

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

УДК 538.958

A. ARLOUSKI, A. NOVITSKY
CALCULATION OF THE GREEN'S FUNCTION
OF A PT-SYMMETRIC MEDIUM

The Green's function of a PT-symmetric medium consisting of two homogeneous semi-infinite bulks with complex dielectric permittivities was calculated. First, the Green's function of a homogeneous media was obtained. Then it was corrected with contributions due to the reflected and transmitted radiation at the interface.

I. Introduction

In [1] it was proposed that non-Hermitian extension of quantum mechanics was possible. To wit, it was conjectured that non-Hermitian Hamiltonians may possess real spectra. In [2] it was shown that PT symmetric Hamiltonians, i.e. Hamiltonians that are invariant under the simultaneous action of P (parity) and T (time-reversal) operators, will always have real eigenvalues, even if they are not Hermitian, and hence may be a useful tool in modeling various quantum systems. Also, an extension of PT-symmetry to optical systems was made, which, in the case of time-independent parameters of the system, reduces to the following restriction to the dielectric permittivity of the medium: $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon^*(-\mathbf{r})$. In this paper we demonstrate how the propagation of electromagnetic radiation in such a medium (and in any other medium, where ε and μ are scalars) can be treated using the method of the Green's function. Precisely, we will describe the propagation of radiation due to a unit dipole. Once the Green's function has been obtained, one can easily compute various useful quantities, like local density of states (LDOS), partial local density of states (PLDOS) and many others [3].

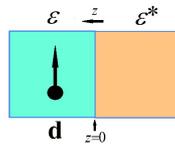


Figure 1 – A unit dipole with the electric dipole moment \mathbf{d} inside a PT-symmetric medium

II. Green's function for a homogeneous medium

From Maxwell's equations, assuming time-harmonic (proportional to $e^{-i\omega t}$) dependence of fields \mathbf{E}, \mathbf{H} and current \mathbf{j} , one can easily obtain the wave equation for the electric field vector:

$$(\nabla^2 \mu^{-1} \nabla^2 - k_0^2 \varepsilon) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi i \omega}{c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (0.1)$$

where $(\nabla^2)_{ij} \equiv \varepsilon_{ijk} \partial_k$, $k_0^2 \equiv \omega^2 / c^2$, ω is the angular frequency, ε is electric permittivity and μ is magnetic permeability. From now on we assume that $\mu = 1$ and $\varepsilon \in \mathbb{C}$. This equation can be solved with the help of the Green's function, which, by definition, satisfies the following equation:

$$(\nabla^2 \nabla^2 - k_0^2 \varepsilon) \bar{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1}, \quad (0.2)$$

where $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ is the delta function, $\mathbf{1}$ is the unit operator and the bar over G is used to remind that this is a tensor quantity. After the Green's function is known, one can obtain a solution to the equation (1.1) by convoluting it with the source current. In this paper we are particularly interested in radiation due to a unit dipole. Therefore, we will assume that [2] $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -i\omega \mathbf{d} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, the constant vector \mathbf{d} being the electric dipole moment of a unit dipole located at \mathbf{r}_0 . Considering this, the solution to the equation (1.1) will take the form:

$$\mathbf{E} = \frac{4\pi i \omega}{c^2} \int \bar{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = 4\pi k_0^2 \bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \mathbf{d}. \quad (0.3)$$

In order to find \bar{G}_0 , let's first consider equations that are to be satisfied by electromagnetic potentials \mathbf{A}, φ . Using Maxwell's equations and the well-known relations between fields and potentials [4] and choosing the gauge to be

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = -\frac{i\omega\epsilon}{c}\varphi, \quad (0.4)$$

we arrive at the following equation for the vector potential \mathbf{A} :

$$(\Delta + k_1^2)\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{c}\mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (0.5)$$

$k_1^2 \equiv k_0^2\epsilon$. In [4] it was shown that the Green's function of this equation is a scalar quantity, rather than a tensor, and can be expressed as follows:

$$g_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(ik_1R)}{4\pi R}, \quad (0.6)$$

where $R \equiv |\mathbf{R}| \equiv |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. The solution to (1.5) then reads:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi i\omega}{c}\mathbf{d}g_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0). \quad (0.7)$$

If we take the gradient of both sides of (1.4), express $\nabla\varphi$ in terms of \mathbf{A} and use the relation between \mathbf{E} and the potentials, we will arrive at the following equation:

$$\mathbf{E} = 4\pi k_0^2 \left(\mathbf{1} + \frac{1}{k_1^2} \nabla \otimes \nabla \right) g_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \mathbf{d}, \quad (0.8)$$

where $\nabla \otimes \nabla$ is, in Cartesian basis, a matrix of second derivatives: $(\nabla \otimes \nabla)_{ij} = \partial_i \partial_j$. Finally, comparing (1.8) with (1.3), we conclude that

$$\bar{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left(\mathbf{1} + \frac{1}{k_1^2} \nabla \otimes \nabla \right) g_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (0.9)$$

This equation is the solution to (1.2) and can be used to compute various quantities. However, since we are also concerned with the reflected and transmitted radiation, it is convenient to express g_0 and \bar{G}_0 as a superposition of plane waves, i.e. take the Fourier transform of these quantities. That will enable us to apply the Fresnel coefficients later on. Using the Weyl identity [4], we obtain:

$$\frac{\exp(ik_1R)}{4\pi R} = \frac{i}{8\pi^2} \iint dk_x dk_y \frac{1}{k_z} \exp(\mathbf{k}_\perp \mathbf{R}_\perp + k_z |z - z'|), \quad (0.10)$$

where $\mathbf{k}_\perp \equiv k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}$ (analogously for \mathbf{R}_\perp), and $k_z = \sqrt{k_1^2 - k_x^2 - k_y^2}$. After evaluating the action of $\nabla \otimes \nabla$ on g_0 , we finally get:

$$\bar{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\hat{\mathbf{z}} \otimes \hat{\mathbf{z}} \frac{\delta(\mathbf{R})}{k_1^2} + \frac{i}{8\pi^2} \iint d^2\mathbf{k}_\perp \frac{1}{k_z} \left(\mathbf{1} - \frac{\mathbf{k} \otimes \mathbf{k}}{k_1^2} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad z > z' \quad (0.11)$$

and for $z < z'$ we have to replace \mathbf{k} with \mathbf{K} , where $\mathbf{K} \equiv k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}} - k_z \hat{\mathbf{z}}$. The necessity of considering two cases lies in the fact that we have to choose the correct sign for k_z so that the amplitudes of waves go to zero at infinity. Expression (1.11) is our starting point in considering reflected and transmitted waves.

III. Green's function in the presence of an interface

In order to apply the Fresnel coefficients, we first have to split the superposition of plane waves (1.13) into TE- and TM-polarized modes. To that end we introduce two vectors: $\hat{\mathbf{e}} \equiv \mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}} / |\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}|$ (TE mode) and $\hat{\mathbf{h}} \equiv \hat{\mathbf{e}} \times \mathbf{k} / k_1$ (TM mode). These vectors, along with \mathbf{k} (or \mathbf{K}) form an orthonormal basis. Hence, the unit operator may be expanded as $\mathbf{1} = \hat{\mathbf{e}} \otimes \hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{h}} \otimes \hat{\mathbf{h}} + \mathbf{k} \otimes \mathbf{k} / k^2$ (the completeness relation). Inserting this into (1.11), we obtain:

$$\bar{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\hat{\mathbf{z}} \otimes \hat{\mathbf{z}} \frac{\delta(\mathbf{R})}{k_1^2} + \frac{i}{8\pi^2} \iint d^2\mathbf{k}_\perp \frac{1}{k_z} (\hat{\mathbf{e}} \otimes \hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{h}} \otimes \hat{\mathbf{h}}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad z > z', \quad (0.12)$$

and similarly for $z < z'$, but only $\hat{\mathbf{h}} \rightarrow 1/k_1 \hat{\mathbf{e}} \times \mathbf{K}$. The Fresnel coefficients have the following form:

$$R^{TM} = \frac{\varepsilon_2 k_{1z} - \varepsilon_1 k_{2z}}{\varepsilon_2 k_{1z} + \varepsilon_1 k_{2z}}, \quad T^{TM} = \frac{2\varepsilon_2 k_{2z}}{\varepsilon_2 k_{1z} + \varepsilon_1 k_{2z}}, \quad R^{TE} = \frac{\mu_2 k_{1z} - \mu_1 k_{2z}}{\mu_2 k_{1z} + \mu_1 k_{2z}}, \quad T^{TE} = \frac{2\mu_2 k_{2z}}{\mu_2 k_{1z} + \mu_1 k_{2z}}. \quad (0.13)$$

The algorithm to obtain solution to our problem is as follows: 1) apply the coefficients (1.13) to TE and TM modes in (1.12) in order to obtain the amplitudes of waves; 2) apply boundary conditions (continuity of electric and magnetic fields across the interface). Detailed calculations are quite long and tedious and are presented in detail in [5]. Here we only summarize the result:



where the subscripts R and T indicate reflected and transmitted parts respectively:

$$G_{xx(y)}^R = -\frac{1}{2} g_1^R \pm \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) - (y - y')^2 \right) g_2^R; \quad G_{xy}^R = G_{yx}^R = (x - x')(y - y') g_2^R;$$

$$G_{xz}^R = -G_{zx}^R = -i(x - x') g_4^R; \quad G_{yz}^R = -G_{zy}^R = -i(x - x') g_4^R; \quad G_{xx}^T = \frac{1}{2} g_1^T - \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) - (y - y')^2 \right) g_2^T;$$

$$G_{yy}^T = \frac{1}{2} g_1^T + \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) - (y - y')^2 \right) g_2^T; \quad G_{zz}^T = g_3^T; \quad G_{xy}^T = -(x - x')(y - y') g_2^T;$$

$$G_{xz}^T = g_4^T / g_5^T G_{zx}^T = i(x - x'); \quad G_{yz}^T = g_4^T / g_5^T G_{zy}^T = i(y - y'),$$

where g^R and g^T , are the so-called Sommerfeld integrals, some of which cannot be solved analytically and whose exact form is given in [5]. The formulas above give the solution to the problem in question and can be applied to any medium, where ε, μ are scalars. The peculiarity of PT-symmetric media lies in the fact that, according to (1.15), both real and imaginary parts of the Green's function tend to infinity as we approach the location of the source. Thus, any quantity, calculation of which requires the evaluation of \bar{G} at the location of the source cannot be applied in this case.

IV. Conclusion

The Green's function of a PT-symmetric medium, with corrections due to reflection and transmittance, was calculated using Maxwell's equations and relations between electromagnetic field and potentials. We were able to derive dyadic Green's function \bar{G} , its spectral representation, and apply the Fresnel coefficients to obtain the final result, which can be used in various applications that concern the propagation of radiation due to a unit dipole.

References

1. Bender, C. M. Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT Symmetry / C. M. Bender, S. Boettcher // Physical Review Letters. – 1998. – Vol. 80, № 24. – P. 5243–5246.
2. Zyablovsky A. A. [et al.] // Phys.-Usp. – 2014. – Vol. 57. – P. 1063.
3. Barnes L. William [et al.] // J. Opt. – 2020. – Vol. 22. – P. 73501.
4. Novotny, L. Principles of Nano-Optics / L. Novotny, B. Hecht. – Cambridge University Press, 2012.
5. Cho, M. H. Efficient and Accurate Computation of Electric Field Dyadic Green's Function in Layered Media. / M. H. Cho, W. Cai // J Sci Comput. – 2017. – Vol. 71. – P. 1319–1350.

Была рассчитана функция Грина РТ-симметричной среды, состоящей из двух полубесконечных однородных частей с комплексными диэлектрическими проницаемостями. Сначала была получена функция Грина для однородной среды. Затем она была скорректирована с учетом вкладов, обусловленных отраженной и прошедшей частями излучения.

Aliaksandr Arlouski, 4th year student, Department of Physics, Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus, fiz.orlovski@bsu.by.

Scientific advisor – *Andrey Novitsky*, Head of the Department of Physical Optics and Applied Informatics, Faculty of Physics, Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus, andreynovitsky@gmail.com.

УДК 621.382.333.3

B. O. JABBAROVA, K. R. PAYZULLAEVA

EFFECT OF FinFET TRANSISTOR CHANNEL SHAPE ON SELF-HEATING EFFECT

We study the impact of channel shape, back oxide, and gate oxide on the self-heating performance in nanoscale FinFET is studied through numerical simulation. The role of back oxide and gate oxide layers in setting the channel temperature is compared. Simulation results show that in the case of hafnium oxide (HfO₂) as the gate oxide and silicon dioxide (SiO₂) as the back oxide, the main role in setting the channel temperature corresponds to the base width of the channel that is in contact with the back oxide layer.

It is known that field-insulated gate transistors, including vertical triangular field-effect transistors (FinFET), experience various degradation effects, including increased leakage currents, when their dimensions reach the nanoscale. To eliminate this effect, it has been proposed to make these transistors based on silicon-on-insulator (SOI) structures.

But in nanoscale FinFET transistors based on SOI, the self-heating effect (SHE) occurs in the channel because the channel is not limited by the size of the semiconductor, but by the dielectric, and the thermal conductivity of the dielectric is significantly smaller than of the semiconductor [1]. That is why the development of methods of reduction of SHE is one of the urgent issues.

The present study examines how the shape of the transistor channel affects SHE in FinFET transistors based on SOI. For this purpose, SHE was studied in transistors with rectangular cross-sections, different widths, and heights, but equal cross-sectional areas (figure 1).

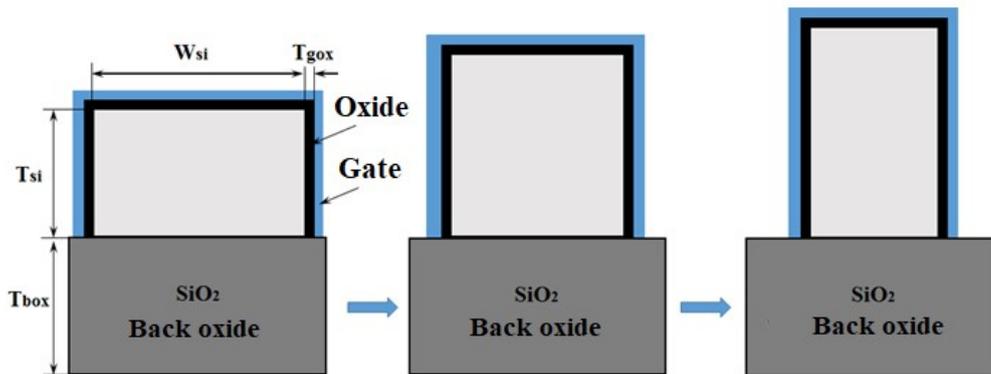


Figure 1 – Schematic of FinFETs with rectangle channel cross-section shape, the different ratio between width and thickness of the channel, and constant area of the cross-section

TCAD Sentaurus software was used to perform 3D modeling. Coupled diffusion-drift and thermodynamic transport models were used in the modeling. The length of the TiN gate (G) of the transistor is 10 nm, and the equivalent thickness of the HfO₂ layer under the gate is $t_{eff} = 1.2$ nm. The width of the back oxide layer SiO₂ is $W_{box} = 69.4$ nm, and the thickness is 145 nm. The transistor base is doped with boron to a concentration of $5 \cdot 10^{18}$ cm⁻³. In the modeling, the transistor channel width $W_{si} = 22$ nm to 9 nm and the thickness $T_{si} = 9$ nm to 22 nm, respectively, were seen. In the modeling, the relationship between the temperature in the center of the transistor channel and the change in the channel shape, that is, the ratio of channel height to width T_{si}/W_{si} (Fig. 2a), was studied. As can be seen from the figure, the channel temperature increases almost monotonically with the increase of the T_{si}/W_{si} ratio.

Such a temperature change can be explained by the diffusion of heat from the channel through the back and under-gate oxide layer. The formula for connecting the channel temperature to the thickness of the oxide layer at the limit (T_{ox}) is as follows [2; 3]

$$\Delta T = \frac{(P_t \cdot T_{ox})}{K_b \cdot A}, \quad (1)$$

where P_t stands for the heat power generated by the current in the channel, K_b is the heat conductance of the oxide layer, and A represents the area of the contact surface between the oxide layer and the channel. To compare the heat dissipation through the back oxide and gate oxide layers, we used equation (1) for both gate oxide and back oxide layers. From equation (1), the gate oxide is justified, because the physical mechanism of heat dissipation through the back oxide and gate oxide are the same. For the back oxide layer $A = W_{si} \cdot L$ and gate oxide layer $A = (2T_{si} + W_{si}) \cdot L$, where L stands for the channel length.

Therefore, when using the independent heat dissipation through the oxide layers, the temperature changes associated with the heat dissipation through the back oxide layer and gate oxide layer, normalized to the heat power, can be written from (1) using the following formulas:

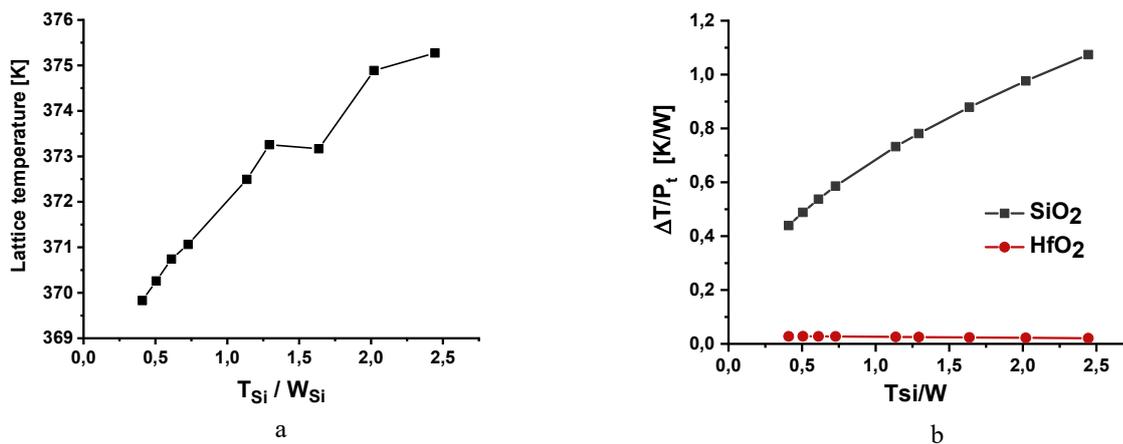


Figure 2 – a) connection of the temperature in the center of the channel to T_{Si}/W_{Si} ;
b) bonding of $\Delta T/P_t$ to T_{Si}/W_{Si} for the back oxide layer and sub-gate oxide layer

$$\frac{\Delta T}{P_t} = \frac{T_{box}}{K_b \cdot W_{Si} \cdot L} \quad (2)$$

$$\text{and} \quad \frac{\Delta T}{P_t} = \frac{T_{gox}}{K_b \cdot (2 \cdot T_{Si} + W_{Si}) \cdot L} \quad (3)$$

where T_{box} is the thickness of the back oxide layer, and T_{gox} is the thickness of the oxide layer under the gate. Comparing the $\Delta T/P_t$ bonds to T_{Si}/W_{Si} (Figure 2b) and (Figure 2a) for the two heat dissipation mechanisms, it can be seen that the heat dissipation is mainly through the oxide layer.

References

1. Kumar, A. International Journal of Electronics and Communications / A. Kumar, A. Gupta, S. Rai. – 2018. – doi:10.1016/j.aee.2018.08.023.
2. Physical origin of negative differential resistance in SOI transistors / L. J. McDaid [et al.] // Electron. Lett. – 1989. – Vol. 25 (13). – P. 827–828.
3. Impact of the channel shape, back oxide and gate oxide layers on self-heating in nanoscale / A. E. Atamuratov [et al.] // JL FinFET Phys. Chem. Math. – 2022. – Vol. 13 (2). – P. 148–155.

Изучается влияние формы канала, заднего оксида и оксида затвора на характеристики самонагрева в наноразмерных FinFET с помощью численного моделирования. Сравнивается роль заднего оксидного слоя и оксидного слоя затвора в установлении температуры канала. Результаты моделирования показывают, что в случае оксида гафния (HfO₂) в качестве затворного оксида и диоксида кремния (SiO₂) – в качестве заднего оксида, основную роль в задании температуры канала играет ширина основания канала, контактирующего с задним оксидным слоем.

Jabbarova Bahor, Senior teacher, Department of Physics, Urgench State University, Uzbekistan, bahorbahor1989@mail.ru.

Payzullaeva Khilola, MS student in Physics, Department of Physics, Urgench State University, Uzbekistan.

Scientific advisor – *Atamuratov Atabek*, Associate Professor in Physics Department, Urgench State University, Uzbekistan, atabek.atamuratov@urdu.uz.

УДК 537.539

А. С. АШИРОВ, М. К. КАРИМОВ, М. У. ОТАБАЕВ, У. О. КУТЛИЕВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И УГЛОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ Ar⁺, РАССЕЯННЫХ С ПОВЕРХНОСТИ Al₂O₃

Исследовано энергетическое распределение рассеянных ионов Ar⁺ с поверхности Al₂O₃(001)<110> при углах скольжения $\psi = 3^\circ, 7^\circ$ и 11° и в диапазоне начальной энергии $E_0 = 1\text{--}5$ кэВ. Получены и проанализированы энергетические распределения рассеянных ионов. Установлено, что при малых углах скольжения наблюдаются пики энергетического распределения, образованные за счет ионов, рассеянных от поверхностных атомных цепочек. С увеличением энергии падающих частиц также образуются пики рассеянных ионов от полуканала, и они расположены в низкоэнергетической части энергетического распределения.

Взаимодействие ионов с твердым телом является одним из самостоятельных разделов фундаментальной физики. Это взаимодействие в результате может приводить к изменению физических свойств твердых тел и созданию материалов с заданными свойствами. В начале исследований рассеяния ионов поверхностями твердых тел, довольно трудным был путь к заключению о парности взаимодействия рассеивающегося иона с атомами твердого тела. Отражение первичных ионов, падающих на поверхность твердого тела, результат взаимодействия их с атомами решетки [1–3].

В области низких и средних энергий траектории сталкивающихся частиц определяются в первом приближении силами упругого взаимодействия атомов. Эти силы возникают из кулоновских сил взаимодействия ядер и электронных атомов и, следовательно, действуют на любом расстоянии между взаимодействующими частицами. Следовательно, для расчета траектории налетающего иона необходимо рассмотреть его взаимодействие в кристаллической решетке со всеми атомами одновременно, что весьма трудно. Но при не очень низких энергиях столкновения ион-атом могут рассматриваться как изолированные парные столкновения частиц.

Для дальнейшего развития математического моделирования процесса рассеяния ионов средних и малых энергий в широком интервале углов падения и рассеяния нами использованы закономерности столкновения двух тяжелых частиц. Итак, будем рассматривать рассеяние пучка ионов от поверхности монокристаллического образца на основе модели парных одно-, двух-, и т. д. многократных соударений.

В приближении парных столкновений основаны две базовые программы, при помощи которых моделируют широкий круг процессов, вызываемых бомбардировкой твердых тел ускоренными частицами – программа MARLOWE и программа TRIM. В основе обеих программ лежит практически один и тот же формализм. Различие между этими программами состоит в том, что первая исходно оперирует с кристаллическими мишенями, тогда как вторая – с аморфными. В программе MARLOWE [4] угол рассеяния определяют путем численного расчета классического интеграла рассеяния или с помощью предварительно рассчитанных и табулированных значений этих интегралов для потенциала Мольера [5]. В настоящей работе за основу берутся компьютерная программа, которая называется CSIRF, основанная на приближении парных столкновений, с модификацией блока построения атомов в связи с переходом с ГЦК кристалла на кристаллическую структуру Al_2O_3 (001)<110>. С помощью этой программы изучено скользящее рассеяние ионов инертных газов с выше упомянутой поверхностью.

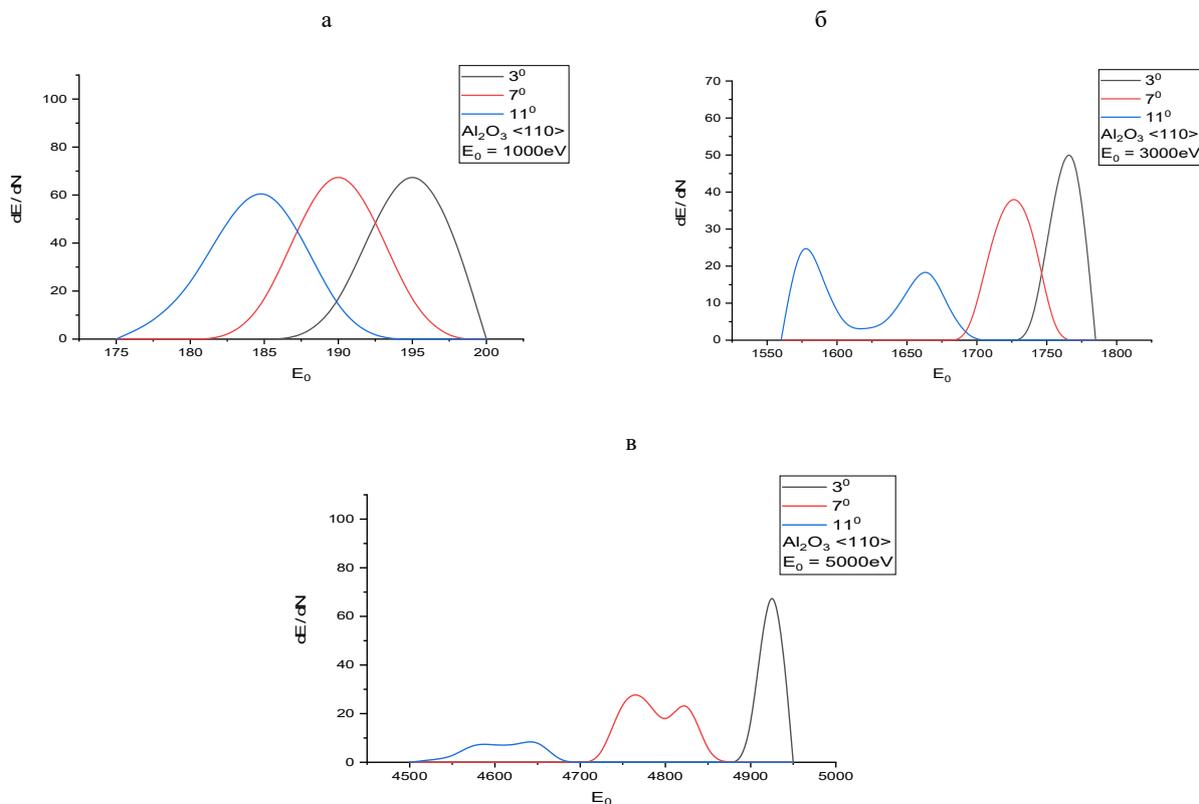


Рисунок 1 – Энергетическое распределения рассеянных ионов Ar^+ с поверхности Al_2O_3 (001)<110> при углах скольжения $\psi = 3^\circ$ (а), 7° (б) и 11° (в) и в диапазоне начальной энергии $E_0 = 1\text{--}5$ кэВ

На рисунке 1 представлено энергетическое распределение рассеянных ионов Ar^+ с поверхности $Al_2O_3(001)\langle 110 \rangle$ при углах скольжения $\psi = 3^\circ, 7^\circ$ и 11° и в диапазоне начальной энергии $E_0 = 1-5$ кэВ. Видно, что при $E_0 = 1$ кэВ образуется один пик во всех значениях угла падения, который относится к ионам рассеянным от поверхностных атомов цепочки (рисунок 1а).

При $E_0 = 3$ кэВ форма энергетического распределения изменяется при значении угле падения $\psi = 11^\circ$, то есть в этом значении угла падения в энергетической зависимости распределения рассеянных ионов образуется двух пиковая структура (рисунок 1б).

А при $\psi = 3^\circ$ и 7° наблюдается только пик поверхностной атомной цепочки.

При $E_0 = 5$ кэВ также можно наблюдать, что в значении угла падения $\psi = 3^\circ$ образуется только пик поверхностной атомной цепочки, а в $\psi = 7^\circ$ и 11° вместе с пиком поверхностной цепочки образуются пики полуканала (рисунок 1в).

Список литературы

1. Парилис, Э. С. Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела / Э. С. Парилис, Н. Ю. Тураев, Ф. Ф. Умаров, С. Л. Нижная. – Ташкент, 1987. – 212 с.
2. Atomic collisions on solid surfaces / E. S. Parilis [et al.]. – Amsterdam : North-Holland, 1993. – 664 p.
3. Машкова, Е. С. Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел / Е. С. Машкова, В. А. Молчанов. – М. : Атомиздат, 1980. – 256 с.
4. Robinson, M. T. MARLOWE Binary Collision Cascade Simulation Program / M. T. Robinson // Version 15b, A Guide for Users. – London, 2002. – 231 p.
5. Robinson, M. T. Computer Simulation Studies of High-Energy Collision Cascades / M. T. Robinson // Phys. Rev. – Amsterdam, 1992. – Vol. 67. – P. 396–400.

We have studied the energy distribution of scattered Ar^+ ions from the surface of $Al_2O_3(001)\langle 110 \rangle$ at glancing angles $\psi = 3^\circ, 7^\circ$ and 11° and in the range of initial energy $E_0 = 1-5$ keV. The energy distributions of scattered ions are obtained and analyzed. It has been established that at small slip angles, peaks in the energy distribution are observed, which are formed due to ions scattered from the surface atomic chains. With an increase in the energy of incident particles, peaks of scattered ions from the half-channel are also formed and it is located in the low-energy part of the energy distribution.

Аширов Атабек Салиевич, аспирант, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, atabek.ashirovs@gmail.com.

Каримов Мухторжон Каримбергенович, PhD, доцент кафедры физики, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, karimov_m_k@mail.ru.

Отабаев Мехрож Учкун угли, магистрант, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

Кутлиев Учкун Отобоевич, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

Научный руководитель – *Кутлиев Учкун Отобоевич*, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

УДК 535.391:621.376

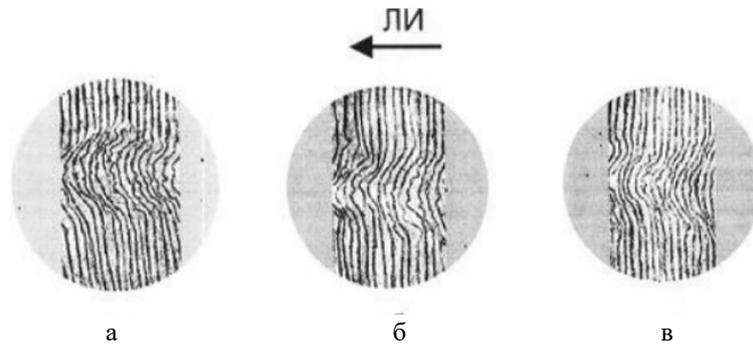
И. О. БОДАК

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ ПЛАЗМЕННОГО ФАКЕЛА ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА МЕТАЛЛЫ

Целью данной работы является разработка пакета MATLAB для подсчета интерферограмм, полученных в результате скоростной голографической киносъемки развития лазерного факела. Проведены улучшение полученной интерферограммы и подсчет концентрации электронов.

Явление образования и разлета плазмы при взаимодействии излучения сверхвысокой интенсивности с твердым телом называется плазменным факелом. Основными характеристиками плазмы следует считать ионную (электронную) температуру и концентрацию ионов (электронов).

В результате экспериментов были получены интерферограммы, зарегистрированных в различные моменты времени в ходе скоростной голографической киносъемки. Рисунок 1 наглядно иллюстрирует начальный этап развития лазерного факела.



При отрицательном потенциале мишени (а), без электрического поля (б) и при положительном потенциале мишени (в)

Рисунок 1 – Интерферограммы

Смещения интерференционных полос $\Delta k(x,y)$ на интерферограмме и изменение показателя преломления связаны между собой интегральным уравнением Абеля. Однако распределение $\Delta k(x,y)$ задается не аналитически, а в виде экспериментальных кривых, для решения удобно использовать численные методы. При этом осесимметричное распределение разбивается на m концентрических кольцевых зон, и интегрирование заменяется суммированием. Наиболее простым методом численного решения уравнения Абеля, который использовался для расчета поля показателя преломления в представленной работе, является метод ступенчатой аппроксимации, или метод Пирса.

Ручной метод обработки интерферограмм в общем случае предполагает выполнения ряда трудоемких шагов. Автоматизация метода с использованием возможностей пакета MATLAB и его расширений позволяет достичь положительного эффекта, заключающегося в значительной экономии времени и ресурсов, а также существенно повысить точность конечного результата.

Полученное в ходе эксперимента изображение интерферограммы считывается из соответствующего файла и помещается в массив данных MATLAB. Далее путем преобразования RGB составляющих пикселей оригинала в соответствующие им значения яркости и контрастности изображения. Для подавления шумов изображения фильтруется и сглаживается. По умолчанию используется сглаживающий фильтр Гаусса с заданным стандартным отклонением распределения. После изображение преобразуется в бинарное методом отсечения по порогу яркости. Пиксели результирующего бинарного изображения принимают значение 0 (черный цвет), если яркость соответствующих пикселей исходного изображения меньше заданного порога, и значения 1 (белый цвет), если яркость соответствующих пикселей исходного изображения больше либо равна заданному порогу.

Выбор отдельной полосы на интерферограмме осуществляется путем указания курсора мыши любой точки, находящейся в области полосы. После указания программе интересующей полосы Ю происходит обнаружение и построение кривой, проходящей через центр полосы и тем самым описывающей ее положение на интерферограмме.

Для получения численных значений смещение полосы от невозмущенного состояния, необходимо получить прямую описывающую положение полосы в данном состоянии. Значение смещения в пикселях определяется как длина перпендикуляра, опущенного из одной точки кривой, описывающей текущее положение полосы к прямой, описывающей положение полосы в невозмущенном состоянии.

Следующим этапом является запуск подпрограммы `Parse_method.m`, в которой прописан математический алгоритм расчетов требуемых параметров. Затем полученные в результате расчетов данные показателя преломления записываются в матрицы данных для последующей обработки, строятся таблицы и графики и экспортируются в файл Excel.

На последнем этапе обрабатываются сохраненные массивы данных для визуализации картины экспериментов. Все сохраненные результаты могут быть объединены и показаны в виде таблицы, диаграмм, графиков, двух или трехмерных моделей. Самым наглядным являются трехмерные модели, построенные по записанным данным интерферограмм.

Таким образом, положительный эффект предложенной методики обработки интерферограмм с помощью пакета и его приложений заключается в значительной экономии ресурсов и времени, выделяемых на обработку данных экспериментов, при этом получается существенно повысить точность конечного результата. Особенно это ощутимо при обработке записи скоростной кинофотосъемки, при которой требуется одновременная обработка десятков отдельных кадров. Использование пакета MATLAB позволяет не только обрабатывать изображение интерферограмм с целью устранения шумов и неоднородностей, т. е. повышать их качество, но и производить расчеты параметров исследуемых процессов, визуализировать результаты с возможностью моделирования картины быстропротекающих процессов.

Список литературы

1. Васильев, С. В. Влияние электрического поля на приповерхностные процессы при лазерной обработке материалов / С. В. Васильев, А. Ю. Иванов // Квантовая электроника. – 2012. – Т. 42, № 2. – С. 170–174.
2. Иванов, А. Ю. Акустическая диагностика процесса лазерной обработки материалов : моногр. / А. Ю. Иванов. – Гродно : ГрГУ, 2007. – 208 с.
3. Автоматизация обработки результатов скоростной голографической кино съемки / С. В. Васильев, И. К. Губаревич, А. Ю. Иванов, Е. О. Семенчук, Т. А. Ситкевич // Весн. Гродзен. дзярж. ун-та імя Янкі Купалы. Сер. 2, Фізіка. Матэматыка. Інфарматыка. – 2022. – № 1. – С. 36–47.
4. Островский, Ю. И. Голографическая интерферометрия : моногр. / Ю. И. Островский, М. М. Бутусов, Г. В. Островская. – М. : Наука, 1977. – 336 с.

The purpose of this work is to develop a MATLAB package for counting interferograms obtained as a result of high-speed holographic filming of the development of a laser torch. Improvement of the received interferogram and calculation of the electron concentration.

Бодак Ирина Олеговна, студентка 4-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, ira.semyaninova0@mail.ru.

Научный руководитель – *Иванов Алексей Юрьевич*, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, a.ivanov@grsu.by.

УДК 004.896

М. А. БОЧКО

ГИПОТЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО РОБОТА

Определены гипотетическая структура интеллектуального робота, его сущность и основные задачи. Рассмотрены отличительные черты интеллектуального робота и его архитектура.

Развитие интеллектуальных роботов является одним из важнейших технологических трендов нашего времени. Современная действительность требует внедрения этих систем во все сферы деятельности человека и имеет огромный потенциал для изменения нашей жизни, что делает возможным создание новых продуктов и услуг, которые раньше были невозможны.

Универсальность роботов предполагает возможность выполнения ими целенаправленных действий, которые требуют определенных интеллектуальных способностей. Это открывает широкие возможности использования роботов в качестве как основного технологического оборудования (на сборке, сварке, окраске и т. п.), так и вспомогательного – для замены рабочих, занятых на обслуживании такого оборудования [1].

Сущность и основные задачи интеллектуального робота. Интеллектуальные роботы – это роботы, которые могут распознавать объекты и их состояние и на основе такого распознавания автоматически определять действия, которые им следует выполнить [2].

Основные задачи интеллектуального робота:

1. Разработка и реализация алгоритмов и методов, позволяющих ему адаптироваться к изменяющейся среде и задачам.
2. Обработка и анализ данных, получаемых от различных датчиков и сенсоров, для принятия решений и управления своими действиями.
3. Интерактивное взаимодействие с окружающим миром и пользователями, в том числе через голосовые и текстовые интерфейсы.
4. Решение сложных задач, таких как распознавание образов, планирование действий, оптимизация ресурсов и т. д.
5. Самообучение и саморазвитие, позволяющие роботу улучшать свои навыки и способности в процессе работы.
6. Интеграция с другими системами и устройствами, для реализации сложных проектов и решения задач в различных областях, например, в медицине, промышленности, транспорте и т. д.

Таким образом, основным предназначением интеллектуального робота является автоматизация сложных и рутинных процессов, а также решение задач, требующих высокой степени интеллектуальной работы, обеспечение безопасности для человека и адаптивности.

Отличительные черты интеллектуального робота. Интеллектуальный робот обладает следующими отличительными чертами:

1. Способность к обучению. Робот может адаптироваться к новой информации и обучаться новым навыкам и задачам.
2. Способность к анализу данных. Робот может обрабатывать большие объемы данных и извлекать из них полезную информацию.
3. Способность к принятию решений. Робот может анализировать информацию и принимать решения на основе своих знаний и опыта.
4. Способность к коммуникации. Робот может взаимодействовать с людьми и другими роботами, используя различные формы коммуникации.
5. Умение работать в условиях неопределенности. Робот может адаптироваться к изменяющимся условиям и принимать решения на основе неопределенной информации.
6. Способность к самообучению. Робот может анализировать свои ошибки и улучшать свои навыки, не требуя вмешательства человека.
7. Способность к самоорганизации. Робот может оптимизировать свою работу и ресурсы, чтобы достичь максимальной эффективности и производительности.

Архитектура интеллектуального робота представляет собой комплексную систему, которая включает в себя несколько уровней обработки информации и управления действиями робота. Основными компонентами архитектуры интеллектуальных роботов являются [3]:

1. *Исполнительные органы* – это манипуляторы, ходовая часть и др. устройства, с помощью которых робот может воздействовать на окружающие его предметы. Причем по своей структуре это сложные технические устройства, имеющие в своем составе сервоприводы, мехатронные части, датчики, системы управления. По аналогии с живыми организмами это руки и ноги робота.

2. *Датчики* – это устройства, которые измеряют физические величины, такие как температура, давление, освещенность, влажность, ускорение, магнитное или электромагнитное поле и т. д., и преобразует их в электрический сигнал, который может быть обработан и использован для контроля и управления различными системами и устройствами.

3. *Система управления* – это мозг робота, который должен принимать информацию от датчиков и управлять исполнительными органами. Эта часть робота обычно реализуется программными средствами. В состав системы управления интеллектуального робота должны входить следующие компоненты:

3.1. *Модель мира* – отражает состояние окружающего робота мира в терминах, удобных для хранения и обработки. Модель мира выполняет функцию запоминания состояния объектов в мире и их свойств.

3.2. *Система распознавания* – сюда входят системы распознавания изображений, распознавания речи и т. п. Задачей системы распознавания является идентификация, т. е. «узнавание» окружающих робота предметов, их положения в пространстве. В результате работы компонентов системы распознавания строится модель мира.

3.3. *Система планирования действий* – осуществляет «виртуальное» преобразование модели мира с целью получения какого-нибудь действия. При этом обычно проверяется достижимость поставленной цели. Результатом работы планирования действий является построение планов, т. е. последовательностей элементарных действий.

3.4. *Система выполнения действий* – пытается выполнить запланированные действия, подавая команды на исполнительные устройства и контролируя при этом процесс выполнения. Если выполнение элементарного действия оказывается невозможным, то весь процесс прерывается и должно быть выполнено новое (или частично новое) планирование.

3.5. *Система управления целями* – определяет иерархию, т. е. значимость и порядок достижения поставленных целей.

Определение гипотетической структуры интеллектуального робота. Гипотетическая структура интеллектуального робота является предположительной моделью того, как должен быть организован и функционировать робот, чтобы он мог проявлять интеллектуальные способности. Такая структура может включать в себя различные компоненты. Пример блок-схемы гипотетической структуры интеллектуального робота изображен на рисунке 1.



Рисунок 1 – Пример блок-схемы гипотетической структуры интеллектуального робота

1. *Человек-оператор.* Обеспечивает контроль за функционированием робота и его техническим обслуживанием.

2. *Интеллектуальный интерфейс.* Устройство, обеспечивающее канал связи между роботом и оператором.

Сложные системы управления предоставляют пользователю более комфортные условия работы на языке управления роботом. Он представляет собой универсальный язык программирования, который расширен командами задания движения и считывания показаний датчиков. Основным преимуществом использования текстуального описания действий манипулятора является возможность создавать новые алгоритмы движений и накапливать их в виде подпрограмм. Это существенно упрощает разработку программ технологических движений [4].

3. *База данных.* Является динамической, обеспечивает хранение и обмен накопленной информацией.

4. *Блок анализа данных.* Систематизирует, обрабатывает и подготавливает данные для дальнейшего принятия решений.

5. *Блок моделирования внешней среды.* Принимает информацию, полученную от устройств сбора данных. И обменивается информацией с блоком анализа данных. На основе данных производит моделирование внешней среды.

6. *Блок принятия решений.* Обменивается информацией с блоком анализа данных, даёт команду исполнительным механизмам интеллектуального робота или выполняет команду оператора.

7. *Устройства сбора данных.* Представляет собой совокупность различных датчиков, собирающих информацию об окружающей среде. Устройства сбора данных интеллектуального робота могут включать в себя различные типы сенсоров, которые позволяют роботу получать информацию о своей окружающей среде и взаимодействовать с ней. Некоторые из этих сенсоров могут включать в себя:

7.1. *Камеры и видеоканалы* – позволяют роботу видеть и распознавать объекты и людей в своей окружающей среде.

7.2. *Инфракрасные датчики* – используются для обнаружения тепловых источников и измерения температуры.

7.3. *Радары и лидары* – позволяют роботу измерять расстояния до объектов и создавать 3D-изображения окружающей среды.

7.4. *Датчики силы и давления* – используются для измерения сил, которые робот может применять при выполнении задач.

7.5. *Акселерометры и гироскопы* – позволяют роботу измерять свою ориентацию и движение в пространстве.

7.6. *Микрофоны* – используются для распознавания звуков и голосовых команд.

7.7. *Сенсоры прикосновения* – позволяют роботу ощущать соприкосновение с объектами и реагировать на него.

7.8. *Сенсоры запаха* – используются для обнаружения и распознавания запахов.

7.9. *Сенсоры света* – позволяют роботу измерять яркость и цвет света.

8. *Исполнительные механизмы.* Представляют собой силовые элементы робота, которые отвечают за передвижение и выполнение заданных действий. Исполнительные механизмы могут включать в себя различные элементы, такие как моторы, приводы, гидравлические и пневматические актуаторы, мотор, колёса и т. д.

9. *Внешняя среда.* Среда, в которой робот выполняет задачи.

В целом, гипотетическая структура интеллектуального робота должна обеспечивать ему способность воспринимать, анализировать, обрабатывать и использовать информацию из окружающей среды для решения задач и достижения целей.

Интеллектуальный робот должен в значительной мере обладать способностью адаптации к окружающей обстановке. В этом, разумеется, важную роль играют сенсорные устройства, воспринимающие внешнюю информацию [2].

Области применения интеллектуальных роботов весьма обширны. Они могут использоваться как в промышленности, так и в области научных исследований. В зависимости от целевого назначения роботов требуются самые разнообразные сенсорные и исполнительные устройства [2].

Список литературы

1. Юревич, Е. И. Основы робототехники : учеб. пособие [Электронный ресурс] / Е. И. Юревич. – 2007. – Режим доступа: <https://elibr.spbstu.ru/dl/325.pdf/download/325.pdf>. – Дата доступа: 08.03.2023.
2. Пособие по применению промышленных роботов / под ред. Кацухико Нода ; пер. с япон. В. В. Потуловой ; под ред. П. Н. Белянина, Б. Ш. Розина, В. Н. Даниелевского. – М. : Мир, 1975.
3. Добрынин, Д. А. Интеллектуальные роботы вчера, сегодня, завтра / Д. А. Добрынин // Десятая национальная конференция по искусственному интеллекту с международным участием КИИ-2006 (25–28 сент. 2006 г., Обнинск) : тр. конф. В 3 т. Т. 1. – М. : Физматлит, 2006. – 310 с.
4. Богуславский, А. А. Модели и алгоритмы для интеллектуальных систем управления [Электронный ресурс] / А. А. Богуславский, Г. К. Боровин, В. А. Карташев. – М. : ИПМ им. М. В. Келдыша. – 2019. – Режим доступа: <https://keldysh.ru/e-biblio/boguslav>. – Дата доступа: 08.03.2023.

Determination of the hypothetical structure of an intelligent robot. The essence and main tasks of an intelligent robot. Distinctive features of an intelligent robot. The architecture of an intelligent robot. Determination of the hypothetical structure of an intelligent robot.

Бочко Матвей Андреевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, matvey.bochko.2003@mail.ru.

Научный руководитель – *Волчок Валерий Александрович*, кандидат технических наук, доцент кафедры электротехники и электроники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь.

УДК 519.687

А. Ю. БРЕЗИН

TELEGRAM-БОТ-ИНФОРМАТОР

Рассмотрены история создания, преимущества и основные применения Telegram-ботов в повседневной жизни, а также пример созданного автором тестового бота.

На сегодняшний день ИТ-индустрия находится на революционном этапе своего развития. Это связано с тем, что роль ИТ-отрасли кардинально изменилась: из обслуживающей она превратилась в стратегическую. По данным исследовательской консалтинговой компании IDC (InternationalDataCorporation), масштабы отрасли увеличиваются из года в год. Происходит цифровизация не только экономики, производственных и рабочих процессов, но и остальных аспектов жизни людей. ИТ-компании стали источниками возникновения принципиально новых видов бизнеса и новых взглядов на методы корпоративного управления, на организацию компаний, действующих на глобальных рынках. Обеспечивая доход и нанимая работников с относительно высокой средней заработной платой, ИТ-сектор также помогает другим секторам повышать производительность, работать более эффективно и быстрее внедрять инновации.

Согласно глобальному отчету Digital от января 2022 года население мира составляет 7,91 миллиарда. К началу 2022 года число пользователей мобильных устройств достигло 5,31 миллиарда, прирост с начала

прошлого года составил 95 млн пользователей. Из них 4,95 миллиарда пользователей имеют доступ в интернет и с каждым годом число пользователей увеличивается, прирост с прошлым годом составил 192 миллиона пользователей. Из приведенных данных следует очевидное, что пользователям необходимо как-то общаться друг с другом, несмотря на расстояние между ними, в этой связи появилась необходимость реализации мгновенного обмена текстовыми сообщениями, аудиозаписями, фотографиями и другими мультимедиа между пользователями, и этим решением стали мессенджеры (от англ. *messenger* – курьер, посланник) [1].

Первым мессенджером в мире стал EMISARI (Emergency Management Information Systems and Reference Index – Информационные системы управления чрезвычайными ситуациями и справочный индекс). Его создал физик и математик Мюррей Турофф для правительства США в 1971 году. С помощью EMISARI государственные служащие могли быстро связываться друг с другом. Они подключались к сети по междугородним телефонным линиям через телетайпы – электромеханические печатные машины. Так власти США могли быстро реагировать на кризисные ситуации в стране, но обычные граждане EMISARI не использовали. Первым мессенджером, доступным для гражданских лиц, стал Internet Relay Chat. Его разработал финский программист Яркко Ойкаринен в 1988 году. Программа была популярна в Европе и Северной Америке – в 2009 году на серверах общалось более 500 тыс. пользователей.

С каждым годом количество пользователей мессенджеров увеличивалось, и они обрели небывалую популярность на различных операционных системах, таких как IOS, Android или Windows. Одними из самых популярных мессенджеров являются WhatsApp (2000 миллионов пользователей), Weixin / WeChat (1263 миллионов пользователей), Facebook Messenger (988 миллионов пользователей), QQ (574 миллионов пользователей), Snapchat (557 миллионов пользователей), Telegram (550 миллионов пользователей). В связи с большим количеством пользователей многие компании, как мелкие, так и крупные, переходят в мессенджеры. Это связано с попытками увеличить лояльность клиентов. Многим пользователям удобнее работа через мессенджеры, а не сайты компаний. В этой связи появилась необходимость реализовать своевременную поддержку пользователя, но в такой сфере человеческий труд экономически не выгоден, поэтому и были разработаны боты [2].

Бот – сокращенное от «робот». Так называют автономную программу, которая работает в интернете и выполняет за людей некоторые задачи. Тем самым, получается освободить человеческие ресурсы там, где их недостаточно или их использование невыгодно. Например, бот может быть консультантом. Его интегрируют в чаты и сайты для создания там активности и ответов на простые вопросы. Если он не справится с поставленной задачей, то переведет диалог на реального человека из службы поддержки. Благодаря этому удастся снизить нагрузку на реальных специалистов, уменьшить поток нецелевых обращений к ним.

Наиболее подходящий язык программирования для разработки телеграмм бота – Python, так как он весьма прост в изучении, дружелюбен к новичкам и имеет множество библиотек. Одной из наиболее востребованных библиотек является Python-telegram-bot – одна из первых библиотек для создания ботов, которая предоставляет чистый интерфейс Python для Telegram Bot API (программный интерфейс, позволяющий программировать собственного бота, API включает в себя объекты и команды, предназначенные для установки поведения бота Telegram). В дополнение к чистой реализации API, эта библиотека содержит ряд высокоуровневых классов, которые делают разработку ботов легкой и понятной [4].

Главной целью при разработке телеграмм бота было создание тестового варианта «бота-информатора». При разработке были сформулированы основные требования к боту – это возможность запуска на локальном сервере для отладки, тестирования и добавлений функций. Так как это «бот-информатор», то его основная задача заключается в предоставлении информации пользователю по связанному с ним сайту. Разработанный бот @NewTestCreatureBot позволяет переходить на сайт, записывать обращения пользователя для технической поддержки в случае сбоя сайта. Также реализована возможность добавления копии экрана к обращению для фиксации ошибок в работе сайта. В дальнейшем планируется реализация освещения новостей в законодательстве Беларуси, системы помощи в предоставлении справочной информации, а также обеспечение возможности осуществления транзакций для оплаты дополнительных услуг.

Список литературы

1. ИТ рынок Республики Беларусь [Электронный ресурс] / БИК Рейтингс. – 2020. – Режим доступа: <https://bikratings.by/wp-content/uploads/2020/12/it-rynok-respubliki-belarus-2.pdf>. – Дата доступа: 15.02.2023.
2. Почему мессенджеры стали популярнее соцсетей, и какое будущее их ждет [Электронный ресурс] // Тренды. – 2020. – Режим доступа: <https://trends.rbc.ru/trends/futurology/6393305a9a79471755323a44>. – Дата доступа: 25.02.2023.

3. Most popular global mobile messaging apps 2022 [Электронный ресурс] / Statista. – 2005. – Режим доступа: <https://www.statista.com/statistics/258749/most-popular-global-mobile-messenger-apps>. – Дата доступа: 01.03.2023.

4. Python-telegram-bot [Электронный ресурс] / Pypi.org. – 2015. – Режим доступа: <https://pypi.org/project/python-telegram-bot>. – Дата доступа: 03.03.2023.

This article discusses the history of the creation, advantages and main applications of telegram bots in everyday life and example of a test bot, created by the author.

Брезин Александр Юрьевич, студент 4-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, sasha.brezin7262@gmail.com.

Научный руководитель – *Герман Андрей Евгеньевич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры электротехники и электроники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь.

УДК 656.073.76:658.78.06:519.876.5

А. В. БУДЬКО, Е. А. СТАНИСЛАВОВИЧ, А. Д. ВИЛЬЧИК

РЕАЛИЗАЦИЯ ВОЗМОЖНОСТЕЙ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ТЕХНИЧЕСКОМ ОБСЛУЖИВАНИИ ИЗДЕЛИЙ ТРАНСПОРТНО-ЛОГИСТИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ¹

С использованием средств компьютерного моделирования и технологий аддитивного производства разработаны оригинальные конструкции изделий, широко используемых на предприятиях, осуществляющих транспортно-логистическую деятельность: полимерной тары, применяемой для транспортировки и хранения в складских помещениях жидкофазных сред, и индикаторной пломбы, предохраняющей перевозимые грузы от несанкционированного доступа. Оптимизацию разработанных дизайнерских решений осуществляли методом конечных элементов, функциональное прототипирование – с применением установок для 3d-печати.

