ISSN 2077-3110

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXIII Международного семинара

Воронеж 2022

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российская академия наук

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Воронежский государственный технический университет»

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Институт проблем химической физики РАН»

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXIII Международного семинара
(г. Воронеж, 26-27 ноября 2021 г.)

Воронеж 2022

УДК 53.072:519.673(06)
ББК 22.1я4
Ф503

Ф503 **Физико-математическое моделирование систем**: материалы XXIII Международного семинара / отв. ред. И. Л. Батаронов; ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет». – Воронеж: Изд-во ВГТУ, 2022. – 163 с.

В сборнике представлены работы, посвященные физико-математическому моделированию систем многих частиц, конденсированных сред и технических объектов, а также математическому, программному и методическому обеспечению систем компьютерного моделирования.

УДК 53.072:519.673(06)
ББК 22.1я4

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Батаронов И. Л. (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *председатель*
Шунин Г. Е. (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *сопредседатель*
Кострюков С. А. (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *ученый секретарь*
Селиванов В. Ф. (ВГТУ, г. Воронеж, Россия)
Пашуева И. М. (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *секретарь*
Пешков В. В. (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *ответственный секретарь*

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Боженко К. В. (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия), *председатель*
Кургалин С. Д. (ВГУ, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*
Нечаев В. Н. (ВУНЦ ВВС «ВВА», г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*
Андреева Е. Г. (ОмГТУ, г. Омск, Россия)
Баткин И. С. (университет г. Оттава, Канада)
Болдырев А. И. (университет шт. Юта, США)
Гехман А. Е. (ИОНХ РАН, г. Москва, Россия)
Глазнев В. Н. (ВГУ, г. Воронеж, Россия)
Гречихин В. В. (ЮРГПУ(НПИ), г. Новочеркасск, Россия)
Григорьев Е. Г. (НИЯУ МИФИ, г. Москва, Россия)
Зеббар Дж. (Университетский Центр г. Тиссемсильта, Алжир)
Зюбин А. С. (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия)
Князев С. Ю. (ДГТУ, г. Ростов-на-Дону, Россия)
Курганский С. И. (ВГУ, г. Воронеж, Россия)
Мебель А. М. (университет Флориды, г. Майами, США)
Пашковский А. В. (НТИ (филиал) СКФУ, г. Невинномысск, Россия)
Смирнов Ю. Г. (УГТУ, г. Ухта, Россия)
Чувильский Ю. М. (МГУ, г. Москва, Россия)
Шунина В. А. (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *ученый секретарь*

Редакционная коллегия

Научные редакторы: Батаронов И. Л., Нечаев В. Н., Шунин Г. Е.
Технические редакторы: Кострюков С. А., Пешков В. В., Шунина В. А.

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Воронежского государственного технического университета

© ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2022

УДК 539:519.517.3

ВЛИЯНИЕ ПЕРЕМЕННОЙ АМПЛИТУДЫ И МОДУЛЯЦИИ НА КУБИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛЯ ДЕФОРМАЦИИ ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ

О.П. Абрамова

Донецкий национальный университет
oabramova@ua.fm

Аннотация: методом численного моделирования исследовано влияние переменной амплитуды и модуляции фрактального индекса на кубитные состояния поля деформации отдельной фрактальной структуры. Показано, что эффективное затухание функции смещения локализовано в виде стохастических колец. Модуляция фрактального индекса приводит к появлению полос у реальной части и тонкой структуры у мнимой части функции смещения различных кубитных состояний.

Ключевые слова: фрактальная структура, кубитные состояния, переменная амплитуда функции смещения, модуляция фрактального индекса, поле деформации.

Введение

При создании квантовых компьютеров возникают задачи о передаче, обработке, хранения информационных данных. В качестве элементной базы выступают различные наноструктуры и метаматериалы [1-3]. Запись информации часто выполняют на основе кубитов [4]. В работах [5, 6] описание комплексного поля деформации модельных фрактальных связанных структур было выполнено на основе различных кубитных состояний отдельных структур типа кругового и эллиптического цилиндров. Отличительной особенностью поведения поля деформации таких связанных структур является наличие кубитных состояний, для которых отсутствует затухание [7, 8]. Было показано, что такие состояния могут быть ячейками памяти. В работах [5-8] при описании поля деформации отдельной структуры моделирование функции смещения осуществлялось с постоянной амплитудой. Однако, использование наноструктур и метаматериалов с объемной структурой приводит к появлению переменных амплитуд комплексной функции смещения в отдельных плоскостях. В результате итерационного процесса элементы матриц становятся случайными (появляется квантовый хаос [9]). Возникает необходимость учета упорядочения отдельных операторов полей деформаций [5-8] при описании различных кубитных состояний. Для осуществления внешнего управления полем деформации отдельной структуры используют различные модуляционные методы [1]. При этом возникает задача о влиянии таких модуляционных методов на кубитные состояния отдельной структуры.

Целью данной работы является исследование влияния переменной амплитуды и модуляции на кубитные состояния поля деформирмации отдельной фрактальной структуры.

Кубитные состояния поля деформации фрактальной структуры

В работах [5-8] при моделировании безразмерной комплексной функции смещения u фрактальных структур использовалась функция

$$u = k_u^2(1 - 2\,\mathrm{sn}^2(u - u_0, k'_u)) \qquad (1)$$

с постоянной амплитудой 2 перед функцией эллиптического синуса.

В данной работе будем рассматривать фрактальные структуры, которые характеризуются переменной амплитудой $2(k'_u)^2$ в функции смещения u, и исследовать ее влияние на различные кубитные состояния поля деформации.

Модельная фрактальная структура представляет собой круговой цилиндр, находящийся в объемной дискретной решетке $N_1 \times N_2 \times N_3$, узлы которой задаются целыми числами n, m, j. Нелинейные уравнения для безразмерной комплексной функции смещения u узла решетки запишем в виде

$$u = k_u^2(1 - 2(k'_u)^2\,\mathrm{sn}^2(u - u_0, k'_u))\,; \qquad (2)$$

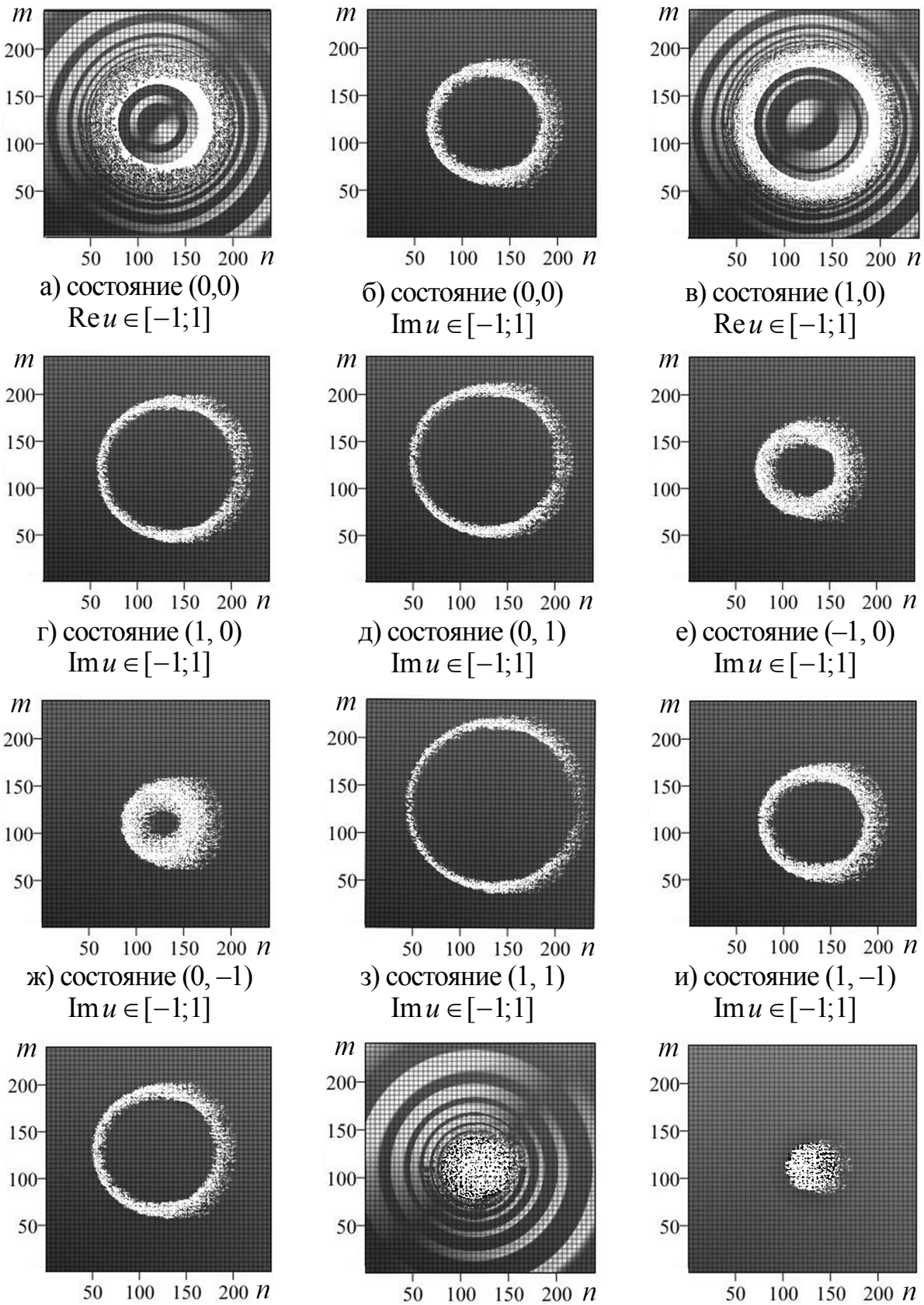
$$k_u^2 = (1-\alpha)/Q\,; \quad k'_u = (1 - k_u^2)^{1/2}\,; \quad p = p_0 + p_1 n + p_2 m + p_3 j\,; \qquad (3)$$

$$Q = p - b_1(n - n_0)^2 / n_c^2 - b_2(m - m_0)^2 / m_c^2 - b_3(j - j_0)^2 / j_c^2\,. \qquad (4)$$

Здесь α – фрактальная размерность поля деформации u вдоль оси Oz ($\alpha \in [0, 1]$); u_0– постоянное (критическое) смещение; модули k_u, k'_u являются функциями от индексов n, m, j узлов решетки. Фрактальный круговой цилиндр характеризуется параметрами: p_0, p_1, p_2, p_3, b_1, b_2, b_3, n_0, n_c, m_0, m_c, j_0, j_c. В нашей модели выбор различных состояний кубитов в плоскости nOm определяется ненулевыми коэффициентами при линейных слагаемых в функциях p, Q из (3), (4). В работе [5, 6] было введено начальное состояние (0, 0) фрактальной структуры – состояние с нулевыми коэффициентами $p_1 = 0$, $p_2 = 0$. Базисные состояния кубитов определены как: (1, 0) – $p_1 = 0.00423$, $p_2 = 0$; (0, 1) – $p_1 = 0$, $p_2 = 0.00572$; (–1, 0) – $p_1 = -0.00423$, $p_2 = 0$; (0, –1) – $p_1 = 0$, $p_2 = -0.00572$. Суперпозиционные состояния кубитов: (1, 1) – $p_1 = 0.00423$, $p_2 = 0.00572$; (1, –1) – $p_1 = 0.00423$, $p_2 = -0.00572$; (–1, 1) – $p_1 = -0.00423$, $p_2 = 0.00572$; (–1, –1) – $p_1 = -0.00423$, $p_2 = -0.00572$.

При численном моделировании полагалось, что N_1=240, N_2=240, u_0=29.537, p_0=1.0423, $b_1 = b_2 = 1$, $n_0 = 121.1471$, $m_0 = 120.3267$, j_0= 31.5279, $j_c = 11.8247$, $b_3 = 0$; значения полуосей кругового цилиндра $n_c = m_c = 57.4327$.

Решение нелинейных уравнений (2) – (3) осуществлялось методом итераций по переменной n. Фрактальная размерность поля деформации u вдоль оси Oz принимала значение $\alpha = 0.5$ (рис. 1). Так для $\mathrm{Re}\,u$ (рис. 1 а) кубитного состояния (0, 0), (рис. 1 в) кубитного состояния (1, 0) характерно регулярное поведение внутренней области типа мембраны вогнутой (выпуклой), а для границы характерно стохастическое поведение. Во внешней области наблюдается волнообразное поведение.



а) состояние (0,0) $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$

б) состояние (0,0) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

в) состояние (1,0) $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$

г) состояние (1, 0) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

д) состояние (0, 1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

е) состояние (–1, 0) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

ж) состояние (0, –1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

з) состояние (1, 1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

и) состояние (1, –1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

к) состояние (–1, 1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

л) состояние (–1, –1) $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$

м) состояние (–1, –1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

Рис. 1. Кубитные состояния поля деформации в круговой цилиндрической структуре. Поведение сечений $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$, $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$ (вид сверху) при $\alpha = 0.5$

На рис. 1 л представлена $\mathrm{Re}\,u$ для суперпозиционного состояния (–1, –1), для которого поведение внутренней области является существенно стохастическим, а во внешней области наблюдается регулярное волнообразное поведение. Для всех состояний кубитов характерно наличие мнимой части безразмерной функции смещения $\mathrm{Im}\,u$, что свидетельствует о наличии эффективного затухания. Это затухание локализовано в области стохастических колец. Радиусы, толщины, расположение этих колец существенно зависят от кубитных состояний поля деформации (рис. 1 б, г, д, е, ж, з, и, к). Для суперпозиционного состояния (–1, –1) затухание локализовано во всей стохастической области (рис. 1 м).

Далее рассмотрим влияние модуляции фрактальной размерности α на кубитные состояния поля деформации u. Исследуем синусоидальный закон изменения $\alpha = \sin\varphi$, где угол $\varphi = 6\pi(n-1)/39$ зависит от индекса n узла решетки (рис. 2). Так для $\mathrm{Re}\,u$ (рис. 2 а) кубитного состояния (0, 0), (рис. 2 в) кубитного состояния (1, 0), (рис. 2 л) суперпозиционного состояния (–1, –1) характерно появление во внутренней области регулярных вертикальных полос (параллельных оси Om), а для границы характерно стохастическое кольцеобразное поведение.

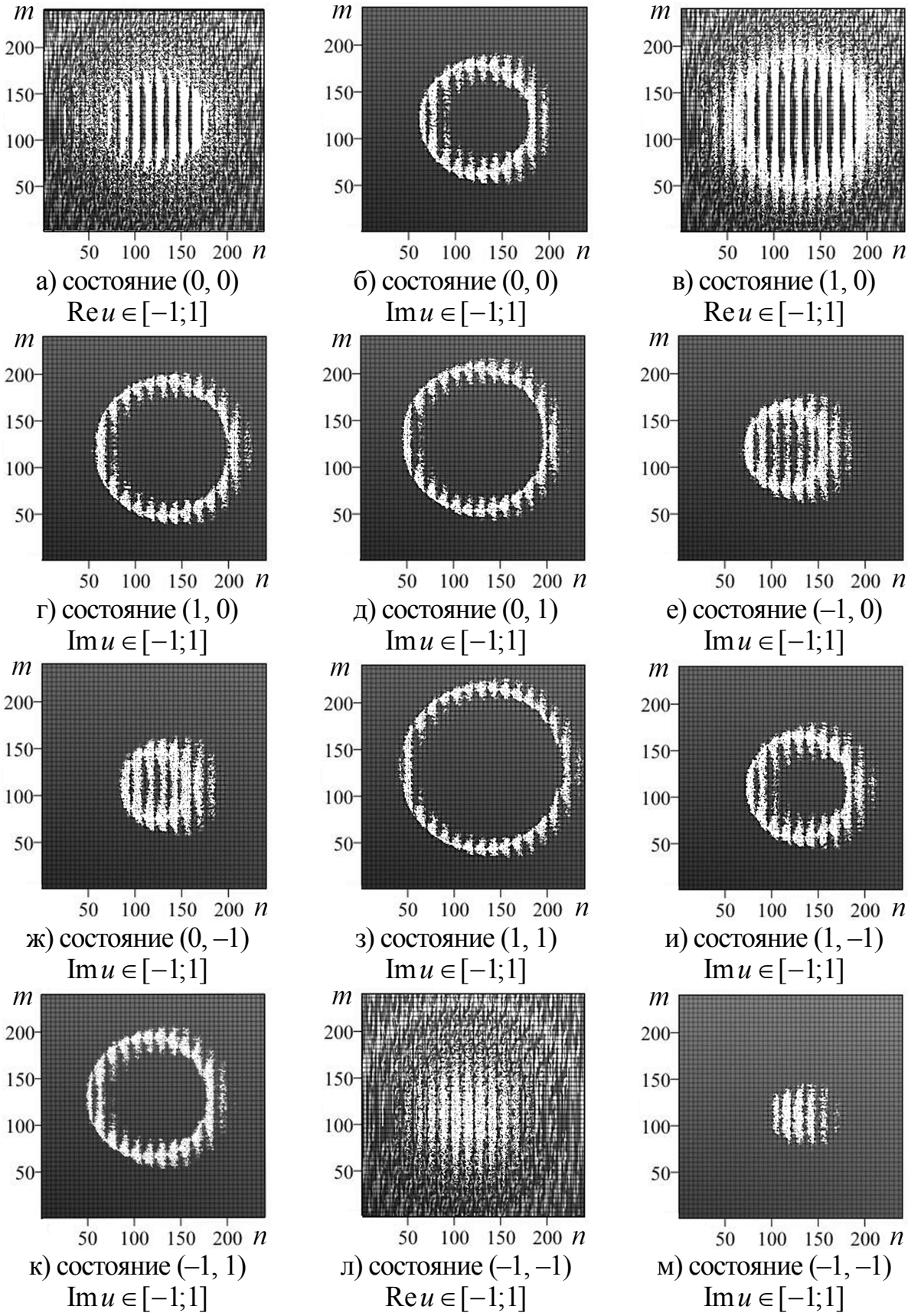
Для мнимой части безразмерной функции смещения $\mathrm{Im}\,u$ наличие синусоидальной модуляции приводит к появлению тонкой структуры у стохастических колец (рис. 2 б, г, д, з, и, к) и стохастических областей (рис. 2 е, ж, м). Тонкая структура зависит от кубитных состояний.

