – С. 62–67.

The influence of the sputtered target curvilinearity in the process of its sputtering deposition on the substrate was investigated and an algorithm for accounting this curvilinearity for the two-dimensional case was shown.

Шекелевский Вадим Владимирович, магистрант 2-го курса факультета радиотехники и электроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь, ivadim2703@gmail.com.

Научный руководитель – **Котов Дмитрий Анатольевич**, доцент кафедры микро- и нанoeлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, кандидат технических наук, Минск, Беларусь, kotov@bsuir.by.