Одним из важнейших технологических элементов логистических процессов при транспортировке и хранении грузов является обеспечение их сохранности, достижимое за счет использования удобных для перевозки и хранения конструкций тары и специальных средств индикации несанкционированного доступа к этим грузам [1; 2].

Для реализации эффективного функционирования складской логистики на промышленных предприятиях машиностроительного комплекса и химической промышленности широко используют различные виды полимерной тары для перевозки и хранения жидких и твердых сыпучих материалов, обладающие улучшенными параметрами надежности, безопасности и эргономических характеристик [3].

В случаях осуществления мультимодальных перевозок для сохранности сборных грузов требуется применение специальных средств пломбирования в месте отправки груза с дальнейшим контролем внешнего вмешательства на каждой стадии перемещения [4; 5]. С этой целью используют различные виды индикаторных пломб в сочетании с дополнительными элементами защиты – защитным номерным скотчем, индикатором бережного обращения с грузом, индикаторами соблюдения температурного режима для грузов, чувствительных к перепадам температур и др. [6; 7].

Актуальным направлением совершенствования качества оказываемых услуг в сфере транспортной логистики является разработка эффективных технических средств обеспечения безопасности и комфорта при перевозке и хранении грузов различного функционального назначения, проектируемых с использованием современных информационных систем цифрового моделирования [8; 9].

Целью данного исследования являлась разработка оригинальных конструкций полимерной тары (канистры) для транспортировки жидкофазных компонентов и пломбировочного устройства, предназначенного для индикации факта несанкционированного доступа к перевозимому грузу.

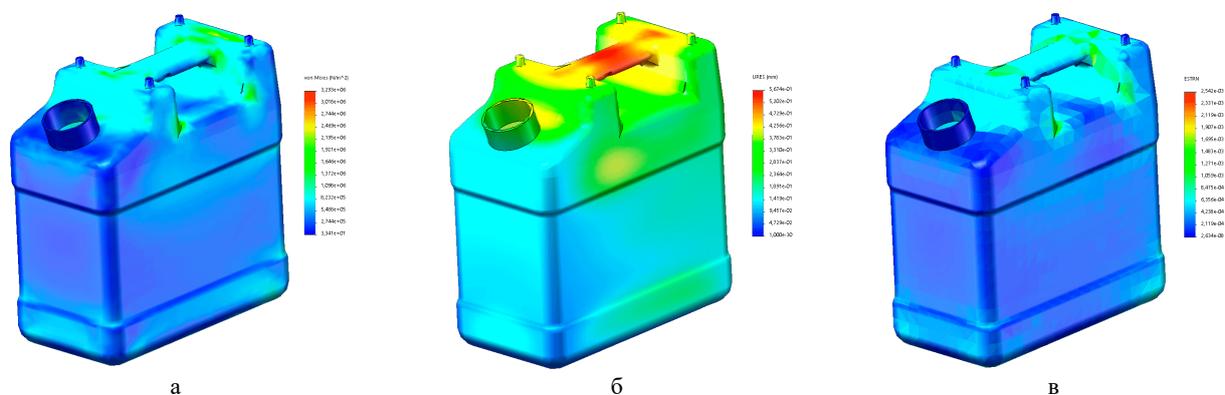
Проектирование и моделирование разрабатываемых объектов осуществляли с применением средств компьютерного моделирования методом конечно-элементного анализа и технологий аддитивного производства методом трехмерной печати.

В качестве инструмента для компьютерного моделирования использовали прикладной программный пакет SolidWorks 2019 с интегрированным расчетным модулем Simulation для анализа напряженно-

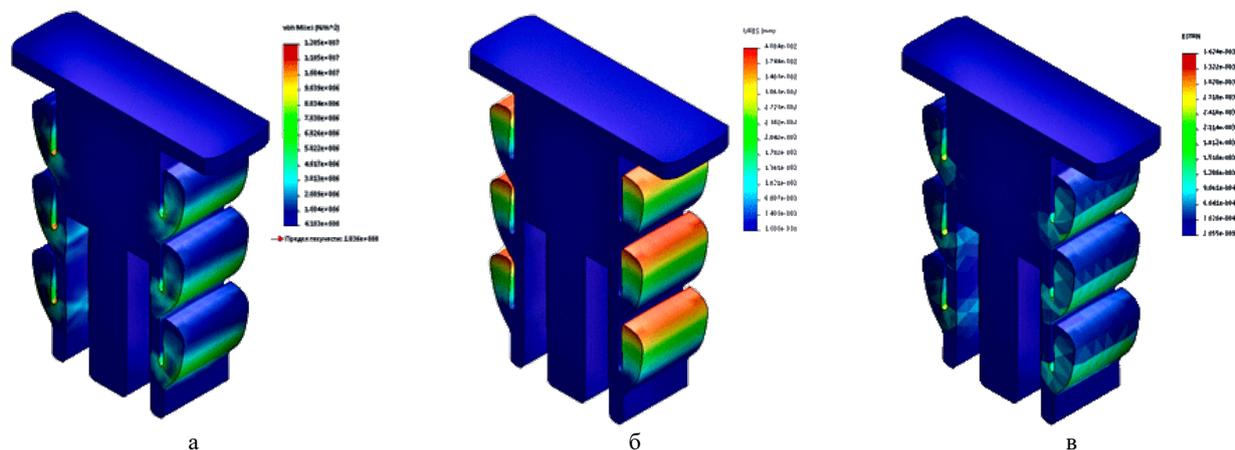
¹Исследование выполнено в рамках деятельности СНИЛ «Hard Skills» факультета инновационных технологий машиностроения ГрГУ им. Янки Купалы.

деформированного состояния моделируемого объекта, для функционального прототипирования – специализированное программное обеспечение FlashPrint для 3d-принтера Flashforge Dreamer.

Результаты анализа напряженно-деформированного состояния разработанных конструкций канистры и индикаторной пломбы представлены на рисунках 1 и 2 и таблицах 1 и 2 соответственно.



а) максимальные напряжения по Мизесу; б) результирующие перемещения; в) эквивалентные деформации
Рисунок 1 – Результаты исследования напряжённо-деформированного состояния канистры



а) максимальные напряжения по Мизесу; б) результирующие перемещения; в) эквивалентные деформации
Рисунок 2 – Результаты исследования напряжённо-деформированного состояния вставки-фиксатора индикаторной пломбы

Таблица 1 – Значения параметров напряжённо-деформированного состояния канистры

Параметр	Максимальные значения
Напряжения по Мизесу, МПа	3,29
Результирующие перемещения, мкм	567,4
Эквивалентные деформации	$2,54 \cdot 10^{-3}$

Таблица 2 – Значения параметров напряжённо-деформированного состояния вставки-фиксатора индикаторной пломбы

Параметр	Максимальные значения
Напряжения по Мизесу, МПа	12,05
Результирующие перемещения, мкм	40,8
Эквивалентные деформации	$3,6 \cdot 10^{-3}$

Результаты виртуальных испытаний разработанной конструкции полимерной 10-литровой канистры, получаемой методом литьевого формования из термопластичного полимера класса полиолефинов (ПЭНД), показали, что при сосредоточенной нагрузке 500 Н, возникающей при вертикальном штабелировании в 6 рядов, максимальные значения внутренних напряжений равны 3,29 МПа, что значительно ниже предела текучести материала изделия.

Аналогичным образом и виртуальные испытания разработанной конструкции индикаторной пломбы свидетельствуют об эффективности принятых конструкторских и дизайнерских решений. Так, при наложении распределенной нагрузки, эквивалентной 10 Н/м^2 , на каждый шип запирающего элемента (вставки-фиксатора) индикаторной пломбы, выполненного методом литья под давлением из термопластичного материала класса алифатических полиамидов (ПА6), максимальные внутренние напряжения соответствуют значениям $12,05 \text{ МПа}$.

Для проверки работоспособности индикаторной пломбы, состоящей из двух частей – запирающего устройства и корпуса, были подготовлены прототипы с помощью трехмерной печати по технологии послойного наращивания материала (FDM – Fused Deposition Modelling). Результаты слайсинга цифровых моделей элементов индикаторной пломбы представлены на рисунке 3.



а) фиксатор-вставка; б) корпус

Рисунок 3 – Послойный вид модели элементов индикаторной пломбы после слайсинга

Прототипирование элементов индикаторной пломбы осуществляли при следующих технологических режимах трехмерной печати: диаметр сопла – $0,4 \text{ мм}$, используемый материал – АБС-пластик, высота слоя – $0,18 \text{ мм}$, высота первого слоя – $0,27 \text{ мм}$, количество слоев по периметру – 2, количество верхних слоев – 3, количество нижних слоев – 3, степень заполнения – 15% , тип заполнения – соты (шестигранник), скорость печати – 60 мм/с , скорость перемещения экструдера при позиционировании – 80 мм/с , температура экструдера – $220 \text{ }^\circ\text{C}$, температура платформы – $105 \text{ }^\circ\text{C}$. Время печати фиксатора-вставки составило 18 мин. (при расходе материала – $0,76 \text{ м}$), корпуса – 34 мин. (при расходе материала – $1,92 \text{ м}$).

Таким образом, разработанные конструкции полимерной тары (канистры) для транспортировки жидкофазных сред и индикаторной пломбы для защиты грузов от несанкционированного доступа отличаются высокой функциональностью, повышенными параметрами надежности и эргономичности, являются эффективными и в тоже время доступными средствами обеспечения безопасности при транспортировке и хранении грузов различного функционального назначения. В частности, в практике логистического обслуживания промышленных предприятий разработанная оригинальная конструкция индикаторной пломбы может быть применена для пломбирования различных стационарных объектов (контейнеров, различных емкостей, складов, хранилищ, помещений, сейфов, упаковок и тары, счетчиков, блоков управления, приборов, оборудования и т. п.), а также подвижных объектов: грузовых помещений транспортных средств на всех видах транспорта.

Список литературы

1. Молокович, А. Д. Транспортная логистика : учеб. / А. Д. Молокович. – Минск : Выш. шк., 2019. – 463 с.
2. Зорина, Т. Г. Международная логистика. Практикум : учеб. пособие / Т. Г. Зорина, С. В. Дирко. – Минск : БГЭУ, 2018. – 290 с.
3. Самуйлов, В. М. Логистика складирования : курс лекций / В. М. Самуйлов, М. А. Левченко. – Екатеринбург : УрГУПС, 2017. – 205 с.
4. Карбанович, И. И. Международные автомобильные перевозки / И. И. Карбанович. – Минск : Юнипак, 2002. – 234 с.
5. Милославская, С. В. Мультимодальные и интермодальные перевозки : учеб. пособие / С. В. Милославская, К. И. Плужников. – М. : РосКонсульт, 2001. – 368 с.
6. Пломбирование, индикация и контроль доступа к грузу [Электронный ресурс] // Официальный сайт транспортно-экспедиционной компании «Экспедитор-Про». – Режим доступа: <http://www.expeditor-pro.ru/sealing-cargoes.php>. – Дата доступа: 10.03.2023.
7. Пломбы индикаторные. Общие технические требования : ГОСТ 31283-2004. – Введен впервые; введ. РФ 01.01.2006. – М. : Стандартинформ, 2005. – 8 с.
8. Введение в информационные системы цифрового моделирования [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Г. Г. Куликов [и др.] ; Уфим. гос. авиац. техн. ун-т. – Электрон. текст. данные (1 файл: 4,04 МБ). – Уфа : УГАТУ, 2017. – Электронная версия печатной публикации. – Режим доступа: http://e-library.ufa-rb.ru/dl/lib_net_r/Vvedenie_v_informats_sis_tsif_model_2017.pdf. – Дата доступа: 10.03.2023.
9. Ли, К. Основы САПР (CAD/CAM/CAE) / К. Ли ; пер. с англ. – СПб. : Питер, 2004. – 560 с.

Using computer modeling tools and additive manufacturing technologies, original designs of products widely used at enterprises engaged in transport and logistics activities have been developed – a polymer container used for transportation and storage of liquid-phase media in warehouses, and an indicator seal that protects transported goods from unauthorized access. The optimization of the developed design solutions was carried out by the finite element method, functional prototyping was carried out using 3D printing machines.

Будько Александра Валерьевна, студентка 2-го курса факультета инновационных технологий машиностроения, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, Budko_AV_21@student.grsu.by.

Станиславович Екатерина Александровна, студентка 2-го курса факультета инновационных технологий машиностроения, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь.

Вильчик Анастасия Дмитриевна, студентка 2-го курса факультета инновационных технологий машиностроения, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, Vilchik_AD_21@student.grsu.by.

Научный руководитель – *Антонов Александр Сергеевич*, кандидат технических наук, доцент кафедры материаловедения и ресурсосберегающих технологий, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, Antonov.science@gmail.com.

УДК 537.9

И. Ю. ВАЙТЕХОВИЧ

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ЭЛЕКТРОНА ВО ВСТРОЕННЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ СФЕРОИДАЛЬНОЙ ФОРМЫ

Проведено численное моделирование электронной структуры сфероидальной встроенной квантовой точки с кусочно-постоянным ограничивающим потенциалом. Получены зависимости энергий основного и возбужденных состояний от геометрических параметров и параметров среды. Показана немонотонность такой зависимости.

Массивы квантовых точек (КТ) могут использоваться в самых разных устройствах нанoeлектроники, таких как квантовый компьютер [1] и многие другие [2]. Использование квантовых точек требует понимания их электронной структуры и влияния на нее различных параметров этих точек. Ограничивающий потенциал КТ может быть создан как неоднородностью полупроводникового материала, так и электрическим полем наноразмерного затвора [3–4]. В данной работе мы теоретически изучаем первый вид КТ и влияния геометрических параметров этих точек на их электронную структуру.

Рассмотрим полупроводниковую структуру, состоящую из двух областей: S_1 и S_2 , заполненных различными полупроводниковыми материалами. Тогда в рамках приближения эффективной массы энергию и волновые функции электрона можно рассчитать из задачи для стационарного уравнения Шрёдингера [5]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \Delta \Psi + U_i \Psi = E \Psi, \quad (x, y, z) \in S_i, \quad i = 1, 2,$$

$$\lim_{|(x, y, z)| \rightarrow \infty} \Psi = 0,$$

$$\Psi|_{\partial S_1 \cap \partial S_2} = 0, \quad \frac{1}{m_i^*} \frac{\partial \Psi}{\partial n} \Big|_{\partial S_1 \cap \partial S_2} = 0, \quad i = 1, 2,$$

где m_i^* – эффективная масса в области полупроводника S_i , в общем случае зависящая от энергии E [5], U_i – заданная потенциальная энергия в области S_i . В качестве S_1 рассматривалась сфероидальная область:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \leq 1.$$

Область S_2 , соответственно, представляет собой ее дополнение.

Для численного решения задачи в работе использовался метод конечных разностей. С помощью расчетов были получены зависимости энергий электрона в квантовой точке от степени вытянутости или сплюснутости сфероида (соотношения длин полуосей), разницы эффективных масс.

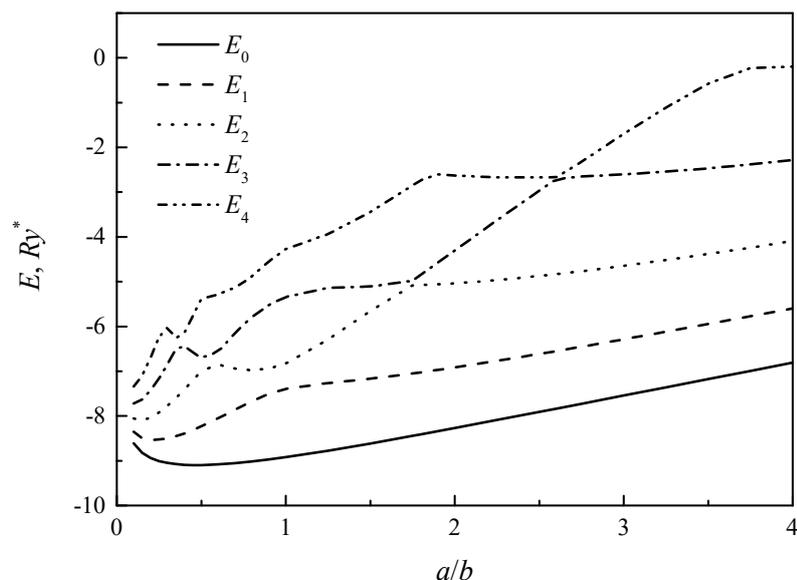


Рисунок 1 – Зависимость электронной структуры квантовой точки от соотношения длин полуосей квантовой точки, $U_2 - U_1 = 10Ry^*$

На рисунке 1 представлены энергии основного и четырех низших возбужденных состояний от соотношения длин полуосей. На рисунке показана немонотонность такой зависимости, а также наличие точек отталкивания уровней.

Полученные результаты могут быть использованы при моделировании электронных приборов на основе квантовых точек.

Список литературы

1. Loss, D. Quantum computation with quantum dots / D. Loss, D. P. DiVincenzo // Physical Review A. – 1998. – Vol. 57, № 1. – P. 120.
2. Silicon quantum electronics / F. A. Zwanenburg [et al.] // Reviews of modern physics. – 2013. – Vol. 85, № 3. – P. 961.
3. Kane, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B. E. Kane // Nature. – 1998. – Vol. 393, № 6681. – P. 133–137.
4. A single-atom transistor / M. Fuechsle [et al.] // Nature nanotechnology. – 2012. – Vol. 7, № 4. – P. 242–246.
5. Energy and coordinate dependent effective mass and confined electron states in quantum dots / Y. Li [et al.] // Solid state communications. – 2001. – Vol. 120, № 2–3. – P. 79–83.

Numerical modeling of electronic structure in spheroidal embedded quantum dot with piecewise-constant confining potential is carried out. The dependences of ground and excited state electron energies on geometrical and medium parameters are obtained. The nonmonotonicity of such dependences is shown.

Вайтехович Игорь Юрьевич, студент 3-го курса, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, uv2705200312@mail.ru.

Научный руководитель – *Левчук Елена Александровна*, старший преподаватель кафедры вычислительной математики, магистр физико-математических наук, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, liauchuk.alena@gmail.com.

УДК 616:577.35

В. В. ВАШИНА

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ «FOOT EXAMINATION» ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИСФУНКЦИИ СТОПЫ

Разработан программный пакет «Foot examination» для диагностики стопы и выявления в ней патологических изменений. Получены отпечатки стоп для больных и здоровых пациентов разных возрастных категорий с использованием подставки, водозадерживающей ткани, густой краски и листа бумаги, на котором оставался отпечаток стопы и фотографировался для обработки в «Foot examination». По отпечатку стопы можно определить различные параметры, которые являются важными для диагностики стопы.

Стопа человека имеет сложное анатомическое строение, эта часть ноги, где находится множество мышечных отделов, которые выполняют функции, такие как балансировка, поддержание равновесия, смягчение ударов при шагах, создании надежной опоры. Её строение позволяет увидеть, как эволюция приспособила наше тело к эффективному способу передвижения – прямохождению. Плоскостопие – это самая распространенная патология стопы, получившая омоложение на современном этапе. Важной задачей на сегодняшний день является дополнение всех существующих методов для диагностики отпечатков стопы с привлечением компьютерных программ. Целью исследования является создание компьютерной программы «Foot examination» для анализа отпечатков стопы. Объектом исследования являются фотографии отпечатков стопы, обработанные с помощью программы «Foot examination». Методы исследования – компьютерная обработка фотографий отпечатков стопы.

Существуют различные методы диагностики стопы, например: биометрические, биомеханические, рентгенографические и комплексные [1]. Диагностическая визуализация стопы позволяет быстро, неинвазивно определять анатомию и патологию. Рентгенография является стандартным методом начальной диагностической визуализации для оценки состояния стопы и голеностопного сустава. Ряд факторов позволяет рентгенографии служить прекрасным методом обследования опорно-двигательного аппарата. Кроме того, рентгенограммы можно получить довольно быстро и недорого, что помогает клиницистам и специалистам по визуализации принимать решения и своевременно начинать терапию. **Ультразвук** является очень эффективным средством диагностики широкого спектра заболеваний стопы и голеностопного сустава, особенно проблем с открытыми тканями и является абсолютно безопасной, неинвазивной и безболезненной диагностической процедурой. **Компьютерная томография** используется в ортопедии для диагностики и лечения проблем со стопой или голеностопным суставом. Общие проблемы со стопами, которые могут помочь диагностировать компьютерную томографию, включают: артрит, деформацию, плоскостопие, инородные тела, переломы.

К биомеханическим методам относят педоплантографию, которая является одной из старейших методик исследования стопы пациента на основании анализа отпечатков опорной поверхности стопы. Плантограмма характеризует многие особенности строения стопы и хорошо коррелирует с рентгенологическими и другими, более сложными методами обследования. Для получения плантограммы – подошвенной поверхности стопы – использовалась подставка, способная выдерживать большие нагрузки, и специально подобранная краска и водозадерживающая ткань. Обратную сторону ткани подкрашивали краской, затем ставили на ткань пациента, у которого под покрашенной тканью находился лист бумаги [2]. Перед снятием отпечатка обследуемый должен принять привычную осанку, ему предлагалось стать удобно. После снятия отпечатка подошвенной поверхности его фотографировали, и полученные снимки обрабатывали написанной программой «Foot examination».

Для написания программы использовалась среда разработки: «IntelliJ IDEA Community Edition 2022.2.1». IntelliJ IDEA – это интеллектуальная контекстно-зависимая среда разработки, которая применяется для написания, исполнения, отладки и оптимизации кода на таких языках программирования, как: Java, Kotlin, Scala, Groovy. При разработке приложения использовался язык программирования Java. Java – мультифункциональный объектно-ориентированный язык программирования со строгой типизацией. К преимуществам Java можно отнести: простота, безопасность, производительность, надёжность, динамичность, возможность параллельной разработки. Для создания графического интерфейса использовался JavaFX, FXML, CSS. Обработка отпечатков стопы проводилась методом Штретера и Чижина.

В разработанной программе кнопка «Foot examination» «Download Image» позволяет загрузить изображения в рабочую область (Canvas) для дальнейшей обработки изображения, используя `FileChooser.showOpenDialog()`, который показывает диалоговое окно выбора файла. С помощью метода `Canvas_download`, в котором используется функция `Canvas.drawImage()`, выбранное изображение вставляется в рабочую область.

В кнопке «Method Shreeter» реализуется обработка изображения по методу Штретера. После нажатия кнопки загружается изображение в `ImageView`, где показано как проводить данный метод, для этого используется метод `setImage()` из класса `Image`, а также в нижнем `ImageView` загружается изображение с формулой для расчёта. Для прорисовки линий на изображении полученного с помощью кнопки «Download Image» воспользовались методами `setOnMousePressed` и `setOnMouseReleased`. Суть `setOnMousePressed` заключается в следующем:

- По нажатию левой кнопки мыши, с помощью функций `setStartX()` и `setStartY()` получаем значения начальной точки (X, Y) и сохраняем координаты в переменные `x1`, `y1`.

Суть `setOnMouseReleased` заключается в следующем:

- По отпусанию левой кнопки мышки, с помощью функций `setEndX()` и `setEndY()` получаем значения конечной точки (X, Y) и сохраняем координаты в переменные `x2`, `y2`.

- С полученными выше значениями переменных `x1`, `y1` и `x2`, `y2` производим расчёт длины линии, после чего сохраняем результат в переменной `result`

- С помощью блока кода switch – case и параметра s(номер проводимой линии) заносим результат, который храниться в переменной result в необходимый TextField.

В кнопке «Method Chizhina» реализуется метод Чижина. После нажатия кнопки загружается изображение в ImageView, где показано как проводить данный метод, для этого используется метод setImage() из класса Image, а также в нижнем ImageView загружается изображение с формулой для расчёта.

Кнопка «Clear Image» позволяет очистить загруженное изображение. Кнопка «Save» дает возможность сохранить обработанное изображение в формате png в выбранном месте. Кнопка «Clear all results» позволяет очистить все.

Компьютерная обработка отпечатков стопы позволяет анализировать и рассчитывать параметры, индексы и углы, помогающие определить различного рода нарушения, наличие, а также тип плоскостопия. Компьютерная плантография дает возможность обеспечить качество и скорость расчетов. Компьютерная плантография не используется как самостоятельный метод диагностики плоскостопия, а применяется совместно с осмотром врача хирурга-ортопеда. Заболевания стопы заставляют испытывать дискомфорт, боль, и если не принимать своевременные меры, то это приведет к проблемам с опорно-двигательным аппаратом. Учитывая данную проблему, необходима компьютерная диагностика стопы. В данной работе приведено описание разработанной компьютерной программы «Foot examination». Данная программа может проводить обработку фотографий стопы методом Шритера и Чижина.

Список литературы

1. Биомеханика и коррекция дисфункций стоп / под ред. А. И. Свириденка, В. В. Лашковского. – Гродно : ГрГУ, 2009. – 279 с.
2. Аржанникова, Е. Е. Ортопедическое обеспечение при деформациях стопы. Плоскостопие. Руководство по протезированию / Е. Е. Аржанникова, И. К. Горелова ; под ред. проф. А. Н. Кейера, проф. А. В. Рожкова. – СПб., 1999. – С. 450–461.
3. Аруин, А. С. Эргономическая биомеханика ходьбы и бега / А. С. Аруин, В. М. Зацюрский. – М. : ГЦОЛИФК, 1983. – 52 с.
4. Болтрукевич, С. И. Особенности формирования стопы у детей школьного возраста / С. И. Болтрукевич, В. В. Кочергин, В. В. Лашковский // Журн. Гроднен. мед. ун-та. – 2005. – № 4. – С. 55–57.

A software package «Foot examination» has been developed for diagnosing the foot and identifying pathological changes in it. Footprints were obtained for sick and healthy patients of different age categories, using a stand, water-retaining fabric, thick paint and a sheet of paper on which the footprint was left and photographed for processing in the «Foot examination». From the footprint, you can determine such parameters as: the length of the foot, the distance from the heel to all metatarsophalangeal joints, the width of the forefoot and heel, various angular indicators that are important for the diagnosis of the foot.

Вашина Виолетта Владимировна, студентка 4-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, violkamm4@gmail.com.

Научный руководитель – *Жарнова Ольга Александровна*, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, zharik783@tut.by.

УДК 53.072

Н. В. ГОРДИЕВСКИЙ, Е. С. РОМАНОВСКИЙ ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ТУРБУЛЕНТНОГО ПОТОКА НА ОСНОВЕ КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА

Проиллюстрированы возможности использования клеточного автомата для описания процессов турбулентности. Разработана программа и рассмотрены алгоритмы описания турбулентности с помощью клеточного автомата.

Турбулентность – это состояние движения жидкости, которое характеризуется, случайной и хаотической трехмерной завихренностью. До сих пор описание этого явления представляет сложную задачу. Наиболее частый метод описания этого течения – это уравнения Навье – Стокса в турбулентных пульсациях Рейнольдса. Не только решение этих уравнений – сложная задача, но и сама постановка задачи достаточно проблематична. Такие уравнения решаются громоздкими конечно-разностными методами. Поэтому целесообразно искать дополнительные методы описания турбулентного течения. Использование клеточного автомата (КА) является одним из возможных вариантов. Применение клеточного автомата для описания физических процессов подробно изложено в работах [1; 2; 3] По своим поведенческим свойствам КА разбиваются на 4 вида: различающихся типами конфигураций, к которым эволюционирует КА 1: эволюционирует к пространственно

однородному глобальному состоянию; 2: КА, эволюционирующие к простым устойчивым или периодически структурам; 3: КА, конфигурация которых хаотично бесконечно меняется непредсказуемым образом; 4: КА, эволюционирующие к довольно сложным локальным фигурам, иногда движущимся (распространение волны).

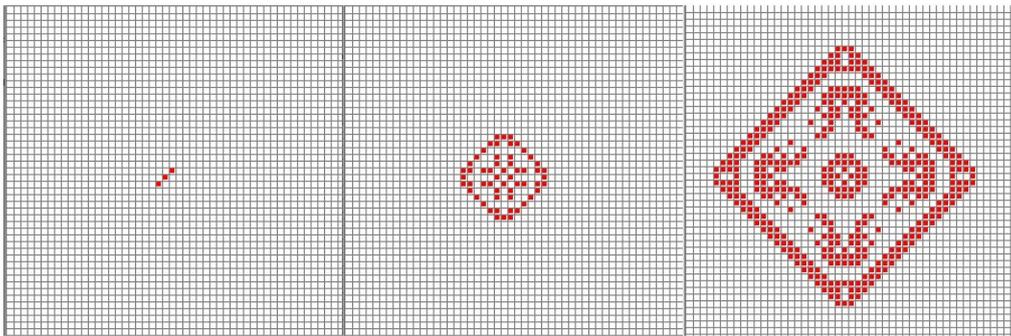


Рисунок 1 – Возможные эволюции КА

Каким образом можно использовать клеточный автомат для моделирования гидродинамического течения? Используем алгоритм, предложенный в работе [4].

Опишем структуру клеточно-автоматного поля в случае моделирования двумерных потоков жидкости. Поле содержит три слоя: 1 – давление P , 2 – слой X -компоненты скорости V_x , 3 – слой Y -компоненты скорости V_y (рисунок 2).



Рисунок 2 – Возможные эволюции КА

Для взаимодействия между клетками примем окрестность фон Неймана – взаимодействие клетки с четырьмя ближайшими соседями.

Моделирование представляет собой итерационный цикл клеточно-автоматных взаимодействий с использованием асинхронной схемы. Схема представляет собой циклическое выполнение трех шагов:

На клеточно-автоматном поле выбирается случайным образом клетка с целочисленными координатами $(i = 1) x1, y1$. Все клетки выбираются равновероятно.

Таким же случайным и равновероятным образом выбирается некоторая соседняя клетка $(i = 2)$ с целочисленными координатами $x2, y2$. В качестве соседних рассматриваются только четыре клетки.

Между этими двумя соседними клетками происходит клеточно-автоматное взаимодействие, суть которого заключается в изменении непрерывных значений соответствующих слоев клеток согласно системе уравнений (1):

$$\begin{cases} c_1^{i'} = c_1^i + k_1((x^1 - x^2)(c_2^2 - c_2^1) + (y^1 - y^2)(c_3^2 - c_3^1)) \\ c_2^{i'} = c_2^i + k_2(x^1 - x^2)(c_1^2 - c_1^1) + k_3(3 - 2i)(c_2^2 - c_2^1) \\ c_3^{i'} = c_3^i + k_2(y^1 - y^2)(c_1^2 - c_1^1) + k_3(3 - 2i)(c_3^2 - c_3^1) \end{cases} \quad (1)$$

где $i = 1, 2$ – значение индекса, задающее выбранную и соседнюю клетки с координатами $(x1, y1)$ и $(x2, y2)$ соответственно;

$c_j^{i'}$ и c_j^i – значение ячеек в моменты времени $t + 1$ и t соответственно:

$$c_1 \equiv P; c_2 \equiv V_x; c_3 \equiv V_y;$$

$k_1, k_2, k_3 > 0$ – коэффициенты пропорциональности, которые отражают пространственно временные параметры клеточно-автоматной модели, а также удельную плотность и кинематическую вязкость.

k_1 – определяет интенсивность изменения давления при различных значениях скорости потока вещества во взаимодействующих клетках. В СИ – (Па с)/м; k_2 – определяет интенсивность изменения компонентов векторов скоростей пропорционально соответствующему градиенту давления в двух соседних клетках. В СИ – м/(Па·с); k_3 – определяет интенсивность «диффузии скорости», то есть является клеточно-автоматным отображением кинематической вязкости. Безразмерная величина.

Разность координат двух соседних клеток необходимо воспринимать как одно из значений $-1, 0, +1$, а не как некоторое расстояние. Система уравнений (1) описывает изменение ячеек за время одного элементарного взаимодействия клеточных автоматов и является своеобразной аппроксимацией численного решения уравнения Навье–Стокса. Систему (1) можно представить в виде:

$$c_j^i = c_j^i + \Delta c_j^i \tag{2}$$

Очевидно, для обеспечения достоверности процесса моделирования значения Δc_j^i должны быть как можно меньшей величиной, которая регулируется коэффициентами k_1, k_2, k_3 , при этом размер клеточно-автоматного поля должен быть как можно больше. С другой стороны, увеличение достоверности процесса может привести к слишком долгому процессу моделирования. Как и в других моделях здесь возникает проблема поиска компромисса между точностью решения и временем, затрачиваемым на его поиск.

Для простоты и наглядности рассмотрим одномерный случай без учета вязкости и объясним вид системы уравнений (1). Система примет вид:

$$\begin{cases} c_1^i = c_1^i + k_1(x^1 - x^2)(c_2^i - c_1^i) \\ c_2^i = c_2^i + k_2(x^1 - x^2)(c_1^i - c_2^i) \end{cases} \tag{3}$$

Для двух взаимодействующих соседних клеток модификацию давления P отображает первое уравнение системы. Изменение давления ΔP , в первом приближении, можно считать пропорциональным разности векторов скоростей, если две клетки рассматривать как микрофрагмент системы. Если выбранная ячейка ($i = 1$) с координатой (x_1) находится слева, а соседняя клетка ($i = 2$) с координатой ($x_2 = x_1 + 1$) – справа. Пусть векторы скоростей направлены вправо, и при этом $V_1 > V_2 > 0$. Тогда, и для выбранной, и для соседней клетки, изменение давления будет следующим:

$$\Delta P = \Delta c_1^i = c_1^i + k_1(x^1 - x^2)(c_2^i - c_1^i) = k_1(-1)(V_2 - V_1) \tag{4}$$

The image shows a graphical user interface for a simulation. At the top, there are four buttons: 'Инициализация' (highlighted with a blue border), 'препятствие', 'Старт', and 'Стоп'. Below these buttons is a section titled 'Решеточный газ' (Lattice Gas). This section contains several input fields: 'P(Па)' with the value '100', 'N' with the value '31', 'K1(Па с/м)' with the value '1', 'K2(м/Па с)' with the value '0.00001', 'K3' with the value '0.01', and 'V[м/с]' with the value '1'.

Рисунок 3 – Исходные данные

Интерфейс программы достаточно прост. Задаем число узлов решетки, давление, скорость невозмущенного потока и коэффициенты: k_1 – определяет интенсивность изменения давления при различных значениях скорости потока вещества во взаимодействующих клетках, k_2 – определяет интенсивность изменения компонентов векторов скоростей пропорционально соответствующему градиенту давления в двух соседних клетках и k_3 – определяет интенсивность «диффузии скорости», то есть является клеточно-автоматным отображением кинематической вязкости. Безразмерная величина.

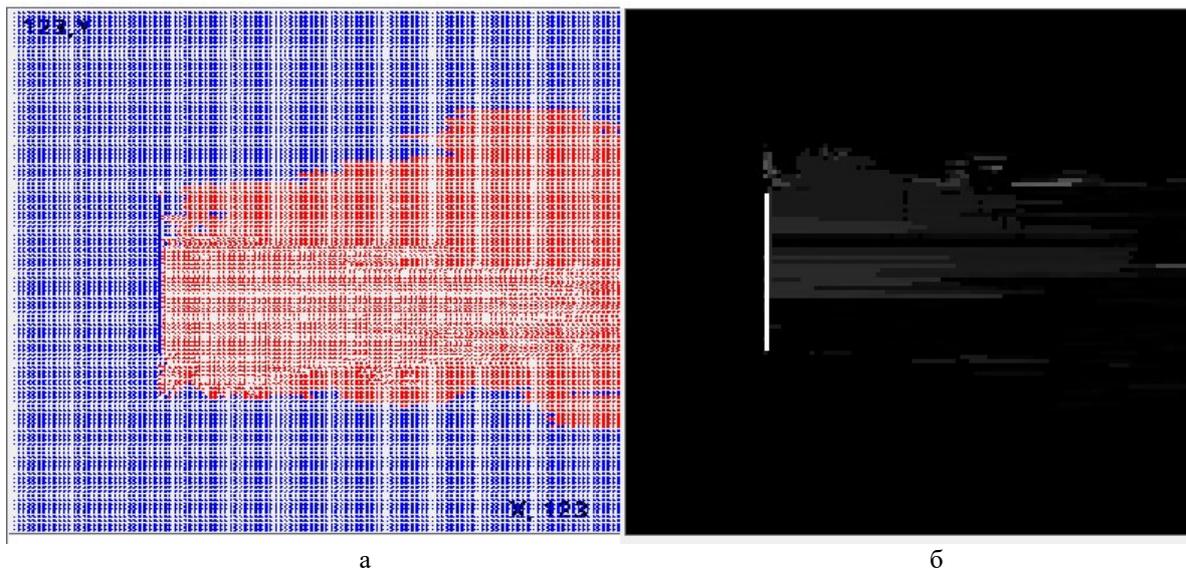


Рисунок 4 – Возможные эволюции КА

На рисунке 4а представлены зоны возмущенного потока (красные векторы скорости) и набегающего потока (синие векторы скорости). На рисунке 4б в градациях серого цвета отображается давление в потоке.

Разработанная программа показывает возможность расчета гидродинамики потока по аналогии с уравнениями Навье – Стокса. Разумеется, доведение методики и программы до более высокого уровня (не только качественного) требует значительного увеличения узлов решетки и физического обоснования выбора коэффициентов k_1, k_2, k_3 .

Список литературы

1. Ванаг, В. К. Исследование пространственных распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата / В. К. Ванаг // УФН. – 1999. – Т. 169, № 5. – С. 481–505.
2. Матюшкин, И. В. Обзор по тематике клеточных автоматов на базе современных отечественных публикаций / И. В. Матюшкин, М. А. Заплетина // Компьютерные исследования и моделирование. – 2019. – Т. 11, № 1. – С. 9–57.
3. Никитин, А. В. Компьютерное моделирование физических процессов / А. В. Никитин, А. И. Слободянюк, М. Л. Шишаков. – М.: Бином, 2013. – 679 с.
4. Тимчук, Г. Д. Развитие метода непрерывных асинхронных клеточных автоматов для моделирования турбулентных потоков / Г. Д. Тимчук, В. В. Жихаревич // Прикладная дискретная математика. – 2012. – № 4 (18). – С. 73–81.

The possibilities of using the cellular automaton to describe the processes of turbulence are illustrated. A program has been developed and algorithms for describing turbulence using a cellular automaton have been considered.

Романовский Евгений Сергеевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, romanovskij_es1_20@student.grsu.by.

Гордиевский Никита Вячеславович, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, gordievskij_nv_20@student.grsu.by.

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

УДК 620.92(476.6)

В. А. ГРЕМЧУК, О. А. МАЛЬЦЕВ

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГЕЛИОКОЛЛЕКТОРОВ В ЦЕЛЯХ ГОРЯЧЕГО ВОДОСНАБЖЕНИЯ В УСЛОВИЯХ ГОРОДА ГРОДНО

Проведена оценка эффективности работы гелиоколлектора в условиях города Гродно. Для оценки эффективности был применен f-метод. По итогам расчетов было показано, что применение бюджетных гелиоколлекторов для обеспечения горячего водоснабжения в городе Гродно неэффективно.

Для оценки эффективности применения гелиоколлектора в целях горячего водоснабжения была выбрана бюджетная одноконтурная система с водой в качестве теплоносителя. В качестве начальных условий были приняты: дом находится на широте $\varphi = 53,6257^\circ$ с. ш., что соответствует жилому району «Ольшанка»; система должна обеспечивать семью из 4 человек, каждый из которых ежедневно расходует $V_{г.в.} = 20$ л воды при температуре $T_h = 55^\circ\text{C}$; температура водопроводной воды составляет $T_c = 11^\circ\text{C}$. Коллектор устанавливают под углом $\beta = 38,6^\circ$ к горизонту и ориентируют на юг. Применяется плоский неселективный гелиоколлектор с однослойным остеклением. Площадь гелиоколлектора равна 2 м^2 .

В первую очередь проводятся расчеты прихода солнечной энергии на наклонную поверхность с применением данных из метеорологических сводок [1]. Среднемесячное количество суммарной солнечной энергии, поступающей на наклонную поверхность:

$$E_{\text{н}} = RE,$$

где E – среднемесячное количество суммарного солнечного излучения, которое поступает на горизонтальную поверхность, МДж/м^2 ; R – отношение среднемесячных количеств солнечной радиации, поступающих на наклонную и горизонтальную поверхности.

Для наклонной поверхности с южной ориентацией:

$$R = \left(1 - \frac{E^p}{E}\right) R_{\text{пр}} + \frac{1 + \cos\beta}{2} \left(\frac{E^p}{E}\right) + \rho \frac{1 - \cos\beta}{2},$$

где E^p – среднемесячное дневное количество диффузной (рассеянной) солнечной энергии, поступающей на горизонтальную поверхность, МДж/м^2 ; $R_{\text{пр}}$ – коэффициент пересчета прямого излучения с горизонтальной на наклонную поверхность; β – угол наклона гелиоколлектора к горизонту, град; ρ – альbedo поверхности Земли.

Среднемесячная величина коэффициента $R_{\text{пр}}$:

$$R_{\text{пр}} = \frac{\cos(\varphi - \beta) \cos\delta \sin\omega_3 + \frac{\pi}{180} \omega_3 \sin(\varphi - \beta) \sin\delta}{\cos\varphi \cos\delta \sin\omega_3 + \sin\varphi \sin\delta \frac{\pi}{180} \omega_3},$$

где φ – широта местности, град; δ – склонение Солнца, град; ω_3 и ω_3' – часовой угол захода Солнца на горизонтальной и наклонной поверхностях, град. Формулы расчета величин δ , ω_3 , ω_3' приведены в [2].

Таблица 1 – Характеристики принимаемого излучения

	E , МДж/м^2	E^p , МДж/м^2	R	$E_{\text{н}}$, МДж/м^2
Апрель	385,00	222,00	1,13	433,22
Май	540,00	301,00	1,06	571,97
Июнь	603,00	314,00	1,04	626,76
Июль	590,00	314,00	1,05	619,43
Август	469,00	247,00	1,11	521,75
Сентябрь	318,00	176,00	1,21	385,92

Для вычислений эффективности использования гелиосистемы на долгосрочный период был использован f-метод [3; 4]. Этот метод предполагает установление безразмерных параметров системы теплоснабжения и использование результатов детального математического моделирования их работы для получения корреляций между этими параметрами и долгосрочными характеристиками системы.

$$f = \frac{L - E}{L} = \frac{Q_{\text{Г}}}{L},$$

$$L = N V_{\text{г.в.}} \rho_{\text{в}} c (T_h - T_c).$$

где f – доля полной месячной тепловой нагрузки, обеспечиваемой за счет солнечной энергии; L – сумма месячной нагрузки горячего водоснабжения; E – общее количество энергии, полученное в течении месяца от

дублирующего источника, Q_T – месячная теплопроизводительность солнечной установки, N – число дней в месяце, ρ_B – плотность воды, c – теплоемкость воды.

Непосредственно последнее уравнение нельзя использовать для расчета f , так как величина Q_T является сложной функцией падающего излучения, температуры, окружающей среды и тепловых нагрузок. Однако, проанализировав все составляющие, можно сделать вывод, что коэффициент замещения f эмпирически можно связать с двумя безразмерными комплексами [3]:

$$X = \frac{AK(T_{rej} - \overline{T_a})\Delta t}{L};$$

$$Y = \frac{A\eta_0 E_d N}{L},$$

$$f = 1,029Y - 0,065X - 0,245Y^2 + 0,0018X^2 + 0,0215Y^3;$$

где A – площадь солнечного коллектора, m^2 ; K – эффективный коэффициент теплопотерь, $Вт/(m^2 \cdot K)$; Δt – число секунд в месяце; T_{rej} – базисная температура, принятая равной $100^\circ C$. $\overline{T_a}$ – среднемесячная температура наружного воздуха, $^\circ C$; η_0 – эффективный оптический КПД. Для используемых гелиоколлекторов $\eta_0 = 0,8$, $K = 8 \text{ Вт}/(m^2 \cdot K)$, E_d – среднемесячный дневной приход суммарной солнечной радиации на наклонную поверхность коллектора, $Дж/(m^2 \cdot \text{день})$.

Также для системы горячего водоснабжения необходимо ввести поправочный коэффициент $k = X_c/X$, так как температура водопроводной воды T_c и минимально допустимая температура горячей воды T_h влияют на характеристики системы:

$$k = \frac{11,6 + 1,18T_h + 3,86T_c - 2,32\overline{T_a}}{100 - \overline{T_a}}.$$

Таблица 2 – Основные характеристики солнечной системы

	E_d , МДж/ m^2	$\overline{T_a}$, $^\circ C$	L, МДж	X_c	Y	f
Апрель	433,22	6,30	442,46	9,78	0,94	0,30
Май	571,97	13,00	457,21	8,32	0,94	0,35
Июнь	626,76	16,20	442,46	7,63	0,94	0,38
Июль	619,43	18,00	457,21	7,24	0,94	0,39
Август	521,75	16,80	457,21	7,50	0,94	0,38
Сентябрь	385,92	12,60	442,46	8,41	0,94	0,35

Следовательно, коэффициент покрытия за сезон:

$$f_r = \frac{\sum fL}{\sum L} = 0,36.$$

То есть рассматриваемая гелиосистема может покрыть $Q = f_r \sum L = 965,89 \text{ МДж}$ из $\sum L = 2699,03 \text{ МДж}$ требуемых. Недостающее количество энергии приходит от стороннего источника (котла, центрального водоснабжения и т. п.).

Для оценки срока окупаемости необходимо сравнить стоимость гелиосистемы с суммой, сохраненной за счет гелиоколлектора. Стандартно требуемый срок окупаемости должен составлять не более 7 лет. Бюджетная гелиосистема с характеристиками, схожими с представленными в работе, имеет стоимость около 5800 р [5]. Тариф на горячую воду в городе Гродно составляет 21,92 р/Гкал [6]. Суммарная экономия энергии за сезон равна 965,89 МДж = 0,23 Гкал. Следовательно, за сезон сумма экономии на горячем водоснабжении составляет 5,04 р. Тогда период окупаемости 5800 р / 5,04 р \gg 7 лет.

Из этого можно сделать вывод, что подобные условия являются непригодными. Чтобы сократить срок окупаемости необходимо использовать более эффективные и дорогие гелиосистемы, увеличивать период их работы.

Список литературы

1. Строительная климатология : СНБ 2.04.02-2000. – Введ. 07.12.2000. – Минск : Минстройархитектуры, 2001. – 35 с.
2. Мирончук, В. И. Алгоритм расчета солнечной траектории в течение дня для нескольких областных центров Республики Беларусь / В. И. Мирончук, А. А. Вельченко, В. М. Андрианов // Энергосбережение – важнейшее условие инновационного развития АПК : материалы Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 19–20 дек. 2019 г. – Минск : БГАТУ, 2019. – С. 105–107.
3. Покотилов, В. В. Гелиосистемы теплоснабжения жилых зданий для эксплуатационных условий Республики Беларусь: рекомендации по проектированию / В. В. Покотилов, М. А. Рутковский. – Минск : БНТУ, 2017. – 60 с.
4. Бекман, У. Расчет систем солнечного теплоснабжения : пер. с англ. / У. Бекман, С. Клейн, Дж. Даффи. – М. : Энергоиздат, 1982. – 80 с.
5. ТеплоДвор. Отопительное оборудование [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.teplodvor.by>. – Дата доступа: 06.03.2023.
6. Тарифы на ЖКУ [Электронный ресурс] // Единый информационный расчетно-кассовый центр. – Режим доступа: <https://eirkc.by>. – Дата доступа: 06.03.2023.

In this scientific work, an assessment of the efficiency of solar collectors in the conditions of the city of Grodno was carried out. The f-method was used to evaluate the effectiveness. According to the results of calculations, it was shown that the use of budget solar collectors to provide hot water supply in the city of Grodno is inefficient.

Гремчук Владислав Алексеевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, vlad.gremchuk@mail.ru.

Мальцев Олег Андреевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, as2241466@gmail.com.

Научный руководитель – *Волчок Валерий Александрович*, кандидат технических наук, доцент кафедры электротехники и электроники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, wwa@grsu.by.

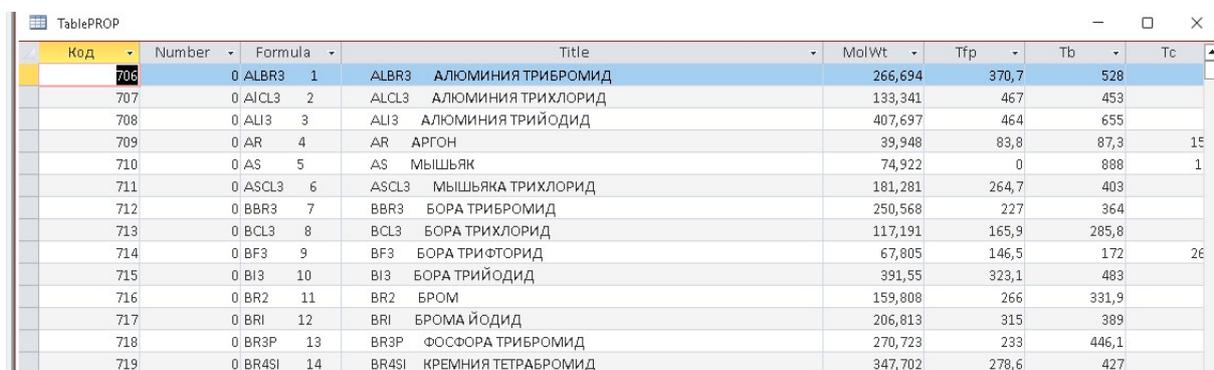
УДК 53.072

О. А. ГРИМУТО, И. В. ЧЕКАВЫЙ

АВТОМАТИЗАЦИЯ ДОСТУПА К ФИЗИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ

Разработана программа доступа к базе данных по физическим свойствам газов и жидкостей. База включает данные более чем для 500 веществ и содержит информацию по более чем 20 свойствам.

База данных основана на информации из источников [1; 2; 3] и содержит следующие статические данные: молекулярная масса, нормальная температура плавления, нормальная температура кипения, критическая температура, критическое давление, критический объем, критический коэффициент сжимаемости, фактор ацентричности Питцера, плотность жидкости при опорной температуре, опорная температура, дипольный момент, стандартная теплота образования при 298 К, теплота парообразования при температуре кипения, нормальный и изобарный потенциал (при н. у.), разработаны алгоритмы расчета физических свойств, зависящих от температуры и давления: плотность газов и смесей газов, коэффициент динамической вязкости газа и жидкости (метод Чэпмена – Энскога), кинематическая вязкость, коэффициент теплопроводности (метод Стила – Тодоса), изобарная теплоемкость, идеально-газовая теплоемкость (метод Ли – Кеслера), давление насыщенных паров (метод Атуана), температура насыщенных паров, теплота испарения при температуре насыщения.



Код	Number	Formula	Title	MolWt	Tfp	Tb	Tc
706	0	ALBR3 1	ALBR3 АЛЮМИНИЯ ТРИБРОМИД	266,694	370,7	528	
707	0	ALCL3 2	ALCL3 АЛЮМИНИЯ ТРИХЛОРИД	133,341	467	453	
708	0	ALI3 3	ALI3 АЛЮМИНИЯ ТРИЙОДИД	407,697	464	655	
709	0	AR 4	AR АРГОН	39,948	83,8	87,3	15
710	0	AS 5	AS МЫШЬЯК	74,922	0	888	1
711	0	ASCL3 6	ASCL3 МЫШЬЯКА ТРИХЛОРИД	181,281	264,7	403	
712	0	BBR3 7	BBR3 БОРА ТРИБРОМИД	250,568	227	364	
713	0	BCL3 8	BCL3 БОРА ТРИХЛОРИД	117,191	165,9	285,8	
714	0	BF3 9	BF3 БОРА ТРИФТОРИД	67,805	146,5	172	26
715	0	BI3 10	BI3 БОРА ТРИЙОДИД	391,55	323,1	483	
716	0	BR2 11	BR2 БРОМ	159,808	266	331,9	
717	0	BRI 12	BRI БРОМА ЙОДИД	206,813	315	389	
718	0	BR3P 13	BR3P ФОСФОРА ТРИБРОМИД	270,723	233	446,1	
719	0	BR4SI 14	BR4SI КРЕМНИЯ ТЕТРАБРОМИД	347,702	278,6	427	

Рисунок 1 – Фрагмент структуры базы данных

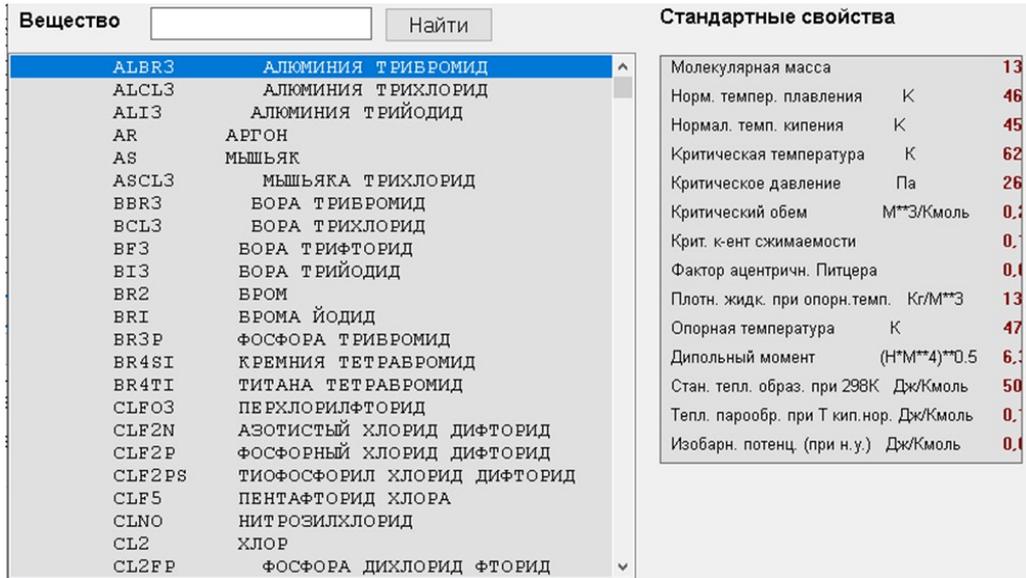


Рисунок 2 – Список веществ и окно статических данных

Статические свойства отображаются после выбора вещества в списке (рисунок 2). Для получения значений физических свойств, зависящих от температуры и давления, необходимо нажать клавишу «Свойства» (рисунок 3).