Если реализован синусоидальный закон изменения $\alpha = \sin\varphi$, где угол $\varphi = 6\pi(m-1)/39$ зависит от индекса m узла решетки, то тонкая структура будет представлять собой горизонтальные полосы, параллельные оси On. Отсюда следует возможность управления эффектом затухания с помощью модуляции фрактального индекса α.

Выводы

Показано, что наличие переменной амплитуды функции смещения отдельной структуры приводит к следующим особенностям поведения. Для $\mathrm{Re}\,u$ наблюдается регулярное поведение внутренней области типа мембраны вогнутой (выпуклой), для границы – стохастическое поведение, во внешней области – волнообразное поведение. Для всех состояний кубитов характерно наличие мнимой части безразмерной функции смещения $\mathrm{Im}\,u$, что свидетельствует о наличие эффективного затухания. Это затухание локализовано в области стохастических колец. Радиусы, толщины, расположение этих колец существенно зависят от кубитных состояний поля деформации.

Наличие модуляции фрактальной размерности α для $\mathrm{Re}\,u$ приводит к появлению во внутренней области регулярных вертикальных полос, а для границы характерно стохастическое кольцеобразное поведение. Для $\mathrm{Im}\,u$ наличие синусоидальной модуляции приводит к появлению тонкой структуры у стохастических колец и стохастических областей. Тонкая структура зависит от кубитных состояний. Отсюда следует возможность управления эффектом затухания с помощью модуляции фрактального индекса α.



а) состояние (0, 0) $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$

б) состояние (0, 0) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

в) состояние (1, 0) $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$

г) состояние (1, 0) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

д) состояние (0, 1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

е) состояние (–1, 0) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

ж) состояние (0, –1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

з) состояние (1, 1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

и) состояние (1, –1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

к) состояние (–1, 1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

л) состояние (–1, –1) $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$

м) состояние (–1, –1) $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$

Рис. 2. Влияние модуляции на кубитные состояния поля деформации в круговой цилиндрической структуре. Поведение сечений $\mathrm{Re}\,u \in [-1;1]$, $\mathrm{Im}\,u \in [-1;1]$ (вид сверху) при $\alpha = \sin\varphi$, $\varphi = 6\pi(n-1)/39$

Список литературы

1. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / под ред. Ю. С. Кившаря и Н. Н. Розанова. М.: Физматлит, 2014. 384 с.

2. Abramov V. S. Active Nanoobjects, Neutrinos and Higgs Fields in Anisotropic Models of Fractal Cosmology // Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics. 2019. V. 83, No 12. P. 1516-1520.

3. Abramov V. S. Active Nanoobjects, Neutrino and Higgs Boson in a Fractal Models of the Universe // C. H. Skiadas and Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2020. P. 1-14.

4. Омельянчук А. Н., Ильичев Е. В., Шевченко С. Н. Квантовые когерентные явления в джозефсоновских кубитах. К.: Наукова думка, 2013. 168 с.

5. Абрамова О. П. Поле деформации и кубитные состояния фрактальных структур с элементами цилиндрического типа // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2020. № 1. С. 3-15.

6. Абрамова О. П., Абрамов С. В. Управление ячейкой памяти в модельной фрактальной связанной структуре // Физико-математическое моделирование систем: материалы XXII Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2021. С. 3-8.

7. Abramova O. P., Abramov A. V. Effect of Ordering of Displacement Fields Operators of Separate Quantum Dots, Elliptical Cylinders on the Deformation Field of Coupled Fractal Structures / C. H. Skiadas and I. Lubashevsky (eds.), 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 15-27.

8. Abramova O. P., Abramov A. V. Coupled Fractal Structures with Elements of Cylindrical Type / C. H. Skiadas and Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2020. P. 15-26.

9. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос: введение / под ред. В. Я. Демиховского. М.: Физматлит, 2004. 376 с.

INFLUENCE OF VARIABLE AMPLITUDE AND MODULATION ON CUBIT STATES OF THE DEFORIMATION FIELD OF FRACTAL STRUCTURE

O.P. Abramova

Donetsk National University

Abstract: by the method of numerical simulation the influence of the variable amplitude and modulation of the fractal index on the qubit states of the deformation field of separate fractal structure is studied. It is shown, that the effective damping of the displacement function is localized in the form of stochastic rings. Modulation of the fractal index leads to the appearance of bands in the real part and a fine structure in the imaginary part of the displacement function of various qubit states.

Keywords: fractal structure, qubit states, variable amplitude of the displacement function, modulation of the fractal index, deformation field.

УДК 539.213; 530.1; 537.312.62:535.317.1

АКТИВНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ И БОЗОН ХИГГСА В КВАРК-ГЛЮОННОЙ МОДЕЛИ

В.С. Абрамов

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
vsabramov2018@gmail.com

Аннотация: для описания связей и основных характеристик активных наночастиц с бозоном Хиггса предложена кварк-глюонная модель. Длины волн активных наночастиц определяются гравитационными радиусами Шварцшильда легких кварков. Показана возможность распада бозона Хиггса на лептонные пары (типа электрон-электронная дырка, мюон-мюонная дырка) и фотон. Оценки энергетических щелей (энергий колебательных мод), эффективных температур зависят от состояний антинейтринного поля Хиггса, связанного с барионной плотностью материи. Показана возможность образования агрегатов с большими длинами волн на основе гравитационных радиусов Шварцшильда эффективного атома и бозона Хиггса.

Ключевые слова: активные наночастицы, бозон Хиггса и поле Хиггса, кварк-глюонная модель, лептонные пары, фотон, агрегаты.

Введение

Экспериментальные исследования на БАКе [1] показали возможность распада бозона Хиггса на лептонную пару и фотон, явление асимметрии антиматерии в протоне [2], появление экзотических состояний адронов [3] и барионной плотности материи [4].

Активные нанообъекты , нейтрино и бозон Хиггса исследовались в работах [5 - 8]. В работах [7, 8] была показана возможность появления сверхбезызлучательных состояний у активных нанообъектов. С другой стороны, активные фемтообъекты и нанообъекты могут входить в состав солнечного и межзвездного ветров [6], релятивистских джетов (выбросов материи с большими скоростями из бинарных черных дыр) [9 - 11]. Эти частицы могут влиять на атмосферу Земли, различные физические и химические процессы на Земле и в Космосе.

Использование экспериментальных методов с высоким угловым разрешением [12] подтверждает, что источником таких частиц могут быть корональные дыры на Солнце.

Однако, связи глюонного импульса P_g с гравитационными радиусами Шварцшильда легких u, d, s-кварков не были исследованы. Не было показано возможное влияние кварк-глюонного взаимодействия на длины волн активных наночастиц и агрегаты из таких частиц. При этом активные пары наночастиц могут находиться в различных точках объемных структур и взаимодействовать через глюоны. Возникает необходимость учета эффекта упорядочения операторов полей деформации [13, 14] таких агрегатных объектов.

Целью данной работы является исследование связей активных наночастиц и бозона Хиггса в рамках кварк-глюонной модели.

Описание активных объектов на основе кварк-глюонной модели

В нашей модели энергии покоя E_{Au}, E_{Ad}, E_{As} легких u, d, s-кварков определяются из выражений

$$E_{Au}/E_{Ad} = (n_{\nu n} + 0.5) + S_{12u}; \quad E_{Au}/2E_{As} = (\Omega_{\tau L} - \Omega^*_{\tau L}) + S_{12u};$$

$$(E_{Au}/E_{Ad}) - (E_{Au}/2E_{As}) = (n_{\nu n} + 0.5) - (\Omega_{\tau L} - \Omega^*_{\tau L}). \qquad (1)$$

Здесь квантовые числа $n_{\nu n}$, $\Omega_{\tau L}$, $\Omega^*_{\tau L}$, параметр S_{12u} определены соотношениями из работ [5, 6]

$$n^2_{\nu n} = \Omega^*_{\tau L}; \quad \Omega_{\tau L} E_{W0} = \Omega^*_{\tau L} E_{Z0}; \quad S_{12u} = E_{\alpha u}/E_{H0};$$

$$E_{\alpha u} - E_{\alpha s} = E_c; \quad E_{\alpha s} = \xi_{gs} E_{0g} = S_{012} E_{H0}; \quad E_{0g} = n_g E_{H0}; \quad S_{012} = n_g \xi_{gs}. \qquad (2)$$

В выражениях (2) лептонное квантовое число $\Omega_{\tau L} = 0.002402187$ связано с квантовым числом $\Omega^*_{\tau L} = 0.002116741$ через энергии покоя $E_{W0} = 80.35235464$ ГэВ и $E_{Z0} = 91.188$ ГэВ для $W0$ и $Z0$ бозонов, соответственно; квантовое число $n_{\nu n} = 0.046008054$; энергия покоя c-кварка $E_c = 1.030142904$ ГэВ; энергии $E_{\alpha s} = 0.681586763$ ГэВ, $E_{\alpha u} = 1.711729667$ ГэВ; энергия покоя бозона Хиггса $E_{H0} = 125.03238$ ГэВ, энергия глюонов $E_{0g} = 1.00025904$ ТэВ; число глюонов $n_g = 8$; численные значения параметров $S_{12u} = 0.013690291$, $S_{012} = 0.005451282$, $\xi_{gs} = 0.00068141$.

На основе численных значений из (2) по формулам (1) находим энергии покоя $E_{Au} = 4.199991904$ МэВ, $E_{Ad} = 7.504027735$ МэВ, $E_{As} = 150.2601224$ МэВ для u, d, s-кварков, которые согласуются с энергиями из [15]. Гравитационные радиусы Шварцшильда R_{Au}, R_{Ad}, R_{As} для u, d, s-кварков находим по формулам

$$R_{Au} = A_G E_{Au}; \quad R_{Ad} = A_G E_{Ad}; \quad R_{As} = A_G E_{As}. \qquad (3)$$

Здесь постоянная $A_G = 0.960836162$ фм$\cdot$(эВ)$^{-1}$ из [5, 6]. Численные значения радиусов $R_{Au} = 4.035504102$ нм, $R_{Ad} = 7.210141208$ нм, $R_{As} = 144.3753593$ нм. Отметим, что эти гравитационные радиусы Шварцшильда могут определять характерные длины волн активных наночастиц. Так, длина волны $\lambda_{gAu} = 1.008876026$ нм для одной из активных наночастиц определяется связью типа $\lambda_{Au} = 2R_{Au} = n_g \lambda_{gAu}$. Из (3) также следует возможность образования агрегатов из таких активных наночастиц с большими размерами (до 2 мкм) и имеющих сложную структуру.

В рамках нашей анизотропной модели [11] (с учетом поляризации реликтового излучения) основное квантовое число $n_{\nu n}$ можно независимо определить из выражений

$$n_{\nu n} = |\chi_{ef}| \sin(\varphi_{0g}) + \psi_{rc} + 2\Omega_{0G}; \quad \Omega_{b1} = 0.5 n_{\nu n} - 2 n_{\tau L} \sin(\varphi_{0g}); \quad n^2_{\tau L} = \Omega_{\tau L}. \qquad (4)$$

Здесь $|\chi_{ef}|=0.2504252$, $\psi_{rc}=0.04420725$, $\Omega_{0G}=4.99501253\cdot10^{-6}$, угол поляризации излучения $\varphi_{0g}=0.409715696^{\circ}$ из [9]. С другой стороны, параметры $z_{\nu n}$, $n_{\nu n}$ определяют барионные плотности Вселенной Ω_{b1} (основное состояние материи), Ω_{b2} (дырочное состояние материи) выражениями

$$\Omega_{b1}=(0.5-z_{\nu n})n_{\nu n};\quad \Omega_{b2}=(0.5+z_{\nu n})n_{\nu n};\quad \Omega_{b1}+\Omega_{b2}=n_{\nu n}. \tag{5}$$

Численные значения равны: $\Omega_{b1}=0.022299491$, $\Omega_{b2}=0.023708563$. При этом $\Omega_{b1}<\Omega_{b2}$, что подтверждает наличие двух состояний барионной материи из-за наличия антинейтринного поля Хиггса $z_{\nu n}=0.015313329$.

Основные уравнения связей импульса глюона P_g с энергиями покоя E_{Au}, E_{Ad}, E_{As} для u, d, s-кварков имеют вид

$$\varepsilon_{0g}=n_gP_g=n_{Au}E_{Au}=n_{Ad}E_{Ad}=n_{As}E_{As};\quad 2\Delta_\mu=n_{A0}E_{ex};$$

$$2P_g=n^*_{A0}E_{ex};\quad E_{ex}=E_e+E'_h;\quad n^*_{A0}=n_{A0}+1+2(S_{2u}+\xi_{gs}). \tag{6}$$

Здесь энергия покоя электрона $E_e=0.51099907$ МэВ, электронной дырки $E'_h=0.496945898$ МэВ, энергия пары электрон-дырка $E_{ex}=1.007944968$ МэВ, число квантов черной дыры $n_{A0}=58.04663887$, параметр $S_{2u}=0.033051284$ [5], На основе (6) находим эффективное число квантов $n^*_{A0}=59.11392178$, импульс глюона $P_g=29.79188196$ МэВ, энергетическую щель $\Delta_\mu=29.25390878$ МэВ, энергию $\varepsilon_{0g}=238.3350557$ МэВ. Числа квантов n_{Au}, n_{Ad}, n_{As} независимо можно определить по формулам:

$$n_{Au}=n_{A0}+0.5-0.5n_{\nu n}-\langle\mu_2\rangle/\mu_N;\quad n_{Ad}=n_{Au}\,\psi_{Ad};\quad n_{As}=n_{Au}\,\psi_{As};$$

$$\langle\mu_2\rangle/\mu_N=1.5+\Omega'_{c1}+n'_{F\tau};\quad \langle\mu_1\rangle/\mu_N=1.5+\Omega'_{c1};\quad E_{0g}=E_{pp}(\langle\mu_2\rangle/\mu_N-1.5)^2;$$

$$\psi_{Ad}=0.5+n_{\nu n}+S_{12u};\quad 0.5\psi_{As}=(\Omega_{\tau L}-\Omega^*_{\tau L})+S_{12u}. \tag{7}$$

Здесь магнитные моменты ядер $\langle\mu_2\rangle/\mu_N=1.777083623$, $\langle\mu_1\rangle/\mu_N=1.728071512$ определяются через известные параметры $\Omega'_{c1}=0.228071512$ и $n'_{F\tau}=0.049012111$ из [5, 6, 11]. Магнитные моменты ядер $\langle\mu_2\rangle/\mu_N$, $\langle\mu_1\rangle/\mu_N$ практически совпадают с магнитными моментами ядер для изотопов ^{188}Re, ^{186}Re из [16]. Энергия $E_{pp}=13.02839058$ ТэВ близка к энергии 13 ТэВ, вблизи которой на БАКе [1] экспериментально при столкновении протонов наблюдается процесс распада бозона Хиггса на лептонную пару (типа электрон-дырка) и фотон. Параметры $\psi_{Ad}=0.559698345$, $\psi_{As}=0.027951474$. Из (7) находим числа квантов $n_{Au}=56.74655122$, $n_{Ad}=31.76095080$, $n_{As}=1.586149751$.

Возможен процесс распада бозона Хиггса на лептонную пару типа мюон-мюонная дырка с излучением фотона. Энергию мюона $E_{\mu p}$ с учетом вклада от глюонного импульса P_g находим из выражений

$$E_{\mu p}=(E_\mu^2+4P_g^2)^{1/2}=E_{gA}\sin^2(\varphi'_\mu);\quad \varphi'_\mu-(\varphi_{\mu g}+\varphi_{eg})=(n^*_{A0}+0.5)\varphi^*_{E0};$$
$$E_e=E_{gA}\sin^2(\varphi_{eg});\quad E_\mu=E_{gA}\sin^2(\varphi_{\mu g});\quad E_\tau=E_{gA}\sin^2(\varphi_{\tau g}). \qquad (8)$$

Здесь углы $\varphi_{eg}=\varphi_{0g}$, $\varphi_{\mu g}=5.901862921^\circ$, $\varphi_{\tau g}=24.94112323^\circ$, энергии покоя E_μ=105.658389 МэВ, E_τ=1777.00 МэВ для μ, τ-лептонов, соответственно, энергия E_{gA}=9.993268924 ГэВ из [9]. Из выражений (8) находим энергию $E_{\mu p}$=121.3009484 МэВ и угол $\varphi'_\mu=6.325334208^\circ$. Выражения (8) позволяют оценить угол $\varphi^*_{E0}=0.8306806''$. Значение этого угла практически совпадает со значением угла отклонения $0.83''$ фотонов вблизи сверхмассивных тел в теории Эйнштейна [17]. Это подтверждает возможность распада бозона Хиггса на мюонную пару и фотон, наличие характерного угла φ'_μ для такой пары.

Дополнительно к числам квантов n_{Au}, n_{Ad}, n_{As} вводим числа квантов n^*_{Au}, n^*_{Ad}, n^*_{As}, которые связаны с числом кварков $n_Q=6$ и числом глюонов $n_g=8$ соотношениями

$$n^*_{Au}=n_Q\,n_{Au}/n_g;\quad n^*_{Ad}=n_Q\,n_{Ad}/n_g;\quad n^*_{As}=n_Q\,n_{As}/n_g=1+\chi_{As};$$
$$n_Q/n_g=z'_\mu(z'_\mu+1)-n_{A0}. \qquad (9)$$

Здесь космологическое красное смещение $z'_\mu=7.18418108$ [11]. Из (9) находим эффективные числа квантов n^*_{Au}=42.55991342, n^*_{Ad}=23.8207131, n^*_{As}=1.189612313 и восприимчивость χ_{As}=0.189612313. Знание восприимчивости χ_{As} дает возможность определить энергетические щели Δ_{As} и Δ^*_{As}, эффективные температуры T_{As} и T^*_{As} по формулам:

$$\Delta_{As}=\chi_{As}\varepsilon_{HG};\quad n_{ra}\Delta^*_{As}=\chi_{As}(E_n-(E_p+E_e));\quad \Delta^*_{As}=\chi^*_{As}\varepsilon_{HG};$$
$$\chi^*_{As}=\chi_{As}\psi_{\nu n};\quad \psi_{\nu n}=1+z_{\nu n};\quad T_{As}=a_T\Delta_{As};\quad T^*_{As}=a_T\Delta^*_{As}. \qquad (10)$$

Здесь параметры $n_{ra}=2.785248449\cdot10^7$, $\psi_{\nu n}$=1.015313329 [9]; энергии покоя нейтрино $\varepsilon_{HG}=280.0460475$ мэВ, нейтрона $E_n=946.7027435$ МэВ, протона $E_p=938.2723226$ МэВ. По формулам (10) находим энергетические щели (энергии колебательных мод) Δ_{As}=53.10017881 мэВ, Δ^*_{As}=53.91331932 мэВ и эффективные температуры $T_{As}=308.1285716$ К, T^*_{As}=312.8470457 К. Увеличение эффективной температуры с T_{As} до T^*_{As} связано с вкладом антинейтринного поля Хиггса $z_{\nu n}$ в барионные плотности материи Ω_{b1}, Ω_{b2} из (5). Изменение состояния антинейтринного поля Хиггса $z_{\nu n}$ будет приводить к изменениям эффективных температур.