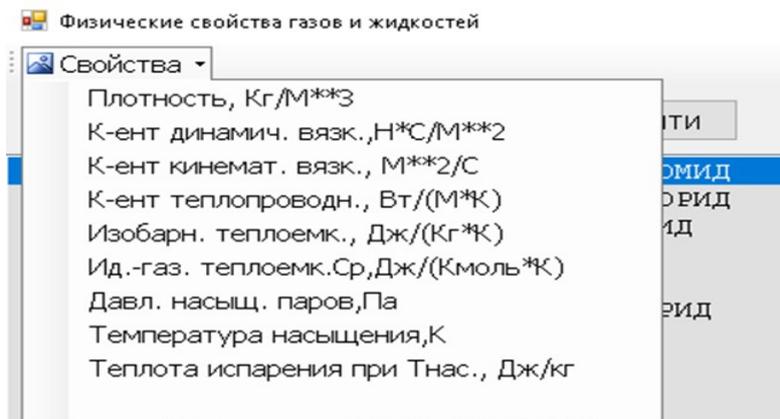


Рисунок 3 – Список свойств, зависящих от температуры и давления

База данных содержит также данные по полуэмпирическим потенциалам (рисунок 4) (Ленарда – Джонса, Штокмайера).

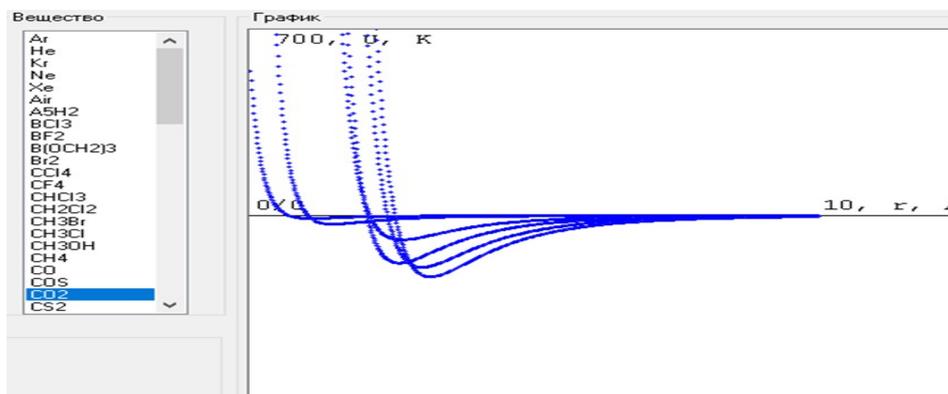


Рисунок 4 – Отображение полуэмпирических потенциалов для различных газов

На основе этих потенциалов разработано программное обеспечение для моделирования динамики молекулярных кластеров (рисунок 5).

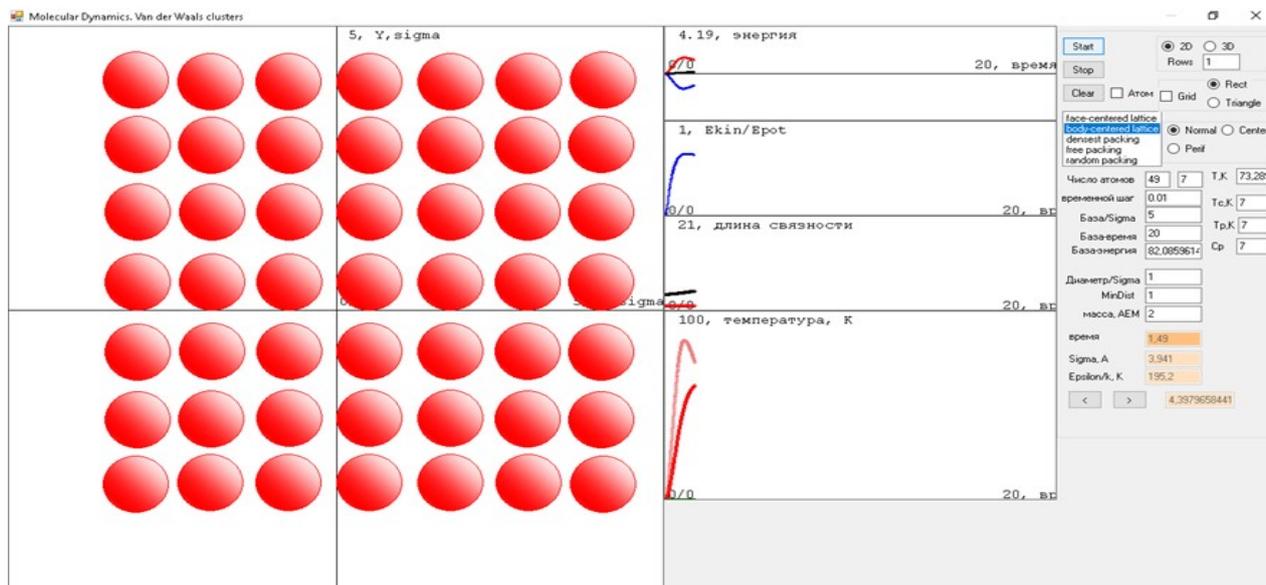


Рисунок 5 – Динамические параметры при формировании молекулярного кластера

Рассмотрены и проанализированы наиболее удобные и достоверные методы. Плотность газов и смесей газов рассчитывается по уравнению Соаве – Грабоски – Дауберта. Коэффициент динамической вязкости газа рассчитывается на основе потенциалов Леннарда – Джонса (неполярные газы) и Штокмайера (полярные газы). Коэффициент динамической вязкости жидкости по методам Морриса и Леца – Стила. Коэффициент теплопроводности жидкости рассчитывается по методу Сато – Риделя. Коэффициент теплопроводности газов рассчитывается по методу Стила и Тодоса. Изобарная теплоемкость рассчитывается по методу Ли – Кеслера. Идеально-газовая теплоемкость рассчитывается по полуэмпирическим уравнениям. Давление насыщенных паров рассчитывается по уравнению Питцера.

Для каждого метода указана относительная погрешность и пределы применения. Расчеты выбраны таким образом, что в последствие их удобно будет использовать при вычислении на ЭВМ. Использование приведенных расчетов заменит многочисленные справочные пособия по свойствам веществ.

Для автоматизации расчетов удобно было бы использовать программное приложение с экспериментальными константами и автоматизированными методами расчетов. В дальнейшем программное обеспечение будет состоять из базы данных на удаленном сервере и приложений для основных операционных систем. Для ускорения процесса разработки возможно создать т. н. прогрессивное веб-приложение (PWA) [4], которое будет работать в любом современном браузере. Интернет потребуется только для начальной загрузки и обновления данных приложения. Такое решение позволит получать актуальные данные из базы данных быстро и на любом устройстве.

Список литературы

1. Reid, R. The properties of gases and liquids / R. Reid, J. Prausnitz, B. Poling. – 4 ed. – New York, 1987.
2. Рид, Р. Свойства газов и жидкостей / Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд. – Л. : Химия, 1982.
3. Уэйлес, С. Фазовые равновесия в химической технологии : в 2 ч. : пер. с англ. / С. Уэйлес. – М. : Мир, 1989. – 304 с.
4. Что такое прогрессивные веб-приложения? [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://web.dev/what-are-pwas>. – Дата доступа: 09.03.2023.

A software has been developed to access a database of physical properties of gases and liquids. The database includes data for more than 500 substances and contains information on more than 20 properties.

Гримута Олег Андреевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, o.grimuta+fks@gmail.com.

Чекавий Иван Валерьевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, avilr.com@gmail.com.

Научный руководитель – Никитин Александр Викторович, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, nik@grsu.by.

УДК 53.06

А. Ю. ГУЛИЧ, К. А. ЛЮБИНСКИЙ, А. И. ГОЛУБОВИЧ, А. В. ИСАЕВ

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ ИЗМЕРЕНИЯ МЕЖВИТКОВОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ ФАЗОВЫХ СООТНОШЕНИЙ

Выход из строя асинхронных двигателей электрических машин (ЭМ) является важной проблемой современного станкостроения. Для этого следует определить наиболее эффективный метод по выявлению неисправностей ЭМ.

Для выявления повреждений или выхода из строя ЭМ, наиболее актуальным способом является анализ изменений, возникших с появлением в обмотках двигателей дефектов, резонансных процессов, путем измерения межвиткового сопротивления. Целью работы является проанализировать эффективность данного метода и определить целесообразность его применения. В качестве примера рассмотрим следующие асинхронные двигатели (АД): АД АИР63В4У3 и АД КР71.1/4, построим их математические модели, с помощью которых опишем процессы образования дефектов в обмотках и произведем анализ математических моделей и сравнение их с полученными результатами.

В данной работе изучено влияние наличия дефектов в обмотках ЭМ на изменение фазочастотных характеристик этих обмоток в АД с различными значениями межвитковых сопротивлений. Выявлены зависимости на основе этих изменений, по которым были построены математические модели и проведено сравнение результатов экспериментальных данных с данными, полученными при моделировании.

Наиболее частой проблемой различных методов по выявлению неисправности электрических машин и асинхронных двигателей является неспособность спрогнозировать выявление выхода из строя ЭМ путем диагностики их обмоток. Это говорит о том, что выявление поломки будет несвоевременным, а соответственно и реагирование на эту неисправность будет поздним, что может приводить к аварии на различных объектах или производстве. Поэтому следует разрабатывать или исследовать методы, способные выявить неисправности асинхронных и синхронных двигателей, а именно их обмоток как можно раньше. Существует метод, на основе которого можно фиксировать активное и реактивное сопротивление катушки и сравнивать полученные значения с исходными и уже на основе полученных результатов делать вывод о работоспособности двигателя [1]. Так наиболее перспективными подходами являются те, что основываются на прямых или косвенных методах обнаружения изменения сопротивления. Также следует учесть, что с каждым годом применение ЭМ только увеличивается и поиск наиболее эффективной фиксации выхода из строя двигателей является только актуальнее.

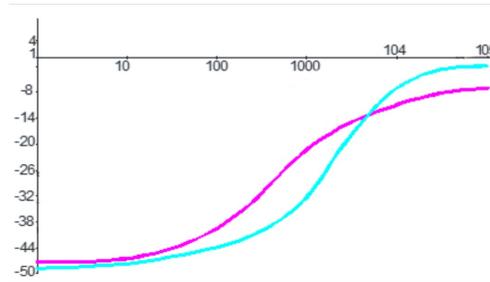
На сегодняшний день существуют различные методы диагностики, способные достаточно точно оценить техническое состояние электропривода, а также его остаточный ресурс. Один из таких методов основан на измерении ЭДС обмотки электропривода в результате инерционного вращения вала после прекращения подачи питания на двигатель. Суть метода заключается в измерении частоты колебаний ЭДС и сравнения полученных результатов с данными от исправного электродвигателя [2]. Таким образом, можно определить наличие межвитковых замыканий. Однако самыми передовыми методами определяется номинальное сопротивление по косвенным признакам. Например, можно использовать расхождение амплитуд сигналов токов, напряжений и мощности каждой фазы, а также коэффициенты не симметрии и гармонических колебаний.

В качестве альтернативного метода определения состояния изоляции обмоток статора, можно назвать измерение действующих значений токов и напряжений статора. Этот метод позволяет достаточно быстро и точно определить состояние изоляции обмоток статора и выявить возможные неисправности. Во время измерения необходимо обеспечить нормальную работу электродвигателя, чтобы получить точные результаты. Это означает, что электродвигатель должен быть включен в сеть и работать при номинальной нагрузке. Измерение проводится на рабочей частоте электродвигателя. После измерения, полученные результаты сравниваются с исправным двигателем.

Между тем данные способы являются не практичными в условиях предприятий, так как подразумевают наличие рабочих единиц, для сравнения полученных характеристик. Добавим также, что определения остаточного ресурса работы ЭМ применяются методы с построением математических моделей старения изоляции, такие как многофакторная детерминированная модель прогноза И. А. Гутова, что так же проблематично осуществить на практике. Исходя из этого эффективность таких методов невысока и в реальных условиях применяются и развивается методы анализа частотных характеристик обмоток электрических машин и методы, рассматривающие резонансные явления в этих обмотках. Эти способы определения дефектов более универсальны и применимы на рабочих предприятиях. Такой метод определения используется в работе [3], а именно анализ полученных путем наложения спектра двух импульсных последовательностей, фазовых спектров, т. е. фазовые обмотки контролируемого двигателя, на АЧХ фазной обмотки, подаются последовательности от генератора импульсов. В исследовании [4] рассматриваются так же фазовые спектры последовательностей импульсов. А именно, используются последовательности прямоугольной формы,

полученные через точки перехода напряжений, через ноль, k-х гармоники на частоте $\omega_0 = 2k\pi/T$. Максимальной чувствительностью к дефектам обмоток обладает контроль за резонансными явлениями, о чем свидетельствуют исследования, что делает его удобным инструментом для обнаружения неисправностей и мониторинга состояния электрических двигателей на ранних стадиях их проявления.

Проанализировав результат, можно наблюдать зависимость между падением межвиткового сопротивления и значением амплитуды высших гармоник, что применимо для оценки пригодности двигателя к дальнейшей работе. Таким образом, измеряя величины амплитуды гармоник ЭМ, можно построить зависимости амплитуды от уровня сопротивлений, тем самым получив семейства фазочастотных характеристик. На рисунке 1 представлены зависимости максимума ФЧХ от межвитковых сопротивлений для 2 двигателей в неисправных обмотках.



1 – для АД АИР63В4У3; 2 – для АД КР71.1/4

Рисунок 1 – Зависимости значений разности сдвига фаз АД от межвитковых сопротивлений в обмотке с дефектом

Основываясь на полученном массиве данных, определим, как сопротивление влияет на разность фаз в исследуемых асинхронных двигателях. Метод наименьших квадратов является наиболее приемлемым методом для аппроксимации данных. Зависимости данных графиков можно описать с помощью следующего математического уравнения:

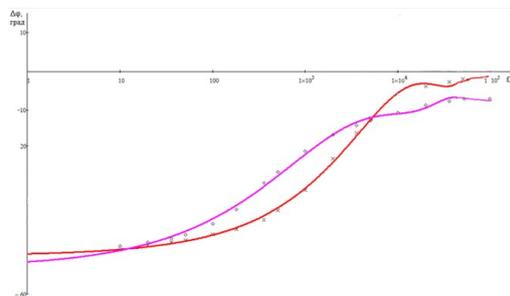
$$\Delta \varphi_i(R) = x_i \cdot R^0 + y_i \cdot R^{\frac{1}{2}} + z_i \cdot R^1 + v_i \cdot R^{\frac{3}{2}} + u_i \cdot R^2 \quad (1)$$

где x, y, z, v, u – начальные значения коэффициентов при x в полиноме; i – номер выбранного АД; R – сопротивление в месте дефекта.

Для выбранных АД были получены коэффициенты, которые описывают зависимости межвиткового сопротивления в обмотках от максимальной фазочастотной характеристики. С использованием этих коэффициентов были построены промоделированные зависимости максимума фазочастотных характеристик от межвитковых сопротивлений для каждого двигателя (рисунок 2), а также определены значения коэффициентов для каждого двигателя (таблица 1).

Таблица 1 – Значения коэффициентов в полученном полиноме максимума ФЧХ от межвитковых сопротивлений для выбранных АД

Коэф.	АИР63В4У3	АД КР71.1/4
x	-49.71	-35.8
y	0.537	1.23
z	$2.899 \cdot 10^{-3}$	$-1.84 \cdot 10^{-2}$
v	$-6.37 \cdot 10^{-5}$	$1.26 \cdot 10^{-4}$
u	$-4.08 \cdot 10^{-10}$	$4.70 \cdot 10^{-10}$



1 – для АД АИР63В4У3; 2 – для АД КР71.1/4; x, \diamond – измеренные значения разности сдвига фаз

Рисунок 2 – Промоделированные зависимости значений разности сдвига фаз от межвитковых сопротивлений для выбранных АД

Погрешность относительно полученных математических зависимостей и экспериментальных показаний для уровня сопротивлений 10 Ом, 1 кОм и 10 кОм для каждого двигателя была рассчитана по формуле (2) и представлено в таблице 2.

$$\Delta \varphi = \frac{(\Delta \varphi_1 - \Delta \varphi_0)}{\Delta \varphi_1} \quad (2)$$

где $\Delta \varphi_0$ – значение разности фаз, полученное из математической зависимости, $\Delta \varphi_1$ – значение, полученное экспериментально.

Таблица 2 – Относительная погрешность зависимостей

	АИР63В4У3	АД КР71.1/4
10 Ом	0.062	0.018
1 кОм	0.048	0.016
10 кОм	0.128	0.094

Список литературы

1. Гемке, Р. Г. Неисправности электрических машин / Р. Г. Гемке. – 8-е изд., испр. и доп. – Л. : Энергия, 1995. – 296 с.
2. Способ диагностики и оценки остаточного ресурса электроприводов переменного тока : патент RU2526500 / Ю. Л. Жуковский, С. И. Таранов. – Оpubл. 20.08.2014.
3. Способ комплексного контроля трехфазной обмотки электрической машины : патент RU2289143С2 / С. А. Сильвашко, В. Н. Булатов, В. Д. Шевеленко. – Оpubл. 10.12.2006.
4. Способ контроля трехфазной обмотки электрической машины : патент RU2339962 / В. Н. Булатов, С. А. Сильвашко. – Оpubл. 2011.

The purpose of this study is to assess the possibility of using resonant processes occurring in electrical converters and machines to effectively diagnose the condition of their windings. Asynchronous motors will be considered as an example, their mathematical models will be constructed with the help of which the processes of defect formation in windings will be described, as well as the analysis of mathematical models and their comparison with the results obtained will be performed. In this paper, the influence on the phase-frequency characteristics of asynchronous motor windings of various classes of resistance indicators between turns, the number and location of closed turns in sections is studied. Mathematical models of these dependences are constructed, coefficients of polynomials are determined and the discrepancy of these mathematical dependences on the considered parameters characterizing defects in the windings of machine coils is estimated relative to experimental data.

Гулич Артем Юрьевич, студент 3-го курса приборостроительного факультета, Белорусский национальный технический университет, Минск, Республика Беларусь, hupege@vk.com.

Любинский Кирилл Александрович, студент 3-го курса приборостроительного факультета, Белорусский национальный технический университет, Минск, Республика Беларусь, kirillqwerty156@gmail.com.

Голубович Алексей Игоревич, студент 3-го курса приборостроительного факультета, Белорусский национальный технический университет, Минск, Республика Беларусь, alexgolub1202@gmail.com.

Научный руководитель – *Исаев Александр Витальевич*, старший преподаватель кафедры информационно-измерительной техники и технологий, приборостроительный факультет, Белорусский национальный технический университет, Минск, Республика Беларусь, isaev0302@gmail.com.

УДК 616.71

А. В. ДЛУБАКОВСКАЯ, П. Д. ЛИС

ОБРАБОТКА ПРЯМОТЕНЕВЫХ РЕНТГЕНОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ РАЗРАБОТАННОЙ ПРОГРАММЫ «PDisk»

С помощью разработанной программы «PDisk» проведена обработка прямотеневых рентгенофункциональных изображений межпозвоночного диска поясничного отдела позвоночника. Проведён анализ полученных результатов, установлены закономерности размеров тел позвонков.

Заболевание суставов, при котором поражаются костные ткани, называют остеохондрозом. Перед дистрофическими изменениями в костной ткани, необходим анализ хрящевой ткани. Согласно статистике, от болей в спине, вызванных развитием остеохондроза, страдает более 50 % всего взрослого населения. Первичными факторами развития этой болезни являются недостаточное питание хрящей, поэтому важно исследовать межпозвоночный диск поясничного отдела позвоночника. Правильная диагностика межпозвоночного диска поясничного отдела позвоночника позволит предотвратить заболевания на ранних этапах. Интерес к данной те-

ме вызвала ее актуальность, большая часть населения страдает различными заболеваниями позвоночника. Целью исследования является написание программы «PDisk» для обработки прямотеневых рентгенофункциональных изображений позвоночного столба и определены высоты межпозвонковых дисков, с помощью разработанной программы.

Для разработки использовалась среда Pycharm – кроссплатформенной интегрированной среде разработки для языка программирования Python. Программа написана на языке Python с использованием PyQt5 – модуль для создания GUI приложений в Python. Интерфейс программы разработан в кроссплатформенной свободной среде разработки графических интерфейсов Qt Designer, которая входит в состав Qt framework. Для хранения данных о пациентах была использована SQLite – встраиваемая кроссплатформенная БД, которая поддерживает достаточно полный набор команд SQL.

На рисунке 1 показан интерфейс программы «PDisk». Слева расположена таблица, в которой хранятся данные пациентов. Выше расположена кнопка «Добавить изображение» – объект класса QPushButton – она отвечает за добавление изображение в объект класса QLabel, в котором можно работать с изображением. После обработки полученные данные о высотах заносятся в поле «L» – объект класса QLineEdit. Ещё один объект этого класса сможет выводить на экран площадь межпозвонковых дисков, которая будет рассчитываться по кнопке «Рассчитать площадь» – объект класса QPushButton.



Рисунок 1 – Интерфейс программы «PDisk»

Имеющийся пакет программ «PDisk» позволяет рассчитать площади и высоты тел позвонков и межпозвонковых дисков, так как именно эти параметры являются важными для определения заболеваний. Загружается фотография в QLabel и вычисляется высота межпозвонковых дисков с помощью QPixmap – пиксельной карты, на которой отображаются линии, которые пользователь проводит сам с помощью клика мыши. На прямотеневых рентгенофункциональных изображениях видны только твердые ткани, а такие, как хрящи и связки, не отображаются. Для определения площади рентгенологического межпозвонкового пространства, которая находится между телами позвонков, определяют границы на рентгенофункциональных изображениях. Магнитно-резонансная томография позволяет увидеть мягкие ткани на снимках, но не позволяет исследовать их в динамике, в отличие от нашего метода.

Известно, что у здоровых пациентов размеры тел позвонков в диапазоне Th4-L4 имеют некоторые закономерности. Так, размеры переднего, среднего и заднего отделов тел равны друг другу, высота каждого нижерасположенного позвонка на 1–2 мм больше, чем у тела, находящегося выше [2]. Кроме этого, если различия в высоте передней и задней поверхностей тел позвонков и встречаются, то они не превышают 1 мм. Определено, с помощью разработанной программы «PDisk», что у здоровых пациентов размеры межпозвонковых дисков имеют некоторые закономерности, а именно высота каждого нижерасположенного межпозвонкового диска больше, чем у находящегося выше.

Список литературы

1. Абельская, И. С. Остеохондроз шейного отдела позвоночника / И. С. Абельская, О. А. Михайлов. – Минск : БелМАПО, 2004. – 220 с.
2. Антонов, И. П. Шейный остеохондроз: клиника, лечение и профилактика / И. П. Антонов // Здоровоохранение. – 1996. – № 4. – С. 7–9.
3. Голубев, В. Л. Болевые синдромы в неврологической практике / В. Л. Голубев. – 3-е изд. – М. : МЕДпресс-информ, 2010. – 338 с.
4. Иваничев, Г. А. Мануальная медицина (мануальная терапия) / Г. А. Иваничев. – М. : МЕДпресс, 1998. – 470 с.

With the help of the developed program «PDisk», direct-shadow X-ray functional images of the intervertebral disc of the lumbar spine were processed. The analysis of the obtained results was carried out, and regularities in the sizes of the vertebral bodies were established.

Длубаковская Анна Валерьевна, студентка 4-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, dlubakovskaya@gmail.com.

Лис Полина Дмитриевна, студентка 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь.

Научный руководитель – *Жарнова Ольга Александровна*, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, zharik783@tut.by.

УДК 538.911,536.212

П. В. ДОБРОГОСТ, И. А. ЗУР, Я. Д. ТИТОВЕЦ, А. К. СТРАУСОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЁНОК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ²

Методом молекулярной динамики проведено моделирование структуры и физических свойств пленок алмазоподобного углерода толщиной до 20 нм с использованием многочастичного потенциала Терсоффа и термостата Нозе – Гувера. Рассчитаны коэффициенты самодиффузии и теплопроводности углеродной пленки при нормальных условиях. С помощью радиальных функций распределения исследована структура системы при температурах в диапазоне 293–3750 К.

Применимость наноразмерных пленок алмазоподобного углерода (АПУ) в качестве износостойких и просветляющих покрытий обуславливает интерес к исследованию трибологических и оптических свойств АПУ. Несмотря на достигнутый прогресс в их изучении, теплофизические свойства АПУ, однако, остаются малоизучены. В последнее время актуально использование АПУ в качестве резистивных покрытий электродов детекторов заряженных частиц для повышения стабильности их функционирования, что повышает необходимость исследования электрических и теплофизических характеристик АПУ.

В данной работе для исследования теплофизических свойств АПУ выбран метод молекулярной динамики (МД) благодаря его эффективности в задачах взаимосвязанного моделирования физических и структурных свойств наноразмерных систем. Особый интерес к методу МД обусловлен возможностью отслеживания эволюции системы взаимодействующих частиц, что позволяет установить как эффективные характеристики области, так и ответственные за них механизмы. Метод классической МД позволяет рассмотреть на несколько порядков больше атомов, чем метод функционала электронной плотности, однако всё ещё оперирует данными на микроскопическом уровне и позволяет получить исчерпывающую информацию о системе: рассчитать положения, скорости и энергии всех частиц, составляющих систему, а также ее макроскопические свойства, на исследование которых нацелены многие экспериментальные методики.

Коэффициент самодиффузии рассчитывается из предположения о том, что атомы кристаллической решетки АПУ совершают хаотические колебания, которые можно представить в виде случайных блужданий. Тогда среднеквадратичное отклонение атомов от их начального положения будет прямопропорционально коэффициенту самодиффузии:

$$D = \frac{\overline{R(t)^2}}{6t} \quad (t \rightarrow \infty), \text{ где } D \text{ – коэффициент самодиффузии,}$$

$$\overline{R(t)^2} \text{ – усредненное по всем атомам среднеквадратичное отклонение.}$$

Как видно из рисунок 1 коэффициент самодиффузии сходится по закону, близкому к логарифмическому, и требует большого количества вычислительных шагов для выхода на насыщение. Ввиду недостатка

²Работа выполнена в студенческой научной лаборатории Вычислительного эксперимента и игровых технологий БГУ.

экспериментальных данных в литературе рассчитанное значение $D = 1,75 \cdot 10^{-19} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$ при нормальных условиях сравнивается с $D = 2,86 \cdot 10^{-19} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$ [1] при экстремальных условиях ($T = 2300 \text{ К}$). По порядку полученных величин значения близки.

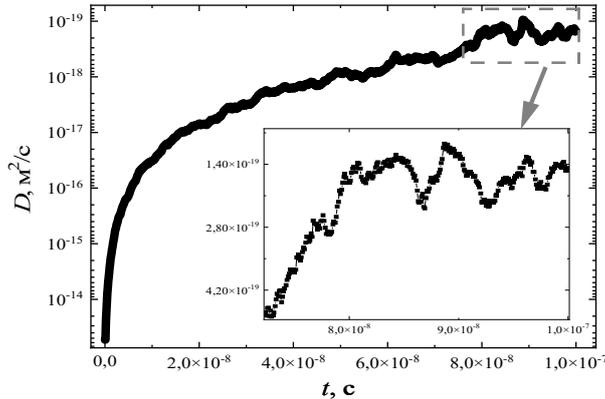


Рисунок 1 – График зависимости коэффициента самодиффузии D в логарифмическом масштабе от времени t с начала симуляции

Для вычисления коэффициента теплопроводности при фиксированной температуре использовался метод, основанный на формализме Грина – Кубо, который сопоставляет коэффициенты переноса с временными корреляционными функциями соответствующих потоков:

$$\kappa_x = \frac{V}{k_B T^2} \int_0^{\infty} \langle J_x(t) \cdot J_x(0) \rangle dt, \text{ где } \kappa_x - \text{коэффициент теплопроводности по направлению } x,$$

$$\langle J_x(t) \cdot J_x(0) \rangle - \text{автокорреляционная функция компоненты } x \text{ теплового потока.}$$

Если используются периодические граничные условия, то фононы при пересечении границ расчетной области будут перезаходить в нее и интерферировать сами с собой на временах больших, чем характерное время τ прохождения фононом системы. Характерное время τ прохождения фононом системы можно оценить как отношение размера области по направлению, имеющему периодические граничные условия, к скорости продольной волны акустического фонона в АПУ [2; 3]. Таким образом, для расчетных ячеек размерами до 20 нм автокорреляционная функция будет корректна только на временах $t < \tau = 500 \text{ фс}$. В таком случае целесообразно аппроксимировать эту зависимость с помощью двойной экспоненты [4] и только затем интегрировать по всему временному промежутку:

$$\langle J_x(t) \cdot J_x(0) \rangle = A_o e^{-t/\tau_o} + A_a e^{-t/\tau_a}; \quad \kappa_x = \frac{V}{k_B T^2} \int_0^{\infty} (A_o e^{-t/\tau_o} + A_a e^{-t/\tau_a}) dt = \frac{V}{k_B T^2} (A_o \tau_o + A_a \tau_a)$$

На рисунке 2 представлена нормированная автокорреляционная функция, а также ее аппроксимация, полученная нелинейным методом наименьших квадратов (Левенберг – Марквардт). Благодаря изотропности алмаза теплопроводность рассчитывается как среднее арифметическое по трем направлениям, что позволяет уменьшить статистическую погрешность расчета. Полученное значение коэффициента при нормальных условиях $\kappa = 4300 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ сопоставимо с известной теплопроводностью изотопически обогащенного углеродом-12 алмаза $\kappa = 3320 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ [5].

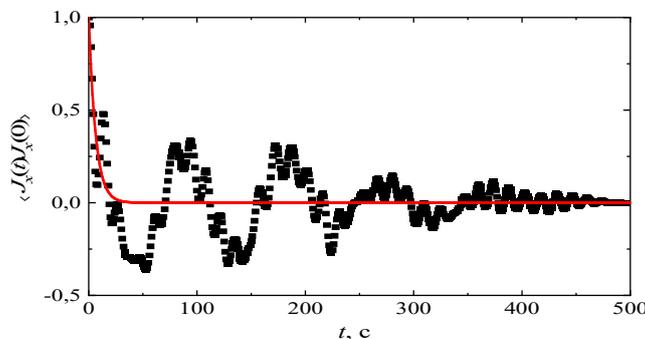
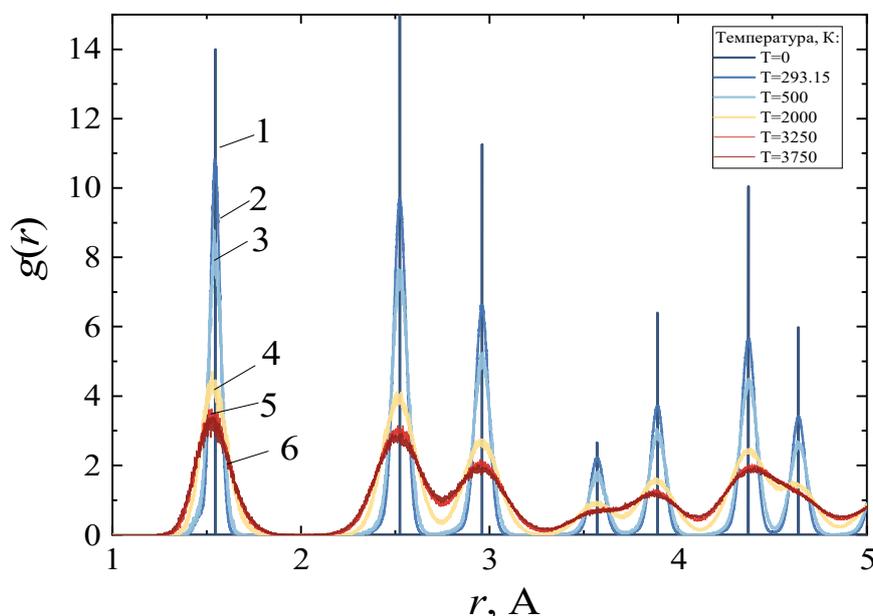


Рисунок 2 – График зависимости нормированной автокорреляционной функции потока тепла $\langle J_x(t) \cdot J_x(0) \rangle$ от времени t с начала симуляции на временах до 500 фемтосекунд

Радиальные функции распределения (РФР) построены для анализа структуры алмазной решетки. Положения пиков РФР представляют собой расстояния до ближайшего соответствующего соседа в алмазной решетке.

На рисунке 3 можно видеть, что при увеличении температуры происходит уширение пиков РФР, которое объясняется увеличением энергии колеблющихся атомов, а значит и неопределённость положения атома в пространстве. При температуре системы 3250 К и выше видно, что в периферийных частях системы наблюдается стадия предплавления (для поверхностных атомов температура плавления меньше, чем для атомов объёма).



1 – 0 К, 2 – 293,15 К, 3 – 500 К,
4 – 2000 К, 5 – 3250 К, 6 – 3750 К

Рисунок 3 – График семейства радиальных функций распределения при различных температурах системы

Список литературы

1. Zhang, B. Calculation of self-diffusion coefficients in diamond / B. Zhang, X. Wu // Appl. Phys. Lett. – 2012. – Vol. 100, № 5. – P. 051901.
2. Lukes, J. R. Thermal Conductivity of Individual Single-Wall Carbon Nanotubes / J. R. Lukes, H. Zhong // J. Heat Transf. – 2007. – Vol. 129, № 6. – P. 705–716.
3. Dresselhaus, M. S. Phonons in carbon nanotubes / M. S. Dresselhaus, P. C. Eklund // Adv. Phys. – 2000. – Vol. 49, № 6. – P. 705–814.
4. Thermal conductivity of diamond and related materials from molecular dynamics simulations / J. Che [et al.] // J. Chem. Phys. – 2000. – Vol. 113, № 16. – P. 6888–6900.
5. Thermal diffusivity of isotopically enriched C 12 diamond / T. R. Anthony [et al.] // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 42, № 2. – P. 1104–1111.

The structure and temperature properties of diamond-like carbon films with a thickness of up to 20 nm were modeled using the Tersoff multi-particle potential and the Nose-Hoover thermostat by molecular dynamics. The coefficients of self-diffusion and thermal conductivity for the carbon layer are calculated under normal conditions. The system's structure was investigated using radial distribution functions at temperatures between 293 and 3700 K.

Доброгост Павел Владимирович, студент 4-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, dobrosun02@gmail.com.

Зур Илья Александрович, физический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, zur.ilya01@gmail.com.

Титовец Яна Дмитриевна, младший научный сотрудник, физический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, yoscrimeer@gmail.com.

Научный руководитель – *Федотов Александр Сергеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, физический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, fedotov.alexandro@gmail.com.

УДК 621.315.592

К. А. ДОРОШКЕВИЧ

**ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ ФОТОАКТИВНЫХ СЛОЁВ
НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА n-CdS/p-CdTe**

С помощью компьютерного моделирования в программе AFORS-HET исследовались солнечные элементы на основе CdS/CdTe, были получены зависимости эффективности СЭ от толщин полупроводниковых слоев. Моделировалась эффективность солнечных элементов CdS/CdTe с толщинами слоев от 5 до 200 нм для слоя CdS и от 0,1 до 8,2 мкм для CdTe. Установлено, что оптимальная толщина слоя CdS – 20 нм, толщина CdTe лежит в диапазоне от 3,3 до 3,9 мкм. При таких толщинах КПД составляет 18,59 %.

Процесс численного моделирования является важным этапом разработки новых солнечных элементов (СЭ), так как позволяет заменить сотни испытаний десятков прототипов, воссоздать абсолютно любые условия, причем с практически безошибочным результатом. Один мощный компьютер в состоянии заменить месяцы работы тестовой лаборатории. Моделирование СЭ можно осуществить в программах SCAPS-1D, PC1D, AFORS-HET и др. Большинство исследований по моделированию СЭ посвящено СЭ на кремниевых подложках, однако существуют полупроводниковые слои из других материалов, которые не уступают по эффективности и рентабельности кремниевым.

СЭ на основе CdS/CdTe быстро набирают популярность благодаря сочетанию высокой средней эффективности и низкой цены. КПД СЭ на основе гетероперехода CdTe/CdS мало меняется в процессе эксплуатации в отличие от СЭ на основе аморфного кремния или перовскитов.

Для организации промышленного производства таких СЭ вполне достаточно природных запасов теллура и кадмия. Комплексные медико-химические исследования показали, что в отличие от кадмия теллурид кадмия не является токсичным. При этом CdTe обладает высокой устойчивостью к разложению, поэтому в процессе эксплуатации СЭ на основе теллурида кадмия не оказывают отрицательного воздействия на здоровье людей [1].

Цель работы заключается в моделировании n-CdS/p-CdTe солнечных элементов и нахождении толщин фотоактивных полупроводников слоев, при которых эффективность СЭ наибольшая.

Численное моделирование СЭ выполнено с помощью программного продукта AFORS-HET [2]. Он дает возможность построить одномерную модель СЭ на основе гомо- и гетеропереходов тонких пленок. Моделирование СЭ состоит из моделирования электрофизических и оптических характеристик. В основе процесса моделирования лежит численное решение уравнений непрерывности и уравнения Пуассона для каждого активного p-n перехода СЭ. Результатом моделирования является построение зонной диаграммы, вольт-амперной, спектральной и ряда других характеристик.

При построении модели n-CdS/p-CdTe СЭ в программе AFORS-HET v2.5 были использованы следующие условия: измерение вольт-амперных характеристик (ВАХ) происходило при постоянном токе (DC); освещение элемента – со стороны слоя сульфида кадмия солнечным светом со спектром и значением интенсивности, соответствующим международному стандарту AM1.5G; температура СЭ составляла 300 К; пренебрегалось квантово-механическими эффектами на границе раздела; работа выхода основных носителей из слоя CdTe была равна 5.4 эВ; количество шагов для вычисления ВАХ находилось в диапазоне от 0 до 1,0 В и составляло 20.

В данной работе толщина слоя CdS варьировалась от 5 до 200 нм с шагом 5 нм, CdS является полупроводниковым материалом, используемым в качестве «оконного слоя» в тонкопленочных СЭ. В СЭ излучение проходит через слой CdS и поглощается в полупроводнике p-типа вблизи p-n перехода. Чтобы избежать снижения КПД, толщину этого полупроводникового слоя стремятся минимизировать до размеров области пространственного заряда [3].

Для оптимизации толщины полупроводникового слоя CdTe толщина изменялась от 0,1 до 8,2 мкм с шагом не менее 0,3 мкм.

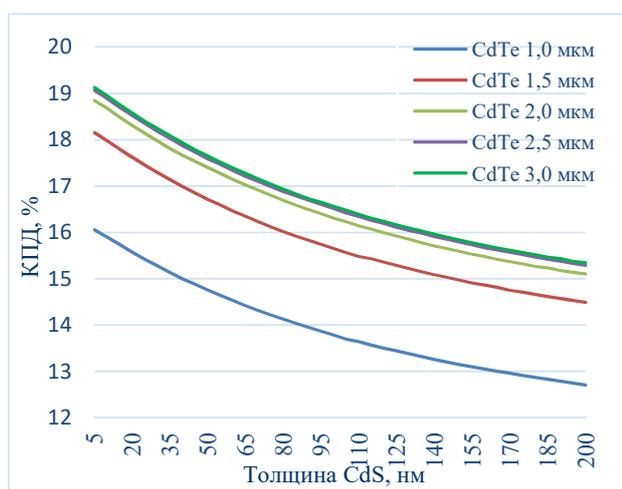
Параметры полупроводниковых слоев для моделирования СЭ в программе AFORS-HET представлены в таблице 1.

В программе AFORS-HET были построены ВАХ СЭ с разными толщинами фотоактивных слоев, по ним рассчитывались КПД СЭ (при расчете КПД интенсивность падающего солнечного излучения считалась равной 100 мВт/см²).

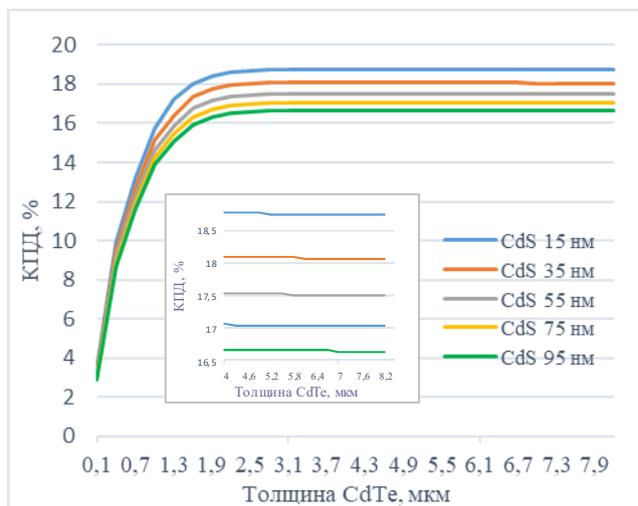
На рисунке 1а представлены зависимости эффективности от толщины слоя CdS для СЭ с толщинами полупроводникового слоя CdTe 1,0 мкм, 1,5 мкм, 2,0 мкм, 2,5 мкм, 3,0 мкм, на рисунке 1б – зависимости эффективности от толщины слоя CdTe для СЭ с толщинами полупроводникового слоя CdS 15 нм, 35 нм, 55 нм, 75 нм, 95 нм. Толщина слоев является одним из важных параметров СЭ, который влияет на электрические свойства солнечных элементов, убедиться в этом можно проанализировав построенные графики.

Таблица 1 – Исходные параметры слоёв СЭ на основе n-CdS/p-CdTe [5; 6]

Параметры	Обозначение (единицы)	CdS (n-тип)	CdTe (p-тип)
Толщина	Thickness (нм)	5–200	100–8200
Относительная диэлектрическая проницаемость	dk	10,0	9,4
Ширина запрещенной зоны	E_g (эВ)	2,4	1,5
Энергия сродства к электрону	χ (эВ)	4,5	4,3
Плотность состояний в зоне проводимости	N_c (см ⁻³)	$2,2 \times 10^{18}$	8×10^{17}
Плотность состояний в валентной зоне	N_v (см ⁻³)	$1,8 \times 10^{19}$	$1,8 \times 10^{19}$
Подвижность электронов	μ_n (см ² /(В×с))	100	320
Подвижность дырок	μ_p (см ² /(В×с))	25	40
Концентрация донорной примеси	N_d (см ⁻³)	1×10^{19}	0
Концентрация акцепторной примеси	N_a (см ⁻³)	0	1×10^{15}
Тепловая скорость электронов и дырок	v_e, v_h (см/с)	1×10^7	1×10^7
Плотность слоя	ρ (г×см ⁻³)	2,328	2,328
Показатель преломления	n	AFORS-НЕТ	2,76
Коэффициент экстинкции	k		0,13
Тип дефекта		Точечные дефекты акцепторного типа	Точечные дефекты донорного типа
Плотность дефектов	N_t (см ⁻³)	1×10^{18}	2×10^{14}
Характеристическая энергия	E (эВ)	1,2	0,75
Сечения захвата электронов	δn (см ⁻²)	1×10^{-17}	1×10^{-12}
Сечения захвата дырок	δp (см ⁻²)	1×10^{-12}	1×10^{-15}



а



б

Рисунок 1 – Графики зависимости КПД от толщины слоя CdS для различных толщин слоя CdTe (а) и от толщины слоя CdTe для различных толщин слоя CdS, на вставке – зависимость КПД от толщины слоя CdTe для различных толщин слоя CdS в увеличенном масштабе (б)

Из рисунке 1а видно, что с увеличением толщины «оконного слоя» CdS падает эффективность солнечного элемента. Из литературы [7; 8] следует, что минимальная толщина слоя CdS для эффективного преобразования солнечной энергии равна 20 нм.

Зависимость КПД от толщины слоя CdTe имеет более сложный характер. Эффективность СЭ возрастает с увеличением толщины слоя CdTe до определенного значения толщины полупроводникового слоя, которое соответствует максимуму эффективности. Это значение находилось в диапазоне от 3,0 до 4,6 мкм при варьировании толщины слоя CdS от 5 до 200 нм. Дальнейшее увеличение толщины слоя CdTe медленно снижает эффективность СЭ. Эту зависимость можно объяснить тем, что тонкого слоя недостаточно для эффективного поглощения солнечной энергии, но он хорошо проводит и разделяет образующиеся в нем электроны и дырки, толстый слой лучше поглощает свет, так как коэффициент поглощения CdTe составляет более 10^4 см^{-1} , однако в нем увеличиваются рекомбинационные потери.

Оптимальные толщины полупроводниковых слоев были выбраны с точки зрения экономичности и эффективности: значение толщины слоя CdS – 20 нм, значение толщины CdTe лежит в диапазоне от 3,3 до 3,9 мкм. При таких толщинах полупроводниковых слоев КПД солнечного элемента на основе CdS /CdTe составляет 18,59 %.

Список литературы

1. Гибкие солнечные модули на основе сульфида и теллурида кадмия / Г. С. Хрипунов [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43, № 8. – С. 1060–1064.
2. Froitzheim, A. AFORS-HET: a computer-program for the simulation of heterojunction solar cells to be distributed for public use / A. Froitzheim, R. Stangl, L. Elstner, M. Kriegel, W. Fuhs // 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion. – Osaka, Japan. – 2003. – Vol. 1. – P. 279–282.
3. Структурные, морфологические и оптические свойства тонких пленок / В. В. Хорошко [и др.] // Проблемы физики, математики и техники. – 2020. – № 2. – С. 43–46.
4. Thickness Optimization of ZnO/CdS/CdTe Solar Cell by Numerical Simulation / Devanshi Parashar [et al.] // Transactions on Electrical and Electronic Materials. – 2020. – Vol. 21. – P. 587–593.
5. Debashish, P. C-V and I-V Characterisation of CdS/CdTe Thin Film Solar Cell Using Defect Density Model / P. Debashish, D. Soumee // Serbian journal of electrical engineering – 2021. – Vol. 18, № 2. – P. 255–270.
6. Munef, R. A. Effect of Series Resistance Simulation on Chalcogenide Solar Cells Using One-Dimensional AFORS-HET Program / R. A. Munef, Z. J. Yaseen // Journal of algebraic statistics – 2022. – Vol. 13, № 3. – P. 717–727.
7. Optimal CdS Buffer Thickness to Form High-Quality CdS/Cu(In,Ga)Se2 Junctions in Solar Cells without Plasma Damage and Shunt Paths / Kyung Soo Cho [et al.] // ACS Omega. – 2022. – Vol. 5, № 37. – P. 23983–23988.
8. Numerical simulation and optimization of CdS/p-Si Heterojunction solar cells https / C. Duan [et al.] // Advances in Engineering Research. – Vol. 170. – P. 1463–1469.

In this work, the CdS/CdTe-based solar cells were studied using computer simulation in the AFORS-HET program, and the dependences of solar cell efficiency on the thicknesses of the semiconductor layers were obtained. The efficiency of CdS/CdTe solar cells with layer thicknesses from 5 to 200 nm for the CdS layer and from 0.1 to 8.2 μm for CdTe were simulated. It was found that the optimal thickness of the CdS layer is 20 nm, the thickness of CdTe is in the range from 3.3 to 3.9 μm . At these thicknesses, the efficiency is 18.59 %.

Дорошкевич Ксения Александровна, студентка 3-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, fiz.doroshke@bsu.by.

Научный руководитель – *Тиванов Михаил Сергеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, декан физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, tivanov@bsu.by.

УДК 537.87

Е. В. ДРОБОТОВ

ВЛИЯНИЕ ДЛИНЫ ВОЛНЫ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА БЛИЖНЕПОЛЕВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЦИЛИНДРОВ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

Численные исследования картин распределения внутренних и ближних полей (КРВиБП) для димеров (структуры, состоящие из двух диэлектрических цилиндров конечной длины) необходимы для того, чтобы выявить предпосылки электродинамического взаимодействия в системах таких частиц. Проводилось изучение зависимости КРВиБП в димерах при постоянных значениях диэлектрической проницаемости цилиндров, окружающей их среды и размеров [1].

Метод и результаты.

С помощью формализма объемного интегрального уравнения (ФОИУ) проводились численные исследования для прямых систем. Под прямыми системами понимаются структуры, для которых показатель преломления цилиндров превышает показатель преломления окружающей среды.

На рисунке 1 изображены распределения внутреннего и ближнего поля в центральных сечениях димера, состоящего из двух цилиндров конечной длины, который расположен в поле плоской электромагнитной волны,

распространяющейся вдоль оси OZ , имеющую амплитуду $E_0 = 1$ и поляризованную вдоль оси OY . Заметим, что отображение распределения внутреннего поля получаются в плоскостях, определяемых сеткой разбиения, которая соответствует используемому числу разбиений. Поэтому обычно удается получить картину РВП не в точном геометрическом центре цилиндра, а лишь вблизи этого точного центра [2].

В данной работе представлен димер из цилиндров с показателем преломления $n = 1,73$. Геометрические размеры частицы составили: $d = 100$ нм, $l = 1500$ нм. Исследования проводились при длине волны электромагнитного излучения – 300 нм и 600 нм. Рассматриваются сечения ZOX , ZOY , YOZ . Значение максимального коэффициента усиления интенсивности составляет $k_{\max} = 1$.

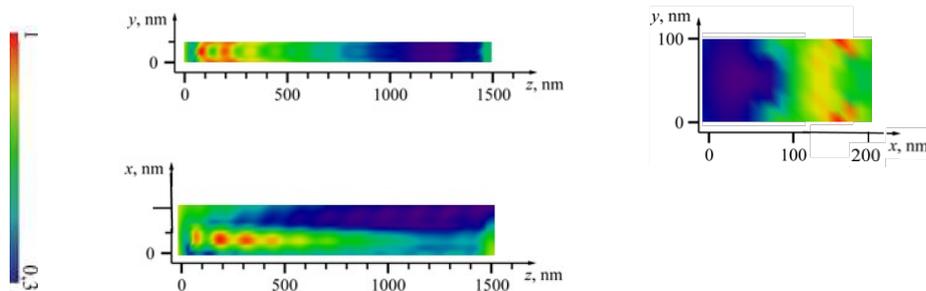


Рисунок 1 – КРВиБП для димера с $n_q = 1,73$ и $\lambda = 300$ нм

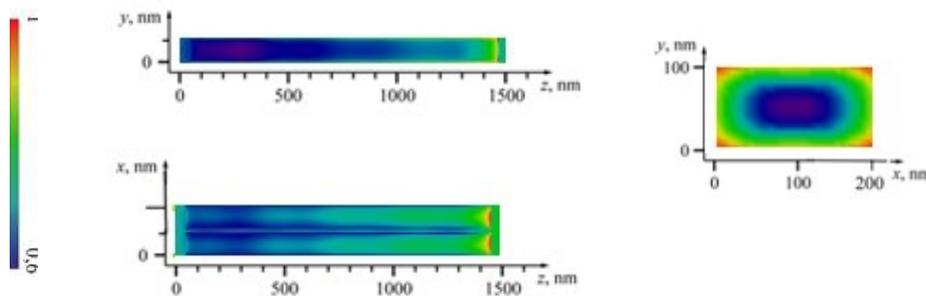


Рисунок 2 – КРВиБП для димера с $n_q = 1,73$ и $\lambda = 600$ нм

Сравнивая рисунки 1 и 2 можно наблюдать, что, при увеличении длины волны электромагнитного излучения от 300 нм до 600 нм КРВиБП видоизменяются. А именно, для $\lambda = 300$ нм немонотонное изменение интенсивности поля по всей длине цилиндра выражено значительно слабее, чем для $\lambda = 600$ нм. Также возникают модуляции интенсивности поля по длине цилиндра, затухающие вдоль направления распространения электромагнитного излучения. Модуляция внутреннего поля в цилиндрах выражена значительно, чем меньше длина волны электромагнитного излучения. Для $\lambda = 300$ нм k_{\max} уменьшается от 1 до значения 0.3, для $\lambda = 600$ нм k_{\max} изменяется от 1 до значения 0.6.

В данной работе провели сравнительное исследование КРВиБП для двух диэлектрических цилиндров с $n = 1,73$ при изменении длины волны электромагнитного излучения от $\lambda = 300$ нм до $\lambda = 600$ нм.

Список литературы

1. Kovtun-Kuszhel, V. A. Localization and scattering of electromagnetic waves in ordered arrays of finite cylinders / V. A. Kovtun-Kuszhel, R. A. Dynich, A. N. Ponyavina // Problems of mathematics, physics and technics. – 2012. – № 2 (11). – P. 27–33.
2. Ковтун-Кужель, В. А. Особенности распределения внутреннего поля для диэлектрических цилиндров конечной длины / В. А. Ковтун-Кужель, Т. А. Ситкевич // Весн. Гродзен. дзярж. ун-та імя Янкі Купалы. Сер. 2, Фізіка. – 2021. – Т. 11, № 3. – С. 46–53.

Numerical studies of the near and internal fields distribution (NFD and IFD) for a two dielectric cylinder of finite length are necessary in order to identify the prerequisites for electrodynamic interaction in systems of such particles. The study of the dependence of the NFD and IFD of two cylinders on the wavelength of electromagnetic radiation at constant values of the dielectric permittivity of the cylinders, their environment and dimensions was carried out.

Дроботов Евгений Викторович, магистрант 2-го года обучения физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, zdrobotovjeffren@mail.ru.

Научный руководитель – Ковтун-Кужель Виктория Александровна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры электротехники и электроники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, vkovtun@grsu.by.

УДК 537.874.32;537.871.52

Н. Н. ДУБИНЕЦКИЙ, К. Г. БАТРАКОВ, Н. И. ВОЛЫНЕЦ, О. Г. ПОДДУБСКАЯ ВЛИЯНИЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ НА ДВОЙНОЕ ЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЕ ТЕРАГЕРЦОВЫХ ВОЛН

Исследована структура, состоящая из двух ячеек кварц / нематик / кварц, подобраны оптимальные толщины кварцевых обкладок для достижения наибольшей разности фаз двух поляризаций выходящего излучения, получены зависимости коэффициентов прохождения и эллиптичности выходящей волны от расстояния между ячейками. Показано, что подбор геометрии позволяет увеличить сдвиг фаз между волнами соответствующих поляризаций.

В наше время наблюдается бурное развитие терагерцовых (ТГц) технологий. В терагерцовом диапазоне излучают космические объекты [1], ТГц спектроскопия позволяет узнать физически-химические свойства некоторых твердых и жидких веществ [2], магнитный момент определенных ферромагнетиков возможно переключать при помощи излучения этого диапазона, что может привести к созданию сверхбыстрой памяти [3]. Так же, поскольку многие материалы являются прозрачными для терагерцового излучения, оно может применяться в сканировании различных объектов (например, багаж в аэропортах) и медицине [4].

Для многих технологий, описанных выше необходимы различные приборы, такие как фазовращатели, поляризаторы и фильтры, работающие в ТГц диапазоне частот. В качестве вещества, изменяющего поляризацию излучения, могут выступать жидкие кристаллы (ЖК), в частности нематики [5–7]. Нематические ЖК являются оптически анизотропными средами, соответственно при прохождении через них электромагнитного излучения возникает эффект двулучепреломления, и исходная волна разбивается на две: обыкновенную и необыкновенную. Для двух этих лучей показатели преломления отличаются, и, как следствие, при выходе из среды между волнами возникает разность фаз. Достоинством использования нематических жидких кристаллов является возможность быстрой смены направления оптической оси при помощи внешнего электрического поля. Однако сложно поддерживать направление директора во всем объеме нематика при его толщине более 200 мкм. При большей толщине формируются домены, направления директора в которых могут отличаться. Вместе с тем длина волны терагерцового излучения варьируется от 0.1 до 1 мм, что делает его взаимодействие с такими тонкими слоями менее эффективным, чем для более коротковолнового оптического диапазона.

Решением могут послужить различные фазовые решетки, использующие ЖК вставки [8–10], однако они достаточно трудны в изготовлении. Так же есть вариант использовать слоистые структуры, содержащие слой нематика и кварца.

В данной работе предлагается улучшение эффективности взаимодействия ТГц с нематиком за счет переотражения и интерференции излучения внутри слоистой структуры, что приводит к многократному прохождению излучения через слой нематика. При расчете использовались две ячейки, схематическое изображение одной из которых показано на рисунке 1. Толщина кварцевых обкладок $d^q = 450$ мкм, нематика – $d = 150$ мкм. Ячейки располагаются последовательно одна за одной, и расстояние d'' между ними варьируется от 0 до 300 мкм. Диэлектрические проницаемости нематика вдоль оптической оси и перпендикулярных ей осей были выбраны, соответствующими ЖК E48 (4-Циано-4'-Пентилбифенил):

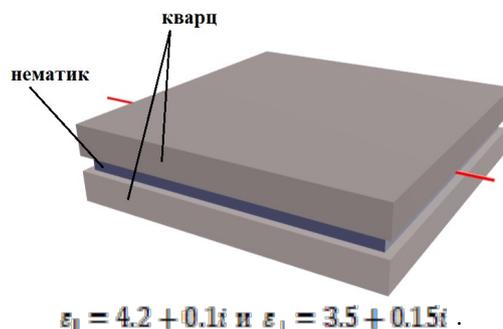


Рисунок 1 – Схематическое изображение ячейки, красной линией показано положение оптической оси

Для подбора оптимальных толщин кварцевых обкладок была рассмотрена одна ячейка, результаты расчётов представлены на рисунке 2, здесь и в дальнейшем падение нормальное, частота излучения 1 ТГц, плоскость поляризации излучения составляет с оптической осью угол 45° . Из расчётов видно, что при определенном значении толщин обкладок d_1 и d_2 можно добиться как меньшей разности фаз, чем просто у нематика, так и большей. В дальнейшем для расчётов были принято, что $d_1 = d_2 = d' = 450 \text{ мкм}$.

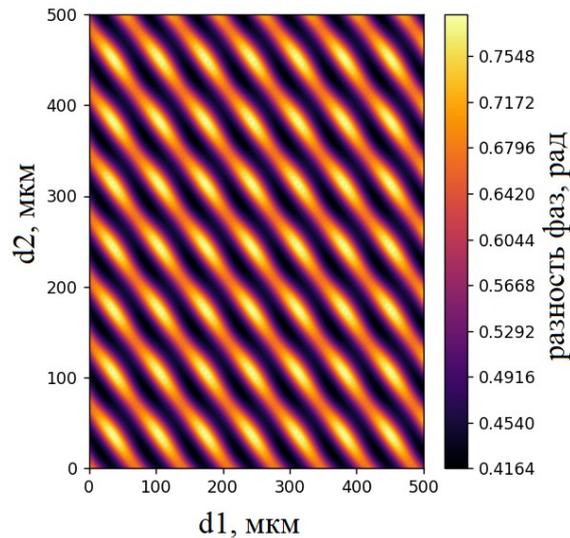


Рисунок 2 – Зависимость разности фаз волн, выходящих из структуры кварц / нематик / кварц, от толщин кварцевых обкладок при падении плоскополяризованной волны

Далее была рассмотрена система, состоящая из двух идентичных ячеек. На рисунке 3 представлена зависимость разностей коэффициентов прохождения и отражения падающего излучения для двух поляризаций. Из графиков видно, что изменением расстояния между ячейками можно эффективно варьировать пропускную способность системы, а также, делать преимущественным прохождение конкретной поляризации.

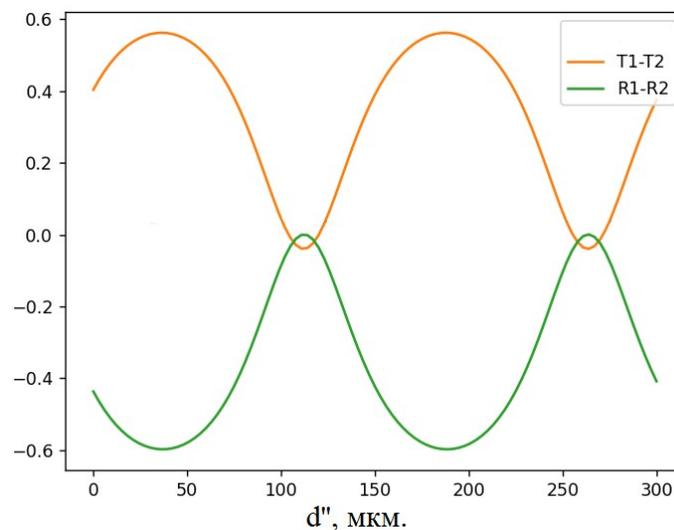


Рисунок 3 – Зависимость разностей коэффициентов прохождения (Т) и отражения (R) для двух перпендикулярных поляризаций падающего излучения от расстояния между ячейками

Изменяя расстояние между ячейками можно также варьировать разность фаз между двумя выходящими лучами (рисунке 4б), плоскости поляризации которых перпендикулярны и в совокупности с разностью коэффициентов прохождения для этих лучей мы наблюдаем в общем случае эллиптически поляризованное излучение. Причем отношение полуосей эллипса поляризации (коэффициент эллиптичности) меняется в зависимости от расстояния между ячейками, что видно на рисунке 4а.

В работе показано, что, изменяя угол между плоскостью поляризации падающего излучения (поворачивая ячейки) и меняя толщины обкладок и расстояние между ячейками можно добиться на выходе как круговой поляризации, так и плоской (когда угол между плоскостью поляризации падающего излучения и оптической осью нематика составляет 0° либо 90°), а также эллиптической с разными отношениями полуосей эллипса.

При этом из-за переотражения и интерференции эффекты, связанные с двулучепреломлением нематического жидкого кристалла можно как усиливать, так и ослаблять меняя геометрию системы.

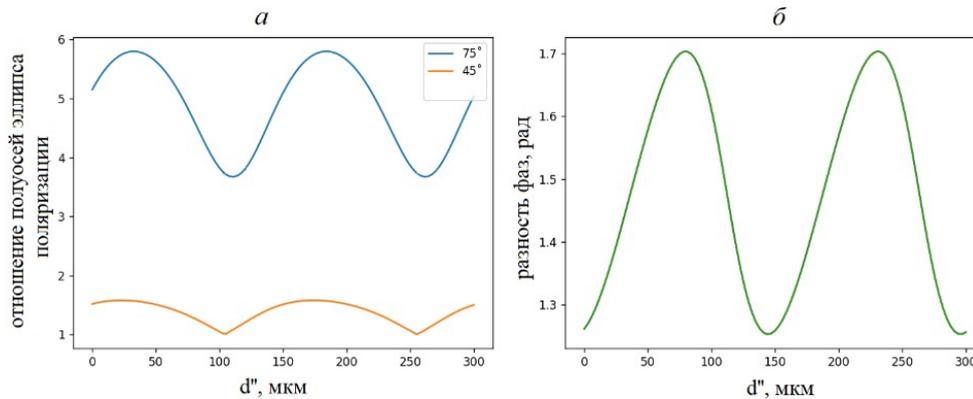


Рисунок 4 – а) зависимость коэффициента эллиптичности поляризации, выходящего из структуры из двух ячеек излучения, от расстояния между ячейками при разных углах между плоскостью поляризации падающего излучения и оптической осью; б) зависимость разности фаз выходящих волн от расстояния между ячейками

Список литературы

1. Pisano, G. Metal-mesh achromatic half-wave plate for use at submillimeter wavelengths / G. Pisano, G. Savini, P. A. Ade, V. Haynes // *Applied Optics*. – 2008. – Vol. 47, № 33. – P. 6251–6256.
2. Kruger, M. Combined THz and Microwave dielectric spectroscopy of intermolecular interactions in homologous protic ionic liquids / M. Kruger, M. M. Huang, E. Brundermann, H. Weingartner, M. Havenith // *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*. – 2011. – Vol. 1, № 1. – P. 313–320.
3. Nonlinear spin control by terahertz-driven anisotropy fields / S. Baierl [et al.] // *Nature photonics*. – 2006.
4. Siegel, P. H. Terahertz technology in biology and medicine / P. H. Siegel // *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. – 2004. – Vol. 52, № 10. – P. 2438–2447.
5. Pyrolytic carbon/liquid crystal structure based platform for tunable thz components / H. L. Margaryan [et al.].
6. Magnetically tunable room-temperature 2π liquid crystal terahertz phase shifter / Chao-Yuan Chen [et al.] // *Optical Society of America*. – 2004.
7. A tunable terahertz filter and its switching properties in terahertz region based on a defect mode of a metallic photonic crystal / Yong Sung Kim [et al.] // *Journal of Applied Physics*. – 2011. – Vol. 109. – P. 123111. – doi:10.1063/1.3603009.
8. Оганесян, Д. Л. Управление излучением в среднем ИК диапазоне длин волн с помощью жидкокристаллической фазовой решетки / Д. Л. Оганесян, А. Л. Маргарян, Н. Г. Акопян, В. М. Арутюнян, В. В. Беляев, А. С. Соломатин // *Изв. НАН Армении, Физика*. – 2015 – Т. 50, № 1. – С. 74–84.
9. Polarization-independent liquid crystal grating on azo-dye film fabricated through intensity holography / Xuemin Lu [et al.] // *Applied Physics Letters*. – 2006. – Vol. 89. – P. 203–507. – doi:10.1063/1.2388940.
10. Electrically Controlled Liquid Crystal Phase Grating for Terahertz Waves / Chia-Jen Lin [et al.] // *IEEE Photonics Technology Letters*. – 2009 – Vol. 21, № 11.

In this work, a structure consisting of two quartz/nematic/quartz cells was studied, the optimal thicknesses of the quartz plates were selected for the largest phase difference of the output radiation, and the ellipticity and radiation transmission coefficient were studied depending on the distance between the cells. It is shown that by selecting a certain geometry of the system, good phase shift results can be achieved.

Дубинецкий Николай Николаевич, студент 4-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, mikola4dnn@gmail.com.

Вольнец Надежда Игоревна, научный сотрудник лаборатории наноэлектромагнетизма, Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, nadezhda.volynets@gmail.com.

Поддубская Олеся Германовна, старший научный сотрудник лаборатории наноэлектромагнетизма, Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, paddubskaya@gmail.com.

Научный руководитель – *Батраков Константин Германович*, кандидат физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории наноэлектромагнетизма, Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, kgbatnikov@mail.ru.

УДК 538.9

П. В. ЕРЕМЕНКО, Е. Н. ДЮБКИНА, Г. А. ПИЦЕВИЧ

КОНФОРМАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И НЕЛИНЕЙНЫХ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ *N*-[4-(ОКТАН-2-ИЛОКСИ)БЕНЗИЛ]-*N,N*-ДИМЕТИЛГЕКСАДЕКАН-1-АМИНИЙ

Для того чтобы можно было оценить влияние изомеризации на спектральные, энергетические и физико-химические параметры молекулы, были выполнены расчеты по определению равновесных конфигураций трех ее конформеров. Рассчитаны на уровне теории B3LYP/сс-pVTZ абсолютные и относительные значения внутренней энергии и значения дипольных моментов четырех конформеров молекулы N4OYBDHA, компоненты тензора поляризуемости и некоторые его инварианты, компоненты кубического тензора первой гиперполяризуемости и некоторые его инварианты.

В последнее время активно разрабатываются новые жидкокристаллические устройства с улучшенными электрооптическими свойствами. В частности, одно из перспективных направлений – сегнетоэлектрические жидкие кристаллы. Ранее было установлено, что одной из групп подходящих для этой цели соединений являются хиральные жидкие кристаллы, образующие смектичную фазу С. В то же время известно, что добавление наночастиц в жидкий кристалл может вызывать изменение его ориентации, уменьшение фазовой задержки и ускорение оптического отклика ЖК с увеличением их концентрации. В частности, суспензии пара- и ферромагнитных частиц в нематиках являются перспективными материалами для создания магнитоупорядочиваемых структур, допирование сегнетоэлектрических ЖК металлическими наночастицами (НЧ) и наночастицами диоксида кремния позволяет увеличить спонтанную поляризацию и диэлектрическую проницаемость. Металлические НЧ также использовались для расширения температурного диапазона существования голубой фазы ЖК. Активно исследуются сочетания ЖК и синтетических аллотропных модификаций углерода, таких как углеродные нанотрубки, детонационные наноалмазы и графен. Наконец, распределение полупроводниковых квантовых точек в смектических ЖК-полимерах позволяет достичь позиционного упорядочения наночастиц. На основании этого, было синтезировано и исследовано оптически активное соединение N4OYBDHA, содержащее четвертичную аммонийную группу, которое перспективно для создания композитов с наноразмерным алюмосиликатом [1]. Поиск устойчивых конфигураций молекулы N4OYBDHA осуществлялся на основе градиентной оптимизации всех геометрических параметров без ограничений по симметрии. Расчёты выполнялись в рамках формализма теории функционала плотности с использованием полноэлектронных двух- и трёхкратно валентно-расщеплённых базисов Дюннинга сс-pVDZ и сс-pVTZ и гибридного обменно-корреляционного функционала B3LYP. Все расчеты выполнялись с использованием квантово-химического пакета [2].

Согласно [1] молекула N4OYBDHA характеризуется наличием двух длинных насыщенных углеродных цепочек, характерных для нормальных парафинов – молекул с общей формулой $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$. Хорошо известно, что по мере увеличения метиленовых групп в этих соединениях, растет число реализуемых конформационных состояний, связанных с вращением вокруг одиночных С-С связей в углеродной цепочке. Аналогичная ситуация, как было показано в работе [3], имеет место и в случае нормальных спиртов с общей формулой $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{OH}$.

Для описания конформационного строения углеродной цепочки в соответствии с [3] принято использовать последовательность букв Т и G, характеризующих, соответственно транс- и гош-расположения атомов углерода относительно С-С связей. В частности, равновесная конфигурация молекулы N4OYBDHA (в дальнейшем конформер I) может быть описана следующим образом: (TTTTTTTTTTTT)(TTTT). В первых скобках описана конфигурация более длинной углеродной цепочки, а во вторых – более короткой. В обеих скобках последовательность символов начинается с описания ориентации метильных групп.

Для того, чтобы можно было оценить влияние изомеризации на спектральные, энергетические и физико-химические параметры молекулы, были выполнены расчеты по определению равновесных конфигураций трех ее конформеров, у которых помимо транс- конфигураций имеются также гош- конфигурации С атомов в более длинной углеродной цепочке. Все расчеты были выполнены на уровне теории B3LYP/сс-pVTZ. В соответствии с введенными ранее обозначениями конфигурации II, III и IV конформеров могут быть описаны следующим образом: (TTTTGTTTTTTTTT)(TTTT), (TGTTTTTTTTTTTT)(TTTT) и (TTTTTTTTTTTTGTT)(TTTT). Как теперь хорошо видно, появление гош-фрагмента имеет место в начале, в середине и в конце более длинной углеродной цепочки молекулы. В таблице 1 собраны рассчитанные значения абсолютных и относительных внутренних энергий четырех конформеров и их дипольных моментов.

Таблица 1 – Рассчитанные на уровне теории B3LYP/сс-pVTZ абсолютные и относительные значения внутренней энергии и значения дипольных моментов четырёх конформеров молекулы N4OYBDHA

Номер конформера	Энергия [Хартри]	Относительная энергия [см ⁻¹]	Величина дипольного момента [Дебай]
<i>I</i>	-1425,16968249	0	12,91
<i>II</i>	-1425,16822102	320,0	12,19
<i>III</i>	-1425,16822677	319,5	12,28
<i>IV</i>	-1425,16837888	286,1	14,35

Как следует из данных, представленных в таблице 1, относительные энергии и значения дипольных моментов конформеров *I–IV* сопоставимы, что говорит о слабой зависимости этих молекулярных характеристик от положения G фрагмента в углеродной цепочке. Дипольный момент молекулы, как следует из данных таблицы 1, также слабо зависит от конформационного строения.

Нелинейные оптические свойства молекул главным образом связаны с обобщением понятия энергии взаимодействия молекул с сильным электрическим полем, что может быть отражено следующей формулой:

$$E = \mu_i E_i + \frac{1}{2!} \alpha_{ij} E_i E_j + \frac{1}{3!} \beta_{ijk} E_i E_j E_k + \frac{1}{4!} \gamma_{ijkl} E_i E_j E_k E_l + \dots \quad (1)$$

В формуле (1) E – полная энергия взаимодействия молекулы с электрическим полем, E_i – i -компонента электрического поля, μ_i – i -компонента дипольного момента молекулы, α_{ij} – i, j элемент тензора поляризуемости молекулы, β_{ijk} – i, j, k элемент кубического тензора первой гиперполяризуемости молекулы, γ_{ijkl} – i, j, k, l элемент четвертичного тензора второй гиперполяризуемости молекулы. Также хорошо известны формулы для обобщенного дипольного момента молекулы M – формула (2) и обобщенной поляризуемости молекулы A – формула (3):

$$M_i \equiv \frac{\partial}{\partial E_i} (E) = \mu_i + \alpha_{ij} E_j + \frac{1}{2!} \beta_{ijk} E_j E_k + \frac{1}{3!} \gamma_{ijkl} E_j E_k E_l + \dots \quad (2)$$

$$A_{ij} \equiv \frac{\partial^2}{\partial E_i \partial E_j} (E) = \alpha_{ij} + \beta_{ijk} E_k + \frac{1}{2!} \gamma_{ijkl} E_k E_l + \dots \quad (3)$$

Используя уровень теории B3LYP/сс-pVTZ для конформеров *I–IV* молекулы N4OYBDHA были рассчитаны компоненты тензора поляризуемости и некоторые его инварианты: усредненный след тензора поляризуемости – a и его анизотропия – b , которые рассчитываются по формулам (4) и (5) соответственно:

$$a = \frac{1}{3} (\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}); \quad (4)$$

$$b = \frac{1}{2} \left[(\alpha_{xx} - \alpha_{yy})^2 + (\alpha_{xx} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 \right]^{1/2}; \quad (5)$$

Результаты расчетов представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Рассчитанные на уровне теории B3LYP/сс-pVTZ значения компонентов и инвариантов тензоров поляризуемости для конформеров *I–IV* молекулы N4OYBDHA.

Результаты представлены в атомных единицах

Конформер	a	b	α_{xx}	α_{yy}	α_{zz}	α_{yy}	α_{yz}	α_{zz}
<i>I</i>	425.4	279.0	336.8	6.913	10.32	347.4	70.31	592.1
<i>II</i>	424.1	238.3	439.2	17.31	118.1	349.5	-4.860	483.5
<i>III</i>	424.5	271.2	473.6	25.07	136.9	344.6	16.42	455.2
<i>IV</i>	422.9	197.9	413.5	18.96	86.35	360.7	-25.91	494.8

На уровне теории B3LYP/сс-pVTZ для конформеров *I–IV* молекулы N4OYBDHA были также рассчитаны компоненты кубического тензора первой гиперполяризуемости и некоторые его инварианты:

$$\beta_i = \beta_{iii} + \frac{1}{3} \sum_{j \neq i} (\beta_{ijj} + \beta_{jjj} + \beta_{jji}); \quad i, j \in (x, y, z); \quad (6)$$

$$\beta_{\parallel}(z) = \frac{1}{5} \sum_j (\beta_{zjj} + \beta_{jzj} + \beta_{jjz}) \mu_z; \quad (7)$$

$$\beta_{\perp}(z) = \frac{1}{5} \sum_j (2\beta_{zjj} - 3\beta_{jzj} + 2\beta_{jjz}) \mu_z;$$

$$\beta_{\parallel} = \frac{1}{5} \sum_{i,j} (\beta_{ijj} + \beta_{jjj} + \beta_{jji}) \mu_i;$$

Результаты представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Рассчитанные на уровне теории B3LYP/cc-pVTZ значения компонентов и инвариантов кубического тензора первой гиперполяризуемости конформеров I – IV молекулы N4OYBDHA.

Результаты представлены в атомных единицах

Конформер									
I	$\beta_{\parallel}(z)$	$\beta_{\perp}(z)$	β_x	β_y	β_z	β_{\parallel}	β_{xxx}	β_{xyy}	β_{yyx}
	-32,9	-10,9	-3799,9	-472,5	-164,6	766,6	-1250,5	-170,9	-45,3
	β_{yyy}	β_{xxz}	β_{yzz}	β_{yyz}	β_{zzz}	β_{zyz}	β_{zzz}		
	13,2	-32,7	-31,9	-4,4	29,1	0,2	-17,7		
II	$\beta_{\parallel}(z)$	$\beta_{\perp}(z)$	β_x	β_y	β_z	β_{\parallel}	β_{xxx}	β_{xyy}	β_{yyx}
	514,7	171,6	2970,9	276,7	2573,6	788,1	589,8	63,1	-13,2
	β_{yyy}	β_{xxz}	β_{yzz}	β_{yyz}	β_{zzz}	β_{zyz}	β_{zzz}		
	-23,2	480,6	55,2	-27,4	413,7	52,3	404,7		
III	$\beta_{\parallel}(z)$	$\beta_{\perp}(z)$	β_x	β_y	β_z	β_{\parallel}	β_{xxx}	β_{xyy}	β_{yyx}
	506,8	168,9	2894,9	269,4	2534,1	771,4	582,5	63,2	-14,6
	β_{yyy}	β_{xxz}	β_{yzz}	β_{yyz}	β_{zzz}	β_{zyz}	β_{zzz}		
	-14,6	473,8	63,2	-23,4	396,9	41,2	394,3		
IV	$\beta_{\parallel}(z)$	$\beta_{\perp}(z)$	β_x	β_y	β_z	β_{\parallel}	β_{xxx}	β_{xyy}	β_{yyx}
	568,2	189,4	3430,5	408,1	2840,9	894,6	609,0	39,6	-10,6
	β_{yyy}	β_{xxz}	β_{yzz}	β_{yyz}	β_{zzz}	β_{zyz}	β_{zzz}		
	7,6	544,0	34,7	-58,4	545,1	88,8	461,4		

Из результатов расчетов, представленных в таблицах 2 и 3, компоненты и инварианты тензора поляризуемости и кубического тензора первой гиперполяризуемости слабо зависят от структурных преобразований при переходах между конформерами молекулы N4OYBDHA. С учетом аналогичного поведения компонент дипольного момента молекулы можно утверждать, что возможные переходы из одного конформационного состояния в другие практически не должны сказываться на оптико-электрических свойствах ЖК материала. Высокие значения величин дипольного момента и компонент поляризуемости и гиперполяризуемости для всех анализируемых конформеров молекулы N4OYBDHA указывают на то, что она является перспективным кандидатом для создания электроперестраиваемых структур, применяемых в жидкокристаллических устройствах.

Список литературы

1. Molecular Crystals and Liquid Crystals / G. Pitsevich, I. Doroshenko, M. Shundalau, L. Rutkovskaya, A. Lugovski, G. Gusakov, V. Lapanik. – 2022. – Vol. 748. – P. 73–81.
2. Journal Chemical Physics / F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, C. Riplinger. – 2022. – Vol. 152. – P. 224108.
3. Vibrational Spectroscopy / G. A. Pitsevich, I. Y. Doroshenko, V. E. Pogorelov, E. N. Kozlovskaya, T. Borzda, V. Sablinskas, V. Balevicius. – 2014. – Vol. 72. – P. 26–32.

In order to assess the effect of isomerization on the spectral, energy and physicochemical parameters of the molecule, calculations were performed to determine the equilibrium configurations of its three conformers. The absolute and relative values of

the internal energy and the values of the dipole moments of the four conformers of the N4OYBDHA molecule; components of the polarizability tensor and some of its invariants; components of the cubic tensor of the first hyperpolarizability and some of its invariants are calculated at the level of the B3LYP/cc-pVTZ theory.

Еременко Полина Владимировна, студентка 2-го курса, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, eremenkopolina250@gmail.com.

Дюбкина Елена Николаевна, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, lena.dyubkina47@gmail.com.

Научный руководитель – Пицевич Георгий Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической оптики и прикладной информатики, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, pitse-vich@bsu.by.

УДК 621.383.51

Б. К. ЖУМАБОЕВ, Э. Ш. ХАЙТБАЕВ, С. Е. ШАРИФБАЕВА

ВЛИЯНИЕ ШИРИНЫ БАЗЫ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ КРЕМНИЕВОГО ВЕРТИКАЛЬНОГО СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА С ТУННЕЛЬНЫМ ПЕРЕХОДОМ

Рассматривается влияние ширины базы на плотность тока короткого замыкания J_{sc} , напряжения холостого хода V_{oc} , фактор заполнения FF и эффективность η кремниевого вертикального солнечного элемента с двумя p-n переходами, соединенными туннельным переходом с помощью двумерного моделирования. Показано, что эффективность вертикального солнечного элемента с туннельным переходом немонотонно зависит от ширины базы. Такое поведение эффективности от ширины базы объясняется ограниченностью диффузионной длины носителей заряда.

Солнечные элементы (СЭ) для концентраторных систем имеют такое существенное преимущество как возможность экономии самого дорогого компонента элемента, полупроводникового материала [1]. В ряду солнечных элементов для концентраторных систем, вертикальные солнечные элементы имеют особое место в связи с наличием таких достоинств как малое последовательное сопротивление и возможность использовать материалы с различной шириной запрещенной зоны в едином элементе, что позволяет расширить используемую часть солнечного спектра и тем самым увеличить эффективность.

Недавно была предложена новая структура вертикального солнечного элемента для преодоления проблемы связанной с насыщением эффективности при высоких солнечных концентрациях, имеющих место в горизонтальных концентраторных фотовольтаических системах [2; 3]. Фундаментальная конструкция нового вертикального солнечного элемента основывается на вертикальном солнечном элементе с туннельным переходом (ВСЭТП). ВСЭТП основывается на последовательном соединении нескольких подэлементов туннельным переходом вместо бокового металлического контакта. Такая конструкция позволяет развить СЭ с высоким напряжением и низкой плотностью тока, что уменьшает контактное сопротивление.

В упомянутых выше работах рассматривается ВСЭТП, основанный на материале GaAs, в то время как ВСЭТП, основанный на широко распространенном кремнии, до сих пор не исследован. Кроме того, хотя во многих работах рассматриваются вертикальные солнечные элементы с металлическим контактом между p-n переходами, до сих пор практически детально не рассматривалась зависимость эффективности от ширины элемента в ВСЭТП. Поэтому в этой работе с помощью моделирования в деталях анализируется зависимость эффективности от ширины элемента в ВСЭТП на основе кремния.

Влияние ширины базы W_n на эффективность исследуется с использованием двумерного моделирования. Структура и геометрические параметры рассматриваемого ВСЭТП приведены на рисунке 1 и в таблице 1 соответственно. В этой структуре два идентичных кремниевых СЭ соединены туннельным переходом. Уровень легирования n-базы составляет 10^{15} cm^{-3} . Основная цель работы исследовать влияние ширины базы на эффективность кремниевого ВСЭТП с двумя p-n переходами. Двумерное моделирование проводилось с использованием TCAD Sentaurus. Использовалась диффузионно-транспортная модель и модель подвижности, включающая зависимость подвижности от концентрации. Для учета рекомбинации использовались модели Шокли – Рида – Холла и Оже. Физическая модель, использованная при моделировании, калибровалась сравнением вольт-амперных характеристик (ВАХ), полученных экспериментально [4], и моделированием солнечных элементов с одинаковыми параметрами (рисунок 2). Солнечная концентрация в эксперименте составляла 2480 Suns, в то время как при моделировании она выбиралась равной 2108 Suns из-за различия в интенсивности прилагаемого солнечного излучения. Интенсивности в эксперименте и при моделировании составляли 850 and 1000 W/m^2 соответственно. Экспериментальная кривая ВАХ для двух p-n переходов, используемая при сравнении, получена путем деления на 20 напряжения холостого хода V_{oc} в ВАХ полученной экспериментально для 40 p-n переходов, при неизменном токе короткого замыкания I_{sc} .

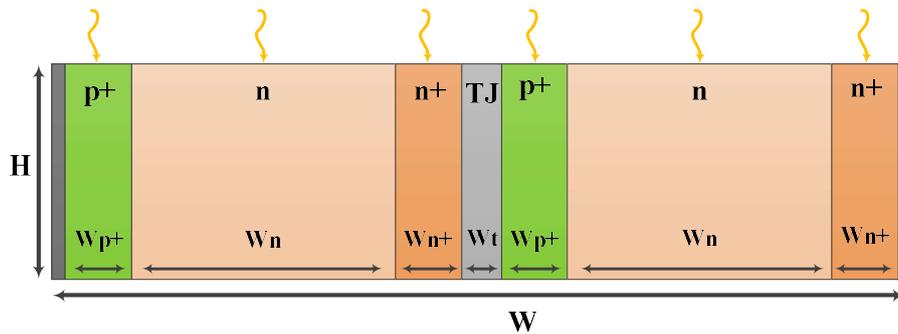


Рисунок 1 – Структура исследуемого ВСЭТП с двумя р-п переходами, соединёнными туннельным переходом

Таблица 1 – Геометрические параметры моделируемого ВСЭТП

H, μm	W_{p^+} , μm	W_{n^+} , μm	W_n , μm	W_t , μm
350	5	5	5–300	0.05

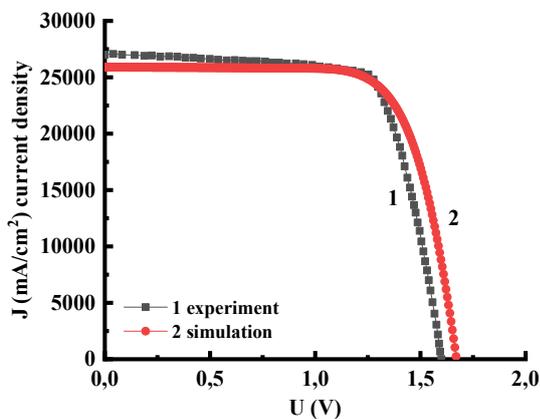


Рисунок 2 – J-V характеристика для экспериментального и моделируемого вертикального солнечного элемента с двумя р-п переходами и одинаковыми параметрами

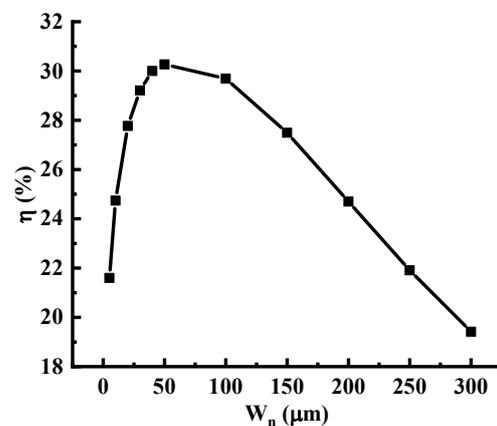


Рисунок 3 – Зависимость эффективности от ширины базы ВСЭТП

Результаты моделирования показывают, что эффективность ВСЭТП η , моделированной при 1000 Suns, немонотонно зависит от ширины базы элемента (рисунок 3).

Зависимость фактора заполнения FF, тока короткого замыкания J_{sc} , и напряжения холостого хода V_{oc} от ширины базы показана на рисунках 4, 5 (кривая 1), и 6 соответственно.

Соответственно формуле (1) увеличение эффективности СЭ с увеличением ширины базы W_n до значений 50 мкм в основном связана с увеличением V_{oc} и J_{sc}

$$\eta = \frac{J_{sc} \cdot V_{oc} \cdot FF \cdot H}{P_{in} \cdot W} \quad (1)$$

где P_{in} – интенсивность падающего на единицу поверхности образца излучения.

Соответственно результатам, приведенным на рис. 5 и 6, при увеличении ширины базы от 5 до 50 мкм, отношение J_{sc}/W увеличивается примерно в 1.44 раза, а V_{oc} примерно в 1.04 раза. Согласно рисунку 4, в указанном диапазоне изменений W , FF уменьшается примерно в 1.04 раза.

Очевидно, такие изменения параметров приводят к наблюдаемому на рисунке 3 увеличению эффективности в 1.42 раза.

Заметный спад интенсивности при ширине базы большей 100 мкм, очевидно, связано как с уменьшением FF, так и с уменьшением отношения J_{sc}/W (рисунки 4 и 5). Такие изменения параметров связаны с тем, что диффузионная длина носителей заряда в кремнии находится в диапазоне 100 мкм.

Поэтому увеличение ширины базы до 100 мкм вызывает увеличение скопления заряда в базе около контакта, а дальнейшее увеличение ширины уже не вызывает увеличения скопления заряда, так как ширина базы, большая чем диффузионная длина, не позволяет увеличению скопления около контакта. Но при этом увеличивается последовательное сопротивление базы, которое уменьшает фактор заполнения FF. В результате этого при ширинах базы, больших чем 100 мкм, наблюдается уменьшение эффективности СЭ.

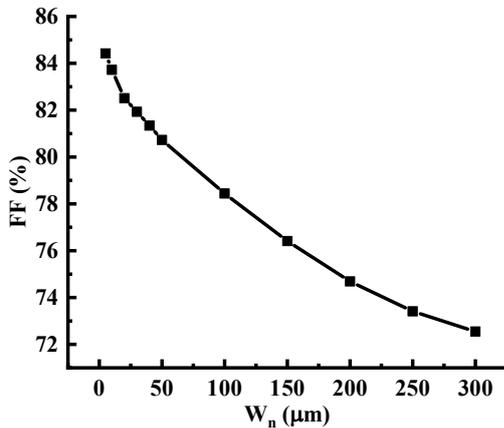


Рисунок 4 – Зависимость фактора заполнения от ширины базы ВСЭПТ

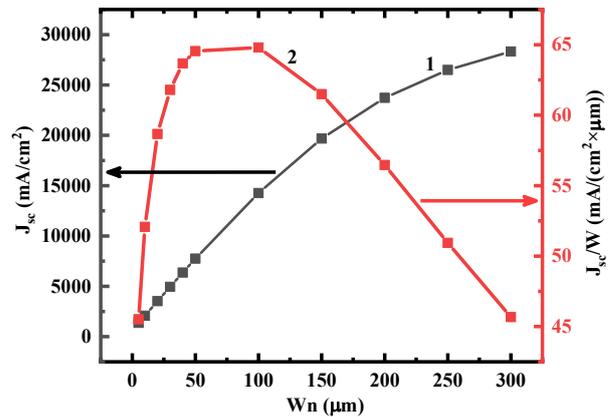


Рисунок 5 – Зависимость плотности тока короткого замыкания J_{sc} (1) и $J_{sc} \cdot W$ (2) от ширины базы ВСЭПТ

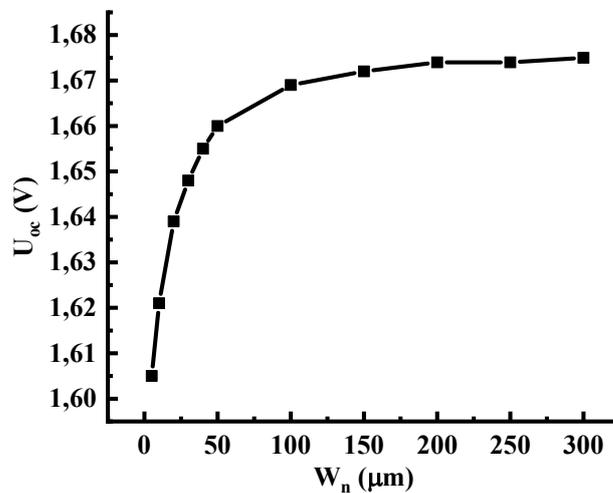


Рисунок 6 – Зависимость напряжения холостого хода от ширины базы ВСЭПТ

Список литературы

1. Luque, A. Handbook of Photovoltaic Science and Engineering / A. Luque, S. Hegedus. – 2nd ed. – New York : Wiley, 2012. – P. 1–1132.
2. Numerical optimization and recombination effects on the vertical-tunnel junction (VTJ) GaAs solar cell up to 10,000 suns / C. Outes [et al.] // Solar Energy. – 2020. – Vol. 203. – P. 136–144.
3. Vertical-tunnel junction (VTJ) solar cell for ultra-high light concentrations (> 2000 suns) / E. Fernández [et al.] // IEEE Electron Device Lett. – 2020. – Vol. 40. – P. 40–47.

4. Sater, B. L. High voltage silicon VMJ solar cells for up to 1000 suns intensities / B. L. Sater, N. D. Sater // Conference Record of the Twenty-Ninth IEEE Photovoltaic Specialists Conference. – 2002. – P. 1019–1022.

In the paper, the effect of the base width on short circuit current density J_{sc} , open circuit voltage V_{oc} , fill factor FF, and efficiency of the silicon vertical solar cell with two p-n junctions connected by tunnel junction is investigated by 2D simulations. It is shown that the efficiency dependence on the width of the vertical solar cell has non-monotonic behavior. It is connected to the limited diffusion length of the charge carriers generated by light.

Жумабаев Бекзод, преподаватель кафедры физики, Ургенчский государственный университет, Узбекистан, juma-boeyvbezd2315@gmail.com.

Хаитбаев Элдорбек, магистрант 1-го курса, Ургенчский государственный университет, Узбекистан, eldor-khaitbaev@gmail.com.

Шарифбоева Сайёра, магистрант 2-го курса, Ургенчский государственный университет, Узбекистан, sayuora-sharifboeva@gmail.com.

Научный руководитель – *Атамуратов Атабек Эгамбердиевич*, доктор физико-математических наук, кафедра физики, Ургенчский государственный университет, Узбекистан, atabek.atamuratov@urdu.uz.

УДК 537.87

Л. А. КАЛОША

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ СВОЙСТВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ И РЕШЁТОК ДЛЯ СВЧ И ОПТИЧЕСКОГО ДИАПАЗОНОВ

Рассмотрено влияние высокочастотного электрического поля на диэлектрические свойства материалов для разработки электродинамических систем с управляемыми свойствами. Объектом исследования являются сложно структурированные периодические структуры. Представлены параметры материалов для построения периодических структур с управляемыми электромагнитными параметрами. Показаны вычислительные модели структур для проведения моделирования взаимодействия с СВЧ-полем. Определен диапазон значений диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрических элементов структур. Приведены зависимости коэффициентов прохождения и отражения электромагнитного поля от диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрического материала, геометрических размеров элементов и частоты СВЧ-поля. Проведен анализ выявленных зависимостей, определены требования к электромагнитным и геометрическим параметрам составляющих структур, обеспечивающих перестройку по частоте и значению коэффициентов прохождения и отражения.

Материалы, обладающие управляемыми свойствами, позволяют реализовать легко перестраиваемые технические устройства. Воздействие управляющих электромагнитных полей приводит к изменению материальных и конструктивных параметров создаваемых систем, что позволяет улучшить характеристики устройств, сконструированных из традиционно используемых материалов.

Важность как с научной, так и с практической точек зрения, работы по проведению численного и экспериментального исследований особенностей рассеяния электромагнитного излучения в средах и периодических системах, управление свойствами которых осуществляется путем изменения электромагнитных характеристик материалов, обусловлена получением данных, позволяющих осуществить дальнейший переход к реализации новых компонентов управляемой опто – и СВЧ-электроники.

Параметры сегнетоэлектрического материала для построения компонентов структур с управляемыми электромагнитными параметрами.

В качестве управляемого материала для проведения исследования выбран материал на основе титаната кальция (CaTiO_3) в виде сегнетоэлектрической керамики [1; 2]. Состав сегнетоэлектрического материала выбирался с учетом влияния на его свойства следующего ряда факторов: дисперсионных зависимостей диэлектрической проницаемости в различных частотных диапазонах, температуры фазового перехода, температуры кристаллизации, поляризуемости во внешних полях, величины диэлектрической проницаемости. Управление диэлектрической проницаемостью сегнетоэлектрика основано на поляризации в ВЧ поле на частоте колебаний доменных стенок. Такое внешнее полевое воздействие позволяет изменять диэлектрическую проницаемость материала в диапазоне значений от 150 до 3000 при приложении полей напряженностью от 0,9 до 2,6 В/см. Тангенс угла диэлектрических потерь в СВЧ поле $6 \cdot 10^{-4}$. Значение диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика в СВЧ поле, без воздействия ВЧ поля, равно 150 [1].

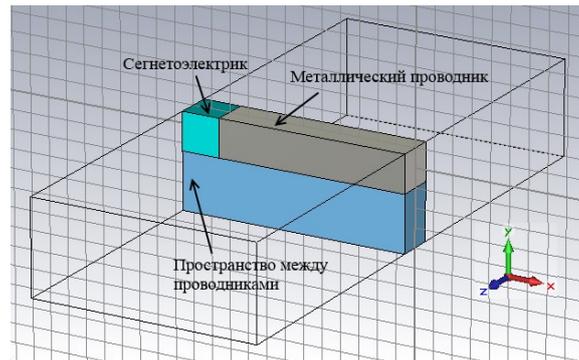
Вычислительные модели периодических структур с сегнетоэлектрическими элементами.

Для исследования рассеяния электромагнитного поля СВЧ диапазона на эквидистантных структурах были рассмотрены структуры из сегнетоэлектрических (керамика на основе CaTiO_3) и металлических элементов

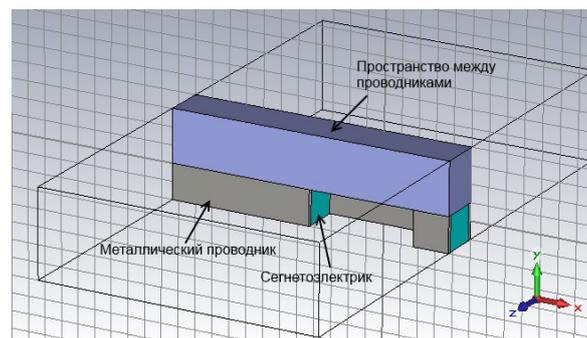
(медь). Диапазон частот облучающего электромагнитного поля в СВЧ диапазоне от 1 до 10 ГГц. Электромагнитное излучение падает нормально на исследуемые структуры.

Сегнетоэлектрик размещается в зазорах между металлическими проводниками, на которые возможно подавать высокочастотное напряжение заданной частоты и напряженности. Проводники размещаются параллельно друг другу. Величина зазора между торцами проводников соответствует размеру сегнетоэлектрического включения для достижения максимального взаимодействия с СВЧ-полем [2].

Модели фрагментов периодических структур в виде проводника и материала на основе сегнетоэлектрика (титаната кальция) в зазоре между проводниками представлены на рисунке 2. В одном случае металлический проводник выполнен в виде бруса, в другом в виде ленты из металла. Пространство между рядами проводников и диэлектрических включений принимается заполненным средой с диэлектрической и магнитной проницаемостями равными единице и не проявляющей частотной дисперсии в используемых при проведении численного эксперимента диапазонах частот.



а



б

Рисунок 2 – Модель фрагмента структуры

Размеры сегнетоэлектрических и металлических включений варьировались в пределах от 0,1 мм до 30 мм. Величина зазора между рядами сегнетоэлектрических и металлических включений варьировалась от 0,1 мм до 6 см (пространство заполнено средой с диэлектрической и магнитной проницаемостями равными единице и не проявляющей частотных дисперсионных свойств в рассматриваемом диапазоне частот). В обоих случаях построения структуры направление электрической компоненты облучающего электромагнитного поля принимается вдоль оси x .

Величина сегнетоэлектрического зазора влияет на ширину максимумов и минимумов коэффициентов прохождения и отражения в рассматриваемом диапазоне частот. При толщине сегнетоэлектрического включения менее 0,1 мм они не оказывают существенного влияния на рассеяние электромагнитного поля.

Наиболее эффективное взаимодействие структуры с излучением (влияние на коэффициенты прохождения и отражения с учетом применения минимального количества сегнетокерамического материала) наблюдается при вариациях размеров зазора в пределах от 0,1 до 5 мм для решетки на основе металлических брусьев, и в пределах от 0,3 мм до 5 мм в виде лент.

Расстояние между рядами из сегнетоэлектрических и металлических элементов и самими элементами, целесообразно выбирать кратным половине, четверти или длине волны, так же как и длину металлических включений.

На рисунке 3 представлено влияние изменения диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрического материала на частотную зависимость коэффициента отражения бесконечной структуры на основе металлических брусьев и сегнетоэлектрика для СВЧ поля. Размер сегнетоэлектрического элемента 2,5 на 2,5 на 2,5 мм. Размер металлического элемента 15 на 2,5 на 2,5 мм. Расстояние между рядами металлических и сегнетоэлектрических включений 15 мм.

На рисунке 4 представлено влияние изменения диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрического материала на частотную зависимость коэффициента отражения бесконечной структуры на основе металлических лент и сегнетоэлектрика для СВЧ поля. Размер сегнетоэлектрического элемента 2,5 на 2,5 на 2,5 мм. Размер металлического элемента 15 на 2,5 на 2,5 мм. Расстояние между рядами металлических и сегнетоэлектрических включений 15 мм.

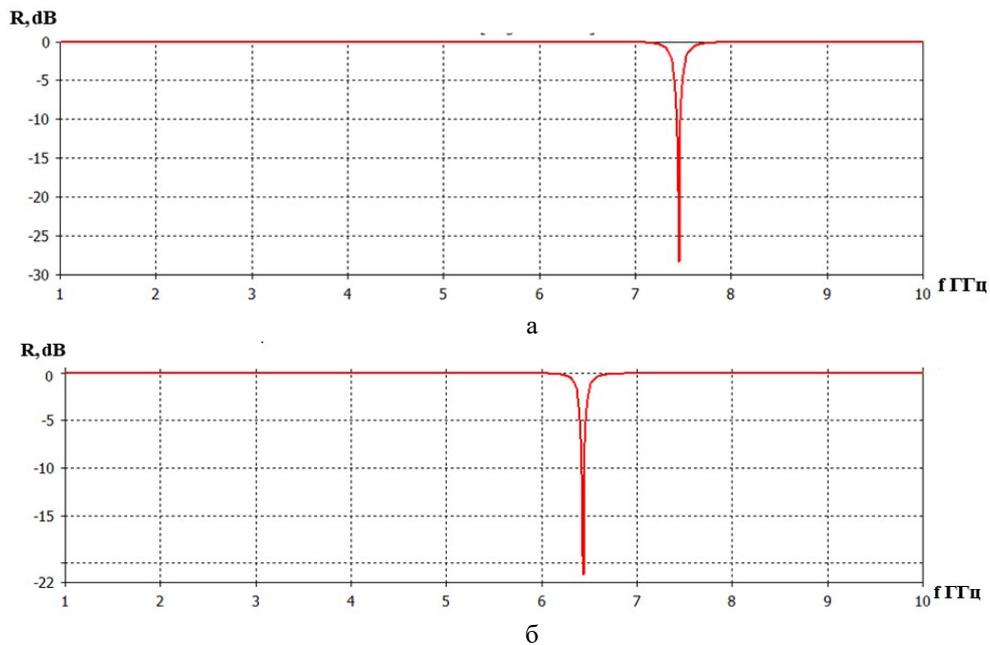


Рисунок 3 – Частотная зависимость коэффициента отражения электромагнитного поля в децибелах для значения диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика в зазоре между металлическими элементами 150 (а) и 1000 (б)

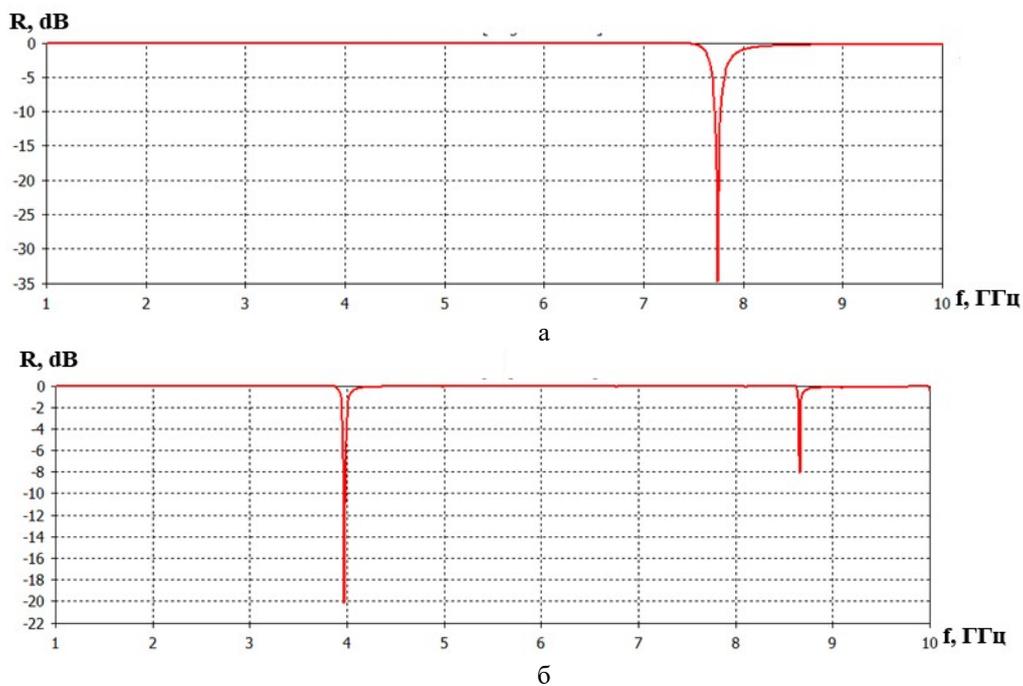


Рисунок 4 – Частотная зависимость коэффициента прохождения электромагнитного поля в децибелах для значения диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика в зазоре между металлическими элементами 150 (а) и 570 (б)

В случае облучения структуры с размерами много меньше длины волны ее можно рассматривать в качестве композиционного материала. Изменение электромагнитных параметров отдельных компонентов в таком случае будет влиять на общие свойства композита.

Проведенные исследования показывают, что изменение диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрических элементов структур на основе элементов из сегнетоэлектрических и металлических материалов в частотном диапазоне от 7,5 до 10 ГГц обеспечивают управление значением коэффициентов прохождения и отражения в диапазоне от 0–25 дБ.

Методами математического моделирования определены геометрические и электромагнитные параметры структур, обеспечивающих эффективное взаимодействие с СВЧ излучением рассматриваемого частотного диапазона, требующих минимальное количество сегнетоэлектрического материала и проявляющих высокую чувствительность к изменению его диэлектрических характеристик.