Отметим, что гравитационный радиус R_{As} связан с характерными длинами волн для барионной плотности материи λ_{b1}, λ_{b2}, $\lambda_{\nu n}$. С другой стороны, R_{As} определяет длины волн λ_{1ex}, λ_{2ex} первого, второго эмиттеров одиночных фотонов и связан с длиной волны активной наночастицы $2\lambda_{gAu}$ выражениями

$$\lambda_{b1} = \Omega_{b1} R_{As}; \quad \lambda_{b2} = \Omega_{b2} R_{As}; \quad \lambda_{\nu n} = n_{\nu n} R_{As};$$
$$\lambda_{1ex} = 0.5 n_g R_{As} - 2\lambda_{b1}; \quad \lambda_{1ex} - \lambda_{2ex} = 2\lambda_{gAu}. \qquad (11)$$

С учетом (3) – (5) из (11) находим длины волн $\lambda_{b1} = 3.219497025$ нм, $\lambda_{b2} = 3.422932302$ нм, $\lambda_{\nu n} = 6.642429327$ нм, $\lambda_{1ex} = 571.0624432$ нм, $\lambda_{2ex} = 569.0446912$ нм. Экспериментальные наблюдения одиночных фотонов на таких длинах волн подтверждают наличие таких активных наночастиц [5, 6].

В рамках нашей анизотропной модели [11] были получены радиусы Шварцшильда для эффективного атома $R_H = 21.84067257$ мкм и бозона Хиггса $R_{H0} = 120.1356321$ мкм. Это также указывает на возможность появления агрегатов из активных наночастиц на основе эффективного атома и бозона Хиггса.

Выводы

Для описания основных характеристик активных наночастиц предложена кварк-глюонная модель. Показано, что длины волн активных наночастиц могут определяться гравитационными радиусами Шварцшильда легких u, d, s-кварков. Взаимодействие таких активных наночастиц через глюоны может приводить к увеличению длин волн и образованию агрегатов.

С учетом связей импульса глюона с энергиями покоя u, d, s-кварков показана возможность распада бозона Хиггса на лептонные пары (типа электрон-электронная дырка, мюон-мюонная дырка) и фотон.

Выполнены оценки энергетических щелей (энергий колебательных мод), эффективных температур. Эти оценки зависят от состояний антинейтринного поля Хиггса, связанного с барионной плотностью материи.

Показана возможность образования агрегатов с большими длинами волн на основе гравитационных радиусов Шварцшильда эффективного атома и бозона Хиггса в рамках нашей анизотропной модели [11].

Список литературы

1. The ATLAS Collaboration / CERN. Evidence for Higgs boson decays to a low-mass dilepton system and a photon in pp collisions at $\sqrt{s}$=13TeV with the ATLAS detector. ATLAS-CONF-2021-002 1st February 2021.

2. The asymmetry of antimatter in the proton / J. Dove, B. Kerns, R. E. McClellan et al. // Nature. – 2021. – No 590. – P. 561-565.

3. An Liupan. Latest results on exotic hadrons at LHCb / Liupan An // CERN-LHC seminar, June 16th 2020.

4. V. Mossa, K. Stöckel, F. Cavanna et al. The baryon density of the Universe from an improved rate of deuterium burning// Nature. – 2020. – No 587. – P. 210-213.

5. Abramov V. S. Active Nanoobjects, Neutrino and Higgs Boson in a Fractal Models of the Universe // C. H. Skiadas, Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation Interna-

tional Conference, Springer Proceedings in Complexity. – Springer Nature Switzerland AG 2020. – P. 1-14.

6. Abramov V. S. Active Femto- and Nano-Objects in Relation to the Solar and Interstellar Winds in Anisotropic Models // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2020. – No 84(12). – P. 1505-1510.

7. Abramov V. S. Super-nonradiative states in fractal quantum systems // XIII International Workshop on Quantum Optics (IWQO-2019). EPJ Web of Conferences, 220, 2 p., 2019.

8. Abramov V. S. Supernonradiative states, neutrino and Higgs Boson in fractal quantum systems //:Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics. – 2020. – No 84(3). – P. 284-288.

9. Абрамов В. С. Черные дыры, релятивисткие джеты, корональные дыры на солнце, активные микрообъекты во фрактальных моделях // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2021. – № 3-4. – С. 7-21.

10. Relativistic X-ray jets from the black hole X-ray binary MAXI J1820+070 / M. Espinasse, S. Corbel, Ph. Kaare et.al. // arXiv:2004.06416v1 [astro-ph.HE]. – 10 p.

11. Абрамов В. С. Анизотропная модель и переходные сигналы от бинарных космологических объектов: черных дыр, нейтронных звезд // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2018. – № 1. – С. 55-68.

12. Is the High-Resolution Coronal Imager Resolving Coronal Strands? Results from AR 12712 / T. Williams, R. W. Walsh, A. R. Winebarger et al. // The Astrophysical Journal.– 2020. – 892:134. – 13 p.

13. Abramova O. P., Abramov A. V. Effect of Ordering of Displacement Fields Operators of Separate Quantum Dots, Elliptical Cylinders on the Deformation Field of Coupled Fractal Structures / C. H. Skiadas and I. Lubashevsky (eds.), 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 15-27.

14. Abramova O. P., Abramov A. V. Coupled Fractal Structures with Elements of Cylindrical Type / C. H. Skiadas and Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2020. P. 15-26.

15. Вайнберг С. Квантовая теория поля. Т. 2. Современные приложения / Москва, Физматлит, 2015. – 528 с.

16. Вонсовский С. В. Магнетизм микрочастиц / Москва: Наука, 1973. – 280 с.

17. Торн К. С. Черные дыры и складки времени. Дерзкое наследие Эйнштейна / Москва, Физматлит, 2007. – 614 с.

ACTIVE NANOPARTICLES AND HIGGS BOSON IN THE QUARK-GLUON MODEL

V.S. Abramov

Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin

Abstract: to describe the relations and main characteristics of active nanoparticles with the Higgs boson the quark-gluon model is proposed. The wavelengths of active nanoparticles by the Schwarzschild gravitational radii of light quarks are determined. The possibility of the Higgs boson decay into lepton pairs (such as electron-electron hole, muon-muon hole) and a photon is shown. Estimates of energy gaps (energies of vibrational modes) and effective temperatures depend on the states of the Higgs antineutrino field associated with the baryon density of matter. The possibility of the formation of aggregates with long wavelengths based on the Schwarzschild gravitational radii of the effective atom and the Higgs boson is shown.

Keywords: active nanoparticles, Higgs boson and Higgs field, quark-gluon model, lepton pairs, photon, aggregates.

UDC 539.126

INVESTIGATION OF SOME EXCLUSIVE PROCESSES USING NEW RENORMALIZATION SCALES

Y.V. Mamedova

Institute of Applied Mathematics, Baku State University, Baku, Azerbaijan
mamedova_yegana@yahoo.com

Abstract: in this work, the electromagnetic form factor (ff) of vector meson is considered in the framework of the running coupling constant method using the new renormalization scales. To calculate the form factors the asymptotic distribution amplitude (DA) and the Ball-Brown wave function were used. We neglected the dependence of the wave function on the factorization scale. To obtain the resummed expression for ffs, the inverse Laplace transform is used. Studies have shown that infrared renormalon effects, in other words, the power-suppressed corrections increase the usual (approximation of the frozen coupling constant) predictions of perturbative quantum chromodynamics (QCD) by approximately two times. This conclusion is valid for both asymptotic and Ball-Brown wave functions.

Keywords: meson, running coupling constant, renormalization scales, form factors, distribution amplitude, infrared renormalon effects.

Introduction

At present, quantum chromodynamics (QCD) is the most serious candidate for the role of the theory of strong interactions [1]. The main property of QCD is asymptotic freedom. Its essence lies in the fact that for large transmitted momentum Q^2 the strong interaction constant

$$\alpha_S(Q^2) = \frac{4\pi}{\beta_0 \ln\left(Q^2/\Lambda^2\right)}, \tag{1}$$

(here Q^2 – momentum transfer in the process; $\beta_0 = \frac{11}{3}N - \frac{2}{3}n_f$, n_f – number of quark flavors, $N=3$ number of colors; Λ – QCD scale parameter) becomes less than one, and this makes it possible to use perturbation theory [2]. At large distances (or for small momentum transfers), on the contrary, the interaction becomes strong, and the use of perturbation theory becomes impossible.

Processes involving virtual or real photons are of undoubted interest. The interaction of composite particles with a photon is determined by functions depending on the momentum (Q), i.e. form factors (ff), which carry important information about the internal structure of the particle. Therefore, the study of electromagnetic $[F_{\mathrm{M}}(Q^2)]$ ffs, characterizing the internal structure of mesons, is of great interest [3].

In order to compare the theoretical predictions for the ffs with the experimental data, it is necessary to take into account all the corrections, computable in the framework perturbative QCD (pQCD) [2].

In the experimentally accessible energetic regime, for explaining the experimental data an important role play the power corrections by the momentum transfer $\sim 1/Q^{2p}$, $p=1, 2, \ldots$.

It is well known that in the framework of pQCD a meson elm ff can be written as

$$F_{\mathrm{M}}\left(Q^2\right)=\int_0^1\int_0^1 dxdy\int_0^1 dy\Phi_M *\left(y,\mu_F^2,\mu_R^2\right)\mathrm{T}_H\left(Q^2/\mu_F^2,Q^2/\mu_R^2,x,y,\alpha_S\left(\mu_R^2\right)\right)\Phi_{\mathrm{M}}\left(x,\mu_F^2,\mu_R^2\right), \quad (2)$$

where $\Phi_M\left(x,\ \mu_F^2\right)$ is the meson distribution amplitude (DA), $T_H\left(x,y,Q^2,\alpha_S\left(\mu_R^2\right)\right)$, is the hard-scattering amplitude of the subprocess $q\overline{q}'+\gamma*\to q\overline{q}'$, $Q^2=-q^2$ is the momentum transfer in the process. μ_F^2 is the factorization scale, the parameter $\frac{1}{\mu_F}$ is the boundary between "small" and "large" distances, μ_R^2 is renormalization scale.

Scale-setting procedure

The choice of the factorization and renormalization scales plays a very important role. The correct choice of the renormalization scale in the expression of the electromagnetic ff of mesons can significantly reduce the perturbative corrections to these physical quantities. An unfortunate choice of μ_F^2 and μ_R^2 may lead to the fact that $F_{\mathrm{M}}\left(Q^2,\mu_F^2,\mu_R^2\right)$ will be very different from the "true" value of $F_{\mathrm{M}}\left(Q^2\right)$ (sum of all orders of perturbation theory), and higher-order corrections of perturbation theory will be large. It is necessary to choose μ_F^2 and μ_R^2 so that these corrections were as small as possible. The most suitable choice for the factorization scale is $\mu_F^2=Q^2$. This choice eliminates the logarithmic terms Q^2/μ_F^2 at the next-to-leading order in the decomposition of pQCD. Choosing the right scale is especially important for pQCD, since with the transmitted impulses characteristic of modern experiments, the QCD coupling constant is large: $\alpha_S\left(Q^2\right)\sim 0.3$. This problem can be partially solved by choosing the renormalization scale μ_R^2 [3]. In exclusive process the renormalization scale μ_R^2 must be chosen in the following form $\mu_R^2\sim xyQ^2$, $\mu_R^2\sim(1-x)(1-y)Q^2$, i.e. proportional to the gluon virtuality $\sim -Q^2(1-x)(1-y)$.

The procedure described above was called the “scale-setting procedure” of the Brodsky-Lepage-Mackenzie [3].

The renormgroup equation

At the leading order of pQCD with this renormalization scales T_H will be in the following form

$$T_H\left(x,y,Q^2,\alpha_S\left(\mu_R^2\right)\right)=\frac{16\pi C_F}{Q^2}\left[\frac{2}{3}\frac{\alpha_S\left[(1-x)Q^2/2\right]}{(1-x)(1-y)}+\frac{1}{3}\frac{\alpha_S\left[xQ^2/2\right]}{xy}\right], \quad (3)$$

where $C_F = 4/3$ is the color factor. $\alpha_S(\mu_R^2)$ with μ_R^2 from Eq. (3) suffers because of infrared singularities at the soft regions $x \to 0, x \to 1$. For regularization of $\alpha_S(\mu_R^2)$ in these end-point regions, we express the running coupling constant $\alpha_S(\lambda Q^2)$ in terms of $\alpha_S(Q^2)$ using the renormalization group equation [1, 4]. The renormalization group equation for the running coupling $\alpha_S(\lambda Q^2)$ has the form

$$\frac{\partial\alpha_S\left(\lambda Q^2\right)}{\partial\ln\lambda}=-\frac{\beta_0}{4\pi}\left[\alpha_S\left(\lambda Q^2\right)\right]^2-\frac{\beta_1}{16\pi^2}\left[\alpha_S\left(\lambda Q^2\right)\right]^3, \quad (4)$$

where

$$\beta_0=11-\frac{2}{3}n_f,\quad \beta_1=102-\frac{38}{3}n_f \quad (5)$$

are the QCD beta-functions one-loop and two-loop coefficients, respectively [5]. The solution of this equation obtained by keeping the leading $(\alpha_S \ln\lambda)^k$ and next-to-leading $\alpha_S^k \ln\lambda^{k-1}$ powers is [5]

$$\alpha_S\left(\lambda Q^2\right)=\frac{\alpha_S\left(Q^2\right)}{1+\left(\alpha_S\beta_0/4\pi\right)\ln\lambda}-\frac{\alpha_S^2\left(Q^2\right)\beta_1}{4\pi\beta_0}\frac{\ln\left[1+\left(\alpha_S\beta_0/4\pi\right)\ln\lambda\right]}{\left[1+\left(\alpha_S\beta_0/4\pi\right)\ln\lambda\right]^2}. \quad (5')$$

The graphic image of formula (2) is given in Fig. 1.

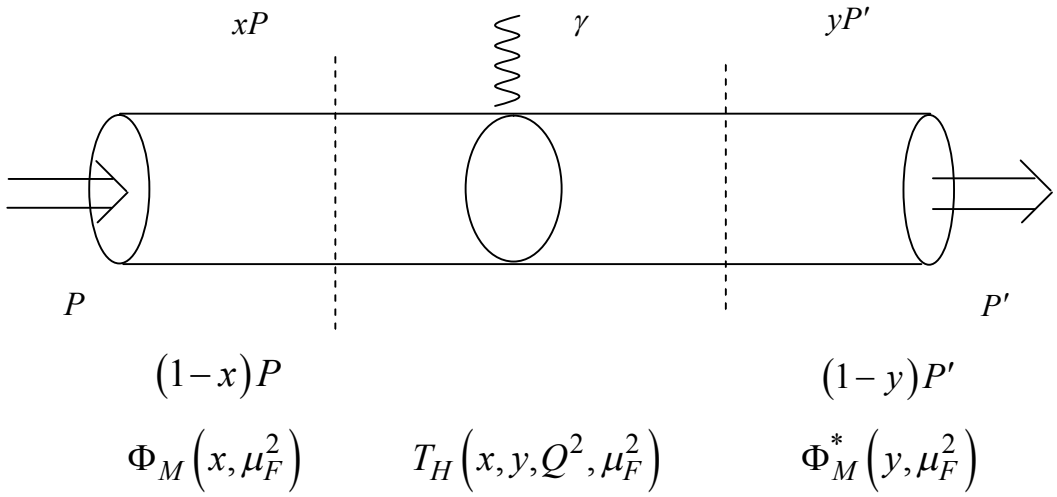


Fig. 1. The graphic image of the electromagnetic ff of meson $F_{\mathrm{M}}\left(Q^2\right)$.

In this work, the electromagnetic ff of ρ_L-meson is considered in the framework of the running coupling constant method using the new renormalization scales [5]

$$\mu_R^2 = (1-x)(1-y)Q^2,\ \bar{\mu}_R^2 = xyQ^2, \tag{6}$$

with two running variables, and

$$\mu_R^2 = (1-x)Q^2/2, \quad \bar{\mu}_R^2 = xQ^2/2. \tag{6'}$$

with one running and one fixed ($\langle y \rangle = \frac{1}{2}$) variables.

To calculate the form factors the asymptotic distribution amplitude (DA) and the Ball-Brown wave function were used. We neglected the dependence of the wave function on the factorization scale.

The asymptotic DA for ρ_L-meson is in the form [6, 7]

$$\Phi_L^{asy}(x) = \sqrt{2}\sqrt{3} f_\rho^L x(1-x), \tag{7}$$

f_ρ^L is the decay constant of ρ_L-meson: $f_\rho^L = 0.141$ GeV.

And the calculated using the QCD sum rules, the Ball-Brown wave function of the ρ_L- meson has the following form [8]

$$\Phi_L\left(x, \mu_0^2\right) = \Phi_L^{asy}(x)\left[a + b(2x-1)^2\right], \tag{8}$$

here $a = 0.7, b = 1.5$; $\mu_0 = 1$ GeV is the normalization point.

In our calculations, we used only the first member of Eq. (5').