Список литературы

1. Заерко, Д. В. Применение колебаний стенок доменов для управления диэлектрической проницаемостью сегнетоэлектрических материалов / Д. В. Заерко, Л. А. Калоша, Л. С. Гайда // Весн. Гродзен. дзярж. ун-та імя Янкі Купалы. Сер. 2, Матэматыка. Фізіка. Інфарматыка, вылічальная тэхніка і кіраванне. – 2020. – Т. 10, № 3. – С. 82–90.
2. Дифракция волн на решетках / В. П. Шестопалов [и др.]. – Харьков : Изд-во Харьков. ун-та, 1973. – 288 с.

The aim of the work is to study the influence of a high-frequency electric field on the dielectric properties of materials for the development of electrodynamic systems with controlled properties. The object of research is complexly structured periodic structures. The work presents the parameters of materials for building periodic structures with controlled electromagnetic parameters. Computational models of structures are presented for modeling the interaction with the microwave field. The range of values of the permittivity of the ferroelectric elements of the structures has been determined. The dependences of the transmission and reflection coefficients of the electromagnetic field on the dielectric permittivity of the ferroelectric material, the geometric dimensions of the elements, and the frequency of the microwave field are given. The analysis of the identified dependencies was carried out and the requirements for the electromagnetic and geometric parameters of the constituent structures that provide tuning in frequency and value of the transmission and reflection coefficients were determined.

Калоша Любовь Александровна, магистр физико-математических наук, аспирант физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, ya-2009@tut.by.

Научный руководитель – *Гайда Леонид Станиславович*, доктор физико-математических наук, профессор кафедры электротехники и электроники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, gls@grsu.by.

УДК 539.534

М. К. КАРИМОВ, М. У. ОТАБАЕВ, У. О. КУТЛИЕВ

РАССЕЯНИЯ ИОНОВ СО СТУПЕНЧАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ InGaP(001)<110> ПРИ МАЛЫХ УГЛАХ ПАДЕНИЯ

С помощью компьютерного моделирования воспроизводилось рассеяние ионов Ne^+ под малыми углами падения от ступенчатой поверхности InGaP(001)<110> с начальной энергией $E_0 = 5$ кэВ. Исследованы траектории деканальных ионов, а также их энергии и угол рассеяния. Показано, что перед деканализацией увеличиваются частота и амплитуда траектории ионов, движущихся по поверхностному каналу, образованному ступенчатым атомом. Получены энергетические распределения этих ионов, и определена часть спектра, соответствующая этим ионам. Установлено, что деканализированные ионы имеют низкую интенсивность и лежат в низкоэнергетической части спектра. Исследование траектории деканализированных ионов дает возможность определить энергию и угол падения имплантированных ионов.

Взаимодействие ионов с твердым телом – один из самостоятельных разделов фундаментальной физики. Это взаимодействие может привести к изменению физических свойств твердых тел и созданию материалов с заданными свойствами. В начале исследований рассеяния ионов поверхностями твердых тел было довольно трудно сделать вывод, что взаимодействие рассеивающего иона с атомами твердого тела является парным взаимодействием. Эксперименты с газовым разрядом, где энергия бомбардирующих частиц невелика, а условия на поверхности массивных мишеней почти всегда весьма неопределенны, способствовали развитию представления об отражении как от твердой стенки [1–3]. Очень хорошо зарекомендовавшие себя систематические фундаментальные, экспериментальные исследования пространственного и энергетического распределения отраженных частиц от поверхностей твердых тел с неупорядоченным расположением атомов и ионизированных атомов отдачи на уникальном для того времени оборудовании позволили достоверно

установить, что в случае тяжелых ионов в энергетических распределениях отраженных частиц наблюдаются острые пики, положение которых на шкале энергий соответствует однократному квазиупругому рассеянию бомбардирующих частиц на отдельных атомах мишени. Было показано, что при отражении легких ионов одиночные пики наблюдаются лишь при достаточно низких энергиях; с увеличением энергии ионов распределения уширяются и приобретают куполообразную форму. Эти исследования были использованы теоретиками для разработки и проверки теории многократного рассеяния ионов поверхностями твердых тел и в значительной степени способствовали становлению и развитию метода спектроскопии ионного рассеяния [4–8].

В области низких и средних энергий траектории сталкивающихся частиц определяются в первом приближении силами упругого взаимодействия атомов. Эти силы возникают из-за кулоновских сил взаимодействия ядер и атомов электронов и поэтому действуют на любом расстоянии между взаимодействующими частицами. Поэтому для расчета траектории налетающего иона необходимо учитывать его взаимодействие в кристаллической решетке со всеми атомами одновременно, что очень сложно. Но при очень низких энергиях ионно-атомные столкновения можно рассматривать как изолированные парные столкновения частиц. Подтверждением того, что атомы решетки при столкновениях свободны, т. е. ведут себя как атомы плотного газа, являются результаты исследования времени взаимодействия и энергии сталкивающихся частиц.

Для дальнейшего развития математического моделирования процесса рассеяния ионов средних и низких энергий в широком диапазоне углов падения и рассеяния использовались закономерности столкновения двух тяжелых частиц. Итак, будем рассматривать рассеяние ионного пучка от поверхности монокристаллического образца на основе модели парных одно-, двух- и т. д. множественных столкновений.

В приближении парных столкновений заложены две базовые программы, с помощью которых моделируется широкий круг процессов, вызванных бомбардировкой твердых тел ускоренными частицами, – программа MARLOWE и программа TRIM. Обе программы основаны практически на одном и том же формализме. Отличие этих программ в том, что первая изначально работает с кристаллическими мишенями, а вторая с аморфными. В программе MARLOWE [9] угол рассеяния определяется путем численного расчета классического интеграла рассеяния или с использованием ранее рассчитанных и табличных значений этих интегралов для потенциала Мольера [10]. В работах [11–12] экспериментально и путем моделирования обнаружено, так называемое, резонансное деканалирование ионов при переходе из осевых в плоскостные каналы, состоящие в интенсивной раскачке поперечных колебаний каналированных ионов при совпадении периода собственных колебаний ионов в каналах с временем пролета между соседними атомными цепочками. Этот эффект был использован для измерения межатомных потенциалов в твердых телах и для оценки величины заряда ионов в кристаллах. Общей особенностью, характерной практически для всех спектров, измеренных в условиях осевого каналирования, является наличие пиков в приповерхностной области и повышение в несколько раз выхода рассеяния по сравнению с исходным необлученным кристаллом. При исследовании повреждений структуры кристаллов методом рассеяния ионов рассматривают в основном две группы дефектов: дефекты блокирующего типа (точечные дефекты, их скопления) и дефекты протяженного типа (дислокации, дефекты упаковки, пузырьки и т. д.), которые при взаимодействии с анализирующим пучком вызывают в основном деканалирование частиц. Частицы, захваченные в канал, покидают его через некоторое время, при деканалировании частиц. Интерес к изучению траектории деканалированных частиц в настоящее время весьма велик, так как при изучении траектории можно получить подробную информацию об энергии и места положения иона.

Исследованы процессы рассеяния ионов Ne^+ и Ar^+ при их скользящем падении на поверхности $\text{InGaP}(001)\langle 110 \rangle$, имеющие дефекты в приповерхностных областях. Показано, что дефекты, находящиеся в приповерхностной области двухкомпонентных монокристаллов, сильно влияют на процесс рассеяния ионов. Наличие дефектов является основным фактором проникновению падающих частиц глубже в кристалл. Эти частицы либо остаются в кристалле, либо отражаются с глубоких атомных слоёв. При отражении ионов от нижних слоев приповерхностной области наблюдаются сложные траектории ионов, которые являются основой объяснений процессов каналирования, деканалирования, имплантации и многократная перефокусировки.

Анализированы угловые и энергетические распределения рассеянных частиц с дефектных поверхностей двухкомпонентных монокристаллов. Показано, что в отличие от рассеяния ионов идеальной поверхностью, рассеяние ионов в данном случае происходит вплоть до $\theta \leq 180^\circ$. Установлено, что образования пиков в низкоэнергетической части энергетического спектра рассеянных частиц, обусловлено деканалированными ионами, отраженных с более глубоких приповерхностных слоев кристалла. Таким образом, дефекты, образованные на бомбардируемой поверхности зависят от условий эксперимента и существенно влияют на траектории, энергетические и угловые распределения рассеянных частиц.

Список литературы

1. Haile, J. M. Molecular Dynamics Simulation / J. M. Haile // Elementary Methods. – New York : Wiley-Interscience, 1992. – 386 p.
2. Kaminsky, M. Atomic and ion collisions on the surface of a metal / M. Kaminsky // Mir. – Moscow, 1967. – 506 p.
3. Zanderny, A. Surface analysis methods / A. Zanderny // Mir. – Moscow, 1979. – 582 p.
4. Grehl, T. Microscopy Today / T. Grehl, E. Niehuis, H. H. Brongersma. – 2011. – Vol. 19. – P. 34. – doi: 10.1017/S1551929511000095.
5. Journal of Physics: Conference Series / U. O. Kutliev, M. K. Karimov, F. O. Kuryozov, K. U. Otabaeva. – 2021. – Vol. 1889. – P. 22–63. – doi:10.1088/1742-6596/1889/2/022063.
6. Catalysis Today / H. R. J. ter Veen, T. Kim, I. E. Wachs, H. H. Brongersma. – 2009. – Vol. 140. – P. 197. – doi:10.1016/j.cattod.2008.10.012.
7. AIP Conference Proceedings / M. K. Karimov, U. O. Kutliev, I. A. Khajieva, S. B. Bobojonova, M.U. Otabaev. – 2022. – Vol. 2467. – P. 020018. – doi:10.1063/5.0092420.
8. Journal of Physics: Conference Series / M. K. Karimov, U. O. Kutliev, M. U. Otabaev, I. A. Khajieva. – 2022. – Vol. 2373 (3). – P. 032003. – doi:10.1088/1742-6596/2373/3/032003.
9. Robinson, M. T. MARLOWE Binary Collision Cascade Simulation Program, Version 15b, A Guide for Users / M. T. Robinson. – London, 2002. – 231 p.
10. Robinson, M. T. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms / M. T. Robinson. – 1992. – Vol. 67. – 396 p. – doi:10.1016/0168-583X(92)95839-J.
11. Yamamura, Y. Surface semichanneling effects on spatial distribuion of reflected ions / Y. Yamamura, W. Takeushi // Phys. Lett. – 1983. – Vol. 92A, № 2. – P. 109.
12. Машкова, Е. С. Отражение ионов от монокристаллов при скользящем падении / Е. С. Машкова, В. Б. Флеров // Поверхность. – М., 1983. – № 3. – С. 41–46.

Scattering of Ne^+ ions at small angles of incidence from a stepped InGaP(001) $\langle 110 \rangle$ surface with an initial energy of $E_0 = 5$ keV was simulated using computer simulation. The trajectories of dechanneled ions, as well as their energies and scattering angle, are studied. It is shown that before dechanneling, the frequency and amplitude of the trajectory of ions, which move the surface channel formed by the stepped atom, increase. The energy distributions of these ions are obtained and the part of the spectrum corresponding to these ions is determined. It has been established that the energetic dechanneled ions have low intensity and lie in the low-energy part of the spectrum. Studying the trajectory of dechanneled ions makes it possible to determine the energy and angle of incidence of implanted ions.

Каримов Мухторжон Каримберганович, PhD, доцент, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, karimov_m_k@mail.ru.

Отабаев Мехрож Учкун угли, магистрант, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uch-kunk@mail.ru.

Кутлиев Учкун Отобоевич, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

Научный руководитель – *Кутлиев Учкун Отобоевич*, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

УДК 004.93,535.317,548.732

И. Н. КОЛЬЧЕВСКАЯ, Ю. И. ДУДЧИК, Н. Н. КОЛЬЧЕВСКИЙ
ВЫДЕЛЕНИЕ ГРАНИЦ ОБЪЕКТОВ
МЕТОДОМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СЪЁМКИ

Разработана программа «X-ray Vox», которая вычисляет распределение интенсивности рентгеновского излучения на детекторе в зависимости от угла поворота объекта. Произведены расчёт распределения интенсивности в зависимости от угла поворота объекта и расчёт новых координат проективной формы объекта на основе оператора поворота. Выполнены численные эксперименты для прямоугольных пластин. Результат разностной съёмки содержит положительную и отрицательную части графика, позволяющего определить границы объекта.

Для получения изображений слабопоглощающих рентгеновское излучение объектов используется метод дифференциальной съёмки [1]. Основу метода составляет получение двух изображений объекта при изменении углового положения, и формирование разностного изображения. Метод дифференциальной съёмки направлен на обнаружение границ объектов, которые существенно изменяют пропускание при угловом повороте объекта. Этот принцип был заложен в основу программы «X-ray Vox».

Программа «X-ray Vox» разработана в среде программирования Rad Studio 11 Alexandria Delphi. Программа «X-ray Vox» моделирует процесс прохождения рентгеновских лучей, через объект при заданном угле поворота и рассчитывает распределение интенсивности на детекторе. На рисунке 1 показано рабочее окно программы «X-ray Vox». Для запуска программы, необходимо в рабочем окне указать следующие параметры: количество шагов, которые отвечают за расположение объекта; угол поворота (в градусах), показывающий как будет повернут объект относительно начального положения; толщина и длина объекта; интенсивность излучения; линейный коэффициент поглощения, который задается в соответствии с материалом, из которого изготовлен объект и энергией рентгеновских фотонов; название log файла для сохранения результатов работы.



Рисунок 1 – Рабочее окно программы «X-ray Vox»

Распределение интенсивности рентгеновского излучения на детекторе в зависимости от угла поворота объекта вычисляется по формуле:

$$I(x, y) = I_0 e^{-\mu(\lambda) \cdot D(a_x, a_y, a_z, x_0, y_0, z_0, \alpha, \beta, \gamma)}, \tag{1}$$

где I_0 – интенсивности источника излучения, $\mu(\lambda)$ – линейный коэффициент поглощения материала объекта в зависимости от длины волны излучения λ , $D(a_x, a_y, a_z, x_0, y_0, z_0, \alpha, \beta, \gamma)$ – толщина объекта по направлению вектора (a_x, a_y, a_z) при повороте относительно оси (x_0, y_0, z_0) на угол (α, β, γ) .

$D(a_x, a_y, a_z, x_0, y_0, z_0, \alpha, \beta, \gamma)$ – толщина объекта по направлению вектора (a_x, a_y, a_z) определяет проективную форму объекта, которая вычисляется на основе координат объекта $F(x, y, z)$ представляющих множество точек принадлежащих границе $F\{x_i, y_i, z_i\}$. Поворот объекта позволяет рассчитать новые координаты проективной формы объекта $F\{X_j, Y_j, Z_j\}$ на основе оператора поворота $R(x_0, y_0, z_0, \alpha, \beta, \gamma)$:

$$F\{X_j, Y_j, Z_j\} = F\{x_i, y_i, z_i\} \cdot R(x_0, y_0, z_0, \alpha, \beta, \gamma), \tag{2}$$

Результаты расчета по формулам 1 и 2 в программе «X-ray vox» показаны на рисунке 1Б. Численные эксперименты выполнены для прямоугольных пластин размером 20–1000 мкм, для углов поворота от 1 до 90 градусов. При повороте объекта толщина объекта меняется, и проективная форма объекта будет представлять собой трапецию рисунок 2. Эффект «трапеции» при повороте объекта, приводит к изменению эффективной длины объекта, что также проявляется на изменении распределения интенсивности.

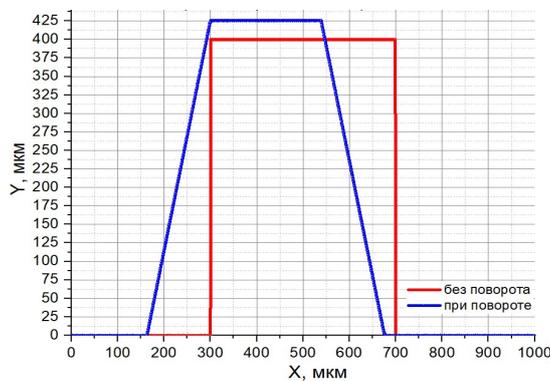


Рисунок 2 – Зависимость толщины квадратного объекта при повороте от координаты

Распределение интенсивности на детекторе в зависимости от коэффициента поглощения объекта показаны на рисунке 1. Коэффициенты поглощения соответствуют разным материалам: C_3H_6 (polypropylene) – синяя линия, Cu (меди) – зелёная линия, $C_5O_2H_8$ (plexiglass) – красная линия. С увеличением линейного коэффициента поглощения растёт контраст в изображении границ объектов (рисунок 3а). При повороте пластинки наблюдается спад интенсивности, что может характеризоваться некоторым размытием изображения на детекторе.

Результат разностной съёмки ΔI с пиками, определяющими границы объекта, показан на рисунке 3, где зелёная линия – медь, красная линия – плексиглас, синяя линия – полипропилен. Видно, что при повороте объекта результат разностной съёмки проявится на участках 150–300 мкм и 550–700 мкм, и зависимость яркости изображения будет иметь нелинейный характер. При увеличении линейного коэффициента поглощения увеличивается разностный контраст (рисунок 3б). Результат разностной съёмки содержит положительную и отрицательную часть графика. Положительная часть ΔI соответствует светлым элементам изображения, а отрицательная – темным элементам. Наличие темных и светлых элементов увеличивает контраст изображения и характеризует границы объекта.

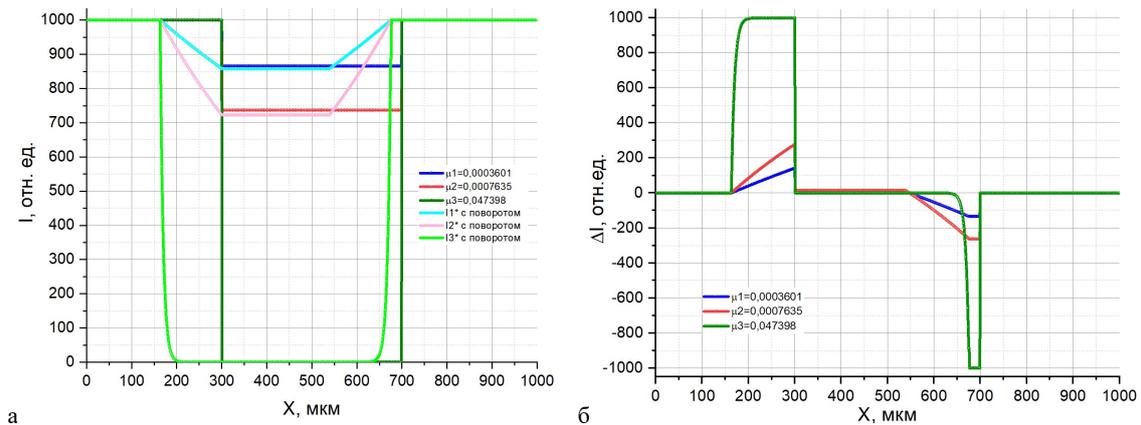


Рисунок 3 – Распределение интенсивности рентгеновского излучения на детекторе (а) и результат разностной съёмки (б)

Список литературы

1. Дудчик, Ю. И. Цифровая рентгенография слабопоглощающих рентгеновское излучение объектов / Ю. И. Дудчик, А. А. Субач // Приборостроение – 2022 : материалы 15-й междунар. науч.-техн. конф., Минск, 16–18 нояб. 2022 г. / редкол.: О. К. Гусев (пред.) [и др.]. – Минск : БНТУ, 2022. – С. 22–23.

Developed the program «X-ray Box», which calculates the intensity distribution of X-ray emission on the detector depending on the rotation angle of the object. Calculated the intensity distribution based on the rotation angle of the object and calculated new coordinates of the projective form of the object on the basis of the rotation operator. Performed numerical experiments for rectangular plates. The result of the difference survey contains positive and negative parts of the graph, which allows to determine the boundaries of the object.

Кольчевская Ирина Николаевна, магистрант 1 курса, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, iren.kolchevsky@gmail.com.

Научные руководители: Дудчик Юрий Иванович, кандидат физико-математических наук, Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, Dudchik@bsu.by.

Кольчевский Николай Николаевич, кандидат физико-математических наук, доцент, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, kolchevsky@bsu.by.

УДК 535.37

Н. Н. КРАСНОПЕРОВ

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ АНАЛИЗА КИНЕТИКИ ЗАТУХАНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ДЛЯ ЛАЗЕРНОГО СПЕКТРОФЛУОРИМЕТРА

Представлен программный модуль «ФлуоТау» для анализа кривых затухания флуоресценции, который разрабатывается в рамках проекта по созданию лазерного спектрофлуориметра. Данный программный комплекс позволяет аппроксимировать кинетику затухания флуоресценции моделью до 5-ти экспонент с помощью нелинейного метода

наименьших квадратов, имеет большую гибкость в настройке начальных и граничных условий аппроксимации. В программном модуле «ФлуоТау» реализован также расширенный режим аппроксимации, в котором имеется возможность регулировать область поиска времени затухания флуоресценции для одного или нескольких флуоресцирующих центров. С использованием макета на базе спектрофлуориметра Fluorolog проведена апробация отдельных узлов лазерного спектрофлуориметра. Зарегистрированы кинетики затухания различных образцов с известными временами затухания флуоресценции (растворы красителей родамин 6Ж и НГТС в этаноле). В результате аппроксимации полученных кинетик с помощью стандартного режима программного модуля «ФлуоТау» получены времена затухания флуоресценции, которые в пределах погрешности совпадают со значениями в литературе.

Люминесцентный анализ один из наиболее информативных спектральных методов при исследовании объектов в различных областях науки. В последние два десятилетия с развитием аппаратуры для измерения временных характеристик свечения люминесценции его применение значительно расширилось. Эталонным методом для получения кинетики затухания сегодня стал метод время-коррелированного счета фотонов. Прежде всего, это обусловлено появлением мегагерцовых импульсных лазерных источников с субнано-секундной и пикосекундной длительностью, а также развитием микроэлектронной базы. В лаборатории спектроскопии НИИПФП им. А. Н. Севченко выполняется разработка лазерного спектрофлуориметра для спектрально-кинетического люминесцентного анализа в экспериментальной физике и биологии. Одной из задач данного этапа проекта является разработка программного модуля «ФлуоТау» для анализа кинетики затухания флуоресценции. На базе спектрофлуориметра Fluorolog (SPEX, США) создан макет для апробации отдельных узлов и тестирования ПО.

Известно, что для однокомпонентных систем характерным является одноэкспоненциальный закон затухания флуоресценции для молекулярной системы. В случае нескольких невзаимодействующих флуоресцирующих центров закон затухания будет представлен суммой экспонент:

$$I(t) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot e^{-t/\tau_i}, \quad (1)$$

где N – число различных флуоресцирующих центров.

Поскольку длительности возбуждающего импульса и отклика регистрирующей фотосистемы нередко сопоставимы с временем затухания флуоресценции исследуемых объектов, то регистрируемый сигнал флуоресценции в момент времени t представляет собой свертку вида:

$$F(t) = \int_0^t G(t') I(t-t') dt', \quad (2)$$

где $G(t)$ – аппаратная функция, которая определяется как отклик системы регистрации на возбуждающий световой импульс.

Закон затухания флуоресценции исследуемых молекул можно установить путем решения задачи деконволюции, т. е. нахождения из интегрального уравнения (2), функцию $I(t)$. Для расчёта параметров α_i и τ_i на основании экспериментальных кривых предложено достаточно много различных методов [1; 2]. В этом отношении наиболее надёжно себя показал метод наименьших квадратов [3]. В его основе минимизация функционала χ^2 , который представляет собой взвешенное среднеквадратичное отклонение рассчитанного закона затухания флуоресценции $F_{расч}(t_i)$ от зарегистрированного $F_{эксн}(t_i)$:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n w_i [F_{эксн}(t_i) - F_{расч}(t_i)]^2, \quad (3)$$

где w_i весовые коэффициенты:

$$w_i = \frac{1/F_{эксн}(t_i)}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1/F_{эксн}(t_i)}. \quad (4)$$

Данный подход используется в разработанном программном модуле «ФлуоТау». Поиск параметров экспонент функции $I(t)$ реализован в виде итерационного алгоритма. Принимая во внимания нелинейную зависимость функционала χ^2 от τ_i , для ускорения вычислений использован метод Левенберга – Марквардта для нелинейного метода наименьших квадратов. В качестве варьируемых параметров в модель оптимизации также включен временной сдвиг между аппаратной функцией и кинетикой затухания флуоресценции образца. Программный модуль выполнен в виде оконного приложения для системы Windows (рисунок 1). На главной

форме располагаются основные элементы управления (предварительный анализ кинетики, параметры модели аппроксимации, сглаживание) и отображения результата расчета включая статистические параметры для оценки качества аппроксимации.

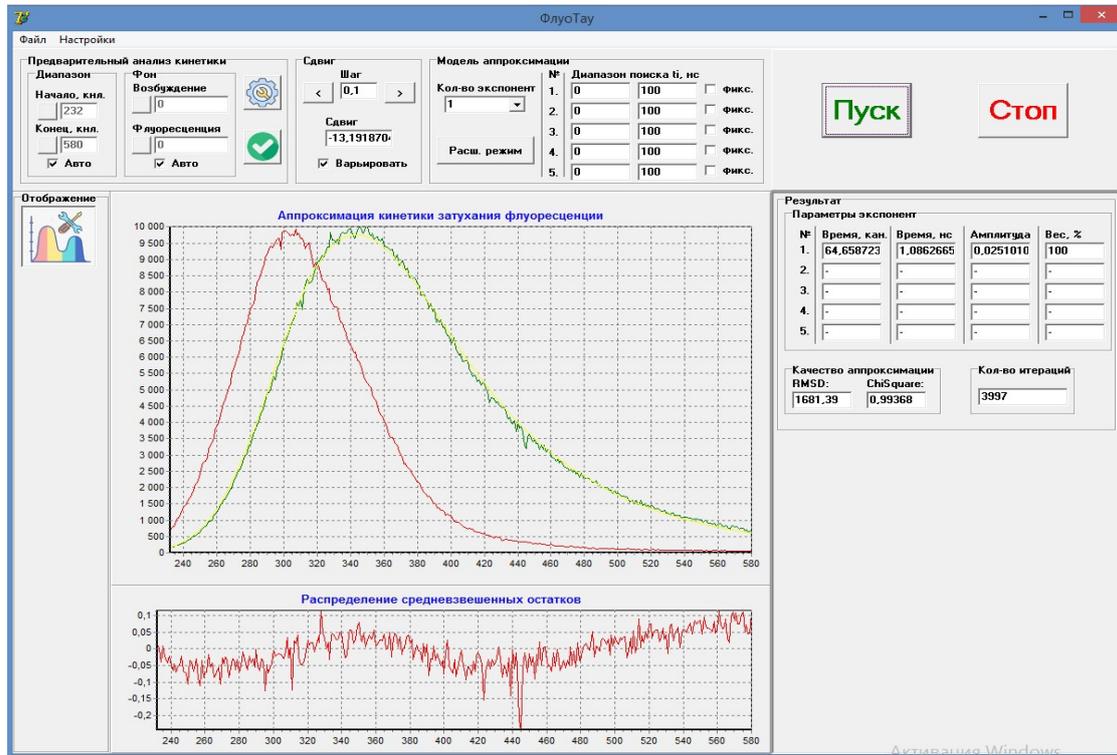


Рисунок 1 – Вид главного окна программного модуля «ФлуоТау»

Следует отметить, что в открытых источниках описывается только общий принцип алгоритма. Детали реализации алгоритма (например, выбор начальных и граничных условий, выделение области анализа, определение критерия останова циклов и т. д.) в литературе зачастую отображены недостаточно. При этом данный алгоритм обладает высокой чувствительностью от начальных параметров [4]. В результате программная реализация алгоритма стала отдельной исследовательской задачей.

В программном модуле «ФлуоТау» реализован также расширенный режим аппроксимации. В данном режиме имеется возможность регулировать область поиска времени затухания флуоресценции для одного или нескольких центров (в том числе его фиксации). С одной стороны, это позволяет учесть сигнал флуоресценции от примесей с известным временем затухания флуоресценции. С другой стороны, такой подход более гибкий при исследовании сложных многокомпонентных флуоресцирующих систем, в которых имеется некоторая исходная информация о фотофизических свойствах отдельных центров. Примером такой системы является комплексообразование флуоресцентных зондов с биомакромолекулами в биообъектах.

В процессе разработки программного модуля «ФлуоТау» корректность работы алгоритма расчета проверена на сгенерированных модельных данных в виде свертки известной аппаратной функции и теоретического закона затухания, представленного суммой нескольких экспонент с известными временами затухания и весами (амплитудами). В полученные кинетики дополнительно добавлялась шумовая компонента с разным уровнем шума. В результате анализа с помощью программного модуля «ФлуоТау» с использованием моделей аппроксимации от 1 до 5 экспонент наилучший результат аппроксимации достигался при совпадении количества экспонент в моделях генерации исходных данных и их аппроксимации. При этом расходимость времен затухания в моделях не превышала 3 %, что подтверждает корректность работы алгоритма.

С использованием макета на базе спектрофлуориметра Fluorolog проведена апробация отдельных узлов лазерного спектрофлуориметра. Зарегистрированы кинетики затухания различных образцов с известными временами затухания флуоресценции (растворы красителей родамин 6Ж и НТС в этаноле). В результате аппроксимации полученных кинетик с помощью стандартного режима программного модуля «ФлуоТау» получены времена затухания флуоресценции, которые в пределах погрешности совпадают со значениями в литературе: родамин 6Ж в этаноле – 4,0 нс [5], НТС в этаноле – 1,2 нс [6].

Таким образом, разработан программный модуль «ФлуоТау» для анализа кинетики затухания флуоресценции. Программный модуль «ФлуоТау» позволяет аппроксимировать кинетику затухания флуоресценции моделью до 5 экспонент, имеет большую гибкость в настройке начальных и граничных условий аппроксимации.

Список литературы

1. O'Connor, D. V. O. Deconvolution of fluorescence decay curves. A critical comparison of techniques / D. V. O. O'Connor, W. R. Ware, J. C. Andre // J. Phys. Chem. – 1979. – Vol. 83. – P. 1333.
2. Apanasovich, V. V. Methods of the decay curves analysis in fluorescent spectroscopy / V. V. Apanasovich, E. G. Novikov // J. Appl. Spectr. – 1992. – Vol. 56, № 4. – P. 538–549.
3. Grinvald, A. On analysis of fluorescence decay kinetics by the method of least-squares / A. Grinvald, I. Z. Steinberg // Anal. Biochem. – 1974. – Vol. 59. – P. 583.
4. Enderlein, J. Fast fitting of multi-exponential decay curves / J. Enderlein, R. Erdmann // Optics Communications. – 1997. – T. 134, № 1–6. – P. 371–378.
5. Berezin, M. Y. Fluorescence lifetime measurements and biological imaging / M. Y. Berezin, S. Achilefu // Chemical reviews. – 2010. – T. 110, № 5. – С. 2641–2684.
6. Концентрационное увеличение квантового выхода образования синглетного кислорода индотрикарбонианиновым красителем / М. П. Самцов [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2014. – Т. 81, № 2. – С. 219–227.

The paper presents the «FluoTau» software module for the analysis of fluorescence decay curves, which is being developed as part of a project to create a laser spectrofluorimeter. This software package allows approximating the fluorescence decay kinetics with a model of up to 5 exponents using the non-linear method of least squares, that has great flexibility in setting the initial and boundary conditions of the approximation. The «FluoTau» software module also provides an extended approximation mode, in which it is possible to adjust the search area for the fluorescence decay time for one or more fluorescent centers. Using a layout based on the Fluorolog spectrofluorimeter, individual units of the laser spectrofluorimeter were tested. The decay kinetics of various samples with known fluorescence decay times were recorded (solutions of the dyes Rhodamine 6G and H1TC in ethanol). As a result of the approximation of the obtained kinetics using the standard mode of the FluoTau software module, the fluorescence decay times were determined, which, within the error, coincide with the values in the literature.

Красноперов Никита Николаевич, студент 4-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, nikitakrasnoporov2710@gmail.com.

Научный руководитель – *Тарасов Дмитрий Сергеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, лаборатория спектроскопии Института прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, dmitrij-tarasov@list.ru.

УДК 666

М. В. КУШИНА

СРАВНЕНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНОГО СОСТАВА ФЕРМЕРСКОГО МОЛОКА И МОЛОКА ИЗ ТОРГОВОЙ СЕТИ «ЕВРООПТ»

Методом рентгено-флуоресцентной спектроскопии изучался элементарный состав молока, представленного в торговых сетях г. Гродно, и из фермерского хозяйства экологически чистой зоны. Проведено сравнение элементарного состава молока, представленного в торговой сети «Евроопт», и фермерского коровьего молока с экологически чистой зоны Национального парка «Беловежская пуща». По результатам исследования был проведён сравнительный анализ элементарного состава образцов. Молоко и получаемые из него продукты содержат большинство необходимых организму нутриентов.

В торговой сети «Евроопт» представлено молоко следующих производителей: «Молочный мир» г. Гродно («Молоко», «Твоя кружка»), «Брест-Литовск» г. Брест, «Бабушкина крынка» г. Могилёв.

Методом исследования является рентгено-флуоресцентная спектроскопия. Для исследования был использован спектрометр ElvaX компании «Элватех».

Устройство спектрометра схематично можно представить в следующем виде: источник возбуждения – образец – детектор излучения – амплитудный анализатор – обработка полученных результатов на ЭВМ.

Спектрометр состоит из следующих основных элементов: совместных рентгеновской трубки с блоком питания, кюветодержатель, детектор рентгеновского излучения, выполненный в полупроводниковом виде, а также устройство обработки спектральных сигналов.

Метод РФА заключается в измерении интенсивности спектральных линий, полученных при вторичной рентгеновской эмиссии от исследуемого образца. Другой вариант исследования – определение длин волн с измерением энергии в пределах этой волны (т. н. спектрометры с волновой дисперсией). Поток квантов короткой длины волны (большой энергии), полученных в рентгеновской трубке направляется на исследуемый образец и поглощается им. При этом элементы, составляющие основу данного образца, возбуждаются и

излучают вторичные кванты энергии с длинами волн, свойственных лишь этому образцу. Для качественного определения химических элементов, составляющих основу исследуемого образца, необходимо определить численные значения регистрируемых длин волн, испущенных возбужденными элементами образца. Для количественного анализа (в том числе и концентрации исследуемых веществ) необходимо измерять численные значения интенсивности вторичного потока от образца. Поскольку вторичные рентгеновские кванты определяются переходами на внутренних электронных подуровнях атомов, образующих исследуемые элементы, то химические связи между изучаемыми элементами, на результаты исследований не влияют.

Для проведения исследования исследуемый продукт необходимо:

1. Тщательно измельчить и перемешать, высушить до постоянного веса при температуре до 105 °С и измельчить в фарфоровой ступке.

2. К 1 г навески, увлажненной 1 мл дистиллированной водой, добавить 3 мл концентрированной азотной кислоты и 1 мл 30 % перекиси водорода, тщательно перемешать и сушить в течение часа при 170–190 °С.

3. Полученную взвесь повторно промолоть, проклеить клеевым раствором и спрессовать в таблетку под давлением порядка 5 тонн/см³.

Подготовив по вышеуказанной схеме исследуемые образцы, проводится исследование на спектрометре ElvaX. В результате исследования мы получаем данные по концентрации элементов в пробе на массу сухого веса. Далее эти показатели пересчитываются на 100 г продукта. Для этого:

1. Высчитывается коэффициент K , который показывает отношение массы исследуемого образца до сушки к массе сухого веса образца:

$$K = \frac{m_{\text{пробы}}}{m_{\text{с.ост.}}} .$$

2. Затем высчитывается масса элемента в сухом остатке.

3. Высчитывается масса элемента в пробе.

4. Далее пропорцией высчитывается масса элемента в 100 г исследуемого продукта.

В результате проведенных исследований выявлены следующие показатели, представленные в таблице 1.

Таблица 1 – Элементарный состав исследуемых образцов молока

	Молочный мир	Брест-Литовск	Твоя кружка	Бабушкина крынка	Домашнее молоко
Ca	735,1	844,66	536,2	577,1	731,3
K	712,9	605,8	342,99	552,2	432,8
Cl	465,3	389,3	202,9	318,4	268,7
Fe	1,48	4,8	9,7	18,4	1,99
S	272,3	276,7	178,7	228,9	230,3
Se	0,025	0,097	0,048	0,03	0,85
Zn	3,96	4,8	3,4	2,5	4,5
Br	0,39	0,44	0,14	0,35	1,5
Sr	0,2	0,24	0,19	0,25	0,15

Обращает на себя внимание, что в фермерском молоке содержится самое высокое содержание Se – элемента антиоксидантной защиты, хорошо сочетается с витамином Е, помогает поддерживать должную эластичность тканей, усиливает иммунитет, защищает организм от тяжелых металлов, входит в состав ряда гормонов и ферментов. Недостаток является причиной преждевременного старения, уменьшения продолжительности жизни человека и животных. Жители Беларуси недополучают селен из продуктов питания, поскольку 50 % территории относятся к региону, в котором уровень селена в почве ниже критического. Бром оказывает благотворное влияние на центральную нервную систему [2]. Цинк в организме человека составляет менее 0,01 % массы тела, играет важную роль в физиологических и патологических процессах организма, служит составной частью более 80 ферментов в организме человека. Уровень цинка в организме тесно коррелирует с его потреблением с пищей, как и другие микро- и макроэлементы.

Также в исследуемом образце фермерского молока определяется самое низкое содержание стронция, который является неэссенциальным элементом и его роль для организма человека до сих пор не изучена.

В образце молока «Брест-Литовск» содержится наибольшее количество кальция и серы. Кальций – основной структурный компонент опорных тканей и оксификации костей, участвует в процессе свертывания крови. Выполняет пластические функции, придаёт стабильность клеточным мембранам, участвует в осуществлении межклеточных связей (процесс адгезии) при тканеобразовании, необходим для нормальной возбудимости нервной ткани и сократимости мышечных волокон, является активатором ряда ферментов и гормонов. Лучшим источником кальция в питании человека является молоко и молочные продукты [3; 4].

Сера – жизненно важный элемент, который входит в состав белков в виде серосодержащих аминокислот (метионина и цистина), а также в состав инсулина и витаминов. Источником является преимущественно продукты животного происхождения [3].

В образце «Молочный мир» содержится наибольшее количество калия и хлора. Калий способствует выведению жидкости из организма, играет важную роль в процессе внутриклеточного обмена, участвует в ферментативных процессах и в превращении фосфопировиноградной кислоты в пировиноградную, играет большую роль в проведении нервного возбуждения в мышцах [3]. Хлор играет важную роль в поддержании осмотического равновесия плазмы крови, лимфы, некоторых тканей, баланса воды в организме, является компонентом желудочного сока [2].

Молоко и молочные продукты являются поставщиком эссенциальных элементов, которые жизненно необходимы для организма человека, уменьшают отрицательное воздействие загрязнителей, выполняют обменные, пластические, ферментативные функции.

Список литературы

1. Соболев, В. И. Качественный рентгенофлуоресцентный анализ : метод. указания / В. И. Соболев // Томск. политех. ун-т. – Томск : Изд-во Том. политех. ун-та, 2014. – 18 с.
2. Позняковский, В. М. Гигиенические основы питания, качество и безопасность пищевых продуктов : учеб. / В. М. Позняковский. – 5-е изд., испр. и доп. – Новосибирск : Изд-во Сиб. ун-та, 2007. – 455 с.
3. Мархоцкий, Я. Л. Советы терапевта. Гигиена питания / Я. Л. Мархоцкий. – Минск : Выш. шк., 2011. – 239 с.
4. Деликатная, И. О. Безопасность товаров (продовольственных) : учеб. пособие / И. О. Деликатная, И. Ю. Ухарцева. – Минск : Выш. шк., 2012. – 252 с.

The method of X-ray fluorescence spectroscopy was used to study the elemental composition of milk presented in the retail chains of the city of Grodno and a farm from an ecologically clean zone. According to the results of the study, a comparative analysis of the elemental composition of the samples was carried out.

Кушина Мария Владимировна, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, kushina798@gmail.com.

Научный руководитель – *Жарнова Валентина Васильевна*, кандидат медицинских наук, доцент, кафедра технологии, физиологии и гигиены питания, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, a.zharnow@grsu.by.

УДК 537.9

А. Н. ОЗОЛИНЬ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ МАГНИТНОГО И ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЕЙ НА ПАРУ ДОНОРОВ И ПАРУ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

С помощью метода Хартри – Фока проведено моделирование влияния электрического и магнитного полей на обменную энергию пары доноров и квантовых точек. Получены пробные функции для вариационного метода, учитывающие смещение волновой функции из-за наличия электрического поля затвора. Исследовано влияние внешних полей на скорость изменения обменной энергии.

Массивы квантовых точек и одиночные доноры в полупроводниках могут использоваться в различных устройствах нанoeлектроники. Для многих таких устройств необходимо контролировать взаимодействие электронов соседних доноров или квантовых точек с помощью внешних электрического и магнитного полей [1; 2]. При моделировании воздействия электрического поля на двухэлектронную систему обычно предполагается, что внешнее электрическое поле однородно [3; 4], однако для более реалистичного моделирования подобных структур необходимо учитывать неоднородность поля. Таким образом, возникает необходимость изучения влияния магнитного поля и электрического поля, созданного электродами различной конфигурации, как на пару центров доноров, так и на пару квантовых точек.

Рассмотрим следующую структуру: имеется пара доноров или пара квантовых точек, расположенные вблизи поверхности полупроводника, на которые воздействуют внешние электрическое и магнитное поля. Однородное магнитное поле направлено перпендикулярно поверхности полупроводника и прямой, соединяющей доноры (квантовые точки). В работе рассмотрено несколько типов потенциалов электрического поля: как однородные, так и неоднородные.

Для расчета волновой функции Ψ и энергии системы E в рамках подхода эффективной массы необходимо решить следующую задачу на собственные значения:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1)$$

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}^{(1)}(\vec{r}_1) + \hat{H}^{(1)}(\vec{r}_2) + \frac{2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (2)$$

$$\hat{H}^{(1)}(\vec{r}) = -\nabla^2 + \hat{V}_{D_1} + \hat{V}_{D_2} + \hat{V}_E + \hat{V}_{Magn}, \quad (3)$$

где \hat{V}_E – оператор внешнего электрического поля, \hat{V}_{D_i} – потенциал доноров или квантовых точек. В качестве ограничивающего потенциала квантовых точек рассматривалась кусочно-постоянная функция. Оператор магнитного поля:

$$\hat{V}_{Magn} = i\mu \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\mu^2}{4} (x^2 + y^2). \quad (4)$$

Уравнение (1)–(4) решалось методом Хартри – Фока. При решении уравнения Шрёдингера использовался вариационный метод с пробными функциями в виде комбинации гауссиан и полиномиальных функций. Пробные функции выбирались исходя из минимизации энергии донора или квантовой точки в поле внеосевого электрода, индуцирующего электрического поля.

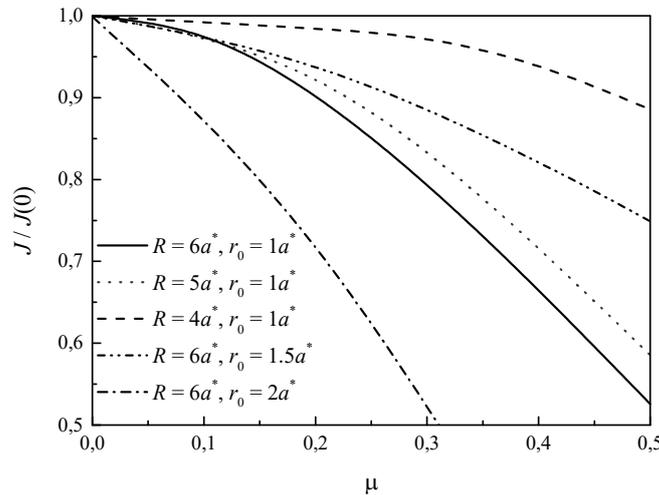


Рисунок 1 – Зависимость обменной энергии от магнитного поля для различных параметров квантовых точек (R – расстояние между квантовыми точками, r_0 – радиус квантовой точки); глубина квантовой точки $V_0 = 5Ry^*/e$

На основании численных расчетов исследовано влияние электрического и магнитного (рисунок 1) полей и геометрических параметров на обменную энергию (J). Установлено, что относительная скорость уменьшения обменной энергии (отношение $J/J(0)$ на рисунке 1, где $J(0)$ – обменная энергия при нулевом магнитном поле) больше при больших значениях поля и расстояниях между донорами или квантовыми точками. Эта скорость изменяется немонотонно с изменением радиуса квантовой точки: для $R = 6a^*$ скорость уменьшения J наименьшая для радиуса точек $r_0 = 1.5a^*$ по сравнению с $r_0 = 1a^*$ и $r_0 = 2a^*$.

Магнитное и электрическое поля можно использовать для компенсации флуктуаций обменной энергии, связанных с флуктуациями расстояния между соседними точками или донорами.

Список литературы

1. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells / J. Wu [et al.] // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – Vol. 48, № 36. – P. 363001.
2. Silicon quantum electronics / F. A. Zwanenburg [et al.] // Reviews of modern physics. – 2013. – Vol. 85, № 3. – P. 961.
3. Two-electron states of a group-V donor in silicon from atomistic full configuration interactions / A. Tankasala [et al.] // Physical Review B. – 2018. – Vol. 97, № 19. – P. 195301.
4. Exchange coupling in silicon quantum dots: Theoretical considerations for quantum computation / Q. Li [et al.] // Physical Review B. – 2010. – Vol. 81, № 8. – P. 085313.

Modeling the effect of electric and magnetic fields on exchange energy of donor and quantum dot pairs is carried out using Hartree-Fock method. Trial functions for variational method taking into account wave function bias are obtained. The effect of external fields on the rate of exchange energy change is studied.

Озолин Алексей Николаевич, студент 3-го курса факультета прикладной математики и информатики, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, alexozol19524@gmail.com.

Научный руководитель – *Левчук Елена Александровна*, старший преподаватель, факультет прикладной математики и информатики, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, liauchuk.alena@gmail.com.

УДК 537.534

К. У. ОТАБАЕВА, Д. У. ХУДОЙНАЗАРОВА, У. О. КУТЛИЕВ
**ИССЛЕДОВАНИЯ РАСПЫЛЕНИЯ ПЛЁНКИ ЛЬДА
ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ Ar^+**

Исследование проведено методом компьютерного моделирования распыления плёнки льда с помощью метода молекулярной динамики. Рассмотрены распыления четырех слоев пленки льда, покрытой на поверхности Au(111). Результаты расчетов показали, что количество падающих частиц напрямую влияет на процесс распыления, то есть чем больше количество падающих частиц, тем интенсивнее происходит процесс распыления атомов верхних слоев подложки. Это связано с тем, что падающие ионы, разрушая структуру кристалла, а именно нарушая периодичность верхних атомных слоев, остаются в подложке кристалла, передавая большую часть своих энергий. Получены и проанализированы масс-спектры распыленных частиц, установлено, что масс-спектр содержит несколько пиков, относящихся молекулы воды, молекулярных кластеров воды и Au.

Взаимодействие быстрых ионов с твердым телом приводит к выбиванию атомов и молекул материала, как в нейтральном, так и в заряженном состоянии. На таком явлении сравнительного эффективного образования заряженных частиц (вторичных ионов) и на принципе высокочувствительных масс-спектрометрических измерениях и основан метод вторично-ионной масс-спектрометрии ВИМС [1; 2].

В этой работе нами рассмотрено распыление пленки льда, покрытой на поверхность Au(111). Для выполнения нашей цели нами использовано метод молекулярной динамики. Развитие молекулярной динамики шло двумя путями. Первый, обычно называемый классическим (когда вычисляются траектории атомов), имеет довольно длительную историю. Он относится к задаче двух частичного рассеяния, которая может быть решена аналитически. Однако, как хорошо известно, даже уже для трех частиц появляются трудности, затрудняющие аналитическое решение [3].

Вторым путем развития метода молекулярной динамики стало исследование термодинамических и динамических свойств систем. Идеи, лежащие в основу этого пути, восходят к работам Ван-дер-Ваальса и Больцмана. Следует отметить несколько ключевых работ, определивших развитие метода молекулярной динамики. Первая работа, посвященная моделированию методом молекулярной динамики, вышла в 1957 году. Её авторами были Алдер и Ваингвайт [4]. Молекулярная динамика (МД) – это техника компьютерного моделирования, позволяющая проследить эволюцию системы взаимодействующих атомов во времени с помощью интегрирования уравнений движения. Несомненным преимуществом метода МД является возможность моделирования системы при заданной температуре или при заданных скоростях атомов (ионов) с достаточно высокой скоростью расчета. МД представленной в этой работе является моделью микроскопического движения атомов льда, осажённых на поверхность металла. Основной частью МД моделирования – потенциалы взаимодействия, которые очень важны для описания силы между атомами, будут представлены в этом разделе. Так как система состоит из атомов металла и молекул воды (состоит из атомов водорода и кислорода) необходимо выбрать потенциал взаимодействия, который может описывать реальный характер взаимодействия между этими атомами.

Нами рассмотрена система, которая состоит из кристалла Au(111), покрытого несколькими слоями воды. Пленка льда состоит из 2-х слоев. Для описания взаимодействия вода – вода в нашей работе был выбран SPC [5] потенциал. Этот потенциал удачно использован при изучении свойств воды в твердых, жидких и газовых состояниях. В SPC модели потенциал взаимодействия состоит из электростатического компонента между двумя атомами. Для описания отталкивающей части потенциала между атомами кислорода была выбрана потенциал Ленхарда – Жонса.

Электростатические взаимодействия воды используются для создания чистого взаимодействия диполя-диполя отталкивающихся и притягивающихся частей ионов. Следовательно, исправления из-за установки силы имеют вид отталкивания. Вычисления структуры и динамические свойства жидкой воды, использующей переменные силы, изменили потенциалы и имели хорошие согласие с результатами эксперимента.

Для взаимодействия Au-Au представлен скорректированный потенциал функции МД/МОНТЕ-КАРЛО, т. е. fcc металлов [6]. Этот потенциал очень хорошо описывает свойства Au. Следует отметить, с помощью этого

потенциала более реально можно показать характер поверхностной энергии атомов Au. Также с помощью этого потенциала были изучены тепловые свойства Au [7]. Этот потенциал был использован при изучении монослоев на подложке золота [8].

Для описания взаимодействия Au–H₂O нами выбран потенциал Spohr [9], который был использован при адсорбции молекул воды на поверхности Ni(100). Этот потенциал в основном состоит из потенциала Morse [10].

Нами визуально наблюдается процесс бомбардировки ионами Ag⁺ поверхность Au(111) покрытая четырьмя слоями молекул воды. Для визуального просмотра этого процесса была использована программа VMD. Данный процесс бомбардировки происходит при нормальном падении иона с начальной энергией $E_0 = 400$ эВ на поверхности твердого тела. В этом случае продолжительность бомбардировки равна $t = 5$ пикосекунд. Визуальный процесс бомбардировки представлен четырьмя изображениями. При бомбардировке поверхности Au(111) покрытой молекулами воды наблюдается процесс распыления молекул воды и атомов Au. Падающий ион, столкнувшись с верхним слоем поверхности, изменит структуру, как плёнки, так и кристалла.

При времени бомбардировки, равном 30 фмсек., ион ударяется в верхний слой поверхности, выбивая при этом 6 молекул воды и, следовательно, изменит прежнюю структуру подложки. На этом рисунке также видно, что один атом золота покидая подложку, перемещается в верхнем направлении. Следует отметить, что при этом времени бомбардировки атомы верхних слоёв подложки, близко расположенных к месту бомбардировки, изменяя свое первоначальное положение, перемещаются в следующей последовательности: атомы верхних слоев перемещаются горизонтально, а атомы средних слоев перемещаются в нижнем направлении, хотя некоторые из них даже перемещаются к другим слоям. Данные перемещения представляют собой начало большого каскада атомов подложки. На следующем этапе бомбардировки, то есть при 120 фмсек. каскады столкновений видны уже более отчетливо. Наблюдалось, что этот каскад по сравнению с предыдущим имеет уже более разветвленную схему. Сущность которой заключается в следующем: во-первых, движения атомов верхних слоев продолжают как и прежде, во-вторых, колебания атомов седьмого слоя подложки (отчет ведется с нижних слоев) значительно влияют на перемещения атомов, образуя при этом отчетливые траектории каскада. Следует отметить, что при данном времени бомбардировки первый слой подложки, даже подвергаясь некоторому колебанию, все равно еще не входит в уже значительно разветвленную ветвь каскада. Верхняя часть поверхности представляет собой хаотическое движение молекул воды в разных направлениях, что показывает интенсивность распыления молекул в данное время. Анализ расчетов показывает, что структура пленки воды резко изменилась, так как на площадке столкновения иона с поверхностью концентрация молекул воды заметно уменьшилась. Это уменьшение связано с распылением и перемещением молекул. В это время ион полностью отделился от поверхности и уже не испытывал никакого его влияния.

Перемещение каскада должно происходить до полного поглощения энергии атомами или молекулами кристалла. В данном случае перемещение каскада в сторону продолжается и удаляет два атома первого слоя подложки. Следовательно, перемещение каскада в этом направлении частично окончено, так как некоторая часть энергии остается в первом слое подложки, а именно на том участке, где были удалены два атома. В то же время пленка воды продолжает распыляться, так как в центре поверхности кристалла уменьшается концентрация молекул воды.