Integrating in (2) using (3) and (6) creates infrared divergences and, as a result, for $Q^2 F_{\rho_L}\left(Q^2\right)$ we obtain a perturbative series with factorially increasing coefficients

$$Q^2 F_{\rho_L}\left(Q^2\right) = 2\left(16\pi f_\rho^L\right)^2 \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{\alpha_S\left(Q^2\right)}{4\pi}\right)^n S_n, \tag{9}$$

$$S_n = C_n \beta_0^{n-1};\ C_n \sim (n-1)!, \tag{10}$$

To cope with this difficulty, one can obtain the Borel transform of series [9] $B\left[Q^2 F_{\rho_L}\right](u)$, and then re-summarized expression for $Q^2 F_{\rho_L}\left(Q^2\right)$. However, this method is time consuming. Therefore, it is convenient to apply a different approach that allows us to bypass all intermediate calculations and get the resummed expression for $Q^2 F_{\rho_L}\left(Q^2\right)$. For these purposes, we introduce the inverse Laplace transform for the function $\frac{1}{t+z+w}$

$$\frac{1}{t+z+w} = \int_0^1 \exp\left[-(t+z+w)u\right]du. \tag{11}$$

After taking into account the first equation of (5') in (2) and changing the variables x, y to $z=\ln(1-x)$, $w=\ln(1-y)$, using formula (11) and integrating with z, w, we find for asymptotic wave function

$$B\left[Q^2F_{\rho_L}\right](u)=\frac{1}{(1-u)^2}+\frac{1}{(2-u)^2}-\frac{2}{1-u}+\frac{2}{2-u}, \tag{12}$$

for Ball-Braun wave function

$$B\left[Q^2F_{\rho_L}\right](u)=\sum_{k=1}^{4}\left(\frac{l_k}{(k-u)^2}+\frac{q_k}{k-u}\right), \tag{13}$$

with l_k and q_k, which are determined as

$$l_1=(a+b)^2,\ l_2=(a+5b)^2,\ l_3=64b^2,\ l_4=16b^2;$$

$$q_1=-2(a+b)\left(a+\frac{7}{3}b\right),\ q_2=2\left(a^2-25b^2\right),\ q_3=8b(a+b),\ q_4=\frac{4}{3}b(35b-a). \tag{14}$$

Borel transform $B\left[Q^2F_{\rho_L}\right](u)$ (the expressions (12) и (13)) have simple and double infrared renormalon poles at points $u=k$ $(k=1,2,3,4)$ [10]. The resumed expression $\left[Q^2F_{\rho_L}(Q^2)\right]^{res}$ can be calculated using the principal value method in the sense of Cauchy [11]

$$\left[Q^2F_{\rho_L}\left(Q^2\right)\right]^{res}=C\frac{\left(16\pi f_\rho^L\right)^2}{\beta_0}\sum_{k=1}^{N}\left[-\frac{l_k}{k}+\left(q_k+l_k\ln\lambda\right)\frac{li\lambda^k}{\lambda^k}\right], \tag{15}$$

Here for the ρ_L-meson $C=2$ and $N=4$. Logarithmic integral $li\lambda$ defined as

$$li(\lambda)=P.V.\int_0^\lambda\frac{dx}{\ln x};\quad \lambda=\frac{Q^2}{\Lambda^2}.$$

The expressions (12), (13), (15) are obtained in the case when both variables x, y in Eq. (2) are running. In the case of one fixed and one running variable that corresponds to the choice (6'), we have for asymptotic wave function

$$\left[Q^2F_{\rho_L}\left(Q^2\right)\right]^{res}=\frac{\left(16\pi f_\rho^L\right)^2}{\beta_0}\left[\frac{li\left(\tilde{\lambda}\right)}{\tilde{\lambda}}-\frac{li\left(\tilde{\lambda}^2\right)}{\tilde{\lambda}^2}\right],\quad \tilde{\lambda}=\frac{Q^2}{2\Lambda^2}. \tag{16}$$

for Ball-Braun wave function

$$\left[Q^2F_{\rho_L}\left(Q^2\right)\right]^{res}=2\frac{\left(16\pi f_\rho^L\right)^2}{\beta_0}\left(\frac{a}{2}+\frac{b}{6}\right)\left[(a+b)\frac{li\left(\tilde{\lambda}\right)}{\tilde{\lambda}}-(a+5b)\frac{li\left(\tilde{\lambda}^2\right)}{\tilde{\lambda}^2}+8b\frac{li\left(\tilde{\lambda}^3\right)}{\tilde{\lambda}^3}-4b\frac{li\left(\tilde{\lambda}^4\right)}{\tilde{\lambda}^4}\right]. \tag{17}$$

The results are illustrated in the Figs. 2, 3.

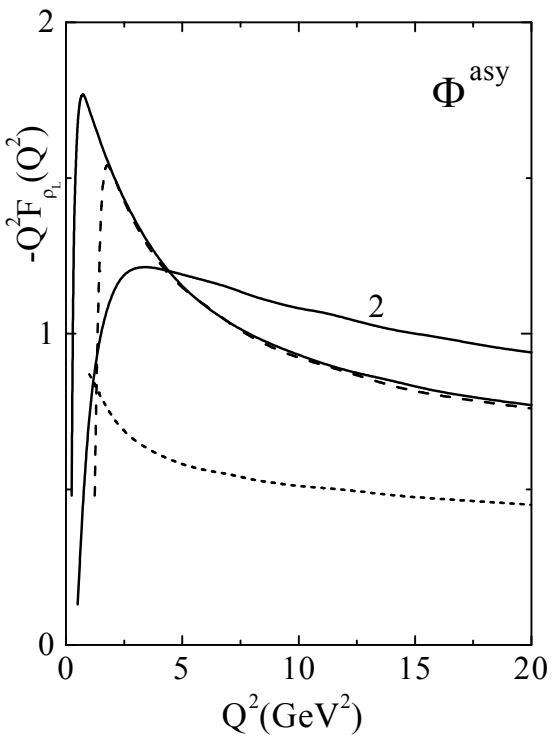


Fig. 2. $-Q^2F_L(Q^2)$ for ρ_L^+-meson. For asymptotic wave function:
1 – resummed expression (15),
2 – resummed expression (16),
- - - - - infrared matching scheme;
. . . . . frozen coupling constant approach.

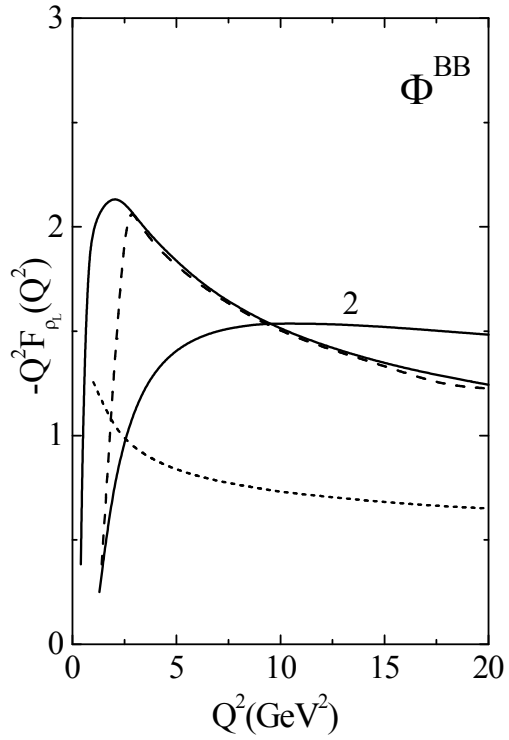


Fig. 3. The same as in fig. 2, but for the Ball-Brown wave function (1 – resummed expression (17).

Conclusion

Studies have shown that infrared renormalon effects, in other words, the power-suppressed corrections increase the usual (approximation of the frozen coupling constant) predictions of perturbative QCD by approximately two times. This conclusion is valid for both - asymptotic and Ball-Brown wave functions.

References

1. Yndurain F. J. Quantum chromodynamics: An introduction to the theory of quarks and gluons. Springer-Verlag, New York, Berlin Heidelberg Tokyo 1983, 288 p.

2. Reya E. Perturbative quantum chromodynamics // Phys. Rep. C, 1981, v. 69, No 3, p. 195-333.

3. Brodsky S., Lepage G., Mackenzie P. On the elimination of scale ambiguities in perturbative quantum chromodynamics // Phys. Rev. D, 1983, v. 28, No 1, p. 228-235.

4. Duncan A., Mueller A. Asymptotic behavior of composite-particle form factors and the renormalization group // Phys. Rev. D, 1980, v. 21, No 6, p. 1636-1650.

5. Agaev S. The running coupling method with next-to-leading order accuracy and pion, kaon elm form factors // Mod. Phys. Lett. A, 1998, v. 13, No 33, p.2637-2643.

6. Lepage G., Brodsky S. Exclusive processes in quantum chromodynamics: Evolution equations for hadronic wave functions and the form factors of mesons // Phys Lett. B, 1979, v. 87, No 4, p. 359- 365.

7. Lepage G., Brodsky S. Exclusive processes in perturbative quantum chromodynamics // Phys. Rev. D, 1980, v. 22, No 9, p. 2157-2198.

8. Ball P. and Braun V. ρ-meson light-cone distribution amplitudes of leading twist reexamined // Phys. Rev. D, 1996, v. 54, No 3, p. 2182-2193.

9. Zakharov V. QCD perturbation expansions in large orders // Nucl. Phys. B, 1992, v. 385, No 3, p. 452-480.

10. Beneke M. Renormalons // Phys. Rep., 1999, v. 317, No 1, p. 1-168, CERN-TH/98-233, hep-ph/9807443

11. Contopanagos H., Sterman G. Prinsipal value resummation // Nucl.Phys. B, 1994, v. 419, No 1, p. 77-101.

12. Mamedova Y. V., Mammadova L. N. Extended Abstracts of 4th International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications COIA2013, 10-12 July, Borovets, Bulgaria, 2013, pp.48-49.

13. Mammadova Y. V. Abstracts of V Congress of the Turkic World Mathematicians TWMS, 5-7 June, Bulan-Sogottu, Kyrgyzstan, 2014, p. 249.

14. Mamedova Y. V. Materials of 5th International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications COIA2015, 2015, 27-29 August, Baku, Azerbaijan.

15. Mamedova Y. V. Abstracts of VI Congress of the Turkic World Mathematicians TWMS, 2-5 October, Astana, Kazakhstan, 2017, p. 328.

16. Mamedova Y. V. Materials of International Conference on Operators, Functions, and System of Mathematical Physics. Khazar University, Baku, Azerbaijan, 10-14 June, 2019, 76-78.

17. Mamedova Y. V. Rep. of 2nd International Conference on Life and Engineering Sciences. 27-29 June, 2019, Istanbul, Turkey, 145.

18. Mamedova Y. V. The 7th International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications. 26-28 August, 2020, Baku, Azerbaijan, 260-262.

УДК 539.194

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО АЛКИЛИРОВАНИЯ АДАМАНТАНА ОЛЕФИНАМИ

Н.И. Баранов[1], Р.Е. Сафир[1], К.В. Боженко[1,3], А.Г. Чередниченко[1], Е.И. Багрий[2]

[1]Российский университет дружбы народов, Москва; 1042182094@rudn.ru
[2]Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева, Москва
[3]Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Аннотация: посредством квантово-химических расчетов исследованы механизмы взаимодействия адамантана с непредельными углеводородами. Показано, что основными продуктами алкилирования адамантана в присутствии кислотных катализаторов являются углеводороды н-строения. Определены стадии алкилирования адамантана, геометрическое и электронное строение интермедиатов.

Ключевые слова: ненасыщенные адамантаны, квантово-химические расчёты, кислотный катализ, алкилирование адамантана.

Соединения адамантана, содержащие двойные связи, представляют одно из наиболее важных и перспективных направлений исследований. Данные соединения используются в качестве исходных веществ для синтеза различных функциональных производных адамантанов, мономеров, термостабильных и энергоемких топлив и масел, биологически активных соединений, лекарственных препаратов, а также для получения высших объемных полимеров алмазоподобного строения – диамондоидов. В качестве примеров можно привести синтез полиаллиладамантана из 1-аллиладамантана [1], анионную сополимеризацию 2-(1-адамантил)-1,3-бутадиена и изопрена [2], синтез полимеров на основе метакрилатов и виниладамантанов [3], катионную полимеризацию 1-винил-адамантана [4], синтез поли-1,3,адамантиленалкилена из α,ω – диена [5].

В химии адамантана в последние годы широко используются квантово-химические расчёты, позволяющие не только определить электронное строение промежуточных и конечных продуктов реакции, но и уточнить механизм их протекания. Такие расчёты наиболее перспективны при изучении превращений высших гомологов адамантана – диамондоидов, труднодоступных соединений, отличающихся высоким уровнем изомерии.

В рамках метода DFT нами были исследованы реакции алкилирования адамантана такими олефинами, как этилен, пропилен, н-бутилен. Квантово-химические расчёты выполнены в приближении B3LYP/6-31G* по программе Gamess US [6, 7]. Образование ненасыщенных углеводородов наряду с алканами является особенностью алкилирования адамантана. Алкилирование адамантана проходит через стадии, включающие взаимодействие ненасыщенного углеводорода с третичным адамантилкатионом. В качестве катализатора рассмотрен хлорид алюминия.

В таблице приведены тепловые эффекты образования непредельных производных адамантана в случае его алкилирования алкенами.

$AdH + C_2H_4 = Ad\text{-}CH{=}CH_2 + H_2$	ΔH=7.7 ккал/моль
$AdH + C_3H_6 = AdCH{=}CHCH_3 + H_2$	ΔH=8.6 ккал/моль
$AdH + 1\text{-}C_4H_8 = Ad\text{-}CH{=}CH\text{-}CH_2\text{-}CH_3 + H_2$	ΔH=9.7 ккал/моль
$AdH + 1\text{-}C_4H_8 = Ad\text{-}CH_2\text{-}CH{=}CH\text{-}CH_3 + H_2$	ΔH=8.8 ккал/моль

В случае пропилена основными продуктами алкилирования в присутствии кислотных катализаторов являются углеводороды н-строения: 1-н-пропиладамантан и 1-н-пропениладамантан, образующиеся через соответствующий карбкатион [8]. При использовании в качестве катализатора $AlCl_3 \cdot HCl$ тепловой эффект химической реакции образования карбкатиона $AdH + AlCl_3 \cdot HCl \rightarrow Ad^+ + H_2 + AlCl_4^-$ составляет $\Delta H = 84.9$ ккал/моль.

Ниже приведена рассмотренная схема реакции алкилирования адамантана в положение 1 пропиленом с образованием 1-*н*-пропениладамантана:

1) $AdH + AlCl_3 \cdot HCl \rightarrow Ad^+ + H_2 + AlCl_4^-$
($\Delta H = 84.9$ ккал/моль),
2) $Ad^+ + C_3H_6 \rightarrow Ad\text{–}CH_2\text{–}C^+H\text{–}CH_3$
($\Delta H = -8.2$ ккал/моль),
3) $Ad\text{–}CH_2\text{–}C^+H\text{–}CH_3 + AlCl_4^- \rightarrow Ad\text{–}CH_2\text{–}C^+H\text{–}CH_3 \cdot AlCl_4^-$
($\Delta H = -88.2$ ккал/моль),
4) $Ad\text{–}CH_2\text{–}C^+H\text{–}CH_3 \cdot AlCl_4^- \rightarrow Ad\text{–}C^+H\text{–}CH_2\text{–}CH_3 \cdot AlCl_4^-$
($E_{акт} = 15.4$ ккал/моль, $\Delta H = 14.9$ ккал/моль),
5) $Ad\text{–}C^+H\text{–}CH_2\text{–}CH_3 \cdot AlCl_4^- \rightarrow Ad\text{–}CH{=}CH\text{–}CH_3 + AlCl_3 \cdot HCl$
($\Delta H = 10.6$ ккал/моль).

Образование насыщенных продуктов реакции сопровождается выделением энергии, а ненасыщенного без катализатора – поглощением энергии. С увеличением молекулярной массы олефинов выход таких производных падает.

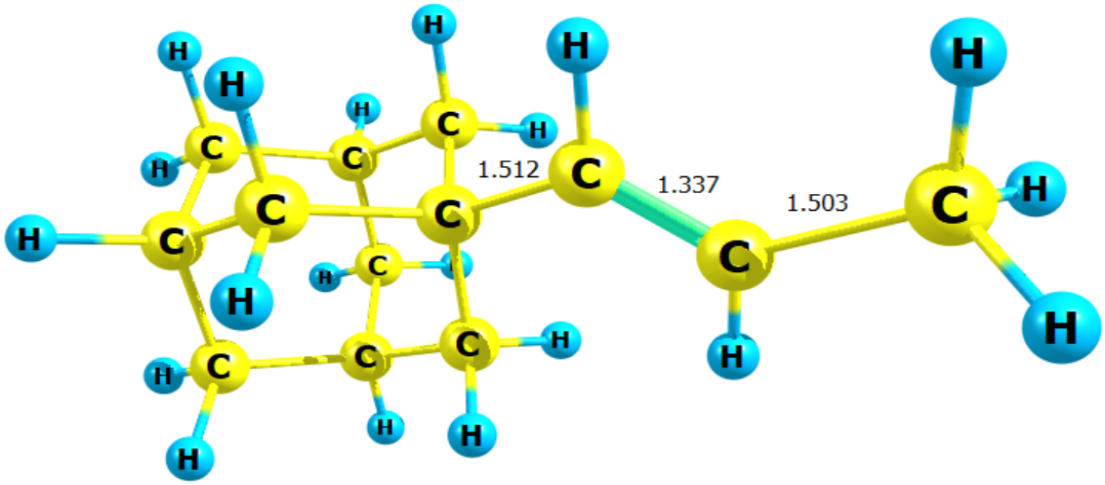


Рис. 1. Геометрическая структура 1-н-транс-пропениладамантана.
Расстояния указаны в ангстремах (Å) [8]

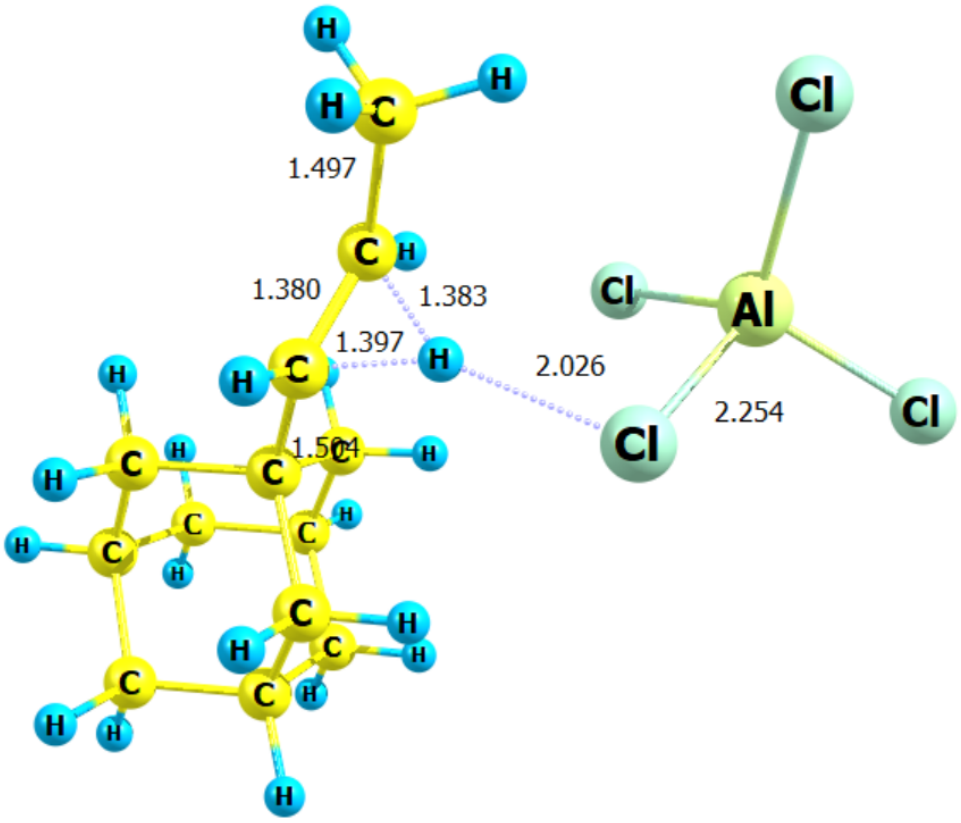


Рис. 2. Геометрическая структура переходного состояния (TS) реакции $Ad\text{-}CH_2\text{-}C^+H\text{-}CH_3 \cdot AlCl_4^- \rightarrow Ad\text{-}C^+H\text{-}CH_2\text{-}CH_3 \cdot AlCl_4^-$. Расстояния указаны в ангстремах (Å)

Образование 1-пропениладамантана происходит при распаде комплекса $Ad\text{-}C^+H\text{-}CH_2\text{-}CH_3 \cdot AlCl_4^-$. Энергия активации данной стадии 15.4 ккал/моль. При этом образование предельного продукта присоединения пропилена к адамантану – 1-н-пропиладамантана, происходящее при присоединении молекулы адамантана к катиону $Ad\text{-}CH_2\text{-}C^+H\text{-}CH_3$, протекает без энергии активации.