Список литературы

1. Schatz G. C. Kopperman A. // J. Chem. Phys. – Philadelphia, 1975. – Vol. 62. – P. 2502–2507.
2. Alder B. J. Waingwright T. E. // J. Chem. Phys. – Philadelphia, 1957. – Vol. 27. – P. 1208–1212.
3. Gibson J. B. [et al.] // Phys. Rev. – Amsterdam, 1960. – Vol. 120. – P. 1229–1232.
4. Rahman A. // Phys. Rev. – USA, 1964. – Vol. 136A. – P. 405–409.
5. Molecular dynamics of rigid systems in cartesian coordinates. a general formulation / G. Ciccotti [et al.] // Molec. Phys. – USA, 1982. – Vol. 47. – P. 1253–1264.
6. HFF: A force field for liquid crystal molecules / E. Garcia [et al.] // J. Molec. Struct. – USA, 1999. – Vol. 464. – P. 39–48.
7. Angle resolved SIMS studies of organic monolayers on Ag(111) / D. W. Moon [et al.] // J. Am. Chem. Soc. – USA, 1983. – Vol. 105. – P. 2916–2917.
8. Pisto, De. In recent advances in density functional theory / De. Pisto // Part 2 : Methodology / D. Chong ed. // World Scientific. – River Edge, 1995. – 341 p.
9. Brenner, D. W. A Classical dynamics study of the ion bombardment of ice / D. W. Brenner, B. J. Garrison // Phys. Rev. B. – Amsterdam, 1986. – Vol. 34. – P. 5782–5787.
10. Wucher, A. Unimolecular decomposition in the sputtering of metal clusters / A. Wucher, B. J. Garrison // Phys. Rev. B. – Amsterdam, 1992. – Vol. 46. – P. 4855–4864.

Investigated by computer simulation of ice film sputtering using the molecular dynamics method. The sputtering of four layers of an ice film coated on the surface of Au(111) was considered. The calculation results showed that the number of incident particles directly affect the sputtering process, that is, the greater the number of incident particles, the more intense the process of sputtering of the atoms of the upper layers of the substrate. This is due to the fact that the incident ions, destroying the structure of the crystal, namely, violating the periodicity of the upper atomic layers, remain in the crystal substrate, transferring most of their energies. The

mass spectra of sputtered particles were obtained and analyzed, and it was found that the mass spectrum contains several peaks related to water molecules, molecular clusters of water and Au.

Отабаева Катола Учкун кизи, аспирант, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uckunk@mail.ru.

Худойназарова Дурдона Улугбек кизи, магистрант, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

Кутлиев Учкун Отобоевич, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

Научный руководитель – *Кутлиев Учкун Отобоевич*, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики, Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, uchkunk@mail.ru.

УДК 535.4;535.3

И. А. ПЕШКО

АНОМАЛЬНОЕ РАПРОСТРАНЕНИЕ СВЕТА В ФОТОННЫХ СЕТЯХ С ИСКУССТВЕННЫМИ ПОТЕРЯМИ

Мы показали, что когерентное случайное блуждание в идеально периодической цепочке бозонных мод с искусственными потерями может демонстрировать множество различных аномальных режимов распространения в зависимости от начального состояния цепочки. В частности, для любого заданного начального интервала времени существует набор начальных состояний, приводящих к гипербаллистическому транспортному режиму. Также существуют начальные состояния, позволяющие достичь субдиффузионного режима или даже локализации за заданный интервал времени. Мы показываем, как эти аномальные режимы распространения света могут быть практически реализованы в сети одномодовых волноводов в стекле или как плоская система связанных одномодовых волноводов – на интегральной фотонной платформе.

В нашей работе мы обсуждаем одномерную цепочку линейно связанных бозонных мод, где каждая вторая мода подвергается искусственным потерям (рисунок 1а). Эта схема может быть описана следующим управляющим уравнением для полной матрицы плотности системы

$$\frac{d}{dt} \rho_{tot} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_{tot}] + \Gamma \sum_{j,j'} (2b_j \rho_{tot} b_j^\dagger - \rho_{tot} b_j^\dagger b_j - b_j^\dagger b_j \rho_{tot}). \quad (1)$$

где гамильтониан взаимодействия мод

$$H = \sum_{j,j'} \kappa v (b_j^\dagger (a_j + a_{j+1}) + (a_j^\dagger + a_{j+1}^\dagger) b_j). \quad (2)$$

Операторы b_j и b_j^\dagger являются операторами уничтожения и рождения мод волноводов с искусственными потерями, причём Γ – скорость этих потерь. Операторы уничтожения и рождения a_j и a_{j+1} описывают моды в волноводах только без потерь. Нужно отметить, что в реальных системах неизбежны пассивные потери во всех модах, однако если положить, что они одинаковые во всех волноводах, а также что скорость этих пассивных потерь много меньше Γ , то учёт их всё равно можно эффективно свести к уравнению (1) с наложением определённых пределов.

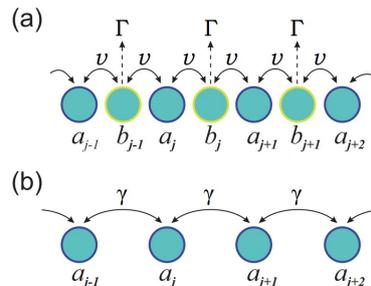


Рисунок 1 – (а) – схема одномерной цепочки линейно связанных бозонных мод, где каждая вторая мода подвергается искусственным потерям; (б) – схема диссипативно связанных бозонных мод

В пределе $v/\Gamma \rightarrow 0$, моды с потерями b_j можно адиаботически исключить из уравнения (1). В результате можно получить управляющее уравнение для диссипативно связанных бозонных мод a_j , схематически изображённой на рисунке 1b (см. например [1]).

$$\frac{d}{dt}\rho = \gamma \sum_j (2L_j\rho L_j^\dagger - \rho L_j^\dagger L_j - L_j^\dagger L_j\rho), \tag{3}$$

где $\gamma = v^2/\Gamma$ это константа диссипативной связи, а $L_j = a_j + a_{j+1}$ это так называемый оператор Линдблада, описывающий симметричную диссипативную связь между j -й и $j + 1$ -й модами с операторами уничтожения a_j и a_{j+1} .

Известными фактами является то, что дисперсия возбуждения в марковской цепочке, связь между элементами которой является тепловой, увеличивается со временем линейно (диффузионный режим) [2], тогда как для системы мод, связанных унитарным гамильтонианом, дисперсия возбуждения увеличивается квадратично со временем (баллистический) [2].

Оказалось, что распространение даже когерентного возбуждения в системе, которую исследовали мы, обладает рядом необычных особенностей. Управляя начальным возбуждением в диссипативно связанной цепочке, можно добиться баллистического (и даже сверхбаллистического) режима, а также субдиффузионного режима или даже локализации возбуждения, в течении некоторого конечного интервала времени. Тогда как для систем, описанных в предыдущем абзаце, не наблюдается подобной чувствительности к начальному состоянию.

На рисунке (2) изображены изменения дисперсии возбуждения в цепочке со временем для различных начальных состояний. Число воловодов равно 300. Все волноводы изначально находятся в вакуумном состоянии, кроме 142-го, 150-го, 158-го и 166-го. В этих волноводах изначально возбуждается когерентное состояние с амплитудой 1, но различными фазами. Так, толстая сплошная, тонкая сплошная, пунктирная и штрихпунктирная линии соответствуют следующим фазовым сигнатурам (то есть различным знакам) в этих модах: $\{+, +, -, -\}, \{+, -, -, -\}, \{-, +, -, +\}, \{+, +, +, +\}$. Верхние и нижние пунктирные линии соответствуют линейным зависимостям $3\gamma t$ и γt .

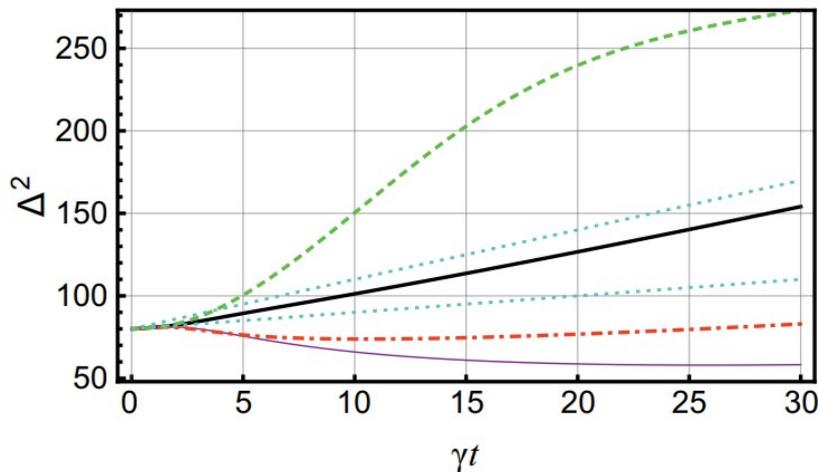


Рисунок 2 – Зависимость дисперсии возбуждения от времени в диссипативно-связанной цепочке бозонных мод для различных начальных состояний

Из рисунка 2 видно, как различные начальные состояния, отличные только знаками при амплитудах когерентных состояний, имеют значительные различия в транспортной динамике.

Также, мы предложили ряд физических систем, которые могут быть использованы для практической реализации описанных, диссипативно-связанных волноводов, а также наблюдения эффектов, описанных в нашей работе. Например, расчетные потери могут быть реализованы за счет изготовления «волнообразных» модулированных волноводов [3]. Более универсальные и компактные структуры могут быть реализованы на интегрированных фотонных платформах, таких как платформа из InP [4].

Список литературы

1. Mogilevtsev, D. Single-photon generation by correlated loss in a three-core optical fiber / D. Mogilevtsev, V. S. Shchesnovich // Optics Letters. – 2010. – № 35. – P. 3375.
2. Kempe, J. Quantum random walks: An introductory overview / J. Kempe // Contemporary Physics. – 2003. – № 44. – P. 307.
3. Mobility transition from ballistic to diffusive transport in non-Hermitian lattices / T. Eichelkraut [et al.] // Nature Communications. – 2013. – № 4. – P. 2533.
4. InP-based generic foundry platform for photonic integrated circuits / L. M. Augustin [et al.] // IEEE J. Sel. Topics in Quantum Electron. – 2018. – № 24.

Here we show that a coherent random walk in a perfectly periodic chain of bosonic modes with designed loss can exhibit a variety of different anomalous transfer regimes in dependence on the initial state of the chain. In particular, for any given finite initial time-interval there is a set of initial states leading to a hyperballistic transport regime. Also, there are initial states allowing one to achieve a subdiffusive regime or even localization for a given time-interval, or change an asymptotic long-time diffusion rate. We show how these anomalous transport regimes can be practically realized in a laser-written network of single-mode waveguides in bulk glass or how a planar system of coupled single-mode waveguides can be realized with an integrated photonic platform.

Пешко Илья Александрович, аспирант Института физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь, i.peshko@dragon.bas-net.by.

Научный руководитель – *Могилевцев Дмитрий Сергеевич*, доктор физико-математических наук, Институт физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси, член-корреспондент НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь, d.mogilevtsev@ifanbel.bas-net.by.

УДК 535.338.42;539.19

Я. В. ПОЛЯКОВА, Е. Е. КОВАЛЁВА, В. В. САПЕШКО, А. Э. МАЛЕВИЧ, Г. А. ПИЦЕВИЧ
**СИЛОВОЕ И КИНЕТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
 ВНУТРЕННИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ВОЛЧКОВ В МОЛЕКУЛАХ ВИДА NYZYH**

Проанализированы вклады силового и кинематического взаимодействий гидроксильных (OH) и тиольных (SH) волчков для ряда молекул, принадлежащих анализируемой группе. Сопоставлены их вклады, и установлено их влияние на величины расщеплений основного и возбужденных торсионных состояний и значения частот торсионных колебаний молекул этой группы.

Молекулы, которые можно описать общей структурной формулой вида NYZYH, формируют весьма интересную группу, характеризующуюся рядом общих свойств. Отметим, прежде всего, что в качестве Z могут выступать следующие атомы и молекулярные группы: O, S, CH₂, Ph, а в качестве Y – атомы O и S. Все молекулы, принадлежащие к этой группе характеризуются наличием двух стабильных конформеров (транс- и цис-), каждый из которых может реализовываться в двух эквивалентных конфигурациях. В качестве примера на рисунке 1 представлены два конформера и две их эквивалентные конфигурации молекулы HSSSH.

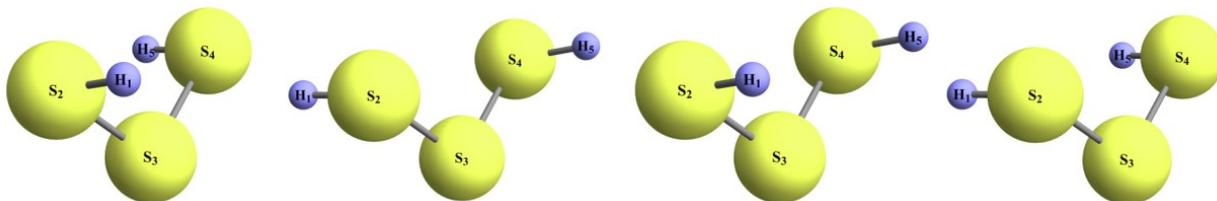


Рисунок 1 – Транс- (первый рисунок слева направо) и цис- (третий рисунок слева направо) конформеры молекулы HSSSH и их эквивалентные конфигурации (второй и четвёртый рисунки слева направо соответственно)

Между двумя эквивалентными конфигурациями в обоих конформерах возможен процесс туннелирования, что ведет к расщеплению всех колебательных состояний молекул этой группы. Молекулы характеризуются также рядом других интересных и важных свойств. Например, молекула метандиола (HO(CH₂)OH) является простейшим представителем диолов и с достаточно давних времен используется в косметической и пищевой промышленности. Долгое время считалось, что молекуле MD присуща единственная равновесная конфигурация. Однако позднее Родлер [1] впервые установил, что молекула характеризуется двумя равновесными конфигурациями. Транс-конфигурация, в которой гидроксильные группы направлены

противоположно, энергетически существенно предпочтительнее цис-конфигурации, в которой О-Н группы почти параллельны. Всплеск интереса к молекуле был недавно инициирован установлением того факта, что МД играет важную роль в формировании атмосферных аэрозолей, а также может присутствовать в межзвездном пространстве и в кометах. Поиск этой молекулы в космическом пространстве осложнен отсутствием на сегодняшний день зарегистрированных микроволновых и ИК спектров МД в газовой фазе, что обусловлено низкой стабильностью молекулы. Поэтому теоретические исследования спектральных характеристик этой молекулы востребованы. Впервые процессы туннелирования и торсионные ИК спектры этой молекулы были теоретически проанализированы в работах [2; 3]. Молекула триоксида водорода (ТВ) – НООН, в свою очередь, является эталонным объектом во многих отношениях. Во-первых, эта молекула является вторым после пероксида водорода представителем в ряду полиоксидов, соединений задаваемых формулой НО_nН (n = 2, 3, 4, 5, ...), интерес к которым у исследователей в последнее время несомненно усиливается. Во-вторых, молекула ТВ является простейшим представителем целого ряда молекул, обладающих двумя эквивалентными некоксиальными внутренними волчками. В-третьих, молекула способна образовывать кластерные структуры за счет формирования водородных связей. Кроме того, молекула ТВ имеет две равновесные конфигурации, различающиеся взаимной ориентацией гидроксильных групп. Многие исследователи указывают также на важную роль молекулы ТВ в окислительных процессах имеющих место в атмосферных явлениях, в биологических системах и в других важных химических реакциях. Впервые процессы туннелирования и торсионные ИК спектры этой молекулы были теоретически проанализированы в работах [4; 5].

Вместе с тем, вопрос о взаимодействии двух некоксиальных внутренних волчков для молекул группы НУЗУН по настоящий момент не рассматривался. Даже визуальный анализ рельефа 2D поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекулы HSSSH [6] (рисунок 2) показывает, что имеет место силовое взаимодействие двух тиольных волчков (HS). Двухмерное колебательное уравнение Шредингера ограниченной размерности, описывающее торсионные колебания и процессы туннелирования в молекулах рассматриваемой группы (см. уравнение (1)), показывает, что кинематическое взаимодействие эквивалентных внутренних волчков носит весьма сложный характер:

$$\left[-F_{\gamma_1}(\gamma_1, \gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial \gamma_1^2} - F_{\gamma_2}(\gamma_1, \gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial \gamma_2^2} - F_{\gamma_1 \gamma_2}(\gamma_1, \gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial \gamma_1 \partial \gamma_2} + U(\gamma_1, \gamma_2) \right] \psi(\gamma_1, \gamma_2) = E \psi(\gamma_1, \gamma_2) \quad (1)$$

Действительно, видно, что помимо кинематического коэффициента при смешанной производной, описывающего основную часть кинематического взаимодействия двух волчков, имеет место зависимость диагональных кинематических коэффициентов, стоящих перед вторыми производными по торсионным координатам, от обеих торсионных координат. Это значит, что они также содержат небольшой вклад кинематического взаимодействия внутренних волчков.

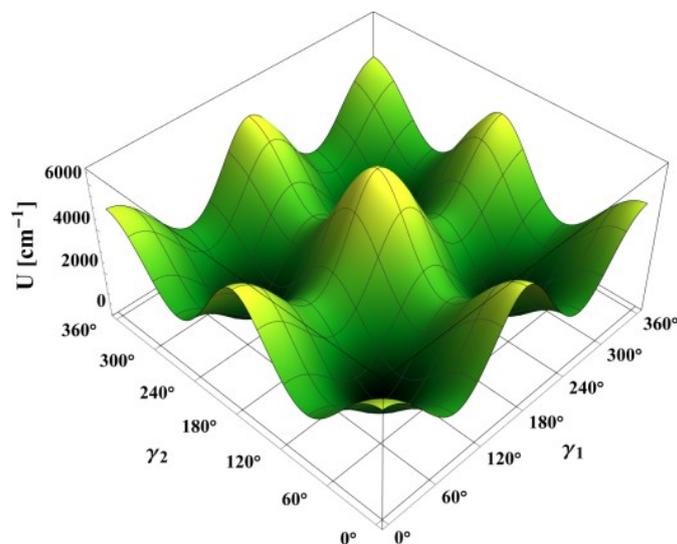


Рисунок 2 – 2D ППЭ молекулы HSSSH, рассчитанная на уровне теории CCSD(T)/Aug-cc-pVTZ [6]

В работе проанализированы вклады силового и кинематического взаимодействия гидроксильных (OH) и тиольных (SH) волчков для ряда молекул, принадлежащих анализируемой группе. Сопоставлены их вклады и установлено их влияние на величины расщеплений основного и возбужденных торсионных состояний и значения частот торсионных колебаний молекул этой группы.

Список литературы

1. Lugez C., Schriver A., Levany R., Schriver-Mazzuoli L. // Chem. Phys. – 1994. – Vol. 181. – P. 129–146.
2. Pitsevich G. A., Malevich A. E., Sapeshko V. V. // J. Mol. Spectr. – 2019. – Vol. 360. – P. 31–38.
3. Pitsevich G. A., Malevich A. E., Markovich F. V., Sapeshka U. U. // Mol. Phys. – 2020. – Vol. 118. – P. 1746425.
4. Pitsevich G. A., Malevich A. E., Sapeshko V. V. // Chem. Phys. – 2020. – Vol. 530. – P. 110633.
5. Pitsevich G. A., Malevich A. E., Kisuryna D. G., Vasilevsky A. U., Vasilevich A. S., Sapeshka U. U., Kamnev A. A. // Spectrochim. Acta. Part A. – 2020. – Vol. 239. – P. 118209.
6. Pitsevich G. A., Malevich A. E., Sapeshko V. V., Kisuryna D., Doroshenko I. Y. // Comp. Theor. Chem. – 2023. – Vol. 1222. – P. 114080.

The paper analyzes the contributions of the force and kinematic interaction of hydroxyl (OH) and thiol (SH) tops for a number of molecules belonging to the analyzed group. Their contributions are compared and their influence on the values of the splitting of the ground and excited torsion states and the values of the frequencies of torsion vibrations of molecules of this group is established.

Полякова Яна Владимировна, студентка 2-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, fiz.polyakov@bsu.by.

Ковалёва Елизавета Евгеньевна, студентка 3-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, fiz.kovalevaEE@bsu.by.

Сапешко Владимир Владимирович, кафедра физической оптики и прикладной информатики, физический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, usapes2@uic.edu.

Научные руководители: *Малевич Александр Эрнестович*, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра дифференциальных уравнений и системного анализа, механико-математический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, malevich@bsu.by.

Пищевич Георгий Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра физической оптики и прикладной информатики, физический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, pitsevich@bsu.by.

УДК 523.681,533.9.082.5

А. О. ПУХТЕЕВ, Р. А. ХАРИТОНЧИК, Н. А. ОРЕХОВА

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ В ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЕ В МЕТЕОРИТЕ БРАГИН МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ МНОГОКАНАЛЬНОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

Проведены исследования распределения железа и никеля в переходной зоне от чисто каменной к железоникелевой части метеорита Брагин методом лазерной атомно-эмиссионной многоканальной спектрометрии (ЛАЭМС). Показано, что наибольшее отличие в верхних слоях наблюдается для никеля, железо распределено более равномерно.

Метеориты были и, несмотря на интенсивное развитие космических исследований, остаются ключевым, а часто и единственным источником информации о протопланетной и ранней планетной истории Солнечной системы. Метеориты являются обломками распавшихся планет и астероидов, большая часть которых движется в обширном поясе между орбитами Марса и Юпитера. Возраст метеоритов составляет 4,5–4,6 млрд лет и совпадает с возрастом Земли 4,56 млрд лет. Значительный интерес ученых к дифференцированным метеоритам обусловлен историей их происхождения. В то время, как структура и состав хондритов отражают историю аккреции вещества в протопланетном облаке и при образовании планетезималей, дифференцированные метеориты несут информацию о процессах, протекавших в родительских телах (астероидах или протопланетах) метеоритов и повлиявших на структуру метеоритного вещества [1; 2].

Вещество дифференцированных метеоритов подверглось термическому метаморфизму в родительских телах, в результате которого происходило плавление вещества метеоритов с последующей дифференциацией: расплав Fe-Ni-Co концентрировался в центре астероида или протопланеты, формируя металлическое ядро. Окружающая это ядро мантия из силикатных фаз могла быть свободной от сплава Fe-Ni-Co или содержать его остаточное количество. После медленного охлаждения в родительском теле происходила кристаллизация дифференцированного вещества. Железокаменные метеориты включают в себя две группы: мезосидериты и палласиты. Эти две группы метеоритов отличаются происхождением и историей формирования.

Мезосидериты представляют собой смесь различного количества зерен сплава Fe-Ni-Co с силикатными фазами. Палласиты содержат ~65 вес. % силикатных фаз (преимущественно, оливина (Fe, Mg)₂SiO₄), ~30 вес. % сплава Fe-Ni-Co и ~5 вес. % троилита FeS, хромита FeCr₂O₄, низкокальциевого пироксена и шрейберзита (Fe, Ni)₃P [3; 4]. Современная модель формирования палласитов описывает их образование как результат столкновения дифференцированного тела, состоящего из затвердевшего металлического ядра с расплавленным металлом на его поверхности и мантии из оливина, с другим космическим объектом. В результате такого

столкновения может произойти разрушение этого тела. В этом случае наружный расплавленный слой металлического ядра смешивается с обломками мантии из оливина. После медленного остывания этой смеси образуются палласиты: сплав Fe-Ni-Co образует матрицу, которая связывает фрагменты каменной части [3; 4].

Цель работы состояла в том, чтобы показать возможность получения методом абляции сериями сдвоенных лазерных импульсов данных по химическому составу переходной зоны от каменной к металлической части метеорита Брагин.

Снимки образца железо-каменного метеорита Брагин и области без каменной части – лунки на поверхности образца приведены на рисунках 1а и 1б соответственно.

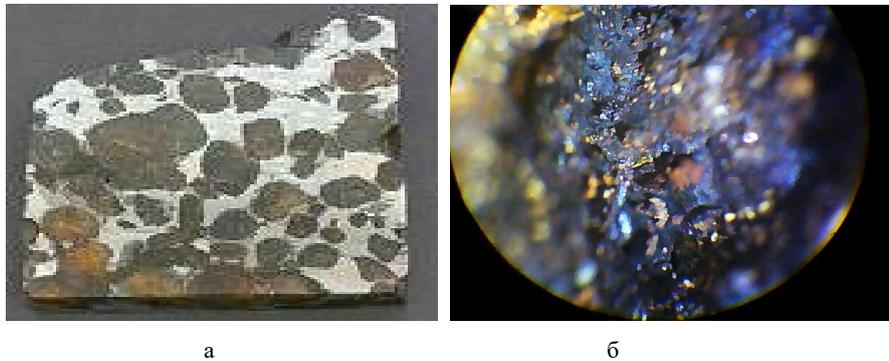


Рисунок 1 – Снимки поверхности: а) метеорит Брагин; б) лунка в области метеорита без каменной части

Для проведения исследований использовали лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1 (изготовитель СП «ЛОТИС ТИИ»). Лазер может работать с частотой повторения импульсов до 10 Гц на длине волны 1064 нм. Длительность импульсов ≈ 15 нс. Временной сдвиг между сдвоенными импульсами может меняться от 0 до 100 мкс с шагом 1 мкс. Размер сфокусированного пятна примерно 50 мкм, при фокусном расстоянии объектива 104 мм.

В качестве объекта использовалась лунка на поверхности образца метеорита Брагин, свободная от каменной части. На рисунках 2а и 2б представлены зависимость интенсивности линий Fe, Ni в спектрах 4 точек (правая – П, нижняя – Н, левая – Л, верхняя – В и чисто металлической части – Ч от номера импульса (последний анализ). На рис. 2в отношение интенсивностей линий Fe и Ni (полуколичественный анализ).

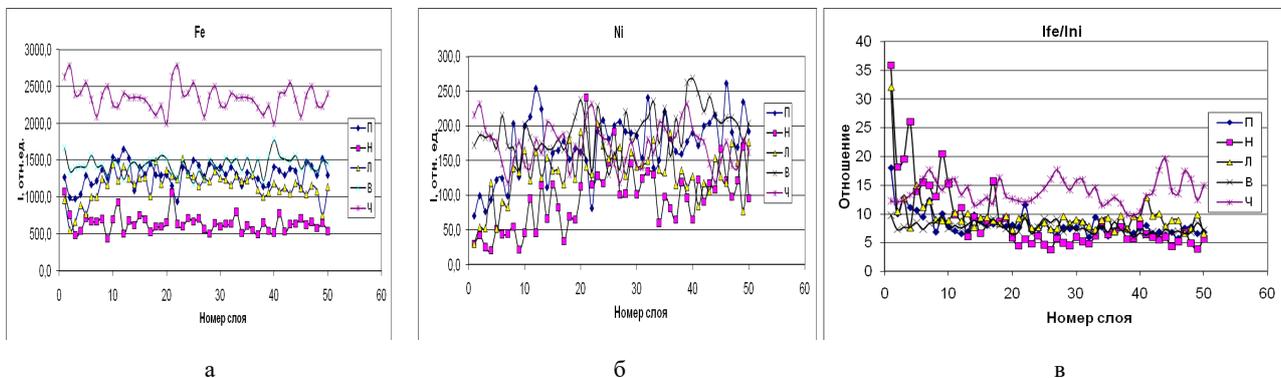


Рисунок 2 – Зависимость интенсивности линий: а) Fe; б) Ni; в) отношение интенсивностей I_{Fe} / I_{Ni} от номера слоя

Как видно из полученных данных, содержание Fe, Ni в исследованной части образца и чисто-металлической части довольно сильно отличаются, особенно в верхних слоях.

Валовый химический состав железо-каменных метеоритов может быть представлен следующим образом (мас. %): Fe 85.64–89.08, Ni 8.79–9.26. В чисто железных метеоритах количество никеля может быть значительно больше. Сплав Fe-Ni-Co в метеоритах представлен такими фазами, как α -Fe(Ni, Co), $\alpha 2$ -Fe(Ni, Co), γ -Fe(Ni, Co) и γ -FeNi. В переходных частях метеорита зерна сплава Fe-Ni-Co могут состоять как из одной фазы, так и из смеси разных фаз. Основные металлические фазы – это α -Fe(Ni, Co) (камасит) и γ -Fe(Ni, Co) (тэнит).

Таким образом, выполненные спектроскопические исследования характеристик приповерхностной лазерной плазмы, образуемой при воздействии сдвоенных лазерных импульсов на металлические образцы, позволили определить распределение железа и никеля в переходной зоне от чисто каменной к железоникелевой части метеорита Брагин методом лазерной атомно-эмиссионной многоканальной спектроскопии (ЛАЭМС). Показано, что наибольшее отличие в верхних слоях наблюдается для никеля, железо распределено более равномерно.

Список литературы

1. Силаев, В. И. Железный метеорит Большой Долгучан: результаты минералого-геохимических исследований / В. И. Силаев, А. В. Кокин, В. Н. Филиппов, Д. В. Киселёва, Н. С. Нефедьева // Вестн. ИГ Коми НЦ УрО РАН. – 2016. – № 7. – С. 10–18.
2. Бахтин А. И. [и др.] // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Естеств. науки. – 2018. – Т. 160, кн. 2. – С. 324–338.
3. Weisberg, M. K. Systematics and evaluation of meteorite classification / M. K. Weisberg, T. J. McCoy, A. N. Krot // Meteorites and the Early Solar System II. – Arizona : University of Arizona Press, 2006. – P. 19–52.
4. Grady, M. Atlas of meteorites / M. Grady, G. Pratesi, V. M. Cecchi. – Cambridge University Press, 2014. – P. 373.

The distribution of iron and nickel in the transition zone from the pure stone to the iron-nickel parts of the Bragin meteorite was studied by laser atomic emission multichannel spectrometry (LAEMS). It is shown that the greatest difference in the upper layers is observed for nickel, iron is distributed more evenly.

Пухтеев Александр Олегович, ученик 9-го класса, ГУО «Средняя школа № 64 г. Минска», Минск, Беларусь.

Харитончик Роман Александрович, ученик 9-го класса, ГУО «Средняя школа № 64 г. Минска», Минск, Беларусь.

Научный руководитель – *Орехова Наталия Андреевна*, учитель астрономии, ГУО «Средняя школа № 64 г. Минска», Минск, Беларусь, sotis-nil@yandex.ru.

Научный консультант – *Зажогин Аатолий Павлович*, доктор физико-математических наук, профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, zajogin_an@mail.ru.

УДК 53.072

Е. С. РОМАНОВСКИЙ, Н. В. ГОРДИЕВСКИЙ
**ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА ДЛЯ АНАЛИЗА
МАГНИТНЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАГНЕТИКОВ**

На основе модели Изинга методами Монте-Карло разработан инструментарий для расчета магнитных свойств материалов (намагниченность, магнитная восприимчивость), а также термодинамических свойств (энергия, теплоемкость), и показано, что модель позволяет исследовать фазовые переходы второго рода. Модель была предложена Вильгельмом Ленцем (1888–1854) и реализована его учеником Изингом.

На рисунке 1 представлена плоская модель спинов. Каждый спин обладает магнитным моментом m . При этом он может быть только в двух состояниях $+1m$ (направлен вверх) и $-1m$ (направлен вниз). Несмотря на очевидную простоту модели, мы увидим, что она позволит получить большое число свойств системы.

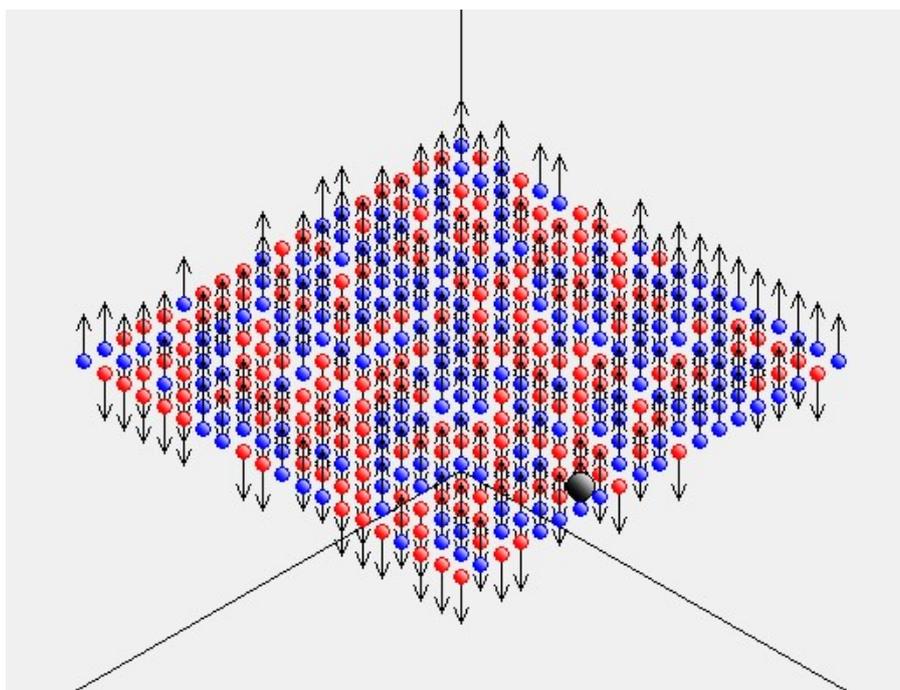


Рисунок 1 – Плоская система спинов

Различные вещества по-разному реагируют на помещение их в магнитное поле:

$M \gg 1, \chi > 0$ – ферромагнетики (железо, никель, кобальт);

$M > 1, \chi > 0$ – парамагнетики (алюминий, платина);

$M < 1, \chi < 0$ – диамагнетики (медь, серебро).

где M – намагниченность; χ – магнитная восприимчивость вещества.

Для ферромагнетиков существует температура (точка Кюри), ниже которой вещество сохраняет магнитные свойства после снятия магнитного поля. Мы описали магнитные характеристики, которые будем рассматривать при разработке модели. Далее рассмотрим на основе модели [1].

1. Постановка задачи.

Разработать на основе модели Изинга методами Монте-Карло инструментарий для расчета магнитных свойств материалов (намагниченность, магнитная восприимчивость), а также термодинамических свойств (энергия, теплоемкость) и показать, что модель позволяет исследовать фазовые переходы второго рода

2. Математическая модель.

Важнейшим параметром системы является энергия. Этот параметр определим согласно модели Гейзенберга: для изотропного магнетика [2]. Пусть состояние i -ого атома характеризуется спином σ_i , а у второго атома $j - \sigma_j$. Таким образом, взаимодействие двух атомов в изотропном пространстве будет зависеть только от произведения данных спинов. Тогда энергия взаимодействия спинов, если рассматривать взаимодействие только ближайших соседей, примет вид:

$$E_{ij} = \begin{cases} -J\sigma_i\sigma_j, & \text{если спины ближайшие соседи} \\ 0, & \text{если спины не ближайшие соседи} \end{cases}$$

где J – константа обменного взаимодействия (обменный интеграл) между атомами.

Обменный интеграл оценим через температуру Кюри T_c (таблица 1):

$$J \sim k_B T_c \tag{1}$$

где $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана;

T – температура, К.

Таблица 1

Материал	T_c , К	J , Дж $\times 10^{20}$
Железо	1043	1,44
Кобальт	1403	1,94
Никель	631	0,87

Гамильтониан системы спинов E в магнитном поле H можно представить в виде:

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{i,j=1}^N a_{ij} \sigma_i \sigma_j - mH \sum_{i=1}^N \sigma_i \tag{2}$$

где

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если спины ближайшие соседи} \\ 0, & \text{если спины не ближайшие соседи} \end{cases}$$

m – магнитный момент спина.

Далее определим статистическую сумму системы спинов. Как известно, статистическая сумма позволяет находить все термодинамические параметры системы:

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp\left(-\frac{J}{2kT} \sum_{i,j=1}^N a_{ij} \sigma_i \sigma_j + \frac{mH}{kT} \sum_{i=1}^N \sigma_i\right) \tag{3}$$

Выражение (3) получено с использованием канонического распределения Больцмана.

Среднее значение внутренней энергии:

$$U = \frac{kT^2}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \tag{4}$$

Среднее значение намагниченности:

$$M = \frac{kT}{N} \frac{d \ln Z}{d h}, \quad (5)$$

3. Качественный анализ модели.

Наша задача будет состоять в том, чтобы построенная модель при произвольных начальных конфигурациях спинов приводила систему в равновесное состояние, и в этом состоянии можно было определить магнитные (намагниченность, восприимчивость) и термодинамические (теплоемкость) параметры системы.

Конечно, модель Изинга далека от реальных физических систем, тем не менее, это единственная модель системы взаимодействующих частиц, для которой строго математически получены значения **критических индексов**. Критические индексы связаны с фазовыми переходами. Двумерная модель Изинга позволяет исследовать и эти сложные вопросы критических явлений [5], которых мы не будем касаться.

Оценим возможность применения выражения (3). Суммирование в этом выражении производится по всем возможным состояниям системы. Если число спинов равно 400, и одно состояние (конфигурацию) отслеживать каждую секунду, то понадобится

$$G = 2^{400} \cong 2,58 \times 10^{120} \text{ сек.}$$

Время жизни нашей вселенной оценивается в 4×10^{17} сек. Самый быстрый суперкомпьютер считает со скоростью 10^{18} операций в секунду (1 эксафлопс). Поэтому задача рассмотрения всех возможных состояний системы всего из 400 спинов не имеет смысла. В таких случаях применяют методы Монте-Карло [3]. В этом методе из всех возможных состояний системы осуществляется **выборка по значимости**. Мы не ставим задачу анализа этого метода, а лишь формально им воспользуемся. Применим для решения задачи алгоритм Метрополиса [2]. Будем опираться на каноническое распределение Гиббса. Это значит, что вероятность состояния системы с энергией E при температуре T определяется выражением:

$$W = \exp(E/k_B T), \quad (6)$$

4. Разработка программы.

Интерфейс.

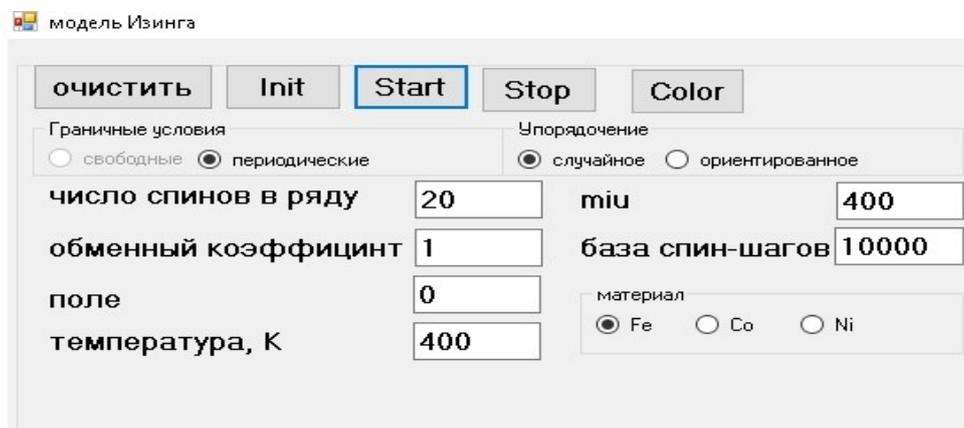


Рисунок 2 – Исходные данные и кнопки управления

Разработанная методика и алгоритма обеспечивает расчет магнитных свойств материалов (намагниченность, магнитная восприимчивость), а также термодинамические свойства (энергия, теплоемкость) Также модель позволяет методом вычислительного эксперимента определять равновесные состояния системы магнитных спинов.

Список литературы

1. Козлова, В. О. Применение модели Изинга для расчета физических параметров [Электронный ресурс] / В. О. Козлова // Физика конденсированного состояния : материалы XXIX междунар. науч.-практ. конф. аспирантов, магистратов и студентов, Гродно, 22–23 апр. 2021 г. / ГрГУ им. Янки Купалы. – Гродно : ГрГУ, 2021.
2. Гулд, Ч. Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2 / Ч. Гулд, Я. Тобочник. – М. : Мир, 1990. – 400 с.

3. Дайсон Ф. Устойчивость и фазовые переходы / Ф. Дайсон, Э. Монтролл, М. Кац, М. Фишер. – М. : Мир, 1973. – 368 с.
4. Биндер, К. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / К. Биндер, Д. Хеерман. – М. : Наука, 1995. – 144 с.
5. Ландау, Л. Статистическая физика. Ч. 1 / Л. Ландау, Е. Лифшиц. – М. : Наука, 1976. – 584 с.

On the basis of the Ernst Ising model, Monte Carlo methods have developed tools for calculating the magnetic properties of materials (magnetization, magnetic susceptibility), as well as thermodynamic properties (energy, heat capacity), and it is shown that the model allows you to study phase transitions of the second kind. The model was proposed by Wilhelm Lenz (1888–1854) and implemented by his student Ising).

Романовский Евгений Сергеевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, romanovskij_es1_20@student.grsu.by.

Гордиевский Никита Вячеславович, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, gordievsky_nv_20@student.grsu.by.

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

УДК 691.175.2

А. А. РОТКОВИЧ, А. А. БОНДАРУК, С. А. ГЕРМАН, Т. И. УСОВИЧ,
Т. И. ЗУБАРЬ, А. В. ТРУХАНОВ, Е. С. ДАШКЕВИЧ, Д. И. ТИШКЕВИЧ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБЛУЧЕНИЯ ФОТОНАМИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА И ВОЛЬФРАМА

Исследованы композиционные материалы системы полиэтилен / вольфрам, которые предполагается использовать в качестве экранов для радиационной защиты в сферах электроники, медицины или космической отрасли. Рассчитаны параметры эффективности экранирования от ионизирующего излучения современным методом моделирования в ПО «Phy-X/PSD». Варьирование наполнителя в системе полиэтилен / вольфрам позволяет оценить качество полученных образцов.

Ионизирующее излучение разрушает молекулы и молекулярные связи, что ведет к изменению химической структуры соединений. Это отрицательно сказывается на жизнедеятельности человека и состоянии окружающей среды [1]. Для защиты от ионизирующего излучения применяют радиационные экраны [2], содержащие в своем составе высокоплотные материалы, например, свинец. Однако свинец имеет серьезный минус – значительные показатели токсичности. В данной работе предлагается использование другого материала – порошка вольфрама. Указанный металл считается так называемым «зеленым» материалом и превосходит свинец по значению плотности.

В качестве матрицы для создания радиационных экранов может применяться полиэтилен, являющийся бюджетным материалом, а также отличным связующим [3]. Полиэтилен позволяет заметно уменьшить вес образцов, что перспективно для его использования в авиационной промышленности, а также в микроэлектронике и космической отрасли.

Цель работы – путем моделирования в программном комплексе Phy-X/PSD определить характеристики эффективности экранирования композиционных материалов системы полиэтилен/вольфрам, по которым можно судить о возможности применения композитов в качестве радиационных экранов.

Композиционные материалы изготавливались из линейного полиэтилена низкой плотности (ЛПНП) и порошка вольфрама ПВЧ. Массовое содержание вольфрама варьировалось от 0 до 70 %. Экспериментальные образцы были закодированы согласно шифру, приведенному в таблице.

Таблица – Кодовые названия композиционных материалов

Кодовое название	Содержание полиэтилена, %	Содержание вольфрама, %
ПЭ100	100	0
ПЭ90В10	90	10
ПЭ70В30	70	30
ПЭ50В50	50	50
ПЭ30В70	30	70

Экспериментальные образцы изготавливались методом прессования, формирование происходило в металлической форме под действием температуры 200–220 °С и давления 1–4 тонн. Форма остывала при комнатной температуре до 70–80 °С, после этого образец извлекался.

Исследование морфологии и химического состава полученных композитов проводили методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием Carl Zeiss EVO10 и приставки Oxford. Эффективную плотность образцов рассчитывали по методу Архимеда [4]. Моделирование эффективности экранирования осуществлялось в ПО Phy-X/PSD, где рассчитывались такие основные характеристики, как линейный коэффициент ослабления и слой половинного ослабления [5]. Указанные расчеты проводились в диапазоне энергий 0,0–2,0 МэВ.

Результаты моделирования эффективности экранирования от гамма-излучения (рисунок 1а) показали, что использование экспериментальных образцов возможно при энергии излучения не выше 1 МэВ. Для полного же поглощения энергии 0,4 МэВ потребуется образец с содержанием наполнителя в 70 % (ПЭ30В70) с толщиной в 1 см, а для экранирования такой же величины энергии образец из чистого полиэтилена (ПЭ100) должен быть толщиной 5 см (рисунок 1б).

Образец с содержанием вольфрама в 70 % в наибольшей степени подходит для создания экранов радиационной защиты, так как он обладает лучшими характеристиками экранирования по сравнению с другими образцами. Применение данных композиционных материалов позволяет уменьшить толщину образца в 5 раз по сравнению с образцом без наполнителя вольфрама и допускает их эксплуатацию при энергии облучения до 1 МэВ.

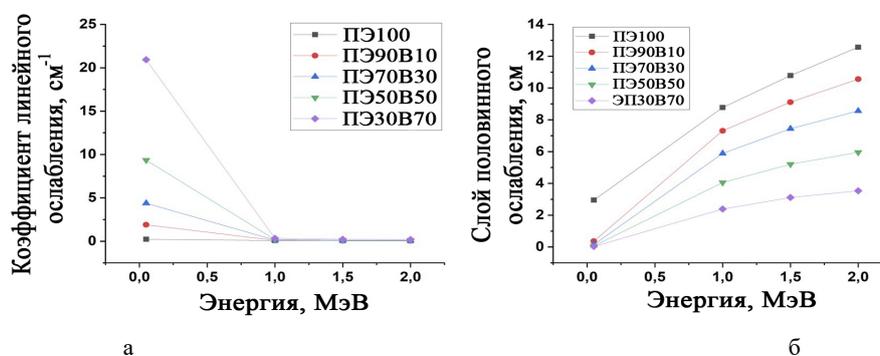


Рисунок 1 – Графики зависимости линейного коэффициента ослабления (а) и слоя половинного ослабления (б) от энергии гамма-излучения

Список литературы

1. Low cost radiation shielding material for low energy radiation applications: Epoxy/Yahyali Stone composites / N. Sahin [et al.] // Prog. Nucl. Energy. – 2021. – Vol. 135. – P. 103703.
2. Physical, optical and gamma radiation shielding competence of newly boro-tellurite based glasses: $\text{TeO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-ZnO-Li}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$ / M. Sayyed [et al.] // Ceram. Int. – 2021. – Vol. 47 (1). – P. 611–618.
3. Preparation and radiation attenuation performances of metal oxide filled polyethylene based composites for ionizing electromagnetic radiation shielding applications / E. Eren Belgin [et al.] // J Radioanal Nucl. Chem. – 2015. – Vol. 306 (1). – P. 107–117.
4. Композиты полимерные. Метод определения пустот : ГОСТ P56679-2015. – М. : Стандартинформ, 2017. – 12 с.
5. Phy-X / PSD: Development of a user friendly online software for calculation of parameters relevant to radiation shielding and dosimetry / E. Şakar [et al.] // Radiat. Phys. Chem. – 2020. – Vol. 166. – P. 108496.

By the method of solid-phase synthesis, composite materials of the polyethylene/tungsten system were obtained, which are supposed to be used as radiation shields to protect against ionizing radiation. Based on the results of the simulation, it is clear that the use of materials is possible up to a radiation energy of 1 MeV.

Роткович Анастасия Александровна, магистрант Университета Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь, rottkovich@gmail.com.

Бондарук Анастасия Александровна, магистрант Университета Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь, bondaruk625@gmail.com.

Герман Степан Алексеевич, студент 3-го курса приборостроительного факультета, Белорусский национальный технический университет, Минск, Республика Беларусь, stpangrmn@gmail.com.

Усович Татьяна Игоревна, магистрант Университета Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь, tanya_usovich@mail.ru.

Зубарь Татьяна Игоревна, кандидат физико-математических наук, доцент, ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Республика Беларусь, fix.tatyana@gmail.com.

Труханов Алексей Валентинович, доктор физико-математических наук, ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Республика Беларусь, truhanov86@mail.ru.

Дашкевич Елена Сергеевна, научный сотрудник, ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Республика Беларусь, gramovich5@yandex.ru.

Тишкевич Дарья Ивановна, кандидат физико-математических наук, доцент, ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Республика Беларусь, dashachushkova@gmail.com.

Научный руководитель – Тишкевич Дарья Ивановна, кандидат физико-математических наук, доцент, ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Республика Беларусь, dashachushkova@gmail.com.

УДК 537.612.2

Д. Р. СЕРГЕЙЧИК

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ РАСЧЁТОВ ГЕНЕРАЦИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ПОВЫШЕННОЙ ОДНОРОДНОСТИ

Описана система расчётов параметров магнитного поля, генерируемого соленоидом с компенсирующей обмоткой. Разработана программа-симулятор на базе MS Excel для расчётов параметров магнитного поля на основе параметров катушки соленоида и параметров компенсирующей обмотки.

В природе магнитное поле может создаваться различными источниками, в зависимости от выбора которых, параметры данного поля также будут различны. В качестве источника могут выступать: проводники с током, постоянные магниты, а также катушки с током имеющие или не имеющие сердечника.

Магнитное поле повышенной однородности (однородное магнитное поле) – это магнитное поле, в любой точке которого сила действия на магнитную стрелку одинакова по модулю и направлению [1]. Данное поле всегда находится внутри проводника или магнита, а его индукция в разных точках одинакова. В случае именно однородного поля его силовые линии параллельны друг другу и находятся друг от друга на одинаковом расстоянии.

Силовые линии – линии магнитного поля, касательные к которым в каждой точке совпадают по направлению с векторами индукции [2].

Для установок, генерирующих магнитное поле, одной из наиболее удобной основой является соленоид. **Соленоид** – это катушка, состоящая из изолированного проводника, намотанного на цилиндрическую основу, образующую винтовую линию. При пропускании тока через очень длинный соленоид между её витками образуется область пространства с однородным магнитным полем. Направление силовых линий этого поля определяется по правилу «правой руки». Количественную характеристику магнитного поля можно описать двумя величинами.

Первая – вектор магнитной индукции \vec{B} .

Вторая – вектор напряженности магнитного поля \vec{H} . Эти две величины связаны между собой магнитной

постоянной μ_0 и относительной магнитной проницаемостью среды μ [3].

При проведении лабораторных опытов, связанных со взаимодействием движущихся зарядов с магнитным полем, для получения наиболее точных результатов необходимо использование магнитного поля повышенной однородности. Однако сама по себе катушка соленоида не позволит генерировать магнитное поле с достаточно высокой степенью однородности, достаточно сильно отличаясь по значению индукции поля на краях и в центре катушки. Для максимизации однородности потребуется дополнительно намотать на катушку несколько слоёв компенсирующей обмотки с током, протекающем в направлении протекания тока в основной катушке соленоида.

Ввиду специфики каждого лабораторного опыта может потребоваться поле различной мощности и различного размера по длине вдоль оси, для чего необходимо подбирать катушку соленоида с индивидуальными параметрами. С целью определения этих параметров была написана программа-симулятор на базе MS Excel, призванная рассчитать индукцию магнитного поля, генерируемого катушкой соленоида с заданными параметрами самой катушки и её компенсирующей обмоткой, намотанной одинаковыми сегментами с обеих сторон катушки.

В общем виде созданный симулятор способен визуализировать индукцию магнитного поля, генерируемую катушкой соленоида и катушкой соленоида с компенсирующей обмоткой с заданными параметрами.

Пример 1. Демонстрация результатов работы программы симулятора для катушки соленоида без компенсирующей обмотки.

Для демонстрации работы данного сегмента программы были заданы параметры катушки. Список определённых параметров: диаметр внутреннего кольца катушки d (мм), диаметр проволоки катушки D (мм), длина катушки l (мм), число слоёв обмотки катушки (для описываемой программы максимальным числом слоёв катушки является 4) и сила тока, протекающего по обмотке катушки I (А).

В результате расчётов по разработанной программе определяются величина индукции магнитного поля в одиннадцати равноудалённых друг от друга точках катушки соленоида, где точки 1 и 11 – это края катушки, а точка 6 – это центр катушки. Численные результаты автоматически вносятся в таблицу. В таблице 1 приведены данные расчёта индукции магнитного поля, создаваемого соленоидом без компенсирующей обмотки.

Таблица 1 – Расчётные значения индукции магнитного поля соленоида без компенсирующей обмотки

Индукция магнитного поля, создаваемого соленоидом		
Номер точки	Расстояние от центра катушки, мм	Индукция магнитного поля в точке, мкТл
1	-25	-4,873205506
2	-20	-4,838373486
3	-15	-4,780971081
4	-10	-4,696908064
5	-5	-4,579579145
6	0	-4,417648629
7	5	-4,579579145
8	10	-4,696908064
9	15	-4,780971081
10	20	-4,838373486
11	25	-4,873205506

На основе итоговых данных из этой таблицы строится график зависимости значения индукции магнитного поля соленоида от расстояния до центра катушки.