Выполненные расчёты позволили выяснить особенности протекания стадий алкилирования адамантана, геометрическое и электронное строение интермедиатов, а также определить термодинамические характеристики соединений и стадии образования адамантил-катиона и дальнейшего присоединения к нему олефина с образованием алкана и алкена. Увеличение кислотной силы катализатора и понижение температуры процесса должно способствовать выходу непредельного продукта в реакции каталитического алкилирования адамантана олефинами.

Список литературы

1. Ishizone, T., Goseki, R. Synthesis of polymers carrying adamantyl substituents in side chain // Polym. J. 2018. V. 50. P. 805–819. DOI:10.1038/s41428-018-0081-3.

2. Shingo Kobayashi, Hiroshi Kataoka, Takashi Ishizone, Toshinori Kato, Tomohiro Ono, Syuji Kobukata, Kikuo Arimoto, Hiroyuki Ogi. Synthesis of well-defined random and block copolymers of 2-(1-adamantyl)-1,3-butadiene with isoprene via anionic polymerization // React. Funct. Polym. 2009. V. 69. № 7. P. 409-415. DOI: 10.1016/j.reactfunctpolym.2008.12.010.

3. Douglas R. Robello. Moderately high refractive index, low optical dispersion polymers with pendant Diamondoids // J. Appl. Polym. Sci. 2012. V.127. № 1. P. 96-103. DOI:10.1002/app.37802.

4. Matthias Spohn, Masfer H. A. Alkahtani, Robert Leiter, Haoyuan Qi, Ute Kaiser, Philip Hemmer, and Ulrich Ziener. Poly(1-vinyladamantane) as a template for nanodiamond synthesis // ACS Appl. Nano Mater. 2018. V. 1. № 11. P. 6073–6080. DOI: 10.1021/acsanm.8b01238.

5. Jonas Friebel, Christopher P. Ender, Markus Mezger, Jasper Michels, Manfred Wagner, Kenneth B. Wagener, and Tanja Weil. Synthesis of precision poly(1,3-adamantylene alkylene)s via acyclic diene metathesis polycondensation // Macromolecules. 2019. V. 52. № 12. P. 4483–4491. DOI: 0.1021/acs.macromol.9b00294.

6. Michael W. Schmidt, Kim K. Baldridge, Jerry A. Boatz, Steven T. Elbert, Mark S. Gordon,Jan H. Jensen, Shiro Koseki, Nikita Matsunaga, Kiet A. Nguyen,Shujun Su, Theresa L. Windus, Michel Dupuis,John A. Montgomery Jr. General atomic and molecular electronic structure system // J. Comput. Chem. 1993. V.14. № 11. P. 1347-1363. DOI: 10.1002/jcc.540141112.

7. Giuseppe M. J. Barca, Colleen Bertoni, Laura Carrington, Dipayan Datta, Nuwan De Silva, J. Emiliano Deustua, Dmitri G. Fedorov, Jeffrey R. Gour, Anastasia O. Gunina, Emilie Guidez, Taylor Harville, Stephan Irle, Joe Ivanic, Karol Kowalski, Sarom S. Leang, Hui Li, Wei Li, Jesse J. Lutz, Ilias Magoulas, Joani Mato, Vladimir Mironov, Hiroya Nakata, Buu Q. Pham, Piotr Piecuch, David Poole, Spencer R. Pruitt, Alistair P. Rendell, Luke B. Roskop, Klaus Ruedenberg, Tosaporn Sattasathuchana, Michael W. Schmidt, Jun Shen, Lyudmila Slipchenko, Masha Sosonkina, Vaibhav Sundriyal, Ananta Tiwari, Jorge L. Galvez Vallejo, Bryce Westheimer, Marta Włoch, Peng Xu, Federico Zahariev, and Mark S. Gordon. Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system // J. Chem. Phys. 2020. V.152. № 15. P.154102. DOI: 10.1063/5.0005188.

8. Н. И. Баранов, Р. Е. Сафир, Е. И. Багрий, К. В. Боженко, А. Г. Чередниченко. Каталитическое алкилирование адамантана пропиленом: квантово-химические расчёты и данные эксперимента // Нефтехимия. 2020. Т. 60. № 5. С. 644-653. DOI: 10.31857/S0028242120050044. (Переводная версия - Baranov, N. I., Safir, R. E., Bagrii, E. I., Bozhenko K. V., Cherednichenko A. G. Catalytic alkylation of adamantane with propylene: quantum-chemical calculations and experimental data // Pet. Chem. 2020. V.60. P. 1033–1042. DOI:10.1134/S0965544120090042.

QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF CATALYTIC ALKYLATION OF ADAMANTANE WITH OLEFINS

N.I. Baranov[1], R.E. Safir[1], K.V. Bozhenko[1,3],
A.G. Cherednichenko[1], E.I. Bagrii[2]

[1]Peoples' Friendship University of Russia, Moscow
[2]A. V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Moscow
[3]Institute of Problems of Chemical Physics of RAS, Chernogolovka

Abstract: the mechanisms of interaction of adamantane with unsaturated hydrocarbons have been studied. It has been shown that the main products of adamantane alkylation in the presence of acid catalysts are normal hydrocarbons. The stages of adamantane alkylation, geometric and electronic structure of intermediates have been detected. The thermodynamic values of studied adamantanes have been calculated.

Keywords: unsaturated hydrocarbons, quantum-chemical calculations, acid catalysis, alkylation of adamantane.

УДК 539.194

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В МАГНИТНОЙ ПОДРЕШЕТКЕ БИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

К.В. Боженко, С.М. Алдошин, А.Н. Утенышев

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
bogenko@icp.ac.ru

Аннотация: выполнены квантово-химические расчеты GAUSSIAN-09 (B3LYP/LANL2DZ) и ORCA (B3LYP/TZV) магнитных свойств комплексов $[(L)_2M1^{III}(L)M2^{II}(L)_2]^{5-}$ ($M1^{III}$ - Mo и $M2^{II}$ - двухвалентные атомы 3d и 4d переходных металлов) для поиска пар металлов, отвечающих максимальному значению константы обменного взаимодействия J. Показано, что замена двухвалентного атома 3d металла на двухвалентный атом 4d металла приводит к увеличению J.

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, B3LYP/LANL2DZ, B3LYP/TZV, константа обменного взаимодействия, спиновая плотность.

Компьютерное моделирование обменных взаимодействий весьма эффективно при подборе компонент магнитной подрешетки бифункциональных материалов, отвечающей за их магнитные свойства. Оно позволяет значительно удешевить процесс поиска компонент, обеспечивающих максимальное значение константы обменного взаимодействия J. Ранее нами было показано [1-3], что комплексные анионы типа $[(L)_2M1^{III}(L)M2^{II}(L)_2]^{n-}$ (I) наиболее оптимальны для этих целей. Здесь M1 и M2 – трех- и двухвалентные атомы переходных металлов, соответственно, связанные межметальными мостиками L, n – заряд аниона. А в качестве межметального мостика наиболее эффективным оказывается дитиоксамид [4]. В [4] мы провели расчеты комплексов типа I и металлов M1 = Cr ; M2 = Ni, Co, Tc, Ru, Rh и Pd с дитиоксамидными и оксалатными лигандами. Целью данной работы является поиск более широкого круга переходных металлов, которые обеспечивают максимальное значение J. Для этого мы провели расчеты комплексов типа I и пар металлов, содержащих M1 = Mo вместо Cr; и M2 = Fe, Co, Ru и Rh с дитиоксамидным лигандом. Полученные закономерности позволят дать рекомендации химикам-синтетикам по выбору компонент магнитной подрешетки, обладающих максимальным ферромагнитным обменным взаимодействием.

Геометрическая структура комплексных анионов I была рассчитана с использованием программы GAUSSIAN-09 [5] в приближении B3LYP/LANL2DZ с оптимизацией геометрических параметров комплексов в основном высокоспиновом энергетическом состоянии. Затем константа J и спиновая плотность в этих комплексных анионах были рассчитаны с использованием полученной геометрии в приближении B3LYP/TZV по программе ORCA [6]. Константы J были рассчитаны по методу нарушенной симметрии (broken symmetry – BS) [7]. В табл. 1 приведены значения константы обменного взаимодействия J и значе-

ния спина в высокоспиновом состоянии (S_{max}). Из этой таблицы следует, что значения константы J увеличиваются при переходе от Fe^{II} к Ru^{II} и от Co^{II} к Rh^{II}. Таким образом, для рассмотренных пар металлов ферромагнитные свойства комплексов I возрастают при переходе от двухвалентных 3d металлов к двухвалентным 4d металлам без изменения трехвалентного атома 4d металла. Можно ожидать, что эта закономерность будет выполняться и в макроскопической кристаллической магнитной подрешетке.

Таблица 1

Рассчитанные значения константы обменного взаимодействия J и значения спина в высокоспиновом состоянии (S_{max})

$[L_2M1^{III}LM2^{II}L_2]^{5-}$	S_{max}	J(см$^{-1}$)
Mo^{III} Fe^{II}	7/2	3.27
Mo^{III} Ru^{II}	7/2	13.34
Mo^{III} Co^{II}	3	6.75
Mo^{III} Rh^{II}	3	11.32

В табл. 2 приведены значения спиновой плотности (SD) на атомах M1 и M2 и Δρ [M1M2] – суммарное изменение (SD) на атомах M1 и M2 по сравнению со SD на изолированных катионах $M1^{3+}$ и $M2^{2+}$, соответственно. Откуда следует, что величина Δρ[M1M2] меняется аналогично изменению константы обменного взаимодействия J. Это проясняет физический смысл этого важного параметра, положительный знак которого позволяет отнести данное взаимодействие к ферромагнитному типу. Можно сказать, что константа обменного взаимодействия пропорциональна перетеканию спиновой плотности между атомами металлов M1 и M2 в результате образования комплексов. Причем ее увеличение имеет место при переходе от двухвалентных 3d металлов к двухвалентным 4d металлам. Таким образом, полученные закономерности позволяют давать рекомендации химикам-синтетикам по выбору компонент магнитной подрешетки, обладающих максимальным ферромагнитным обменным взаимодействием.

Таблица 2

Рассчитанные значения спиновой плотности на атомах M1 и M2 и Δρ [M1M2] – суммарное изменение SD на атомах M1 и M2 по сравнению со SD на изолированных катионах $M1^{3+}$ и $M2^{2+}$

$[(L)_2M1^{III}(L)M2^{II}(L)_2]^{5-}$	M1	M2	Δρ[M1M2]
Mo^{III} Fe^{II}	2.75	3.76	0.49
Mo^{III} Ru^{II}	2.88	3.46	0.66
Mo^{III} Co^{II}	2.89	2.69	0.42
Mo^{III} Rh^{II}	2.89	2.29	0.82

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием № АААА-А19-119092390079-8 для Института проблем химической физики Российской академии наук.

Список литературы

1. С. М. Алдошин, К. В. Боженко, Д. В. Корчагин, А. Н. Утенышев, Н. А. Санина // Материалы VI Международного семинара «Физико-математическое моделирование систем», 27-28 ноября 2009, ВГТУ, г. Воронеж, 2010, с. 9.

2. К. В. Боженко, Д. В. Корчагин, А. Н. Утенышев, Н. А. Санина, С. М. Алдошин // Системы управления и информационные технологии 2010, 39, № 1,2, с.292.

3. Д. В. Корчагин, К. В.Боженко, А. Н.Утенышев, Н. А.Санина, С. М. Алдошин // Тезисы докладов XXI Симпозиума «Современная химическая физика», 24 сентября–5 октября 2010, пансионат «Маяк», г. Туапсе, с.184.

4. S. M. Aldoshin, K. V. Bozhenko, A. N. Utenyshev, Structural Chemistry, 2017, 28, 965, doi: 10.1007/s11224-016-0900-0.

5. M. J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, et al., 2009, Gaussian 2009.

6. F. Neese, The ORCA program system. Wiley interdisciplinary Reviews - Computational Molecular Science, 2012, 2, 73.

7. L. Noodleman, Journal of Chemical Physics, 1981, 74, 5737, doi: 10.1063/1.440939.

COMPUTER SIMULATION OF EXCHANGE INTERACTIONS IN MAGNETIC SUBLATICE OF BIFUNCTIONAL COMPOUNDS

K.V. Bozhenko, S.M. Aldoshin, A.N. Utenyshev

Institute of problems of chemical physics RAS, Chernogolovka

Abstract: quantum chemical calculations of GAUSSIAN-09 (B3LYP/LANL2DZ) and ORCA (B3LYP/TZV) magnetic properties of complexes $[(L)_2M1^{III}(L)M2^{II}(L)_2]^{5-}$ ($M1^{III}$ - Mo and $M2^{II}$ - divalent atoms of 3d and 4d transition metals) were performed to search for metal pairs corresponding to the maximum value of the exchange interaction constant J. It is shown that the replacement of a divalent 3d metal atom with a divalent 4d metal atom leads to an increase in J.

Keywords: quantum chemical calculations, B3LYP/LANL2DZ, B3LYP/TZV, exchange interaction constant, spin density.

УДК 539.194

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ НЕОБЫЧНОЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ХЕЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ НЕКОТОРЫХ 3d МЕТАЛЛОВ С 3,5-ДИ-(ТРЕТ-БУТИЛ)-2-ОКСИАЗОБЕНЗОЛОМ

А.Н. Утенышев, С.М. Алдошин, К.В. Боженко, В.В. Ткачев

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
uten@icp.ac.ru

Аннотация: проведены квантово-химические расчеты (TPSSh/def2tzvp(Cu,Fe,Mn,Cr)/6-311G*(C,N,O,H)) хелатных комплексов с 3,5-ди-(*трет*-бутил)-2-оксиазобензолом в качестве лиганда. Геометрии изученных комплексов рассчитаны в низкоспиновом и высокоспиновом состоянии– синглетном и триплетном для Fe(II) и Cr(II), и дублетном и квартетном для Mn(II) и Co(II). Для металлов с наполовину заполненной оболочкой (Cr) и наполовину заполненной d-подоболочкой (Mn) комплексы имеют тетраэдрическую структуру в основном энергетическом состоянии, а для Fe(II) и Co(II) имеют необычную куполообразную структуру.

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, TPSSh/def2tzvp, хелатные комплексы, квантово-химическое моделирование.

Известно, что для ряда хелатных комплексных соединений на основе производных азобензола возможно образование различных изомеров. Такая изомерия указанных комплексов реализуется вследствие амбидентного характера азо-группы. В работе [1] показано, что оба атома азота могут проявлять почти одинаковую электронодонорную способность, и поэтому стремятся к участию в координации с комплексообразователем в равной степени.

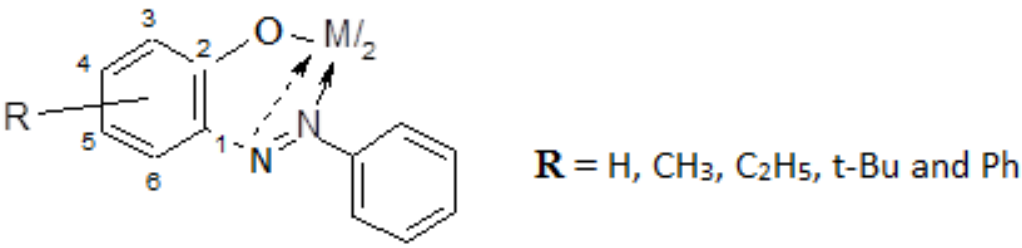


Рис. 1.

В [2-5] приведено получение и исследование комплексов одновременно с 5 и 6-членными циклами в одном координационном узле. Известные и описанные в литературе [6, 7] немногочисленные комплексы с координационным узлом PdN_2O_2 имеют плоско-квадратное строение. В работе [8] показано, что в комплексах палладия реализуется почти плоское строение с лигандами, отличными от 3,5-ди-(*трет*-бутил)-2-оксиазобензола, что было подтверждено рентгеноструктурными исследованиями.