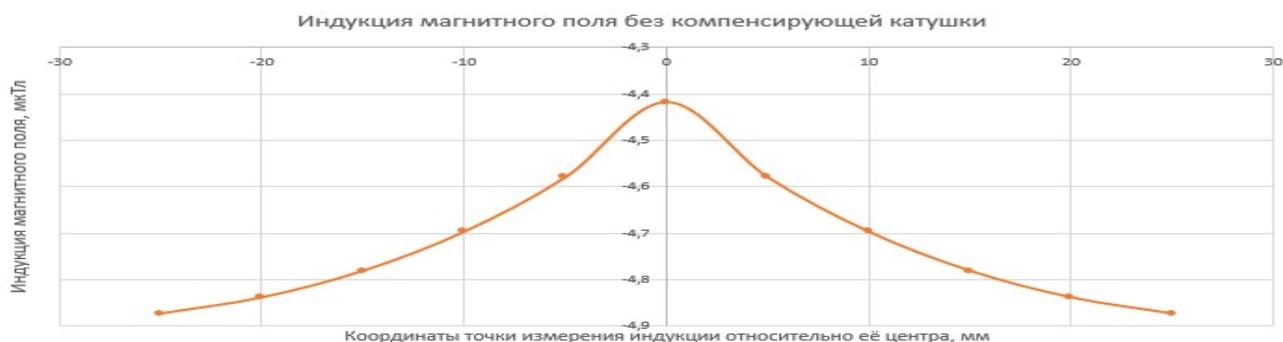


Рисунок 1 – График индукции магнитного поля соленоида в выбранных точках

Пример 2. Демонстрация результатов работы программы симулятора для катушки соленоида с компенсирующей обмотки.

Работа данного сегмента программы более комплексна ввиду необходимости расчёта параметров нескольких дополнительных слоёв компенсирующих обмоток.

Таблицы параметров слоёв компенсирующей обмотки схожи с таблицей параметров катушки соленоида за исключением того, что длины компенсирующей катушки считаются от края основной катушки соленоида, а также имеется параметр «число обмоток данного слоя», показывающий число витков по вертикали у каждого слоя.

Как и в первом примере, в результате расчётов по разработанной программ формируется таблица с итоговыми значениями индукции магнитного поля при задействовании каждого слоя компенсирующей обмотки.

Итоговые значения индукции магнитного поля, с учётом поля соленоида и компенсирующих обмоток записываются в таблицу, аналогичную таблице индукции магнитного поля для катушки соленоида без компенсирующей обмотки.

На основе итоговых данных из этой таблицы, как и для таблицы катушки соленоида без компенсирующей обмотки, программа строит график зависимости значения индукции магнитного поля соленоида от расстояния до центра катушки. Отметим, что шаг графика для поля с компенсирующей обмоткой на рисунке 2 в 100 раз меньше, чем на рисунке 1 для поля без компенсирующей обмотки.

Таблица 2 – Расчётные значения индукции магнитного поля соленоида с компенсирующей обмоткой

Индукция магнитного поля, создаваемого соленоидом с компенсирующей обмоткой		
Номер точки	Расстояние от центра катушки, мм	Индукция магнитного поля в точке, мкТл
1	-25	-4,42165295
2	-20	-4,423681165
3	-15	-4,421808853
4	-10	-4,415829819
5	-5	-4,418140469
6	0	-4,417648629
7	5	-4,418140469
8	10	-4,415829819
9	15	-4,421808853
10	20	-4,423681165
11	25	-4,42165295

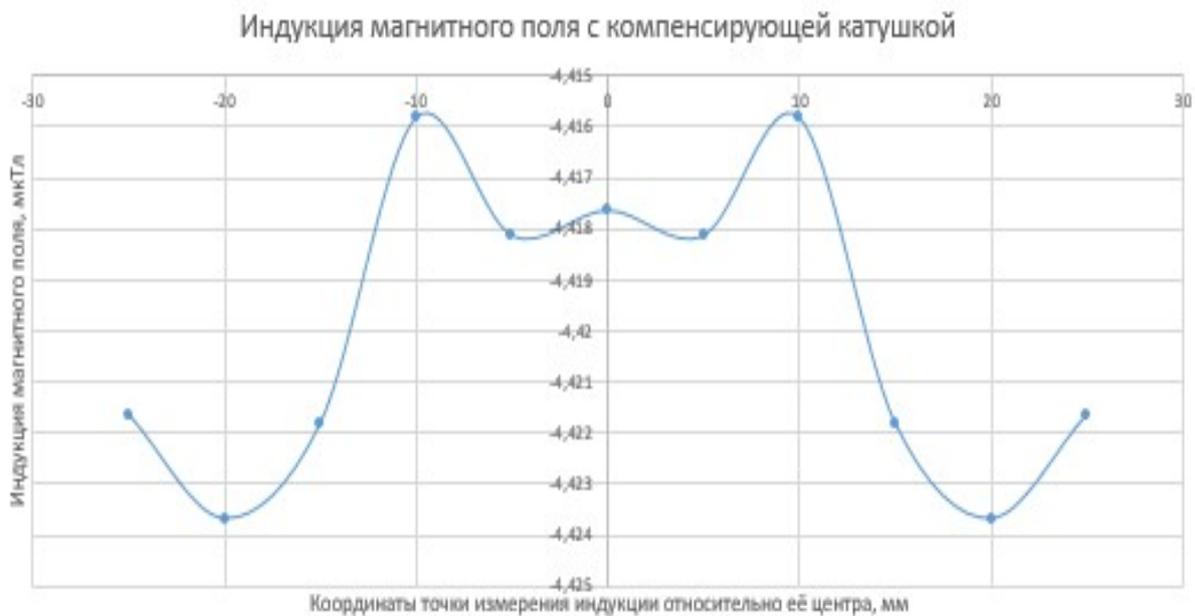


Рисунок 2 – График индукции магнитного поля соленоида с компенсирующей обмоткой в выбранных точках

Параметры магнитного поля, рассчитанные в обоих сегментах программы, также визуализируются на общем графике, с целью упрощения подбора параметров компенсирующей обмотки для максимизации однородности поля.

Таким образом, разработанная программа, позволяет подобрать параметры катушки соленоида и компенсирующей обмотки под заданные условия проводимого с генерируемым магнитным полем опыта (величину индукции поля, размер измерительных датчиков, необходимую степень однородности поля).

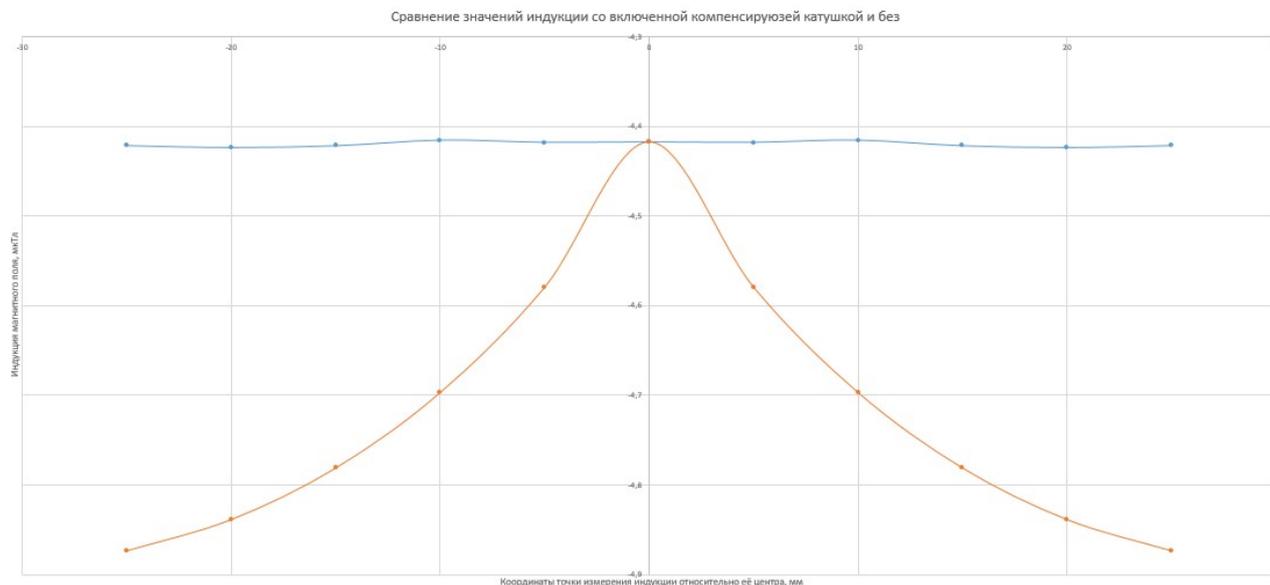


Рисунок 3 – График индукций магнитного поля соленоида с и без компенсирующей обмотки (синий – с компенсирующей обмоткой, оранжевый – без компенсирующей обмотки)

Список литературы

1. Калашников, С. Г. Электричество / С. Г. Калашников. – М. : Физматлит, 2006. – 655 с.
2. Капусткин, Д. Е. Физика: Обработка результатов измерений при выполнении лабораторных работ / Д. Е. Капусткин, А. Г. Шустиков. – М. : МИСиС, 2007. – 108 с.
3. Методы создания однородных магнитных полей [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://studopedia.ru/26_103659_metodi-sozdaniya-magnitnogo-polya.html, свободный. – Дата доступа: 12.07.2020.

A system for calculating the parameters of the magnetic field generated by a solenoid with a compensating winding is described. A simulator program based on MS Excel has been developed for calculating magnetic field parameters based on the parameters of the solenoid coil and the parameters of the compensating winding.

Сергейчик Даниил Русланович, магистрант 1-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, daniils2000@yandex.by.

Научный руководитель – *Гачко Геннадий Алексеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, gachko@grsu.by.

УДК 536.2+536.3

М. С. ТЕРЕХОВА, Г. А. МАСКАЛЕНКО, А. А. СТАНКЕВИЧ, Н. В. НАСОНОВА,
С. И. РУДИКОВ, А. П. ШКАДАРЕВИЧ

МОДЕЛЬ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ГОМОГЕННЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Проведено моделирование воздействия лазерного излучения на гомогенные материалы для предварительной оценки эффективности процесса и определения оптимальных технических параметров лазерных устройств обработки поверхности. Для этого был выбран упрощенный способ описания процесса воздействия, основанный на уравнении теплопроводности с учетом нагрева и абляции материала. Модель была верифицирована для алюминия Д-16. На основании проверки были построены прогностические результаты для других входных параметров.

Лазерное излучение находит применение в различных областях – от медицины до тяжелой промышленности. Востребованными направлениями технического применения высокомошных лазеров являются разбор завалов, очистка поверхности от опасных загрязнений, дистанционная резка и сверление отверстий. Преимуществом использования лазера в перечисленных случаях являются большая экономичность, безопасность и технологичность воздействия по сравнению с традиционными средствами, точность и дальность действия. Однако при разработке подобных систем возникает ряд трудностей, зависящих от выбора необходимого и достаточного диаметра и мощности пучка, вопросов наведения и точности удержания пучка, конструктивных вопросов мобильности и обслуживания цельной системы, ее технических ограничений эксплуатации. Целью данной работы является разработка модели воздействия лазерного излучения на гомогенные материалы, что позволит оптимизировать предварительную оценку параметров разрабатываемых лазерных систем.

Воздействие лазерного излучения (ЛИ) на материал приводит к возникновению тепловых, оптических, электрических эффектов. При исключении из рассмотрения нелинейных явлений, возникающих при высоких плотностях мощности 10^8 – 10^{10} Вт/см², результат действия ЛИ можно свести к теплофизическим процессам, приводящим к нарушениям механической прочности и/или запуску химических процессов и последующему разрушению [1]. В соответствии с первым началом термодинамики энергия, поглощенная материалом, расходуется на его нагрев, плавление и испарение или на нагрев и последующую абляцию материала. В случае воздействия ЛИ на металлы процесс испарения может быть сопряжен с образованием плазмы и экранированием объекта. Существует ряд моделей, описывающих воздействие ЛИ на материал, учитывающих выброс материала из области расплава и образование сквозных отверстий. Часть из них построены аналитически, с привлечением специальных программных пакетов, таких как Abaqus, CLUSTER2D, COMSOL Multiphysics [2; 3]. В данной работе предложена упрощенная модель воздействия ЛИ на металлы, позволяющая оценить время образования сквозного отверстия. В отличие от существующих данная модель не задействует существенных вычислительных мощностей и является необходимым и достаточным приближением для описания взаимодействия ЛИ с однородными материалами. Модельная гипотеза была экспериментально проверена.

Результаты и обсуждение.

Моделирование процесса лазерного воздействия на материал сводится к решению задачи Стефана. Математическая модель была построена в программном пакете Comsol Mutiphysics с привлечением модулей Deformed geometry и Heat transfer in fluids. Задача рассматривалась как осесимметричная с осью симметрии, проходящей через центр пучка. В качестве объекта воздействия выбиралась пластина из гомогенного материала (металла) с размерами, соответствующими зоне воздействия в эксперименте (подробное описание ниже). Удельная теплоемкость материала считается зависимой от температуры, степень зависимости определяется на основании библиотеки COMSOL для материала aluminum 2024. Рабочая область разделялась на два участка: предполагаемая зона основного плавления и остальная зона, что позволило обеспечить достаточно мелкую сетку разбиения только на основной области воздействия и сократить время вычисления. Максимальная величина элементов сетки в области воздействия – 0,01 мм. Особенности расчета выбранным способом не позволяют промоделировать образование сквозного отверстия, поскольку в данном случае происходит разрыв сетки. Однако может быть определено критическое минимальное время образования отверстия. При дальнейшем увеличении времени, слой модельного материала считается бесконечно тонким для расчета, что расценивается как момент сквозного прожига.

Учитывая описанные выше основы термодинамики, управляющим уравнением в модели является уравнение теплопроводности:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q$$

где ρ – плотность материала, C_p – удельная теплоемкость, T – температура, \vec{u} – вектор скорости движения материала, Q – поток тепла.

Движение границы воздействия имитирует разрушение материала и зависит от температуры абляции. Скорость перемещения границы определяется разностью температур текущей и критической (абляции). Стоит учитывать, что поскольку данная температура выше температуры плавления, то образование расплава будет возникать раньше, что видно по температурному распределению на объекте воздействия.

Поток тепла определяется как доля поглощенной энергии лазерного пучка. Поскольку материал непрозрачный, то коэффициент поглощения оценивается как $(1-\alpha)$, где α – коэффициент отражения, (в работе $\alpha = 0,8$ для алюминия). Известно, что за счет окисления поверхности металла во время воздействия ЛИ изменяется коэффициент отражения. Кроме того форма поверхности расплава непредсказуемо модифицируется. Следовательно, в модель может быть заложен поправочный коэффициент, описывающий неучтенные факторы. Путем прямых модельных вычислений выяснено, что для алюминия постоянный поправочный коэффициент составляет $k = 0,45$. В таком случае доля энергии, переданной материалу, снижается.

Для осуществления расчетов на границах принимаются следующие условия:

1. Верхняя граница, на которую направлено действие ЛИ, подвергается действию потока ЛИ (ГУ 2-го рода).
2. Конвективный сброс тепла происходит от всей поверхности. Коэффициент теплообмена принимался равным $2 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$, что соответствует теплообмену в стоячем воздухе (ГУ 3-го рода).
3. Радиационный сброс тепла происходит от всей поверхности. Коэффициент излучательной способности тела принимался равным 0,09 (для неокисленного алюминия).

Модель позволяет установить профиль лазерного пучка с помощью задания определенного распределения потока тепла. Для экспериментальной проверки использовался многомодовый лазер, для этого в модели принимался профиль вида top-hat со сглаженным переходом. Радиус пучка рассматривается на половине спада его интенсивности. В случае одномодового лазера профиль пучка задавался как распределение Гаусса.

Результатом моделирования является температурное распределение в материале (рисунок 1), время, за которое образуется отверстие, и его размер. Размер отверстия зависит от смещения границы материала за счет плавления и определяется по точке перегиба профиля поверхности (рисунок 1), а также по области достижения температуры плавления в градиенте.

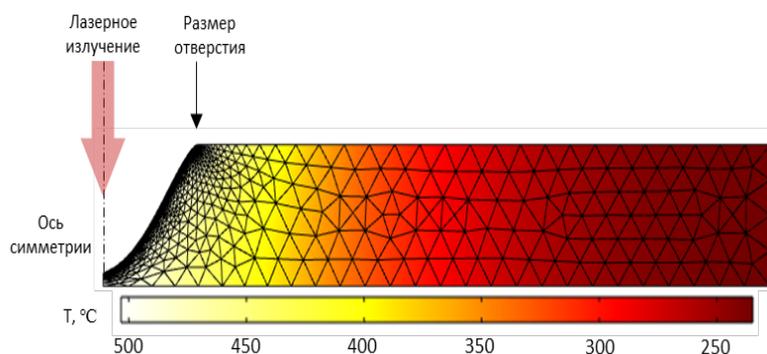


Рисунок 1 – Температурное распределение в металле (алюминий) при воздействии на него многомодового пучка лазерного излучения мощностью 5,7 кВт (длина волны – 1080 нм)

Для апробации модели были проведены эксперименты по воздействию лазерного излучения на металлические пластины (алюминий Д-16) толщиной 0,5–6 мм, размерами 20×20 см. Процесс воздействия записывался на ТВ камеру с частотой 240 кадр/с. Образование первичного отверстия детектировалось посредством прожига с точностью 8 мс. На каждую толщину проводилось по три эксперимента. Каждый лазерный кратер промоделирован с учетом собственных геометрических размеров кратера и пластины. Поскольку модель не учитывает выброс материала, а только его нагрев и плавление, было принято решение анализировать сходимость модели к эксперименту по параметру времени образования отверстия. В то же время каверна продолжает формироваться даже после выключения излучения за счет высокой тепловой нагрузки. На рисунке 2 представлено сравнение результатов экспериментальных и моделирования. Среднеквадратическое отклонение рассчитано для каждой совокупности экспериментов и модельного времени каждой точки. Было обнаружено, что критическим параметром, влияющим на результат сходимости модели к эксперименту, является размер расчетной области. Так, если зона воздействия на практике несимметрична, то ее моделирование представляет собой сложную задачу, требующую внедрения дополнительных параметров. Если в качестве аналога размера области расчета выбирать среднее геометрическое положения пучка относительно края образца (модель 1, рисунок 2), то наибольшее отклонение модельных данных от экспериментальных проявляется на меньших толщинах (0,5–3 мм, данные не приведены). Однако при возрастании толщины материала (5 мм и выше, рисунок 2), модельные результаты согласуются с экспериментальными по уровню значимости 0,05. Полученный результат может быть обусловлен увеличением вклада теплопроводности материала в накопление и перераспределение энергии на толстых образцах. В связи с этим для моделирования воздействия ЛИ на металл предлагается выбирать расстояние от центра до ближайшего края (модель 2, рисунок 2) для тонких образцов и переходить на среднегеометрический способ определения расчетной области для толстостенных объектов.

В таблице 1 приведены результаты моделирования воздействия одномодового пучка. Видно, что за счет локального увеличения плотности мощности лазерного излучения время поражения уменьшается, что заметно на большой толщине материала. При увеличении толщины на время образование отверстия могут влиять механическое повреждение, изменение формы и наплыв расплава в зону воздействия. Поэтому в области практического применения можно прогнозировать сходные результаты для одномодового и многомодового

лазера на тонких металлах до 6 мм, что позволяет не возлагать дополнительные технические ограничения на источник ЛИ в конечной системе.

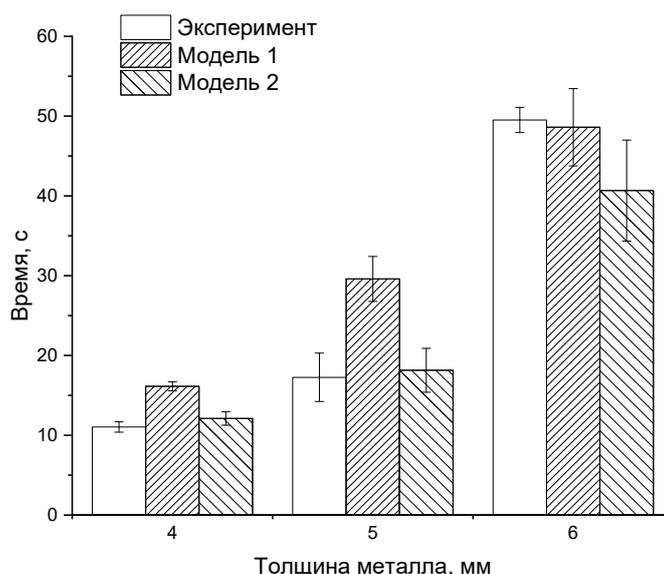


Рисунок 2 – Изменение времени образования отверстия в объекте в зависимости от толщины образца, где в модели 1 расчётная область – среднее геометрическое положение, в модели 2 расчётная область – среднее расстояние до ближайшего края

Таблица 1 – Результаты моделирования действия одномодового и многомодового пучка лазерного излучения на алюминий Д-16.

Толщина материала, мм	Многомодовое излучение		Одномодовое излучение	
	Время образования отверстия, с	Диаметр отверстия, мм	Время образования отверстия, с	Диаметр отверстия, мм
2	1,81	5,82	1,93	5,26
4	10,58	8,5	9,94	7,4
5	13,16	9,6	12,31	8,6
6	36,95	11,6	34,06	8,5
8	70,54	10,6	65,46	11,7
12	175,45	13,6	165,46	14,3

На основании сравнения результатов моделирования с экспериментом выяснен способ задания расчетной области для металлов. С учетом этого разработанная модель может быть далее усовершенствована для оценки действия ЛИ на несимметричные объекты сложной формы. Для уточнения модели и стабилизации ее работы требуется экспериментальная проверка на других однородных материалах и толщинах.

Список литературы

1. Взаимодействие лазерного излучения с веществом: силовая оптика / В. П. Вейко [и др.]. – М. : Физматлит, 2008.
2. Светушков, Н. Н. Проблемы моделирования взаимодействия лазерного излучения с анизотропными средами и композиционными материалами / Н. Н. Светушков, О. Н. Третьякова // Труды МАИ. – 2010. – № 40. – С. 7.
3. Keyhole formation during spot laser welding: Heat and fluid flow modeling in a 2D axisymmetric configuration / M. Courtois [et al.] // COMSOL Conference. – Milan, 2012.

Current work describes the model of laser-matter interaction on homogenous materials. It can be used for preliminary efficiency estimation of laser-matter interaction process and for determination technical parameters setting of laser remote cutting devices. In order to do this, there was selected the simplified interaction description method which is based on thermal conductivity equation and took into account heating and ablation process. Model was verified for aluminum D-16. Based on the model check the predicted results for other input parameters was performed.

Терехова Мария Сергеевна, студентка 5-го курса, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, terekhova.m.s@yandex.by.

Маскаленко Галина Александровна, унитарное предприятие «НТЦ “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Республика Беларусь, g.maska-lenko@gmail.com.

Станкевич Александр Алексеевич, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, stankevich2a@gmail.com.

Рудиков Станислав Игоревич, унитарное предприятие «НТЦ “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Республика Беларусь, stanislav.rudikov@gmail.com.

Научные руководители: *Шкадаревич Алексей Петрович*, доктор физико-математических наук, академик НАН Беларуси, профессор, директор Унитарного предприятия «НТЦ “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Республика Беларусь, office@lemt.by.

Насонова Наталья Викторовна – доктор технических наук, доцент, профессор кафедры инфокоммуникационных технологий, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, nasono-van@bsuir.by.

УДК 53.087.51

Н. В. ТРАПЕНОК, И. Н. КОЛЬЧЕВСКАЯ, А. Д. КОСЕНКО, С. В. МОЗГАЛЁВ,
А. Н. ПЕТЛИЦКИЙ, Ю. И. ДУДЧИК, Н. Н. КОЛЬЧЕВСКИЙ
**МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКЛИКА ЦИФРОВЫХ КАМЕР
В УСЛОВИЯХ НЕДОСТАТОЧНОЙ РАВНОМЕРНОЙ ОСВЕЩЁННОСТИ**

В условиях недостаточной освещенности цифровой детектор регистрирует малое число фотонов, т. е. изображение содержит малое число активных пикселей. В работе анализируется распределение активных и вакантных пикселей цифровых детекторов при недостаточной равномерной освещенности. Приводятся результаты экспериментов по регистрации равномерного рентгеновского излучения цифровой ПЗС камерой. Показано, что регистрация отдельных фотонов имеет локальный характер в виде пиков, отличающихся симметрией и размерами.

При работе в рентгеновском диапазоне длин волн в качестве детектора используются цифровые ПЗС камеры. Для получения статистически достоверного изображения необходимо обеспечить достаточный поток фотонов на отдельный пиксел цифрового детектора, что приводит к большим затратам по времени и радиантной нагрузке на объект исследования в методах анализа. Предлагается рассмотреть задачу обнаружения изображений объектов в условиях недостаточной освещенности. Признаком объекта будем использовать неравномерность освещенности детектора.

Рассмотрим цифровой детектор размером L на H пикселей в условия равномерной освещенности, при числе фотонов F , попавших на детектор:

$$F = (LH)^x, \quad (1)$$

где x – степень заполнения детектора, L , H – число пикселей по длине и высоте детектора.

Рассмотрим детектор размером 2 на 2 ($L = 2$, $H = 2$), который зарегистрировал 4 фотона ($x = 1$) при равномерной освещенности детектора. При равномерной освещенности, вероятность попадания фотона в пиксел равна:

$$P = \frac{1}{LH}, \quad (2)$$

Тогда вероятность равномерного заполнения фотонами детектора равна 9,4 % (рисунок 1а). Наиболее вероятное событие 56,2 % (рисунок 1б) – заполнение трех пикселей. Вероятность попадания фотонов в два пикселя 32,8 % (рисунок 1в). Вероятность попадания всех фотонов в один пиксел равна 1,6 % (рисунок 1г).

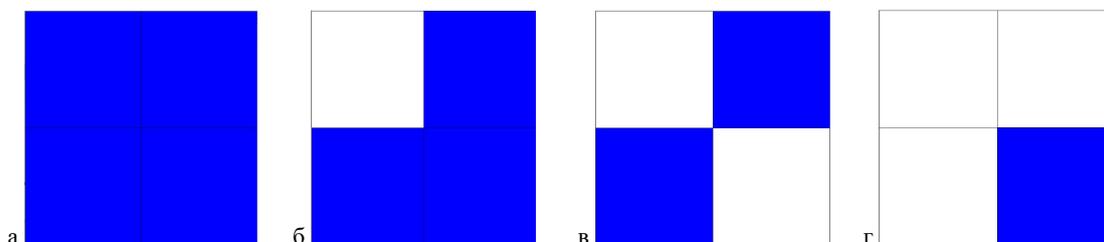


Рисунок 1 – Изображение детектора 2 на 2.

Синие области соответствуют пикселям, в которые попали фотоны

Наиболее вероятное событие – три пикселя, в которые попали фотоны, и один вакантный или пустой пиксел. Такое распределение активных и вакантных пикселей характерно для равномерной освещенности.

Вероятность того, что в отдельный пиксель детектора не произойдёт попадания фотона равно:

$$k = \left(1 - \frac{1}{LH}\right)^F, \quad (3)$$

где k – коэффициент вакантных пикселей.

Число вакантных пикселей зависит от количества фотонов или от степенного коэффициента x (рисунок 2). Из зависимости следует, что при числе фотонов равном числу пикселей коэффициент вакансий не зависит от размера детектора. Если число фотонов больше числа пикселей, то при увеличении размера детектора коэффициент вакансий увеличивается. В пределе при бесконечно большом детекторе коэффициент вакансий равен нулю:

$$\lim_{LH \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{LH}\right)^F = 0, \text{ при } x > 1, \quad (4)$$

если число фотонов меньше числа пикселей, то при увеличении размера детектора коэффициент вакансий уменьшается. В пределе при бесконечно большом детекторе коэффициент вакансий равен единице:

$$\lim_{LH \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{LH}\right)^F = 1, \text{ при } x < 1 \quad (5)$$

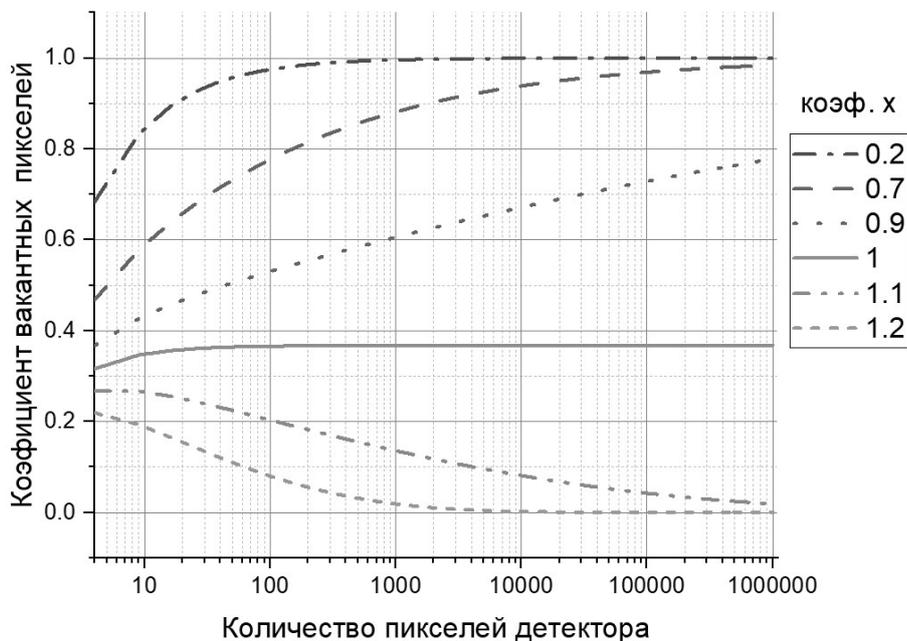


Рисунок 2 – Зависимость вакантных пикселей от степенного коэффициента x

Проведены эксперименты по регистрации фотонов рентгеновского диапазона при помощи двух цифровых камер с разрешением 480×640 и 240×320 . Экспериментальное изображение показано на рисунке 3а. Изображения содержат ярко выраженные пики, которым соответствуют попадания рентгеновских фотонов. Численными методами выполнена пороговая обработка, выделяющая рентгеновские фотоны на изображении (рисунок 3б).

По результатам экспериментов, стала явно видна возможность регистрации некоторых областей (размер которых, обусловлен размером пикселя матрицы камеры и энергией фотона) в которые произошли попадания рентгеновских фотонов. После была произведена графическая обработка, из изображений был вычтен их фон, полученный при отключённом рентгеновском источнике, и за тем применялась пороговая обработка, виды разных попаданий в матрицу показаны на рисунке 4. На изображении мы видим несколько пиков, отличающихся симметрией и размерами.

Результаты экспериментов по регистрации равномерного рентгеновского излучения цифровой ПЗС камерой показывают, что регистрация отдельных фотонов имеет локальный характер в виде пиков, отличающихся симметрией и размерами.

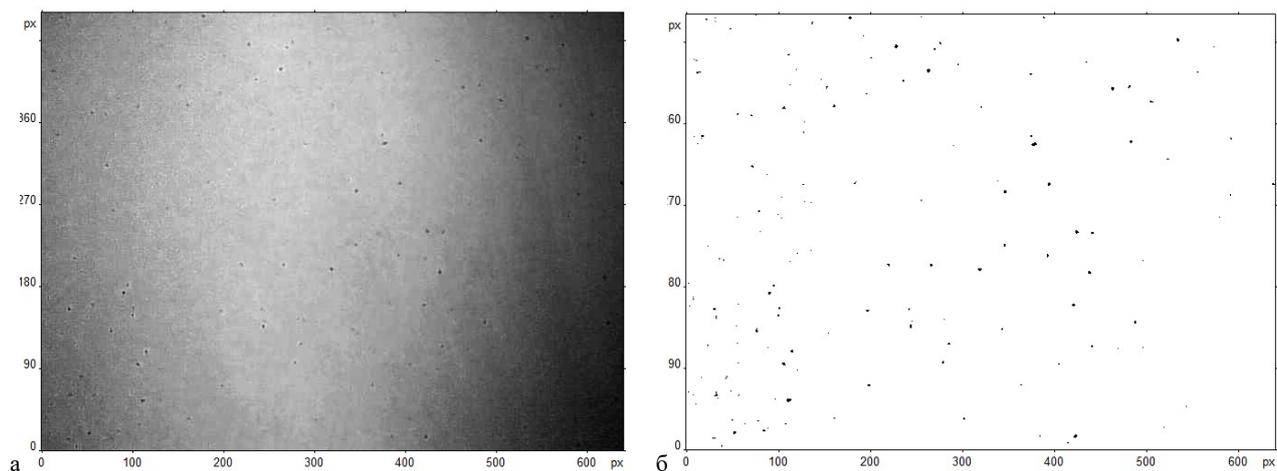


Рисунок 3 – Изображение камеры с разрешением 480×640 при равномерной освещённости

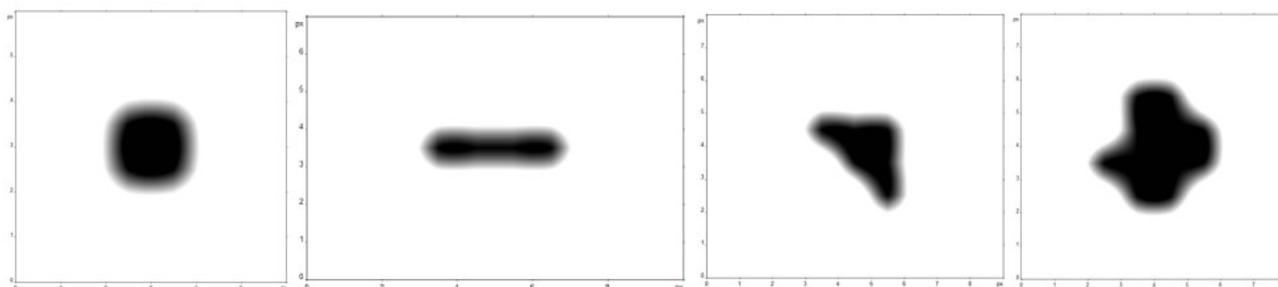


Рисунок 4 – Изображение видов попаданий фотонов в камеру с разрешением 480×640

Список литературы

1. MacDonald, K. A. X-ray Physics, Optics, and Applications // Princeton University Press. – 2017.
2. Ахманов, С. А. Введение в статистическую радиофизику и оптику / С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин // М. : Наука, 1981. – 640 с.
3. Грейсух, Г. И. Рентгеновская оптика: современное состояние и области применения / Г. И. Грейсух, Е. Г. Ежов, С. В. Казин, С. А. Степанов. – 2014.

In conditions of insufficient illumination, the digital detector registers a small number of photons, i.e. the image contains a small number of active pixels. The paper analyzes the distribution of active and vacant pixels of digital detectors under insufficient uniform illumination. The results of experiments on the registration of uniform X-ray radiation with a digital CCD camera are presented. It is shown that the registration of individual photons has a local character in the form of peaks that differ in symmetry and size.

Трапенюк Никита Владимирович, студент 4-го курса, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, mikita.trapianok@gmail.com.

Кольчевская Ирина Николаевна, магистрант, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, iren.kolchevsky@gmail.com.

Косенко Антон Дмитриевич, студент 2-го курса, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, kosenkoanton13@gmail.com.

Мозгалёв Сергей Владимирович, студент 1-го курса, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь.

Научные руководители: *Петлицкий Александр Николаевич*, кандидат физико-математических наук, директор Государственного центра «Белмикроанализ» научно-технического центра «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл», Минск, Республика Беларусь, rct.petlicki@bsu.by.

Дудчик Юрий Иванович, кандидат физико-математических наук, заместитель директора по научной работе Института прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, Dudchik@bsu.by.

Кольчевский Николай Николаевич, кандидат физико-математических наук, доцент, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, kolchevsky@bsu.by.

УДК 535.338.42,539.19

Н. А. ХУРСЕВИЧ, Д. Д. КАЧКИНА, К. А. ЯЦУХНО, А. Э. МАЛЕВИЧ, Г. А. ПИЦЕВИЧ

АНГАРМОНИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЕФОРМАЦИОННЫХ КОЛЕБАНИЙ В МОЛЕКУЛЕ CO₂

Проведён анализ деформационных колебаний ДУ с учётом ангармонических взаимодействий данной моды с остальными колебаниями молекулы. Проведены расчёты энергий стационарных деформационных колебательных состояний, полученные с использованием полярных координат, что открывает путь к полноразмерным расчётам колебательных состояний как молекулы ДУ, так и других линейных трёхатомных молекул.

Молекула диоксида углерода (углекислого газа) играет важную роль в атмосферных процессах, вносит вклад в формирование парникового эффекта и широко представлена в атмосферах других планет солнечной системы и экзопланет. Также молекула CO₂ обнаружена в газовых туманностях межзвездного пространства и во многих кометах. Диоксид углерода (ДУ) является одной из простейших линейных молекул и принадлежит к группе точечной симметрии $D_{\infty h}$. Молекула CO₂ уже давно и по сегодняшнее время находится в фокусе внимания исследователей как теоретиков, так и экспериментаторов [1–3]. Однако, описание деформационных колебаний в этой молекуле остается неполным и требует более детального рассмотрения.

Напомним, что известно о деформационных колебаниях молекулы CO₂. Поскольку в равновесном состоянии молекула ДУ линейна, то число нормальных колебаний должно рассчитываться не по формуле 3N-6, а по формуле 3N-5. Следовательно, в данной молекуле реализуется 4 нормальные колебания. При этом в ИК и КР спектрах молекулы наблюдается две полосы поглощения и одна линия рассеяния, соответственно, обусловленные фундаментальными колебаниями. Единственное фундаментальное полносимметричное колебание обусловлено симметричными валентными колебаниями С=О связей и проявляется только в спектре КР. Фундаментальное антисимметричное колебание С=О связей и деформационное колебание О=C=О валентного угла проявляются в ИК спектре. Последнее фундаментальное колебание является дважды вырожденным, поскольку молекула ДУ может быть изогнута в двух ортогональных плоскостях, пересекающихся по линии О=C=О в ее равновесной конфигурации. Экспериментальные данные показывают, что это фундаментальное колебание действительно является вырожденным, то есть оба деформационных колебания в двух ортогональных плоскостях имеют одну и ту же частоту. Однако, первый и последующие обертона оказываются расщепленными за счет ангармонического взаимодействия двух деформационных колебаний. Закономерности расщеплений обертонов деформационного колебания детально в литературе не описаны. В качестве одной из моделей наглядного описания этих колебаний используется следующий подход. Пусть в начальный момент все атомы молекулы расположены вдоль оси Z, при этом атом углерода находится в начале координат. Оси X и Y образуют правую тройку. При деформации молекулы атомы кислорода продолжают оставаться на оси Z, смещаясь симметрично к началу координат, а атом углерода в общем случае движется в плоскости XOY. При этом, длины С=О связей остаются неизменными. Если атом С движется строго вдоль оси X, то мы имеем дело с деформацией молекулы в плоскости ZOX, а если строго вдоль оси Y, то с деформацией в плоскости ZOY. Поскольку эти две плоскости ортогональны, то такие движения характеризуют два независимых деформационных колебания. При этом значение координаты X атома углерода (X_C) можно рассматривать в качестве колебательной координаты ($Y_C = 0$), описывающей первое деформационное колебание молекулы, а значение координаты Y_C колебательной координатой ($X_C = 0$), описывающей второе деформационное колебание. Теперь, если атом углерода оказывается в иных точках на плоскости XOY, то его положение может быть охарактеризовано координатами (X_C, Y_C) или, поскольку речь идет лишь об атоме углерода, можно записать эти координаты проще (x, y). Теперь с помощью этих координат можно воспроизводить изгибы молекулы CO₂ в двух ортогональных плоскостях одновременно и при этом на различные величины. Поскольку центр масс атомов кислорода при таком описании деформационных колебаний остается неподвижным, то приведенная масса произвольного деформационного колебания будет являться константой и можно записать следующее двухмерное колебательное уравнение Шредингера:

$$-R\left(\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial y^2}\right) + U(x,y)\Psi(x,y) = E\Psi(x,y). \quad (1)$$

Если бы потенциальная энергия имела следующий вид:

$$U(x,y) = \frac{kx^2}{2} + \frac{ky^2}{2}, \quad (2)$$

то мы имели бы дело с двухмерным изотропным гармоническим осциллятором, теория которого отлично разработана и ее некоторые положения полезны для описания анализируемого деформационного колебания. Пусть квантовые числа n_1 и n_2 описывают первый и второй гармонический осциллятор. Тогда энергия 2D изотропного гармонического осциллятора оказывается равной $E_{n_1 n_2} = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega$. Очевидно, что основное состояние не вырождено ($n_1 = n_2 = 0$). Колебания с заданным значением $n = n_1 + n_2$ оказываются $n + 1$ раз вырожденными. Следовательно, если бы 2D поверхность потенциальной энергии (ППЭ) в тех или иных колебательных координатах, описывающих деформации молекулы CO_2 , была гармонической функцией (2), то как первый, так и более высокие обертона деформационного колебания не были бы подвержены расщеплению. Известно также [4], что в уравнении (1) можно перейти к полярным координатам r, φ , где $r^2 = x^2 + y^2$; $t\varphi = y/x$. Не сложно показать, что в этих координатах уравнение (1) принимает следующий вид:

$$-R\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi(r,\varphi)}{\partial r} + \frac{\partial^2\Psi(r,\varphi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi(r,\varphi)}{\partial\varphi^2}\right) + U(r,\varphi)\Psi(r,\varphi) = E\Psi(r,\varphi). \quad (3)$$

Очевидно, что в уравнении (3) переменные легко разделяются, если волновую функцию представить в следующем виде:

$$\Psi(r,\varphi) = R(r)e^{im\varphi}. \quad (4)$$

С учетом (4) уравнение (3) принимает следующий вид:

$$-R\left(\frac{1}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r} + \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} - \frac{m^2}{r^2}R(r)\right) + U(r)R(r) = ER(r). \quad (5)$$

Более сложный анализ показывает [6], что квантовое число m характеризует колебательный момент импульса. Действительно, лишь те колебания, которые совершаются вдоль радиус-вектора в полярных координатах, могут считаться чисто колебательными движениями. В этом случае $m = 0$. В иных случаях атом углерода движется либо по окружности, либо по эллипсу в плоскости ХОУ и тогда $m \neq 0$. Целочисленное квантовое число m может быть как положительным, так и отрицательным, что отражает возможность вращения атома углерода как по часовой, так и против часовой стрелки. При этом полная потенциальная энергия с учетом эффективного слагаемого не зависит от знака m (от направления вращения):

$$U_{\text{eff}}(r) = R\frac{m^2}{r^2} + U(r). \quad (6)$$

Согласно [5; 6] состояние движения изотропного осциллятора в полярных координатах описывается парой квантовых чисел: n_r, m . При этом оказывается, что эта пара связана с отмеченной ранее парой квантовых чисел n_1, n_2 следующим образом: $n_r = n_1 + n_2$; $m = n_1 \pm n_2$. Здесь следует отметить некоторую аналогию с квантовыми числами атома водорода n и l . Орбитальное квантовое число l определяет значение эффективного слагаемого в потенциальную энергию атома водорода, однако сама энергия зависит только от главного квантового числа n . Кроме того, при заданном значении n квантовое число l принимает значения от $-n$ до $+n$ через единицу. Аналогичным образом, в случае 2D изотропного гармонического осциллятора квантовое число n_r играет роль главного квантового числа, поскольку выражение для его энергии, может быть теперь записано следующим образом: $E_r = (n_r + 1)\hbar\omega$. То есть энергия не зависит от квантового числа m . При этом квантовое число m подобно квантовому числу l также определено «главным» квантовым числом n_r следующим образом: m изменяется от $-n_r$ до $+n_r$, но через двойку, принимая $n_r + 1$ значение. Поэтому имеет смысл пометить индексом n_r квантовое число m (m_{n_r}) чтобы различать одинаковые значения m , принадлежащие различным значениям n_r . Изложенные выше данные, хотя в целом известны, но в литературе отсутствуют источники, где компактно изложены все приведенные факты.

Учтем теперь то обстоятельство, что реальная потенциальная энергия молекулы диоксида углерода как функция деформационных координат является ангармонической. Следовательно, вырождение возбужденных колебательных состояний должно сниматься. Однако, как именно осуществляется этот процесс в литературе не описано. Были выполнены расчеты 1D потенциальной кривой (6) молекулы CO_2 на уровне теории CCSD(T)/acc-pVQZ. Затем, уравнение (5) решалось численно с помощью DVR метода [7–9]. В результате было установлено, 1) что энергия возбужденных деформационных состояний определяется главным образом значением квантового числа n_r , 2) при заданном n_r компоненты мультиплетта с одинаковыми по модулю значениями m_{n_r} остаются дважды вырожденными, в то время как энергия компонент с различными значениями

$|m_n|$ различна, таким образом, число компонент мультиплета с различной энергией и одинаковым значением n_r оказывается равны $\left[\frac{n_r}{2}\right] + 1, 3$) при заданном значении n_r , энергия компонент мультиплета нарастает по мере уменьшения модуля квантового числа m_n .

Использование декартовых и полярных координат позволяет эффективно анализироваться деформационные колебания молекулы ДУ, однако не подходят для более точных расчетов, учитывающих ангармонические взаимодействия данной моды с остальными колебаниями молекулы. Недавняя попытка использовать декартовы координаты для описания всех колебательных мод молекулы оказалась в целом безуспешной [10]. Очевидно, что учет всех колебательных степеней свободы возможен только с помощью полного набора обобщенных естественных координат. Для возможности описания анализируемой моды с помощью двух естественных деформационных координат φ_1, φ_2 , значения которых в равновесной конфигурации принимаются равными 180° , мы предлагаем использовать следующее геометрическое соотношение, связывающее одновременную деформацию молекулы в двух ортогональных плоскостях на углы φ_1 и φ_2 с углом φ , определяющим результирующую изогнутую конфигурацию молекулы:

$$\cos^2 \frac{\varphi}{2} = \cos^2 \frac{\varphi_1}{2} + \cos^2 \frac{\varphi_2}{2}. \quad (7)$$

Соотношение (7) справедливо в случае чисто деформационных колебаний, когда длины С=О связей остаются неизменными, но может быть легко модернизировано на случай изменения длин С=О связей при рассмотрении полноразмерной 4D модели описания колебаний молекулы ДУ или (что особенно важно) любой другой линейной трехатомной молекулы. Поскольку в (7) правая часть ограничена интервалом 0–1, то возможные значения углов φ_1 и φ_2 также ограничены интервалом $90^\circ \leq \varphi_i \leq 270^\circ$. Однако, реально расчеты потенциальной энергии для изогнутых конфигураций со значениями φ близкими к нулю в конкретных квантово-химических пакетах нереализуемы. Т. е. реальные интервалы вариаций φ_1 и φ_2 будут ограничены минимально допустимыми значениями угла φ конкретных квантово-химических расчетов. В данной работе расчеты 2D ППЭ в естественных деформационных координатах φ_1, φ_2 выполнялись на равномерной эквидистантной сетке с шагом 1° , при этом значения координат φ_1 и φ_2 варьировались в пределах от 142° до 218° . Расчеты проводились на уровне теории CCSD(T)/асс-рVQZ с помощью квантово-химического пакета ORCA [11]. Результаты расчетов энергий стационарных деформационных колебательных состояний оказались идентичными результатам, полученным с использованием полярных координат, что открывает путь к полноразмерным расчетам колебательных состояний, как молекулы ДУ, так и других линейных трехатомных молекул.

Список литературы

1. Chang, X., Dobrolyubov, E. O., Krasnoshchekov, S. V. // Spectrochim. Acta. Part A. – 2023. – Vol. 288. – P. 122071.
2. Cihla, Z., Chedin, A. // J. Mol. Spectr. – 1971. – Vol. 40. – P. 337–355.
3. McCoy, A. B., Silbert, E. L. // J. Chem. Phys. – 1991. – Vol. 95. – P. 3476–3487.
4. Watson, J. K. G. // Mol. Phys. – 1970. – Vol. 19. – P. 465–487.
5. Chedin, A. // J. Mol. Spectr. – 1979. – Vol. 76. – P. 430–491.
6. Мессиа, А. Квантовая механика / А. Мессиа. – М.: Наука, 1978.
7. Meyer, R. // J. Chem. Phys. – 1970. – Vol. 52. – P. 2053–2059.
8. Light, J. C., Hamiltonian, I. P., Lill, J. V. // J. Chem. Phys. – 1985. – Vol. 82. – P. 1400–1411.
9. Pitsevich, G. A., Malevich, A. E. // J. Appl. Spectr. – 2016. – Vol. 82. – P. 893–900.
10. Liang, Z., Tsai, H.-L. // J. Mol. Spectr. – 2008. – Vol. 252. – P. 108–114.
11. Neese, F., Wennmohs, F., Becker, U., Riplinger, C. // J. Chem. Phys. – 2020. – Vol. 152. – P. 224108.

The carbon dioxide (CD) molecule plays an important role in atmospheric processes, contributes to the formation of the greenhouse effect, and is widely present in the atmospheres of other planets of the solar system and exoplanets. However, the description of bending vibrations in this molecule remains incomplete and requires more detailed consideration. The scientific work analyzes the deformation vibrations of CD taking into account the anharmonic interactions of this mode with other vibrations of the molecule and calculates the energies of stationary deformation vibrational states obtained using polar coordinates, which opens the way to full-size calculations of the vibrational states of both the CD molecule and other linear triatomic molecules.

Хурсевич Никита Александрович, студент 2-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, maljajew@gmail.com.

Качкина Дарья Дмитриевна, студентка 3-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, spooky.alien@mail.ru.

Яцухно Ксения Александровна, студентка 4-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, beckysqkas@gmail.com.

Научные руководители: *Малевиц Александр Эрнестович*, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра дифференциальных уравнений и системного анализа, механико-математический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, malevich@bsu.by.

Пицевич Георгий Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра физической оптики и прикладной информатики, физический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, pitse-vich@bsu.by.

УДК 53.072

И. В. ЧЕКАВЫЙ, О. А. ГРИМУТО
**РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ
ПРИ ПРЕПОДАВАНИИ ФИЗИКИ**

Использование компьютерных технологий при преподавании физики иллюстрируется на примере разработки приложения «Температура».

Существуют понятия, которые мы хорошо воспринимаем на интуитивном уровне. К таким понятиям относятся, например, время. Французский король Карл Великий (742–814) утверждал: «Пока меня не спрашивают, что такое время, я хорошо себе представляю, что это такое. Когда меня спросят, что такое время, я задумываюсь. Когда объясняю, что такое время, я окончательно запутываюсь». Наверное, к подобным понятиям можно отнести и температуру. Мы хорошо ориентируемся в прогнозе погоды, температуре собственного тела, когда пользуемся эмпирическими температурными шкалами (Цельсия (1701–1744), Фаренгейта (1686–1736)). Кстати, в первом варианте своей температурной шкалы Цельсий предложил температуру кипения воды принять равной 0° , а температуру таяния льда 100° . Позже уже без участия Цельсия была принята современная шкала температур. Физический смысл температуры, определяемой эмпирически не ясен. На самом деле температура – это мера средней кинетической энергии, приходящейся на одну молекулу в системе. Эта температура называется энергетической, измеряется в единицах энергии и обозначается буквой ε . Связь этой температуры с термодинамической (Кельвина) определяется соотношением:

$$\varepsilon = kT$$

$$k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К} \text{ – постоянная Больцмана;}$$

$$T \text{ – абсолютная температура, К.}$$

Молекулы движутся хаотически, и их энергия при столкновении с другими молекулами постоянно меняется. А вот среднее значение энергии любой молекулы (по времени) остается одинаковым. Это параметр – единый для всей системы и есть мера температуры.

1. Постановка задачи.

Составить программу пересчета градусов термодинамической шкалы (Кельвин (1824–1907)) в градусы Цельсия, Фаренгейта, Реомюра (1683–1757). По заданной температуре найти среднюю энергию и среднюю скорость движения молекул воздуха. Вводить можно температуру в любых единицах. Отобразить графики мгновенной и средней энергии произвольной молекулы.

2. Математическая модель.

Пересчет градусов из одной температурной шкалы в другую выполняется по формулам:

$$t_C = T - 273.15$$

$$t_F = 1.8 * t_C + 32$$

$$t_R = t_C / 1.25$$

$$\varepsilon = M \langle v^2 \rangle / 2 = \frac{3kT}{2},$$

где $T, t_C, t_F, t_R, \varepsilon$ – соответственно температура в Кельвинах, градусах Цельсия, градусах Фаренгейта, градусах Реомюра, энергетическая температура в Дж., $k = 1.38 \times 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана, M – масса молекулы, кг.

Средняя скорость молекулы:

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{M\pi}}.$$

Рассмотрим систему частиц на плоскости. Взаимодействие между молекулами – абсолютно упругие соударения. Даже такая примитивная модель позволяет продемонстрировать стремление закрытой системы к равновесию, показать, что при любой начальной скорости молекул, система приходит к распределению молекул по скоростям, можно продемонстрировать парадокс Лoshмидта. Но самое важное можно понять в чем физический смысл температуры.

Закон движения частиц между соударениями:

$$x_i = x_{0i} + \Delta t v_{xi}$$

$$y_i = y_{0i} + \Delta t v_{yi}$$

Скорости двух частиц до и после столкновения определяются соотношениями.

$$\begin{aligned} v_{0i}^2 + v_{0j}^2 &= v_{1i}^2 + v_{1j}^2, \\ v_{0xi} + v_{0xj} &= v_{1xi} + v_{1xj}, \\ v_{0yi} + v_{0yj} &= v_{1yi} + v_{1yj} \end{aligned}$$

3. Качественный анализ модели.

Известно, что даже электрически нейтральные молекулы газа взаимодействуют друг с другом (ван-дер-Ваальсово взаимодействие). Мы принимаем динамическую модель идеального газа, когда между молекулами существуют только абсолютно упругие взаимодействия при столкновении. Примем также, что массы молекул одинаковые.

4. Модель идеального газа.