В [9, 10] мы показали, что 3,5-дитретбутил-2-оксиазобензол образует с никелем и палладием хелатные комплексы с необычной куполообразной геометрией, причем вершина этого купола образована транс-плоским координационным узлом. Такое необычное строение наблюдается только в случае объёмных заместителей. В случае, когда в роли заместителя выступает атом водорода – координационный узел плоский. По мере увеличения объёма заместителя, начиная с метильного, координационный узел приобретает купольность, которая становится максимальной в случае трет-бутила.

Расчет модельных комплексных соединений на основе Cr, Mn, Fe и Co выполнен по программе GAUSSIAN-09 [11] в приближении TPSSh/def2tzvp(Cr, Mn, Fe, Co)/6-311G*(C,N,O,H). Полные энергии комплексов представлены в таблице. Как видно из таблицы, для комплексов, на основе Fe, Cr и Mn, более выгодны высокоспиновые основные состояния. Наиболее стабильными являются комплексы с атомом водорода, то есть с наименее объемными заместителями, и по мере увеличения объема заместителя относительная стабильность комплексов уменьшается.

Полные энергии комплексов E_{tot} (а.е.), рассчитанные для низкоспинового и высокоспинового состояний комплексов в приближении TPSSh/def2tzvp(Pd,Ni)/6-311G*(C,N,O,H) и их разность ΔE_{tot} (ккал/моль). Комплексы обозначены в виде их координационных узлов

координационный узел комплексов	2S+1, E_{tot} (а.е.)	2S+1, E_{tot} (а.е.)	ΔE_{tot}, ккал/моль
Комплексы с высокоспиновыми основными состояниями			
	1	3	
Fe-NH	-2725.93060	-2725.96585	22.1
Fe-Me	-2804.56890	-2804.59310	15.2
Fe-Ph	-3188.15267	-3188.17641	14.9
	1	3	
Cr-NH	-2506.68390	-2506.72870	28.1
Cr-Me	-2585.33095	-2585.35915	17.7
Cr-Ph	-2968.91652	-2968.95732	25.6
	2	4	
Mn- NH	-2613.22090	-2613.24281	25.6
Mn- Me	-2691.86787	-2691.88564	11.2
Mn- Ph	-3075.44962	-3075.46907	12.2
Комплексы с низкоспиновыми основными состояниями			
	2	4	
Co-NH	-2845.03002	-2845.00745	14.2
Co-Me	-2923.66051	-2923.65704	2.2
Co-Ph	-3307.23934	-3307.22620	8.2

Для комплексов с атомом кобальта в качестве комплексообразователя, основным является низкоспиновое состояние, а для остальных комплексов – высокоспиновое состояние. Как видно, стабильность комплексов уменьшается при увеличении объема заместителя (переход от атома водорода к трет-бутилу) для всех типов рассмотренных комплексов.

На основании проведенных расчетов показано, что рассмотренные комплексы можно разделить на две группы – имеющие тетраэдрическое строение и куполообразное строение с объемным заместителем. Комплексы на основе металлов с наполовину заполненной оболочкой (Cr) и наполовину заполненной d-подоболочкой (Mn) имеют тетраэдрическую геометрию (рис. 2), а комплексы на основе Fe(II) и Co(II) обладают необычной куполообразной структурой (рис. 3).

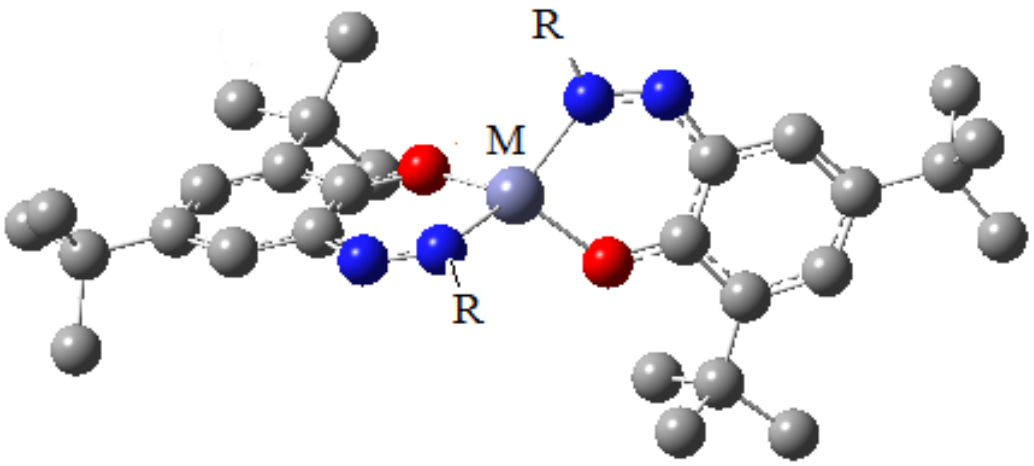


Рис. 2. Тетраэдрическая геометрия комплексов, M = Cr, Mn

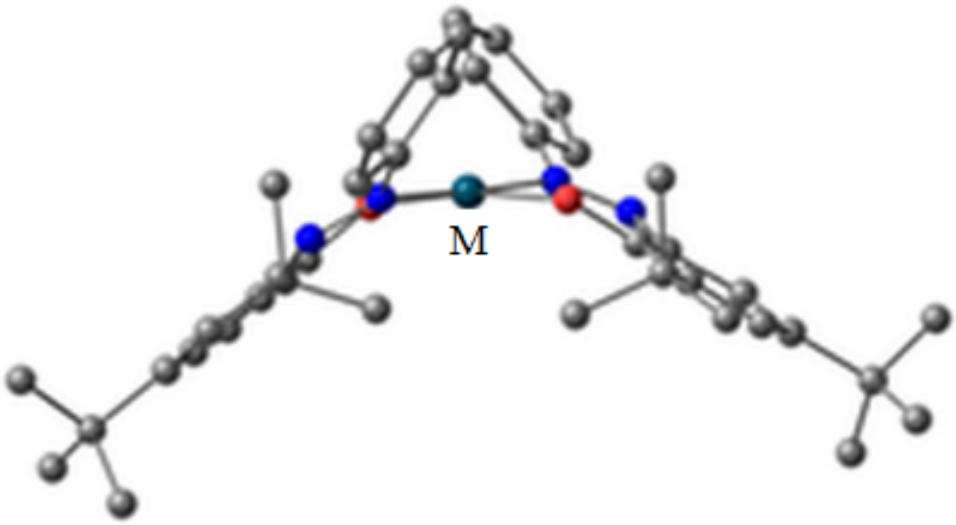


Рис. 3. Куполообразная геометрия комплексов, M = Fe, Co

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием № АААА-А19-119092390076-7 для Института проблем химической физики Российской академии наук.

Список литературы

1. В. А. Коган, Н. Н. Харабаев, О. А. Осипов, Э. Н. Юрченко, *Журн. общ. химии,* 1975, 45, 362 [J. Gen. Chem. USSR (Engl. Transl.), 1975, 351].

2. В. А. Коган, Н. Н. Харабаев, О. А. Осипов, С. Г. Кочин. *Журн. структур. химии.*, 1981, 22, 1, 126 [J. Struct. Chem. (Engl. Transl.), 1981, 96]

3. О. А. Дьяченко, Л. О. Атовмян, С. М. Алдошин, В. В. Ткачев. *Журн. структур. химии*, 1978, 19, 5, 829.

4. V. A. Kogan, S. G. Kochin, A. S. Antsyshkina, G. G. Sadikov, A. D. Garnovskii, *Mendeleev Commun*., 1997, 239.

5. С. М. Алдошин, В. А. Алексеенко, Л. О. Атовмян, О. А. Дьяченко, В. А. Коган, С. Г. Кочин, О. А. Осипов, *Координац. химия*, 1975, 10, 1075 [Soviet J. of Coord. Chem. (Engl. Transl.), 1975, 997]

6. А. С. Бурлов, А. И. Ураев, К. А. Лысенко, И. С. Васильченко, С. А Мащенко, Е. В. Коршунова, Д. А. Гарновский, Е. Д. Гарновская, Г. С. Бородкин, *Журнал неорганической химии*, 2015, 60, 12, 1621. [Burlov A. S., Uraev A. I., Vasil'chenko I. S., Mashchenko S. A., Korshunova E. V., Garnovskii D. A., Garnovskaya E. D., Borodkin G. S., Lysenko K. A. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2015. 60. 12. P. 1481-1486.]

7. S. D. Ana, M. Ferreira, N. Fernanda, N. Carvalho, M. Adelino, GalvãoLuís F.Veiros, *Inorganica Chimica Acta*, 2013, 395, 169.

8. M. N. Kostic, L. M. Dutca, *Comprehensive Coordination Chemistry II / Eds. McCleverty Y. A., Meyer T. Y. Amsterdam–Oxford–N.Y.: Elesevier Pergamon Press*, 2003, 556.

9. В. А. Коган, С. Н. Любченко, И. Н. Щербаков, А. М. Ионов, В. В. Ткачев, Г. В. Шилов, С. М. Алдошин, *Координац. Химия*, 2005, 31, 8, 563. [Kogan V. A., Lyubchenko S. N., Shcherbakov I. N., Ionov A. M., Tkachev V. V., Shilov G. V., Aldoshin S. M. *Russian Journal of Coordination Chemistry*. 2005. Т. 31. № 8. С. 533-540]

10. В. В. Ткачев, К. В. Боженко, А. Н. Утенышев, С. М. Алдошин, Л. Г. Гуцев, *Известия АН. Сер. Химическая*, 2021, 5, 000.

11. Licence to Use Agreement: *Gaussian, Inc., 340* Quinnipiac Street, Building 40, Wallingford, CT 06492.

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF UNUSUAL GEOMETRIC STRUCTURE OF CHELATE COMPLEXES OF CERTAIN 3d METALS WITH 3,5-DI- (TERT-BUTYL) -2-OXYAZOBENZENE

A.N. Utenyshev, S.M. Aldoshin, K.V. Bozhenko, V.V. Tkachev

Institute of Problems of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

Abstract: quantum chemical calculations were performed (TPSSH/def2tzvp(Cu,Fe,Mn,Cr)/6-311G*(C,N,O,H)) of chelate complexes with 3,5-di-(tert-butyl)-2-hydroxyazobenzene as a ligand. The geometries of the studied complexes are calculated in the low-spin and high-spin states - singlet and triplet for Fe(II) and Cr(II), and doublet and quartet for Mn(II) and Co(II). For metals with a half-filled shell (Cr) and a half-filled d-subshell (Mn), the complexes have a tetrahedral structure in the ground energy state.

Keywords: quantum chemical calculations, TPSSh/def2tzvp, chelate complexes, quantum chemical modeling.

UDC 532.685: 532.546

ABOUT SOME PROBLEMS OF FILTRATION THEORY

E.N. Bereslavskii

Saint Petersburg State University of Civil Aviation
eduber@mail.ru

Abstract: the following filtration flows with unknown free boundaries are investigated:

- in case of a flow past the Zhukovsky groove in the case when the soil layer is underlain along its entire length with an impermeable base and evaporation from the free surface occurs;
- in case of a flow past the Zhukovsky groove in the case when the underlying layer is a completely well-permeable aquifer and infiltration occurs on the free surface;
- when groundwater moves in a rectangular bridge with a partially impenetrable vertical wall in the presence of evaporation from the free surface;
- when groundwater moves to an imperfect gallery in the presence of evaporation from the free surface.

Keywords: boundary value problem, positive solution.

Introduction

Within the theory of the flat established filtering of an incompressible fluid under Darci's law in homogeneous and isotropic soil some tasks connected with currents in the presence of evaporation or infiltration on a free surface of subsoil waters are considered.

1. Currents at flow of a groove Zhukovsky

The task about flow of a groove was for the first time studied by N. E. Zhukovsky [1] where Kirchhoff's method altered by it in the theory of streams was used for a solution of tasks with a free surface and special analytic function which is widely used in the theory of filtering is entered. Since function, and a task and a groove bear a name of Zhukovsky [2-6]. Work [1] opened a possibility of mathematical modeling of the movement of subsoil waters under Zhukovsky's groove and laid the foundation for researches of the specified class of filtrational currents (see, for example, reviews [2-6]).

It should be noted that in tasks about flow of a groove of Zhukovsky application of function of Zhukovsky only then results in effective results when in addition to a free surface the border of area of a current contains only horizontal lines of equal potential and vertical lines of current (V. V. Vedernikov, F. B. Nelson Furriers, S. N. Numerov, V. I. Aravin, etc.). However in actual practice hydrotechnical construction, [2–5], the irrigated agriculture [2, 4, 7], etc. directly under integumentary deposits along with horizontal pressure head water-bearing layers more high-permeability [7]

also horizontal waterproof inclusions often meet that radically affects the nature of filtrational currents [8-12].

At the same time so far there are no works devoted to a special research of impact of evaporation or infiltration on filtrational processes. Accounting of these important physical factors for the present did not become broad property of exact analytical solutions.

In the presented work on the example of two limit filtrational schemes which arise at flow of a groove of Zhukovsky, the impact of evaporation or infiltration on a current picture is studied.

The first limit scheme corresponds to a case when the layer of earth on all the extent is spread by the impenetrable horizontal basis and from a free surface there is a uniform evaporation of intensity ε ($0 < \varepsilon < 1$). The current is provided with water inflow from the left part of a band of flooding with a liquid layer, invariable on time. As the right edge of a band of flooding serves the impenetrable vertical screen in the form of a groove of Zhukovsky which basis is located in layer, at the same time the static height of a capillary raising of a subsoil water can be considered (fig. 1).

In the second limit scheme the layer of earth is spread by well permeable pressure head aquifer in which pressure has constant H_0 value, and on a free surface there is a uniform infiltration of intensity ε. Far from a groove (at $x \to \infty$) the curve of a depression is horizontal and located at H_0 height over an aquifer (fig. 2).

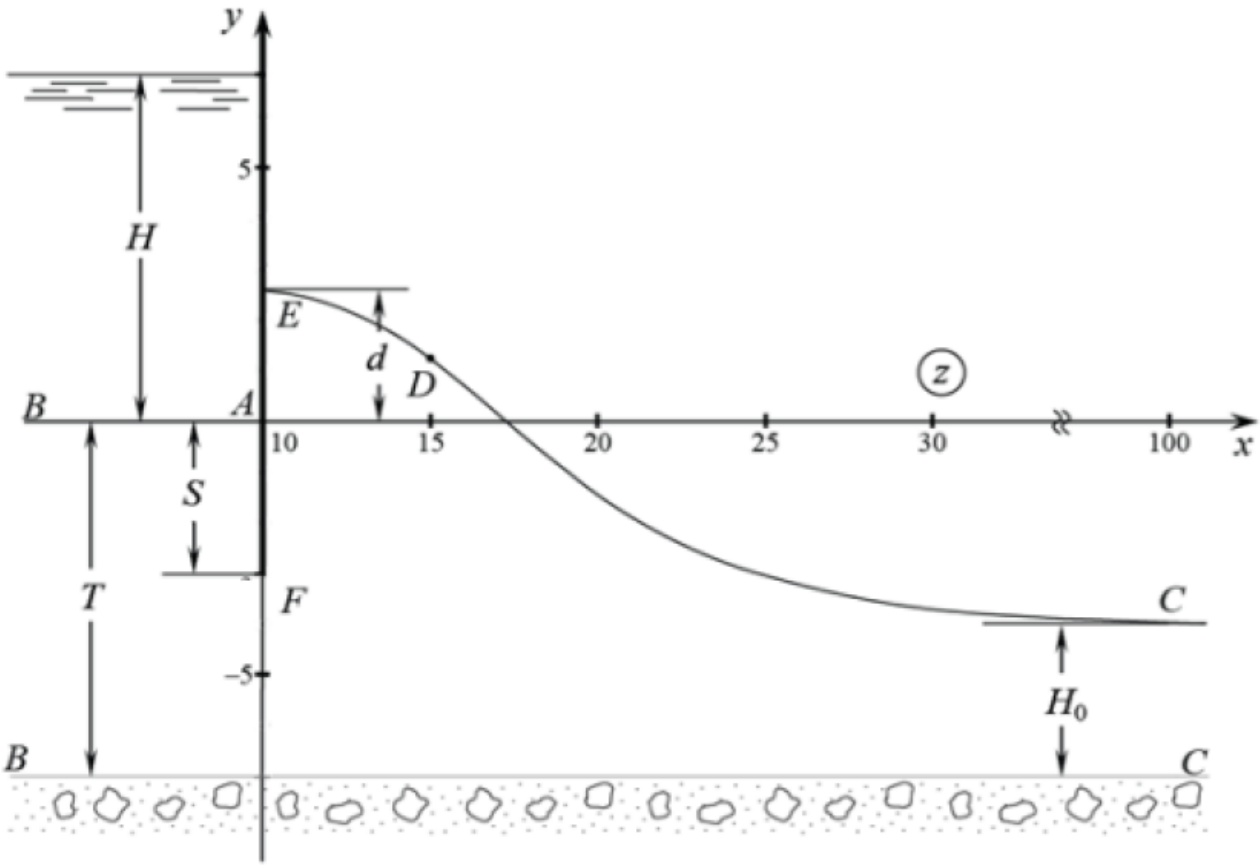


Fig. 1. The current picture calculated at $\varepsilon = 0.6$, $h_c = 0.5$, $T = 7$, $S = 3$, $H = 5$

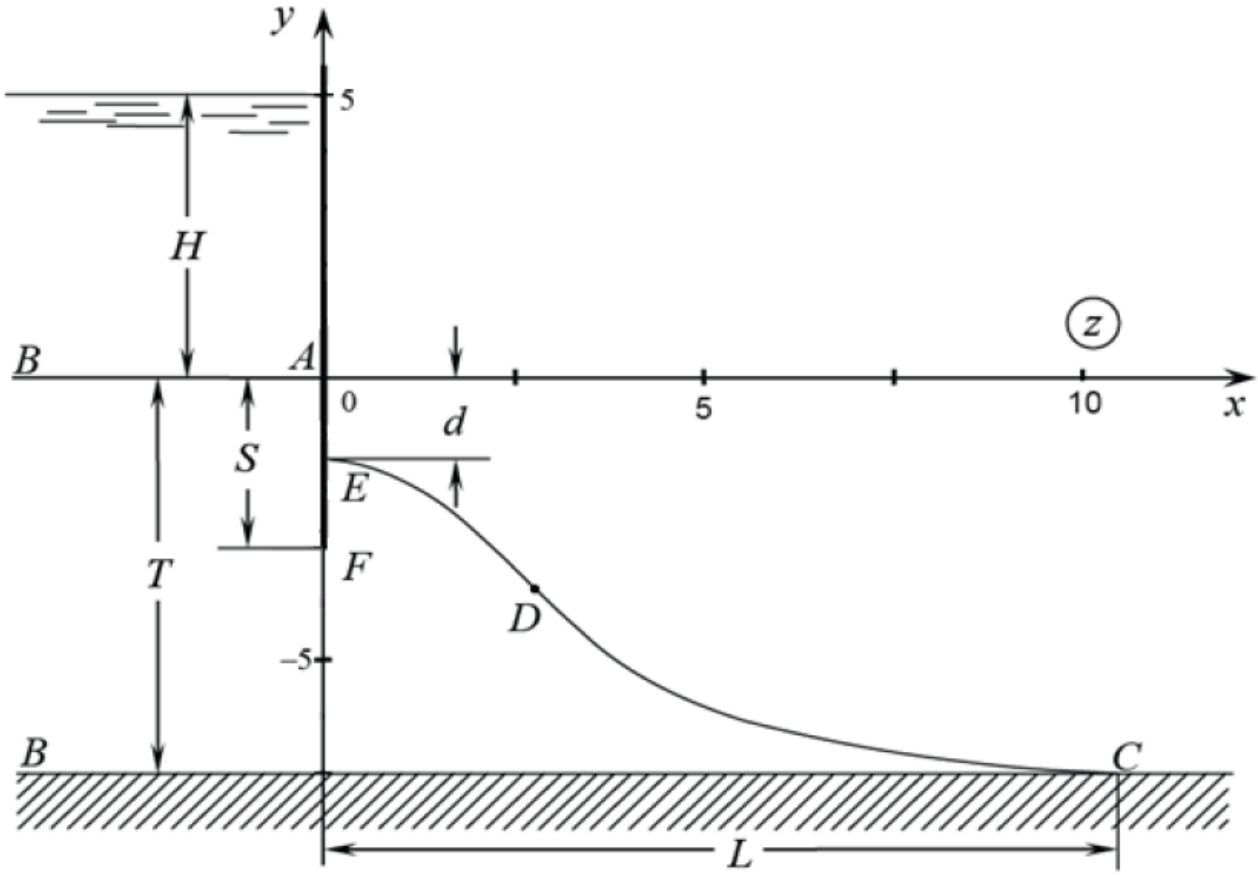


Fig. 2. The current picture calculated at $\varepsilon = 0.6$, $T = 7$, $S = 3$, $H = 7$, $H_0 = 3$ and $x_C = 100$

2. Currents in a rectangular jumper with partially impenetrable vertical wall and to imperfect gallery

The exact solution of a task on a fluid influx to the imperfect well with the flooded filter (i.e. an axisymmetric task) or the tubular well representing an impenetrable pipe with the filter in some (usually lower) its part is connected with great mathematical difficulties and so far is not found. Therefore in due time as first approximation to a solution of similar tasks by P. Ya. Polubarinova-Kochina, V. G. Pryazhinska, V. A. Postnov and V. N. Emikh [2, 6, 7, 17, 18] considered some corresponding flat task analogs about filtering in a rectangular jumper with partially impenetrable vertical wall and to imperfect gallery. It should be noted that areas of values of complex speed in the specified cases allow to apply by means of inversion at a solution Christoffel-Schwartz's formula.

In work the exact analytical solution of a task on a current of subsoil waters in a rectangular jumper with slopes of A_0A_1 and D_0B, width of L located on the impenetrable horizontal basis of length of L is given. Water height is equal in an upper byef to H, lower reach with water level of H_2, having partially impenetrable vertical wall CD (screen), adjoins a basis sole. The upper bound of area of the movement is free surface AD which is coming out with which there is a uniform evaporation to intensity ε (fig. 3). In the considered area of complex speed, unlike [2, 6, 7, 17, 18],

there are not rectilinear, but circular polygons that does not give the chance to use classical integral of Christoffel-Schwartz.

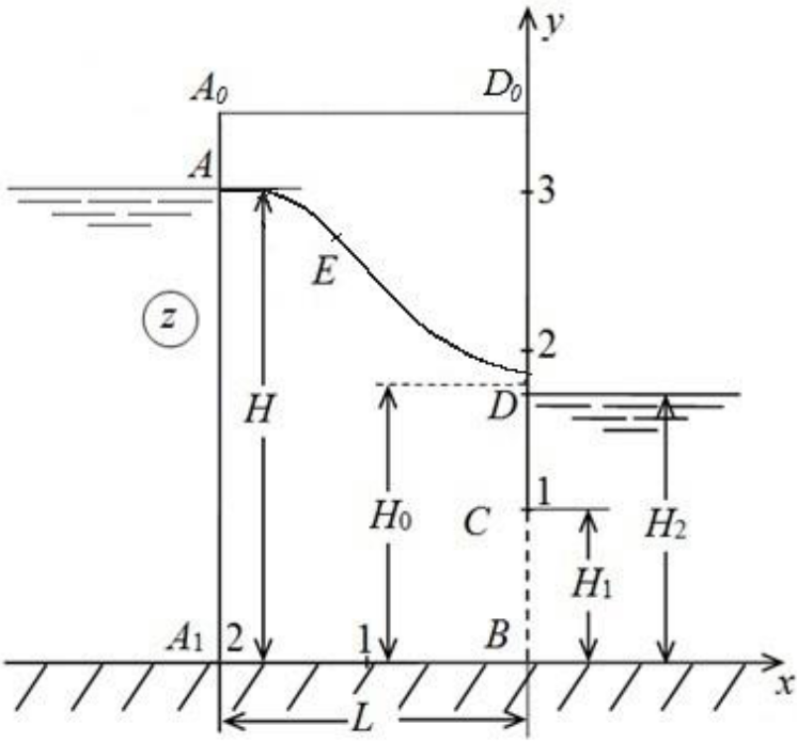


Fig. 3. The current picture in a rectangular jumper calculated at $\varepsilon = 0.5$, $H = 3$, $L = 2$, $H_1 = 1$, $H_2 = 1.4$

The task solution on a current to the imperfect well formally turns out from a task solution on filtering in a rectangular jumper with partially impenetrable vertical wall in case of its infinite width, i.e. at $L = \infty$ [19, 20].

3. Technique of solutions

For studying of the specified currents in the presence of evaporation or infiltration on a free surface the mixed multiple parameter boundary value problems of the theory of analytic functions which solution is carried out with use of the method of P.Ya. Polubarinova-Kochina [2-7] based on application of the analytical theory of linear differential equations of a class of Fuchs are formulated. And also [21-23] ways of conformal mapping of a special type of circular polygons [24] developed for areas which are very typical for tasks of the theory of filtering. Accounting of characteristics of the considered classes of areas of the hodograph of speed allowed to present solutions of tasks in the closed form through elementary functions that does their use the simplest and convenient in practice.

Conclusion

On the basis of the studied models calculation algorithms are developed:

– heights of a raising of a subsoil water behind Zhukovsky's groove during its flow, width of capillary spreading of liquid on a water emphasis (in scheme 1) and also values of a filtrational expense;

– ordinates of exit point of a curve depression on the screen, a filtrational expense and coordinates of points of a free surface when filtering in a rectangular jumper and to imperfect gallery.

The received results give an idea (at least qualitatively) of possible dependence of characteristics of a current by filtering consideration already to the imperfect well or a tubular well.

References

1. N.E. Zhukovsky. Leakage of water through dams//M.: Gostekhizdat, 1950. T. 7. Page 297-332.

2. P.Ya. Polubarinova-Kochina. Theory of the movement of subsoil waters. M.: Gostekhizdat, 1952. 676 pages; the 2nd prod. M.: Science, 1977. 664 pages.

3. V.I. Aravin, S.N. Numerov. The theory of the movement of liquids and gases in the non-deformable porous environment. M.: Gostekhizdat, 1953. 616 pages.

4. Development of researches on the theory of filtering in the USSR (1917–1967). M.: Science, 1967. 545 pages.

5. G.K. Mikhaylov, V.N. Nikolayevsky. The movement of liquids and gases in porous environments//Mechanics in the USSR in 50 years. M.: Science, 1970. T. 2. Page 585 – 648.

6. P.Ya. Kochina. Chosen works. Hydrodynamics and theory of filtering. M.: Science, 1991. 351 pages.

7. P.Ya. Polubarinova-Kochina, V.G. Pryazhinskaya, V.N. Emikh. Mathematical methods in questions of irrigation – M.: Science, 1969.

8. E.N. Bereslavskii. About some hydrodynamic models connected with a problem of Zhukovsky about flow of a groove//Dokl. RAS. 2013. Volume 448. No. 5, page 529-533

9. E.N. Bereslavskii. About some mathematical models connected with a problem of Zhukovsky about flow of a groove//Applied mathematics and mechanics. 2014. T.78. Issue 3.S. 394-400.

10. E. N. Bereslavskii. Modeling the Movement of Groundwater from the Pits, Surrounded with Tongues of Zhukovsky// International Journal of Teoretical and Applied Mathematics (USA).2017. V.3. №4. pp.124–137.

11. E.N. Bereslavskii. Effect of Evaporation or Infiltration on the Free Surface of Groundwater in Certain Problems of Underground Hydromechanics//American Journal of Applied Mathematics and Statictics.2017.V.5.№5.pp. 159–163.

12. E. N. Bereslavskii. Application of Method Polubarinova-Kochina for Research of Groundwater Motion from Ditcheshences Tongue Zhukovsky// International Journal of Mathematical Sciences: Advance and Applications. 2017.V.8. № 1. p.p. 11–28.

13. V.G. Pryazhinskaya. The movement of subsoil waters in a rectangular jumper with an impenetrable vertical wall//Izv. Academy of Sciences of the USSR. Mechanics and mechanical engineering. 1964. No. 2. Page 41-49.

14. P.Ya. Polubarinova-Kochina, V.A. Postnov, V.N. Emikh. The established filtering to imperfect gallery in non-pressure layer//Izv. Academy of Sciences of the USSR. Mechanics of liquid and gas. 1967. No. 4. Page 97-100.

15. E.N. Bereslavskii, L.M. Dudina. About the movement of subsoil waters to imperfect gallery in the presence of evaporation from a free surface//Mathematical modeling. 2018. T.30. No. 2. Page 99-109.

16. E.N. Bereslavskii, L.M. Dudina. On Ground Water Flow to an Imperfect Gallery: Case of Evaporation from a Free Surface//Mathematical Models and Computer Simulations.2018. V. 10. № 5. pp. 601–608

17. E.N. Bereslavskii, P.Ya. Kochina. About some equations of a class of Fuchs in gidro-and aeromechanics//Izv. RAS. Mechanics of liquid and gas. 1992. No. 5. Page 3-7.

18. P.Ya. Kochina, E.N. Bereslavskii, N.N. Kochina. Analytical theory of linear differential equations of a class of Fuchs and some problems of underground hydromechanics. Ch.1. Pre-print No. 567. M.: Ying t of mechanics problems. RAS. 1996. Pre-print No. 567. 122 pages.

19. E.N. Bereslavskii, P.Ya. Kochina. About the differential equations of a class of Fuchs which are found in some problems of mechanics of liquids and gases//Izv. RAS. Mechanics of liquid and gas. 1997. No. 5. Page 9-17.

20. E.N. Bereslavskii. About the differential equations of a class of Fuchs connected with conformal mapping of circular polygons in polar grids//Differential equations. 1997. T. 33. No. 3. Page 296-301.

21. E.N. Bereslavskii. About integration in the closed form of some differential equations of a class of Fuchs which are found in gidro-and aeromechanics//Dokl. RAS. 2009. T.428. No. 4. page 439-443.

22. E.N. Bereslavskii. About accounting of infiltration or evaporation from a free surface by method of circular polygons//Applied mathematics and mechanics. 2010. T.74. Issue 2. page 239-251.

23. E.N. Bereslavskii. About integration in the closed form of some differential equations of a class of Fuchs connected with conformal mapping of circular pentagons with a section//Differential equations. 2010. T.46. No. 4. Page 459-466.

24. E.N. Bereslavskii. About application of the equations of a class of Fuchs for calculation of filtering from channels and sprinklers//Applied mathematics and mechanics. 2013. T. 77. Issue 5. Page 711-724.

УДК 517 11

ОСОБЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ В ЦЕПОЧКЕ МАЯТНИКОВ С КРАТНЫМИ ЧАСТОТАМИ

Е.Е. Гетманова

ООО «Дистанционный репетитор», Москва
elge@mail.ru

Аннотация: в работе показано, как осуществляется обмен энергией между различными группами маятников в цепочке линейных несвязанных осцилляторов. Показаны особенности возникновения последовательных совокупностей маятников с повышенной энергией, перемещения областей повышенной энергией и определено, в каких интервалах времени происходит наиболее существенный энергетический обмен между высокочастотными маятниками.

Ключевые слова: волны в системе несвязанных линейных осцилляторов, обмен энергией между волнами-группами, энергетические группы.

В работе [1] показано, что несвязанные линейные осцилляторы (маятники, расположенные в ряд) с кратными частотами $\omega_{0s} = 5s, s = 1, 2, \ldots, s_{MAX}$ ($s_{MAX} = 40$) под действием импульса $T = 2\pi/\omega$ силы ($\omega = 100\ \text{с}^{-1}$) совершают свободные колебания, характерной особенностью которых является появление волн в результате согласованных колебаний маятников, входящих в определенные (волновые) группы.

В работе показано, что предположения о существовании
1) волн-групп – совокупностей маятников, формирующих волну в момент $t_{S,2\pi n}$ (середина временного интервала существования ансамбля с числом волн S, включенные в волну-группу маятники имеют одинаковую фазу, энергия каждого, как элемента волны, равна сумме потенциальных энергий маятников);
2) энергетических групп – совокупности осцилляторов, которые обмениваются (получают или отдают энергию), при достижении максимального смещения (максимального значения потенциальной энергии) осцилляторы, включенные в волну-группу, переходят в следующие энергетические группы;
позволили установить, при каких условиях энергия некоторой последовательной совокупности маятников значительно превышает энергию остальных маятников, в чем причина перемещения данного максимума, при каких условиях осуществляется разделение на группы с одинаковым числом осцилляторов и одинаковым распределением энергии. Выяснено в таких интервалах и почему осуществляется обмен энергией между высокочастотными маятниками, а низкочастотные маятники находятся в состоянии близком к равновесному.

В каждой волне-группе существуют первоначальные маятники, которые входят в начальные энергетические группы (начальные группы включают не менее двух маятников).

Осцилляторы, включенные в волны-группы, но не являющиеся первоначальными, образуют тождественные энергетические группы. Число маятников в начальной энергетической группе, совпадает с числом маятников в тождественных группах, что обуславливает одинаковый обмен энергией в указанных

группах. Таким способом формируется связь между маятниками в начальных (частоты которых, в общем случае, отличаются незначительно) и тождественных группах (различие в частотах существенно). Совокупность обменивающихся энергией осцилляторов начальных и тождественных групп обозначается как энергетическая петля.

Окончание действия импульса создает в цепочке одну начальную (осцилляторы $5\,\text{с}^{-1}, 10\,\text{с}^{-1}, \ldots, 95\,\text{с}^{-1}$, $s = 1, 2, \ldots, 19$) и тождественную ($100\,\text{с}^{-1}, 105\,\text{с}^{-1}, \ldots,$ $190\,\text{с}^{-1}$, $s = 20, 21, \ldots, 38$) группы. Далее последовательно образуются ансамбли с уменьшающимся числом волн $38, 37, 36, \ldots, 20$ (рис. 1), что приводит к сокращению числа осцилляторов в начальной группе (в результате достижения максимального смещения и переходе в тождественную группу, поскольку в интервале $(1-5{,}5)T$ в каждой группе энергия передается от низкочастотных маятников к высокочастотным) и увеличение числа тождественных групп.

В момент $t = 1{,}5T$ (ансамбль с числом волн 20) первая начальная энергетическая группа включает маятники с частотами $5\,\text{с}^{-1}, 10\,\text{с}^{-1}, \ldots, 45\,\text{с}^{-1}$, $s = 1, 2, \ldots, 9$ (маятники с номерами $s = 1$ и $s = 9$ выполняют наиболее значимый энергетический обмен), и три тождественные группы (маятники с номерами $11,12,13,\ldots 19$, $21,22,23,\ldots 29$, $31,32,33,\ldots 39$ (рис. 2.1). На рис. 2, 3 картина, показывающая энергию маятников, дополняется линиями, которые охватывают все маятники каждой энергетический группы. Смещение линий от положения равновесия определяет величину энергии каждой из существующих в данный момент энергетических групп.

Энергетическая петля, включающая осцилляторы с номерами $1-9-11-19-21-29-31-39$, устанавливает последовательность маятников, которые в данный момент обмениваются энергией.

Маятники $2-8-12-18-22-28-32-38$ также формируют петлю, которая определяет обмен энергией (в начальной группе обмен энергией выполняется между маятниками с частотами $10\,\text{с}^{-1}$ и $40\,\text{с}^{-1}$, номера $s = 2$ и $s = 8$).