1. Задаем: число частиц N ;

минимальное расстояние между частицами L_{\min} .

2. Задаем начальные координаты и скорости:

$$\begin{aligned} x_i = x_{i0}, y_i = y_{i0}, v_{xi} = v_{xi0}, v_{yi} = v_{yi0}, \\ i = 1..N. \end{aligned}$$

3. Начальное время $t = 0$.

4. Определяем временной шаг $\Delta t = 0.01 / \sqrt{N}$.

5. Текущее время $t = t + \Delta t$.

6. Текущие координаты:

$$x_i = x_i + \Delta t v_{xi},$$

$$y_i = y_i + \Delta t v_{yi}.$$

7. Текущий индекс частицы:

$$i = i + 1.$$

8. Если $i \leq N$, переходим к пункту 6.

9. Индекс частицы: $i = 1$. Проверка на столкновение.

10. Индекс другой частицы, с которой возможно столкновение i -й частицы: $j = i + 1$.

11. Проверяем столкновение частиц.

Если $|x_i - x_j| > L_u$ $|y_i - y_j|_{\min, \min}$, то переходим к пункту 10.

12. Находим скорости после столкновения и переходим к пункту 3.

5. Разработка программы и вычислительный эксперимент.

Интерфейс программы позволяет задавать начальные произвольные скорости молекул. Кроме того, можно наблюдать хаотическое движение молекул. При этом отображаются мгновенные скорости двух молекул. Как видно значения мгновенных скоростей носят случайный характер.

Кроме того, отображаются средние значения скоростей этих молекул.

И как видно из графиков эти температуры стремятся к одинаковому значению. Поскольку мы приняли, что массы молекул одинаковые, средние скорости молекул могут характеризовать состояние всей системы в целом. Также программа позволяет рассмотреть движение молекул разной массы отображать их средние энергии.

Как видно из графиков, средние энергии любой молекулы практически одинаковые. Эта средняя энергия и есть мера температуры.

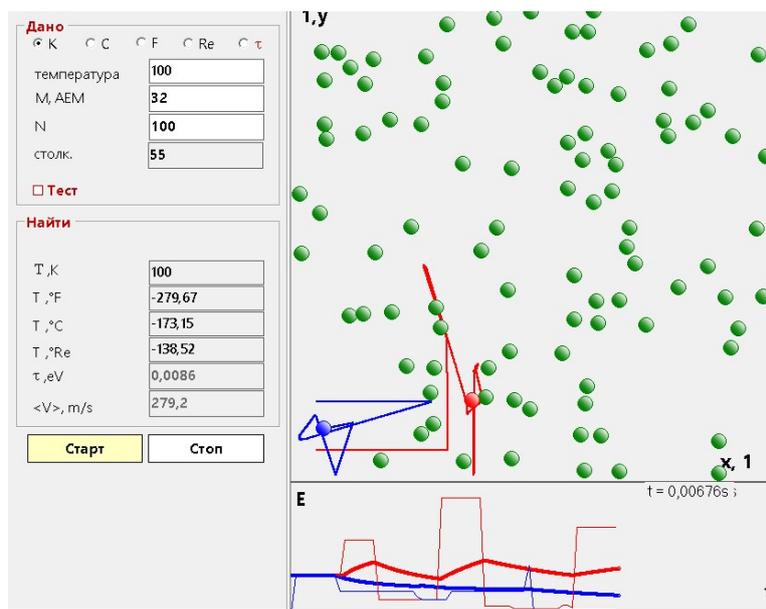


Рисунок 1 – Интерфейс модели «Температура»

Большое число разработанных нами моделей может быть использовано при преподавании физики как в средней, так и высшей школе (рисунок 2).

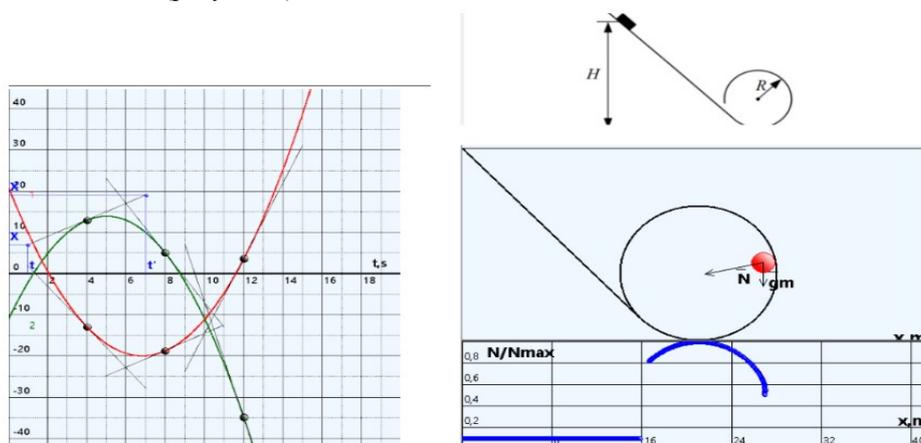


Рисунок 2 – Примеры демонстрационных компьютерных моделей

Список литературы

1. Никитин, А. В. Компьютерное моделирование физических процессов / А. В. Никитин, А. И. Слободянюк, М. Л. Шишаков. – М. : Бином, 2013. – 679 с.

The use of computer technology in teaching physics is illustrated by the example of the development of the application «Temperature».

Чекавый Иван Валерьевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, avilr.com@gmail.com.

Гримута Олег Андреевич, студент 3-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, o.grimuta@gmail.com.

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

УДК 536.2

А. В. ЧЕРНЯВСКАЯ

АЛГОРИТМЫ РАСЧЁТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИЦИОННЫХ СИСТЕМ С УЧЁТОМ РАЗМЕРНОГО ФАКТОРА НАПОЛНИТЕЛЯ

Рассмотрены методики учета размерного фактора при определении физических свойств наполнителей композиционных материалов.

Как известно при размерах объектов в нанодиапазоне их физические свойства отличны от объемных. В композитах этим условиям могут отвечать, размеры частиц наполнителя и их форма. Оценка размерного фактора для теплопроводности частицы наполнителя в общем случае зависит от размеров и формы частицы, а также от направления теплового потока, В дальнейшем анализе будем ориентироваться на карбид кальция. Граничным температурным параметром, определяющим размерные эффекты, является характеристическая температура Дебая. Вывод основан на теории Дебая, описывающей различие квантовых состояний при температурах ниже Θ_D и на анализе связей между Θ_D и размером частицы. Размеры частицы определяются дебаевской длиной $L \approx \lambda_D$, которая рассчитывается по формуле (коэффициент «230» – размерный) [1];

$$L_D = 230\Theta_D^{-1/2} [\text{нм}] \quad (1)$$

Наиболее приемлемый анализ размерных эффектов, связанных с теплопроводностью базируется на фоновом приближении. Рассматриваются два механизма переноса теплоты: диффузионный и баллистический. Эти механизмы связывают со значением числа Кнудсена [4]: $Kn = l/L$, где l – длина свободного пробега фононов; L – характерный размер.

Границы диффузионного и баллистического механизмов переноса теплоты можно оценить по критерию Кнудсена: $Kn < 10^{-2}$ – диффузионный перенос; $Kn > 1$ – баллистический перенос.

Эффективная теплопроводность в зависимости от размерного фактора может быть представлена выражением [2]:

$$eff = \frac{D_0}{1 + Kn}. \quad (2)$$

Диффузионная теплопроводность:

$$D_0 = \frac{1}{3} \sum_i \int \hbar v_i v_i^2 t_i \frac{\partial N_0}{\partial T} \frac{d^3 k}{(z)^3}, \quad (3)$$

где

v_i, v_i^2, t_i – частота, групповая скорость и время свободного пробега фононов соответственно;

N_0 – распределение Бозе – Эйнштейна;

T – температура;

k – модуль волнового вектора;

\hbar – постоянная Планка – Дирака.

Эффективная теплопроводность с учетом размерного фактора, учитывающая диффузионный и баллистический механизмы переноса энергии может быть рассчитана по формуле [6]:

$$eff = \frac{1}{3} \sum_i \int (k_B (\hbar v_i / (k_B T)))^2 \frac{\exp(\hbar / (k_B T))}{\exp \hbar / (k_B T) - 1} v_i(k) l_i(k) \cos^2 \Theta dk, \quad (4)$$

где

k_B – постоянная Больцмана;

k – волновой вектор.

Θ – угловая переменная направления потока энергии.

Для быстрой оценки влияния можно использовать простое соотношение:

$$eff = D_0 L. \quad (5)$$

Параметр зависит от формы и размеров частицы, от направления теплового потока, его определение связано с серьезными трудностями и должно опираться на экспериментальные данные.

Для оценки эффективного коэффициента теплопроводности можно использовать простое соотношение:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{3} C v l, \tag{6}$$

где C, v, l – средние значения объемной теплоемкости в расчете на элементарную ячейку, скорости звуковых фононов, длины свободного пробега фононов.

Будем ориентироваться на наполнители, для которых имеются экспериментальные данные по эффективной теплопроводности композитов (рисунок 1) [2].

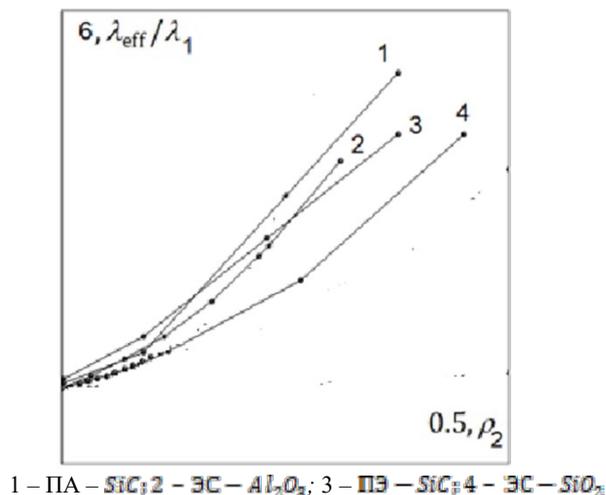


Рисунок 1 – Экспериментальные данные для эффективной теплопроводности

Рассмотрим температурную зависимость коэффициента теплопроводности карбида кремния при высоких температурах. Структуры фаз карбида кальция, которые оказывают существенное влияние на физические свойства кристаллов, достаточно разнообразны. В работе [4] представлены параметры структуры фаз, которые потребуются для определения постоянной Грюнайзена и теплопроводности кристалла.

Основным механизмом переноса тепла в карбиде кальция при высоких температурах является фононный (колебания кристаллической решетки). Для определения коэффициента теплопроводности кристалла применим формулу Лейбфрида – Шлеманна [4; 5]:

$$\kappa = \frac{2kM}{hT} \frac{\gamma^3}{2N}, \tag{7}$$

где k – постоянная Больцмана; h – постоянная Планка; M – средний молекулярный вес, γ – постоянная Грюнайзена; α – постоянная решетки; N – число атомов в элементарной ячейке.

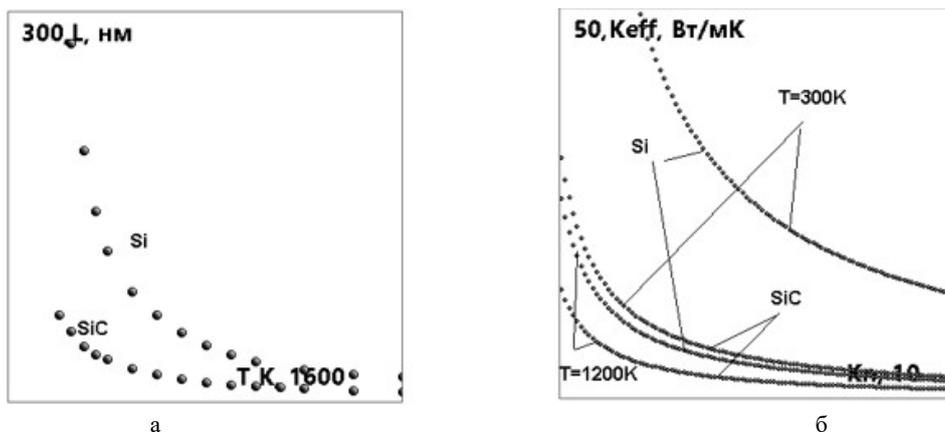


Рисунок 2 – а) зависимости средней длины пробега фононов для кремния и карбида кремния от температуры; б) сравнительные зависимости эффективного коэффициента теплопроводности от критерия Кнудсена при $T = 300\text{ K}$

Оценим длину свободного пробега фононов в кристаллах кремния и карбида кремния, используя экспериментальные данные и выражение (6) (рисунок 2).

Когда рассматриваются размерные эффекты, связанные с теплопроводностью, необходимо уточнение размеров и формы нано-объекта (нано-нити, пленки, нано-трубки).

Для всех этих случаев рассматриваются два механизма переноса теплоты: диффузионный и баллистический. Второй, в свою очередь, предусматривает N-процессы (учитывает взаимодействие фононов с фононами без потери квазиимпульса) и U-процессы (учитывает взаимодействие с границами и дефектами решетки).

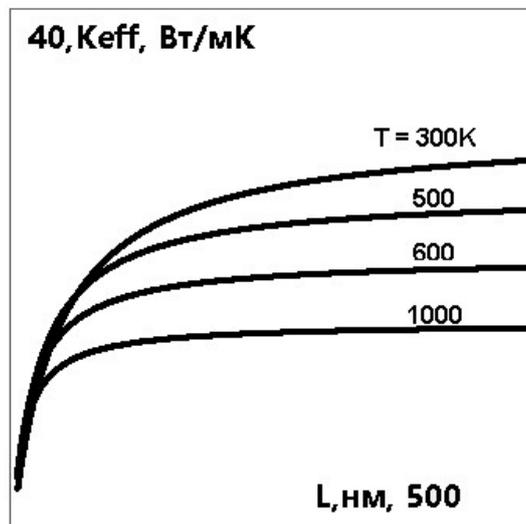


Рисунок 3 – Зависимости эффективного коэффициента теплопроводности карбида кремния от размера частиц

Моделирование этих свойств также должно опираться на экспериментальные данные. Сложность рассматриваемого процесса заключается в необходимости учета большого числа факторов. В частности, теплопроводность карбида кремния при одинаковой температуре в зависимости от структуры, технологии изготовления может меняться от 200 до 30 Вт/мК. Размерные и температурные факторы приводят к необходимости рассматривать большое число механизмов переноса энергии (диффузионный, баллистический, гидродинамический), что значительно усложняет решение проблемы [6].

Список литературы

1. Лиопо, В. А. Определение максимального размера наночастиц / В. А. Лиопо // Вестн. Гродн. гос. ун-та им. Янки Купалы. Сер. 2, Математика. Физика. Информатика. – 2007. – № 1 (48). – С. 50–56.
2. Phonon Boundary Scattering Effect on Thermal Conductivity of Thin Films / J. H. Tang [et al.] // J. Appl. Phys. – 2011. – Vol. 110. – P. 046102.
3. Experiment and simulation of the effective thermal conductivity of composite systems based on polymers / A. V. Nikitin [et al.] // Вестн. Гродн. гос. ун-та им. Янки Купалы. Сер. 2, Математика. Физика. Информатика. Вычислительная техника и управление. – 2019. – Т. 9, № 3. – С. 94–103.
4. Беленков, Е. А. Классификация и структура фаз карбида кремния / Е. А. Беленков, Э. Н. Агалямова, В. А. Грешняков // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54, вып. 2. – С.16–22.
5. Парфенова, И. И. Теплопроводность карбида кремния в области температур 300–3000 К / И. И. Парфенова, Ю. М. Таиров, В. Ф. Цветков // Физика и техника полупроводников. – 1990. – Т. 24, № 2. – С. 258–263.
6. Попов, П. А. Теплопроводность твердотельных материалов на основе неорганических оксидов и фторидов : дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 01.04.07 / П. А. Попов. – Брянск, 2015.

The methods of taking into account the dimensional factor in determining the physical properties of fillers of composite materials are considered.

Чернявская Алеся Владимировна, магистрант 2-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, aonezhina1@gmail.com.

Научный руководитель – Никитин Александр Викторович, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, nik@grsu.by.

С. Г. ШАРИНА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ МАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ В ВЫСОКОГРАДИЕНТНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ МАГНИТОЖИДКОСТНОГО УПЛОТНЕНИЯ ДЛЯ ТРЕУГОЛЬНОГО ПОЛЮСНОГО НАКОНЕЧНИКА

Проведено численное моделирование диффузии магнитных наночастиц в магнитожидконостном уплотнении для полюсного наконечника треугольной формы методом контрольных объемов. Определено время достижения плотной упаковки под полюсным наконечником в зависимости от параметров задачи.

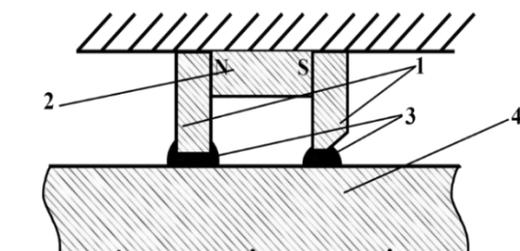
Магнитная жидкость – это уникальное устойчивое двухфазное вещество, сочетающее в себе свойство текучести и способность взаимодействовать с магнитным полем. Все магнитные жидкости состоят из следующих компонентов: жидкость-носитель, магнитные наночастицы из магнетита Fe_3O_4 или феррита Fe_2O_3 и стабилизатор (полимеры или ПАВ).

Физические свойства магнитных жидкостей определяют возможность использования их в технике и технологиях [1]. Одно из главных применений магнитных жидкостей – использование их в качестве рабочей среды в магнитожидконостных уплотнениях (МЖУ). Главной задачей МЖУ является предотвращение утечек жидкости или газа через зазоры механизмов. Конструкция МЖУ представлена на рисунке 1.

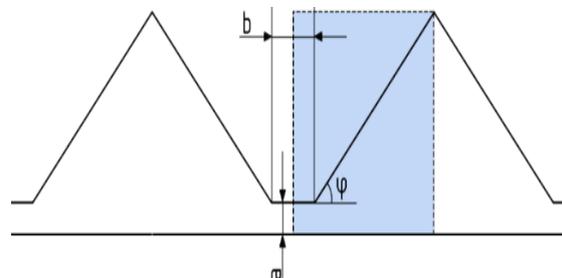
В работе рассматривается МЖУ в стояночном режиме работы [2], то есть вал уплотнения неподвижен. Основной проблемой уплотнений такого типа является то, что магнитная жидкость долгое время находится в неподвижном состоянии в неоднородном магнитном поле. Это может привести к тому, что в зазоре МЖУ может образоваться плотная упаковка частиц. Так же возможно, что жидкость-носитель начнет вытекать.

Основной задачей данной работы является определение времени, за которое магнитная жидкость образует плотную упаковку в зазоре МЖУ с треугольной формой полюсного наконечника. Для решения задачи проведено численное моделирование. Использован авторский код на языке C++.

Геометрия полюсного наконечника магнитожидконостного уплотнения имеет треугольную форму и представлена на рисунке 2. Расчетная область выбрана с учетом симметрии полюса, а на рисунке выделена цветом.



1 – полюсные наконечники;
2 – постоянный магнит;
3 – магнитная жидкость;
4 – вал



a – зазор между полюсным наконечником
и уплотняемым валом;
 b – ширина поверхности полюсного наконечника;
 φ – угол наклона треугольного полюсного наконечника

Рисунок 1 – Схема магнитожидконостного уплотнения

Рисунок 2 – Геометрия полюсного наконечника МЖУ:

Уравнение диффузии с видом коэффициента диффузии (в приближении твердых сфер) для идеальной магнитной жидкости, в которой можно пренебречь диполь-дипольным взаимодействием и силой тяжести [3]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 \nabla \cdot \left[K(c) \left(G(c) \nabla c - c \frac{\mu_0 m_p}{k_B T} \nabla H \right) \right], \quad (1)$$

где D_0 – эйнштейновский коэффициент диффузии для разбавленных растворов, концентрационные функции $K(c) = \frac{1-1.88c}{1+5c}$, $G(c) = 1 + \frac{2c(4-c)}{(1-c)^4}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м – магнитная постоянная, m_p – магнитный момент частицы, $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж · К⁻¹ – постоянная Больцмана, T – температура, H – напряженность магнитного поля.

Граничным условием для данного уравнения на всех границах является равенство потока нулю

$$\mathbf{j} = K(c) \left(G(c) \nabla c - c \frac{\mu_0 m_p}{kT} \nabla H \right) = 0.$$

Напряженность магнитного поля H определяется из уравнений, полученных из уравнений Максвелла:

$$\mathbf{H} = \nabla \varphi, \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0. \quad (2)$$

Граничные условия для потенциала: в силу симметрии задачи на правой и левой границах производная от потенциала по нормали равна нулю $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$, на поверхности полюса $\varphi = 0$, на поверхности вала $\varphi = H_0 a$, где H_0 – напряженность магнитного поля под полюсным наконечником, a – зазор.

Приведем уравнения (1)–(2) к безразмерному виду. Размерные величины через новые безразмерные выражаются следующим образом:

$$x = a\hat{x}, \quad y = a\hat{y}, \quad t = \frac{a^2}{D_0} \hat{t}, \quad H = H_0 \hat{H}, \quad \nabla = \frac{1}{a} \hat{\nabla}.$$

Вид уравнений (2) после обезразмеривания не изменяется. Уравнение диффузии (1) преобразуется к следующему виду (крюшечки над величинами убраны):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (K(c)(G(c)\nabla c - cU\nabla H)), \quad U = \frac{\mu_0 m_p H_0}{k_B T}. \quad (3)$$

Дифференциальные уравнения (2)–(3) дискретизировались в выбранной области методом контрольных объемов на треугольной сетке [4; 5]. Выбор треугольной сетки обусловлен сложной геометрией задачи. Главной идеей метода контрольных объемов является то, что расчетная область разбивается на непересекающиеся контрольные объемы с общими границами. Для уравнения потенциала использовалась линейная интерполяционная функция на треугольном элементе. Уравнение напряженности и градиента напряженности вычислялись с помощью метода обратных расстояний. При дискретизировании нестационарного уравнения диффузии также использовалась линейная интерполяционная функция на треугольном элементе, а для вычисления интегралов использовался метод Симпсона. Для решения уравнения использовалась явная схема:

$$c_i^{s+1} = c_i^s + \sum_{nb} (J_{ab} + J_{bc})^s \frac{\Delta t \cdot 6}{\sum_{nb} \Delta},$$

где J_{ab}, J_{bc} – потоки для интегралов по участкам интегрирования.

Проведено моделирование диффузии магнитных наночастиц в неподвижном МЖУ. На рисунке 3 представлено распределение установившейся концентрации при разных параметрах задачи для большого поля (рисунок 3b) и для меньшего поля (рисунок 3a). Показано, что частицы магнитной жидкости устремляются в область максимального значения поля. Это влечет за собой проблемы в работе МЖУ. Зависимость максимальной концентрации от координаты вдоль вала показана на рисунках 3c и 3d). Видно, что концентрация на краю капли магнитной жидкости при больших полях может стать практически равной нулю. Такое явление приведет к тому, что из магнитной жидкости начнет вытекать жидкость-носитель, и как следствие, это тоже может привести к выходу МЖУ из строя.

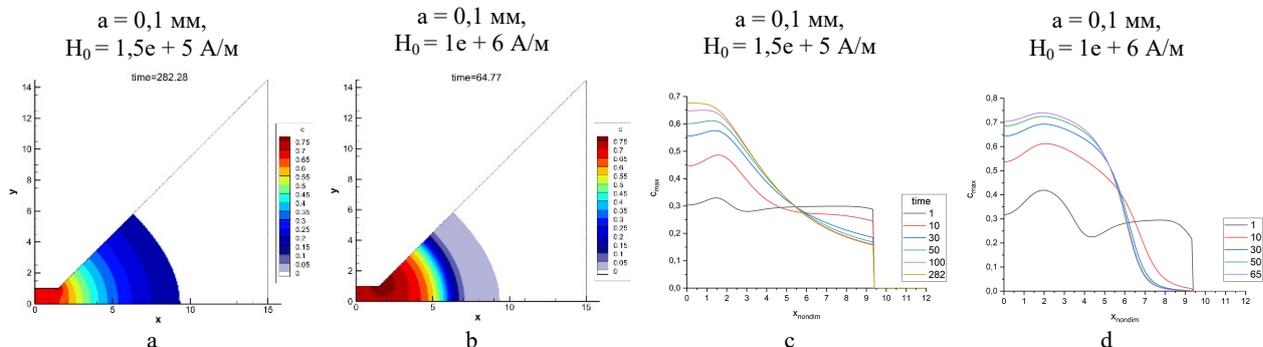


Рисунок 3 – Распределение концентрации и зависимость максимальной концентрации от безразмерной координаты вдоль вала в разные моменты времени при начальной концентрации $c_0 = 0,3$ и разных параметрах

Из зависимости концентрации от напряженности под полюсным наконечником (рисунок 4) видно, что концентрация, соответствующая значению случайной плотной упаковке – 0,64, достигается во всех рассматриваемых зазорах, а концентрация, соответствующая 0,74, – в зазорах до 0,3 мм. Можно сделать вывод, что при очень больших зазорах плотная упаковка не будет достигаться вообще. Однако, такие зазоры в реальных МЖУ использовать не всегда целесообразно, так как удерживаемый уплотнением перепад давления в этом случае мал.

Критическое значение напряженности, при котором достигается плотная упаковка частиц, с увеличением размера зазора увеличивается, что показано на рисунке 5. При напряженностях меньше критической плотная упаковка не достигается, и такие МЖУ могут работать бесконечно долго.

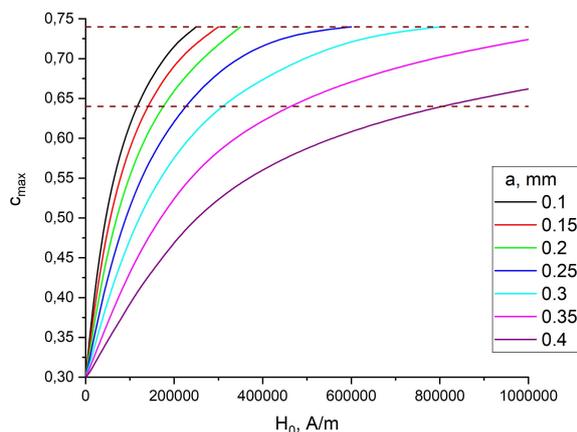


Рисунок 4 – Зависимость концентрации от напряжённости магнитного поля под полюсным наконечником при разных размерах зазора

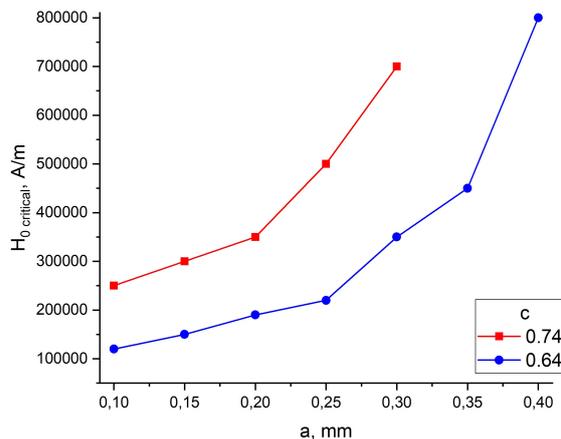


Рисунок 5 – Зависимость критической напряжённости от размера зазора для разных значений концентрации плотных упаковок

Зависимость времени достижения плотных упаковок от напряженности магнитного поля под полюсным наконечником (рисунок 6) показывает, что время достижения значения концентрации 0,64 и 0,74 с увеличением поля уменьшается. При этом, чем больше размер зазора, тем больше время, за которое частицы достигают плотной упаковки.

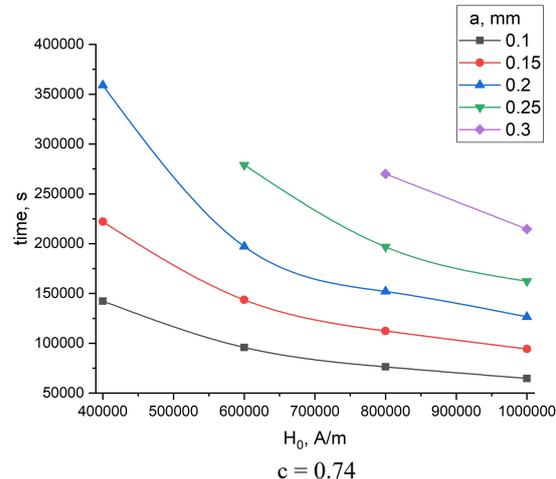
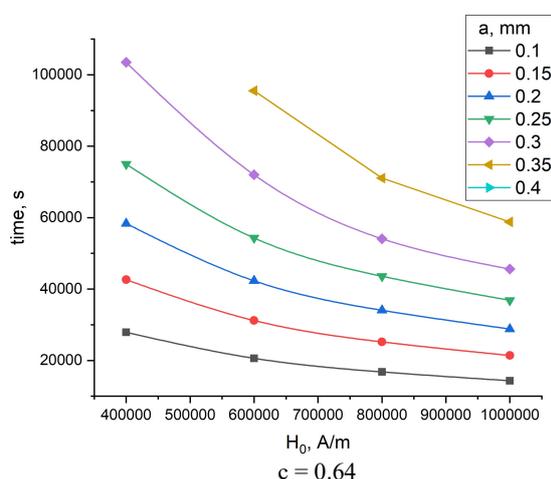


Рисунок 6 – Зависимость времени от напряжённости магнитного поля при разных размерах зазора

Список литературы

1. Kole, M. Madhusree Engineering applications of ferrofluids: A review. / M. Kole, S. Khandekar // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – June 2021.
2. Берковский, Б. М. Магнитные жидкости / Б. М. Берковский, В. Ф. Медведев, М. С. Краков // Химия. – 1989. – С. 240.
3. Pshenichnikov, A. F. Magnetophoresis, sedimentation, and diffusion of particles in concentrated magnetic fluids / A. F. Pshenichnikov, E. A. Elfimova, A. O. Ivanov // J. Chem. Phys. – 2011. – Vol. 134 (18). – P. 184508.

4. Krakov, M. S. Control volume finite-element method for Navier-Stokes equations in vortex-streamfunction formulation / M. S. Krakov // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals. – 1992. – Vol. 21, no. 2. – P. 125–145.
5. Patankar, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow / S. V. Patankar // Hemisphere Publishing Corporation – 1980. – P. 1–197.

A numerical simulation of the diffusion of magnetic nanoparticles in a magnetic fluid seal for a triangular pole piece using the volume control method has been carried out in this work. The influence of various parameters of the problem on the time to achieve close packing of particles under the pole piece is considered.

Шарина Софья Григорьевна, аспирант физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, sonia-sharina@yandex.ru.

Научный руководитель – *Краков Михаил Самуилович*, доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Энергосбережение и возобновляемые источники энергии», Белорусский национальный технический университет, Минск, Республика Беларусь, mskrakov@gmail.com.

УДК 533.9.924:621.793.18

В. В. ШЕКЕЛЕВСКИЙ

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ОЦЕНКИ ПРОФИЛЯ ВЫРАБОТКИ МИШЕНИ МАГНЕТРОННОЙ РАСПЫЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

Представлена методика расчета пространственного распределения электронов в магнитной ловушке магнетронной распылительной системы с использованием метода Монте-Карло для заряженных частиц, исходя из которого оценивается профиль выработки мишени.

В современной промышленности при производстве микро-, нано- и оптоэлектроники с использованием тонкопленочных покрытий наиболее часто используется метод магнетронного распыления. Несмотря на широкое распространение этого метода, в настоящее время актуальна разработка методов для определения равномерности формирования покрытий на основе количественной оценки эффектов и процессов, связанных с магнетронным распылением и конденсацией на подложке.

Магнетронное распылительное устройство состоит из системы электродов, магнитной системы, системы охлаждения и газораспределительной системы. Система электродов необходима для создания разности потенциалов, магнитная система – для создания магнитной ловушки, охлаждающая система – для предотвращения перегрева магнитной системы и других элементов конструкции, а газораспределительная система – для подачи рабочего вещества в зону разряда.

В магнитной системе, магнитные силовые линии проходят между полюсами над поверхностью мишени, образуя аркообразную магнитную ловушку. Это замкнутое магнитное поле позволяет сосредоточить плазму рядом с мишенью, где ионы, образующие плазму, распыляют мишень [1].

Магнитная ловушка создает неравномерное распределение ионизированных атомов рабочего газа, изменяя траектории электронов, движущихся от катода к аноду. Эти ионы ускоряются электрическим потенциалом к поверхности мишени и распыляют ее. Зная распределение электронов, которые ионизируют рабочий газ над поверхностью мишени, можно оценить профиль распыления мишени и далее рассчитать неравномерность осаждения покрытия на подложке.

Определение пространственного распределения электронов в области над мишенью сводится к решению дифференциального уравнения второго порядка в декартовых координатах при учете действия силы Лоренца и электростатической силы со стороны магнитной и электрической систем.

Уравнение движения определяется следующим выражением:

$$m \cdot \ddot{\mathbf{a}} = q(\dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{B}) + q \cdot \mathbf{E} \quad (1)$$

где m – масса частицы, кг; \mathbf{a} – ускорение, м/с²; q – заряд, Кл; \mathbf{v} – скорость, м/с; \mathbf{B} – индукция магнитного поля, Тл; \mathbf{E} – напряженность электрического поля, В/м.

Для решения этого уравнения в декартовых координатах необходимо разбить на систему из трех уравнений для нахождения проекции вектора скорости на каждую из осей:

$$\begin{cases} mv'_x = q(v_y B_z - v_z B_y + E_x) \\ mv'_y = q(v_z B_x - v_x B_z + E_y) \\ mv'_z = q(v_x B_y - v_y B_x + E_z) \end{cases} \quad (2)$$

Пример решения первой строки этого уравнения методом Эйлера:

$$\begin{aligned} v'_x &= \left(\frac{dx}{dt}\right)' \\ mv'_x &= q(v_y B_z - v_z B_y + E_x) \\ \frac{dv_x}{dt} &= \frac{q(v_y B_z - v_z B_y + E_x)}{m} \end{aligned} \quad (3)$$

dy , dz находятся аналогично.

В нашем случае используется усложненный вариант метода Эйлера, имеющий название метод Рунге – Кутты – Фельдберга, обеспечивающий 5 порядок точности в отличии от метода Эйлера, который обеспечивает лишь 2 порядок точности.

Для решения данной системы уравнений ключевым является определение магнитной индукции и напряженности электростатического поля в точке, где находится частица. В нашем случае для определения магнитной индукции использовался аналитический метод решения для цилиндрического магнита, описанный в работе [2]. Электростатическое поле рассчитывается с помощью метода эквивалентных зарядов [3].

В нашем случае используются аналитические подходы к расчету электрического и магнитного полей по причине непрерывности и гладкости исходных функций для вычисления получаемых полей в пространстве над мишенью, что положительно сказывается на точности вычисления уравнения 1, которое сильно чувствительно к небольшим изменениям входных параметров.

Для учета влияния давления на движение электронов использовалась вероятностная модель, основанная на оценке длины свободного пробега для твердых сфер.

На каждом шаге вычисления значение скорости частицы подставляется в уравнение вероятности рассеяния и с помощью генератора случайных величин определяется, будет ли меняться направление частицы. Новое направление движения выбирается случайно с одинаковым шансом для любого направления.

Для решения данной задачи нами была написана программа с использованием языка программирования Python 3.10 и сторонними бесплатными библиотеками для этого языка, необходимыми для ускорения расчетов.

Программа включает в себя ряд функций последовательно вычисляющих электростатическое и магнитное поля, решает уравнение движения для электронов в этих полях, а также учитывает рассеяние частиц на рабочем газе и определяет пространственное распределение частиц в определенный момент времени.

Результат вычисления электростатического и магнитного полей сверялся с Comsol Multiphysics, помимо этого были проведены экспериментальные измерения магнитного поля над мишенью магнетрона.

Расчеты проводились для круглого магнетрона диаметром 80 мм внешний вид которого представлен на рисунке 1. Рабочее давление порядка 0,15 Па. Потенциал катода – 450 В, ионный источник в качестве анода заземлен.

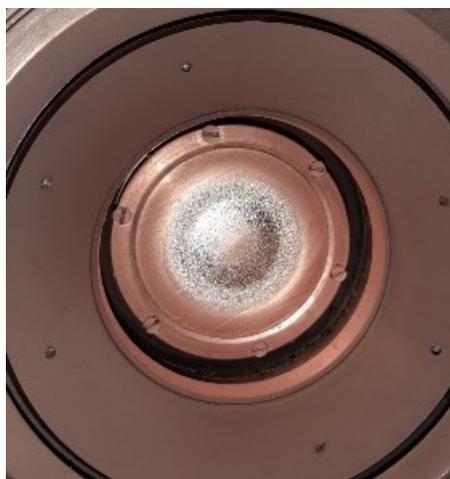


Рисунок 1 – Внешний вид системы в установке с частично расплывённой мишенью из меди

На рисунке 2 представлен результат расчета распределения индукции магнитного поля в нашей программе для представленного магнетрона.

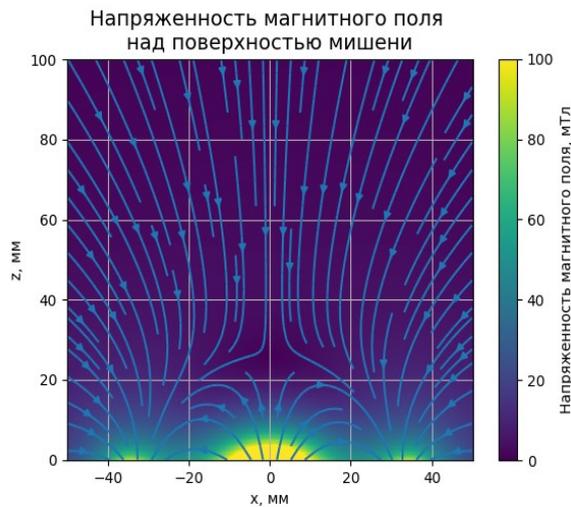


Рисунок 2 – Визуализация результатов расчёта распределения индукции магнитного поля над поверхностью мишени в нашей программе

При решении уравнения движения для множества электронов имеется возможность собрать статистику о пространственном расположении частиц в конкретный момент времени. Для этого пространство в заданной плоскости разбивается на небольшие объемы и производится определение, в каком объеме находится электрон. Суммируя значения числа электронов в ячейках по вертикали, можно оценить профиль эрозии мишени.

На рисунке 3 представлены рассчитанные нормированные профили эрозии мишени для разного давления и сравнение с экспериментом, где контур зоны эрозии на экспериментальном образце оцифровывался с помощью фотосъемки. Давлению в 0 Па соответствует случай без учета рассеяния на рабочем газе.

Сравнение рассчитанного профиля для давления 0,15 Па и экспериментального показывает высокую степень соответствия с погрешностью менее 10 %. Следует отметить, что мишень расплывалась при разных рабочих параметрах, поэтому профиль эрозии является усредненным.

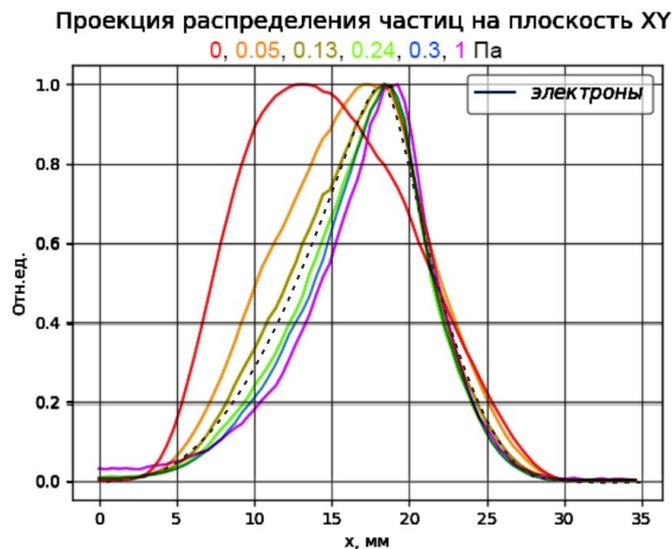


Рисунок 3 – Рассчитанные профили эрозии мишени для разного давления и сравнение с экспериментом (чёрная штриховая линия соответствует экспериментальной кривой)

Таким образом, показана методика оценки профиля эрозии мишени в магнетронной распылительной системе с помощью численных расчетов с использованием метода Монте-Карло. Полученный профиль зоны эрозии позволяет, используя законы распределения распыляемых атомов, получить распределение потока распыленных частиц на подложке, что является важным при решении прикладных задач.

Список литературы

1. Данилин, Б. С. Магнетронные распылительные системы / Б. С. Данилин, В. К. Сырчин. – М. : Радио и связь. – 1982. – 72 с.
2. Derby, N. A. Cylindrical magnets and ideal solenoids / N. Derby, S. Olbert // Am. J. Phys. – 2010. – Vol. 78. – 229 p.
3. Усачев, А. Е. Методы расчета электрических полей : учеб. пособие / А. Е. Усачев. – Казань : Казан. гос. энергетический. ун-т, 2013. – 97 с.

A technique for estimating the erosion profile of a target in a magnetron sputtering system using numerical calculations using the Monte-Carlo method is shown. The obtained profile of the erosion zone makes it possible, using the laws of distribution of sputtered atoms, to calculate the distribution of the flux of sputtered particles on the substrate, which is important in solving applied problems.

Шекелевский Вадим Владимирович, аспирант 1-го курса факультета радиотехники и электроники, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, ivadim2703@gmail.com.

Научный руководитель – *Котов Дмитрий Анатольевич*, кандидат технических наук, доцент кафедры микро- и наноэлектроники, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, kotov@bsuir.by.

УДК 535.391:621.376

С. В. ШИМАНЧУК

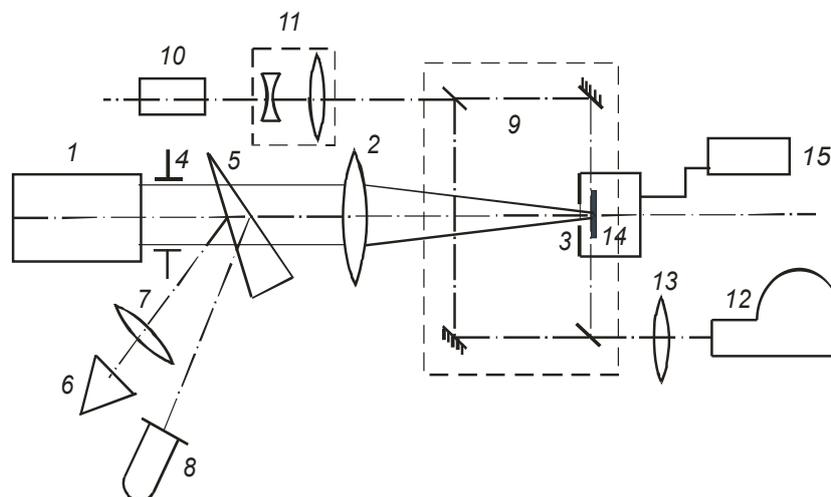
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЕЙ ПЛОТНОСТИ ВОЗДУХА ПЕРЕД МИШЕНЬЮ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ МАТЕРИАЛОВ

Исследуется воздействие лазерного излучения умеренной интенсивности на образцы из полиметилметакрилата в условиях, не приводящих к плазмообразованию, при атмосферном давлении воздуха через некоторое время после начала лазерного воздействия, а также нахождения плотности воздуха возле образца.

В качестве воздействующего лазера использовался лазер ГОР-100М, работавший в режиме свободной генерации.

В качестве прозрачного диэлектрика был выбран полиметилметакрилат (ПММА), широко применяемый в обычной и лазерной оптике, в частности, при создании твердотельных лазеров на красителях, просветляющихся фильтров и оптических элементов для лазерных офтальмологических приборов.

Необходимым условием распространения тепла в сплошной среде является неравномерность распределения температуры в рассматриваемой среде.



- 1 – рубиновый лазер ГОР-100М; 2 – фокусирующая система;
 3 – исследуемый образец; 4 – диафрагма; 5 – светоделительный клин; 6 – измеритель энергии ИМО-2Н;
 7 – линза; 8 – коаксиальный элемент ФЭК-14; 9 – интерферометр Маха – Цендера;
 10 – зондирующий рубиновый лазер; 11 – телескопическая система; 12 – камера СФР-1М;
 13 – объектив; 14 – вакуумная камера; 15 – вакуумный измеритель ВИТ-2

Рисунок 1 – Схема экспериментальной установки

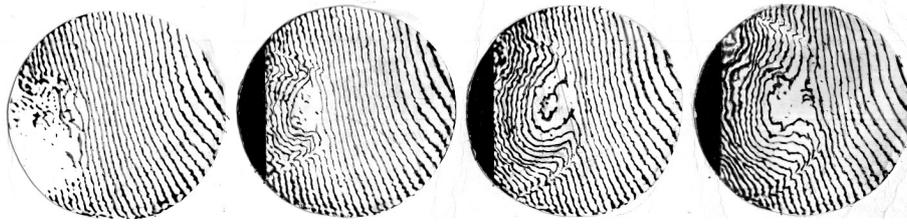


Рисунок 2 – Интерферограммы

Наличие светлых и темных полос обусловлено сдвигом фаз между световой волной, прошедшей через объект (плазменное облако), и опорной волной (волной сравнения). Указанный фазовый сдвиг равен:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \left[\int n(\vec{r}) dl \frac{\vec{k}}{k} - n_0 L \right], \quad (1)$$

где n_0 – показатель преломления невозмущенной среды в опорном плече интерферометра, L – длина опорного плеча, $n(\vec{r})$ – показатель преломления среды в точке \vec{r} , \vec{k} – волновой вектор; интеграл берется вдоль реальной траектории луча, прошедшего объектное плечо интерферометра.

В нашем случае отклонения и смещения луча в пределах неоднородности незначительны. Поэтому интегрирование по точной траектории луча с учетом указанной допустимой погрешности измерений (10 %) можно заменить интегрированием по прямой, совпадающей с оптической осью объектного плеча интерферометра x . Поскольку в рассматриваемом случае плазменное облако имеет ось симметрии z , координатная зависимость показателя преломления имеет вид $n(z, \rho)$, где

$$\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}.$$

В этом случае формула (1) преобразуется к виду

$$\Delta\phi(z, y) = \frac{4\pi}{\lambda} \int_{|y|}^R [n(z, \rho) - n_0] \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 - y^2}} d\rho. \quad (2)$$

Это уравнение Абеля, имеющее решение

$$n(z, \rho) = n_0 - \frac{\lambda}{2\pi^2} \int_{\rho}^R \frac{d\Delta\phi(z, y)}{dy} \frac{dy}{\sqrt{y^2 - \rho^2}}.$$

Здесь R – размер плазменного облака вдоль оптической оси объектного плеча интерферометра.

В результате плотность мы находим по формуле:

$$\frac{n-1}{\rho} = \frac{3}{2} K.$$

Список литературы

1. Иванов, А. Ю. Акустическая диагностика лазерной обработки материалов / А. Ю. Иванов // Воздействие на металлы высокоэнергетических импульсов излучения неодимового лазера различной формы. – 2011.
2. Васильев, С. В. Топография кратера, возникающего при действии лазерного импульса на поверхность металла / С. В. Васильев, А. Ю. Иванов, А. М. Ляликов // Квантовая электроника. – 1995. – Т. 22, вып. 8. – С. 830–834.
3. Аbruков, С. А. Теневые и интерференционные методы исследования оптических неоднородностей : учеб. пособие / С. А. Аbruков. – Казань : Изд-во Казан. ун-та, 1962. – 83 с.

Шиманчук Сергей Владимирович, студент 4-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, barlog2508@gmail.com.

Научный руководитель – *Иванов Алексей Юрьевич*, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики и теплотехники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, a.ivanov@grsu.by.

УДК 004.457

В. А. ЯРОХОВИЧ, М. О. БОЧКО
**МОБИЛЬНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ
 ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ УСТРОЙСТВАМИ УМНОГО ДОМА ЯНДЕКС**

Представлены результаты изучения концепции управления умным домом Яндекс. Для использования API платформы изучен протокол программного управления устройствами, вопросы получения доступа и авторизации для формирования запросов к API платформе умного дома. Сделан выбор языков и сред программирования для создания тестового программного обеспечения приложения «Smart home», разработан дизайн и написано программное обеспечение приложения.

Платформа умного дома Яндекс (далее – платформа умного дома) позволяет управлять умными устройствами различных производителей через:

- голосового помощника Алису;
- приложение Яндекс.

С помощью платформы умного дома эти сервисы могут:

- получать информацию о типах устройств пользователя;
- получать информацию о состоянии устройств пользователя;
- отправлять команды устройствам пользователя.

Платформа умного дома также может принимать уведомления об изменении состояния устройств производителей и предоставляет API для программного управления устройствами.

Объект Устройство (device) описывает умное устройство, как реальное, так и виртуальное, созданное пользователем. Каждое устройство обязательно имеет тип, а также одну из сущностей: набор умений (минимально устройство описывается одним умением) или свойства. Опционально у устройства могут быть обе сущности [1].

Платформа умного дома помогает объединять устройства от различных производителей в одну экосистему, которая обладает дружелюбным голосовым интерфейсом. Производителю достаточно поддержать открытый протокол управления устройствами на стороне своего сервиса и создать навык умного дома в Яндекс Диалогах.

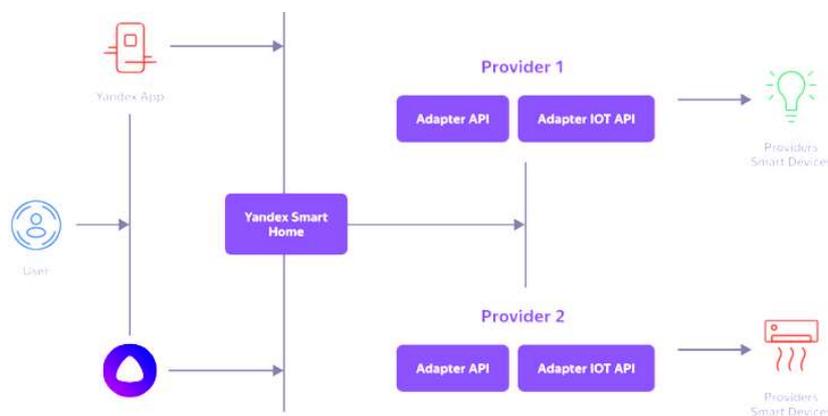


Рисунок 1 – Схема работы [1]

React Native – это платформа для разработки мобильных приложений с открытым кодом, созданная Facebook. Она используется для разработки приложений для Android, iOS, Интернета и UWP (Windows). Решение предоставляет собственные элементы управления пользовательского интерфейса и полный доступ к собственной платформе.

React Native имеет встроенный интерфейс командной строки, который можно использовать для создания нового проекта. Можно получить к нему доступ, не устанавливая ничего глобально, используя менеджер, который поставляется с Node.js [2].

Понадобится устройство Android для запуска приложения. Это может быть либо физическое устройство Android, либо возможно использовать виртуальное устройство Android, которое позволяет эмулировать устройство Android на компьютере.

В любом случае, нужно будет подготовить устройство к запуску приложений Android для разработки. Если есть физическое устройство Android, можно использовать его для разработки вместо AVD, подключив его к компьютеру с помощью USB-кабеля [3].

Во-первых, нужно будет запустить Metro, пакет JavaScript, который поставляется с React Native. Metro «принимает входной файл и различные параметры и возвращает один файл JavaScript, который включает в себя весь код пользователя и его зависимости».

Чтобы запустить Metro Bundler, нужно выполнить команду в папке проекта React Native:

npm react-native start

Metro Bundler работает в собственном терминале. Нужно открыть новый терминал в папке проекта React Native. Выполнить следующие действия:

npm react-native run-android

Если все настроено правильно, можно будет увидеть новое приложение, работающее в эмуляторе Android [4]. Для добавления страниц в приложение пропишем их в файле App.js. Затем укажем, чтобы при первом запуске пользователь попадал на страницу авторизации Яндекс.

Если пользователь уже авторизован, то приложение сразу откроется на странице с подключенными устройствами. На данной странице сделаем управление умными устройствами.

Для теста используем микроконтроллер ESP8266 с поддержкой Wi-Fi и подключим к нему нагрузку.

Подключившись к Wi-Fi и платформе Яндекс, мы можем управлять устройством с помощью созданного приложения.



Рисунок 2 – Экран приложения

Список литературы

1. Об умном доме Яндекс [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://yandex.ru/dev/dialogs/smart-home/doc/about.html>. – Дата доступа: 09.12.2022.
2. Общие сведения о React [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://learn.microsoft.com/ru-ru/windows/dev-environment/javascript/react-overview>. – Дата доступа: 09.12.2022.
3. Обучение React [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://learn.microsoft.com/ru-ru/training/paths/react>. – Дата доступа: 09.12.2022.
4. Настройка среды разработки React Native [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://reactnative.dev/docs/environment-setup>. – Дата доступа: 09.12.2022.
5. Официальная документация по React [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://reactjs.org>. – Дата доступа: 09.12.2022.

This article describes the Yandex smart home device management platform and. An application for managing smart home devices has been developed. The possibilities of creating applications on the react native platform are considered.

Ярохович Вадим Александрович, студент 4-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, vadim.iarokhovich@mail.ru.

Бочко Максим Олегович, студент 4-го курса физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, gugdunoff@gmail.com.

Научный руководитель – *Герман Андрей Евгеньевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой электротехники и электроники физико-технического факультета, Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, Гродно, Республика Беларусь, german@grsu.by.