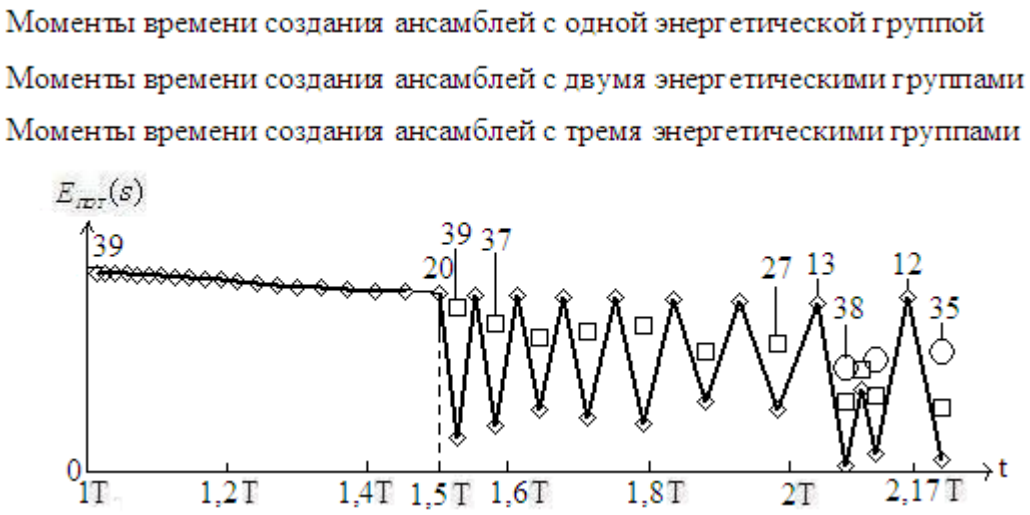


Рис. 1

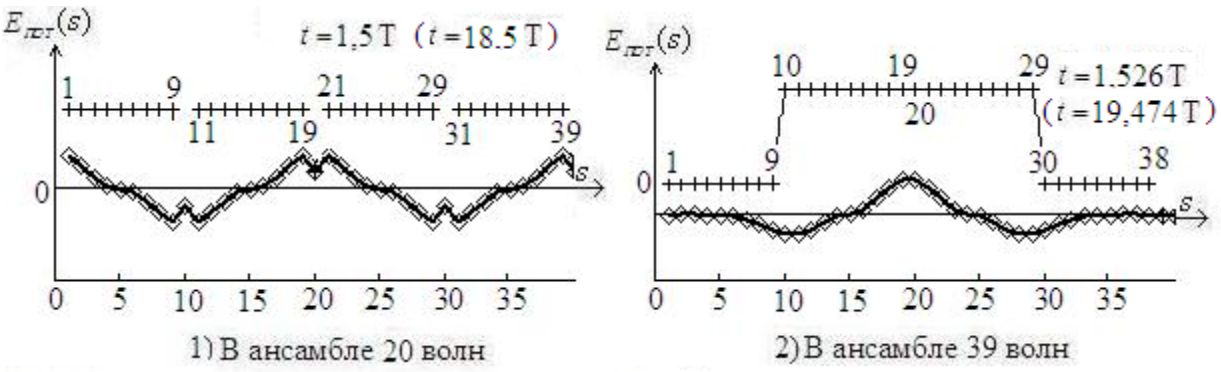


Рис. 2

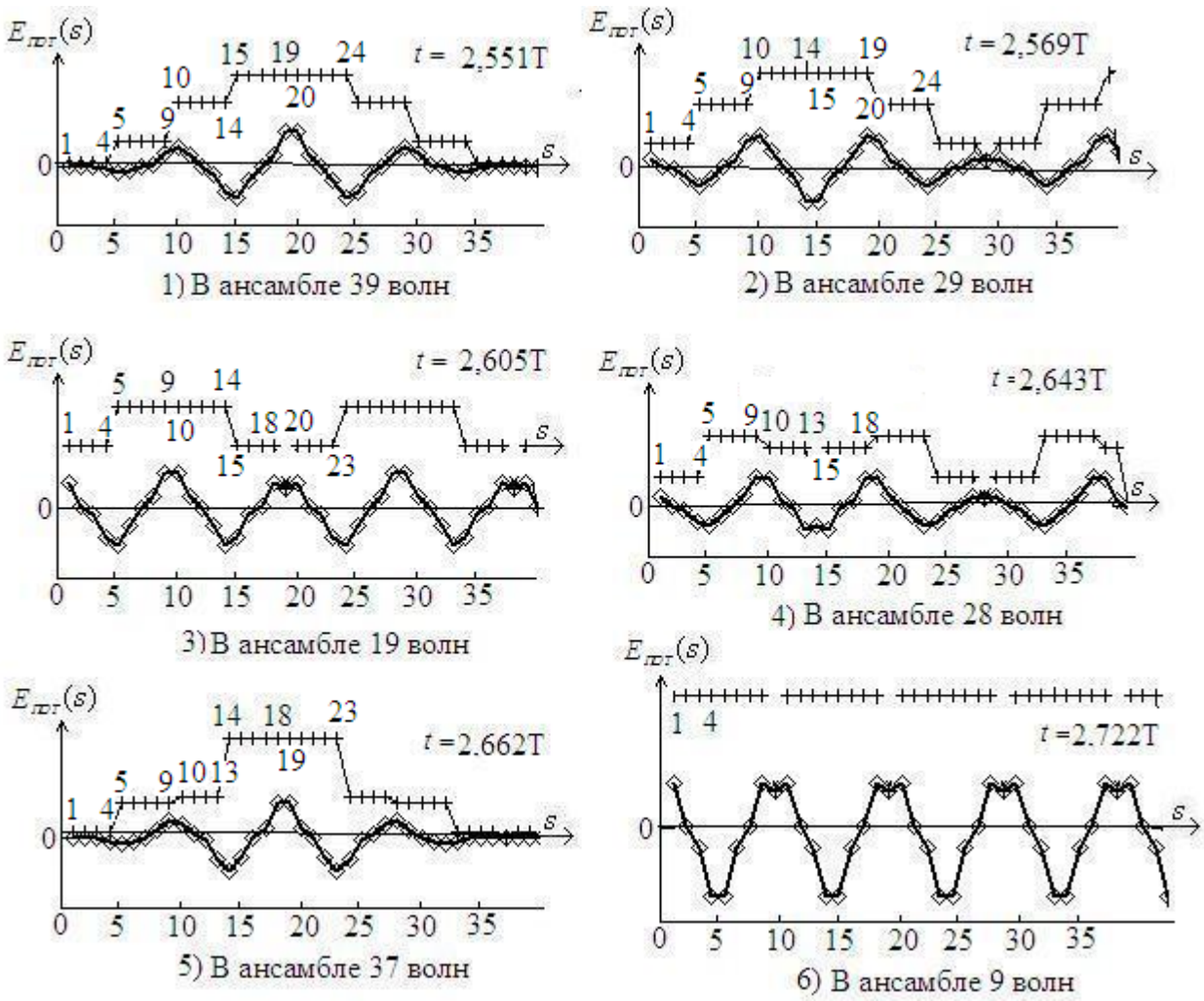
В следующий момент $t=1{,}526T$ создается ансамбль из 39 волн (рис. 1, рис. 2.2), возникает последовательность (вторая энергетическая группа), включающая маятники с частотами $50\,\text{с}^{-1}, 55\,\text{с}^{-1}, \ldots, 95\,\text{с}^{-1}$, $s=10, 11, \ldots, 19$ тождественная группа образована из элементов $s=20, 21, \ldots, 29$. Выделенный ряд осцилляторов выполняет обмен энергией независимо от остальных (энергетическая петля для маятников с максимальной энергией $10-19-20-29$). Энергия второй группы более чем в четыре раза превышает энергию первой, которая содержит маятники $s=1, 2, \ldots, 9$ (тождественная группа $s=30, 31, \ldots, 38$). В скобках (рис. 2) указаны моменты времени с одинаковым распределением, но с противоположным направлением передачи энергии.

При формировании ансамблей с числом волн $39, 37, 35, 33, 31, 29, 27$ (моменты $1{,}526T, 1{,}581T, 1{,}643T, \ldots, 1{,}982T$) энергия второй группы превышает энергию первой (рис. 1). Таким образом, обеспечивается обмен энергией между маятниками ($50\,\text{с}^{-1}, 55\,\text{с}^{-1}, \ldots, 95\,\text{с}^{-1}$, в ансамбле 39 волн) с постепенным включением низкочастотных маятников, $35\,\text{с}^{-1}, 40\,\text{с}^{-1}, \ldots, 65\,\text{с}^{-1}$ (27 волн). Наиболее интенсивный обмен выполняется между начальным и конечным маятниками в группе.

Ансамбли с числом волн $19, 18, 17, 16, 15, 14, 13$, строящиеся в моменты $1{,}553T, 1{,}611T, 1{,}676T, \ldots, 2{,}038T$ (рис. 1) включают только одну энергетическую группу, число маятников в данном интервале сокращается от девяти маятников ($s=1, 2, \ldots, 9$, в ансамбле 19 волн) до семи ($s=1, 2, \ldots, 6$, 13 волн).

Новый ансамбль с числом волн 38 ($t=2{,}079T$) (рис. 1) приведет к выделению осцилляторов с номерами $13, 14, \ldots, 18$ (частоты $65\,\text{с}^{-1}, 70\,\text{с}^{-1}, \ldots, 90\,\text{с}^{-1}$), которые включаются в третью энергетическую группу, имеют энергию, превышающую энергию остальных групп, и выполняют обмен в пределах своей последовательности.

На рис. 3 показано изменение энергии маятников и энергетических групп от момента $t=2{,}551T$ (число волн 39) до $t=2{,}722T$ (число волн 9). Осцилляторы с номерами $15, 16, \ldots, 19$ (частоты $75\,\text{с}^{-1}, 80\,\text{с}^{-1}, \ldots, 95\,\text{с}^{-1}$) (тождественная группа $20, 21, \ldots, 24$, $100\,\text{с}^{-1}, 105\,\text{с}^{-1}, \ldots, 120\,\text{с}^{-1}$) создают независимую совокупность, которая включается в четвертую энергетическую группу и имеет энергию, превышающую энергию остальных групп (рис. 3.1). Наиболее существен-



1) В ансамбле 39 волн
2) В ансамбле 29 волн
3) В ансамбле 19 волн
4) В ансамбле 28 волн
5) В ансамбле 37 волн
6) В ансамбле 9 волн

Рис. 3

ный обмен выполняется между маятниками $75\,\text{с}^{-1}$ и $95\,\text{с}^{-1}$ (в тождественной энергетической группе $100\,\text{с}^{-1}$ и $120\,\text{с}^{-1}$). Появление ансамбля с числом волн 29 ($t = 2{,}569T$, который имеет три энергетические группы), переводит созданный ряд маятников в тождественные группы, что повышает их энергию, и одновременно сдвигает максимум в область низкочастотных маятников. В момент $t = 2{,}605T$ (ансамбль из 19 волн имеет две энергетические группы) энергия второй (включающей пять маятников) превышает энергию первой (число маятников равно четырем). Максимум энергии сдвигается в область низких частот. Создание ансамбля из 28 волн ($t = 2{,}643T$, три энергетические группы) повторяет распределение энергии (рис. 3.2), но сокращение число маятников в третьей энергетической группе (до четырех), что приводит к уменьшению энергии. Ансамбль (37 волн, $t = 2{,}662T$, четыре энергетические группы) показывает распределение энергии, подобное на рис. 3.1, но вследствие уменьшения числа маятников в энергетических группах (в результате перехода маятников при достижении максимального смещения), четвертая энергетическая группа включает маятники с частотами $14, 15, \ldots, 18$ (частоты $70\,\text{с}^{-1}, 75\,\text{с}^{-1}, \ldots, 90\,\text{с}^{-1}$). Наиболее существенный обмен выполняется между маятниками $70\,\text{с}^{-1}$ и $90\,\text{с}^{-1}$ (в тожде-

ственной энергетической группе $95\,\text{с}^{-1}$ и $115\,\text{с}^{-1}$). Наконец, в момент $t = 2{,}722T$ строится ансамбль из девяти волн, где все начальные маятники волн-групп попадают в первую энергетическую группу. Последовательности из четырех маятников имеют одинаковое распределение энергии (максимально смещенные маятники, кратные девяти, совершают обмен энергией между собой).

Как следует из приведенных рассуждений, только в момент формирования ансамбля из девяти волн, низкочастотные маятники с номерами 1, 2, 3, 4 выполняют значимый энергетический обмен. В остальные, показанные на рис. 3, моменты времени, означенные низкочастотные маятники находятся в состоянии, близком к равновесному. Существенной энергией обладают высокочастотные маятники, причем в ансамбле, где определены четыре энергетические группы, максимальная энергия присуща всего четырем осцилляторам.

Дальнейшее образование ансамблей с максимальным числом волн (интервал $(1-5{,}5)T$) выделяет новые последовательности всё меньшего числа маятников, которые включаются в новые энергетические групп. Это передает максимальное значение энергии маятникам, частоты которых близки к $\omega_{02} = 95\,\text{с}^{-1}$ ($s = 19$), увеличивает временные интервалы, между моментами, где создается одна энергетическая группа, при которой максимальная энергия связывается с низкочастотными маятниками.

Выводы

Выделение некоторой последовательности маятников (при создании максимального числа волн в ансамбле) в качестве элементов энергетической группы обеспечивает возможность выполнять независимый от остальных энергетический обмен между выделенной (и близкой к ней) совокупностью осцилляторов. Подобное выделение приводит к передаче энергии и осуществлении значимого энергетического обмена только маятникам, включенным в выделенную последовательность. Низкочастотные маятники (и связанные с ними элементы тождественных групп) имеют равновесное состояние.

Список литературы

1. Гетманова Е. Е. Образование волн в системе несвязанных линейных осцилляторов // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII Междунар. семинара. – Воронеж: Изд. ФГБОУ ВПО «ВГТУ». – 2014. – С. 54-60.

DISTRIBUTION FEATURE ENERGY IN A CHAIN OF LINEAR PENDULUMS WITH MULTIPLE FREQUENCIES

E.E. Getmanova

Company «DistTutor», Moscow

Abstract: energy exchange between different group за linear pendulums with multiple frequencies is studied. The feature of the emergence of groups of pendulums with increased energy, the movement of these groups is shown. It has been established at what time intervals a significant energy exchange is performed between high frequency pendulum.

Keywords: waves in system of unlinked linear oscillators, wave-groups exchange energies, energy groups.

УДК 519.688: 621.762.53

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОВОЛЬТНОЙ КОНСОЛИДАЦИИ ПОРОШКОВ ТУГОПЛАВКИХ МАТЕРИАЛОВ

Е.Г. Григорьев[1], В.Ю. Гольцев[2], А.В. Осинцев[2], А.С. Плотников[2], Е.Л. Стрижаков[3], С.В. Нескоромный[3]

[1]Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А. Г. Мержанова РАН, Черноголовка
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
[3]Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону
eugengrig@mail.ru

Аннотация: представлены экспериментальные результаты высоковольтной консолидации порошков тяжелых сплавов на основе вольфрама и карбидов тугоплавких металлов. Рассмотрены электротепловые процессы на контактах между частицами порошка и в макромасштабе консолидированного образца. Приведены результаты расчетов динамики схлопывания межчастичных пор в процессе консолидации. Установлен критерий, определяющий диапазон технологических параметров высоковольтной консолидации для создания высокоплотных материалов.

Ключевые слова: высоковольтная консолидация, порошки тугоплавких материалов, электротепловой взрыв, кумулятивный режим схлопывания межчастичных пор.

Метод высоковольтной консолидации порошков является одним из перспективных методов изготовления материалов и изделий из электропроводящих порошковых композиций [1]. К преимуществам настоящего метода консолидации можно отнести получение высокоплотных образцов из порошков тугоплавких материалов при сравнительно низких интегральных температурах, с сохранением исходного структурно-фазового состояния в консолидированном материале за счет кратковременности процесса консолидации. Метод высоковольтной консолидации порошков эффективен для производства композиционных материалов, сохраняющих прочностные свойства при сверхвысоких температурах в условиях агрессивных внешних воздействий. Отличительная особенность данного метода связана с локальным выделением джоулевого тепла в контактах между частицами порошка. На процесс высоковольтной консолидации оказывают существенное влияние размеры и форма частиц порошка, толщина и структура поверхностных пленок на частицах, наличие посторонних примесей. Основными технологическими параметрами, определяющими процесс высоковольтной консолидации, служат скорость ввода энергии электромагнитного поля в консолидируемый порошковый материал и характерная динамика воздействия механического давления на порошковый образец в процессе консолидации. Высокая плотность энергии в зонах контактов частиц приводит к локальному изменению агрегатного состояния вещества порошка в этих зонах. Наряду с неоднородностью нагрева порошка в межчастичных контактах возможно макроскопически неоднородное распределение плотности импульса тока в объеме консолидируемого образца. Изучение электро-тепловых явлений,

как в зонах контактов частиц, так и в масштабе всего консолидируемого образца, позволяет установить оптимальные параметры высоковольтной консолидации.

В процессе высоковольтной консолидации на порошковую заготовку, находящуюся в непроводящей матрице, воздействует короткий ($<10^{-3}$ с) мощный импульс тока (10^5 – 10^7 кА/м^2), сформированный высоковольтным генератором импульсов тока (ГИТ), и внешнее механическое давление, создаваемое пневмопрессом посредством электродов-пуансонов. Формирование структуры порошкового материала при высоковольтной консолидации определяется разномасштабными процессами, протекающими на межчастичных контактах, в частицах порошка, в объеме всего образца и взаимовлиянием этих процессов. Преимущества метода высоковольтной консолидации в полной мере удается реализовать при оптимальных параметрах процесса, так как интенсивное электротепловое воздействие на порошковый материал может приводить к неустойчивости процесса консолидации, формированию неоднородной структуры консолидируемого материала и даже к разрушению консолидируемого образца и технологической оснастки.

Теоретический анализ электро-тепловых процессов, протекающих в межчастичных контактах порошковых частиц, на основе сформулированной модели высоковольтной консолидации [2], установил критическую плотность тока j_* в межчастичном контакте, выше которой происходит электротепловой взрыв:

$$j_* = \sqrt{\frac{2\xi\sigma}{\rho h}} T_b^2 , \qquad (1)$$

где σ – постоянная Стефана-Больцмана; $\xi \leq 1$; T_b – температура кипения (потери проводимости) порошкового материала, h – толщина межчастичного контакта. На рис. 1 приведено сравнение результатов экспериментального исследования электрического взрыва контакта между гранулами сплава ЭП741 и результатами расчетов по критерию (1), полученное в работе [2].

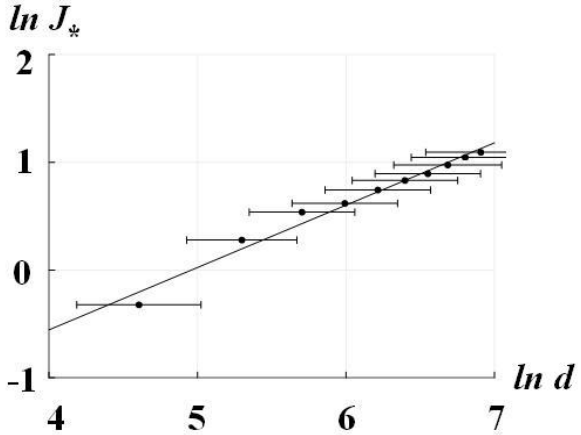


Рис. 1. Зависимость тока теплового взрыва контакта от размера гранул сплава ЭП741 (точки – эксперимент, линия – расчет согласно (1))

Экспериментальные исследования выявили соотношение между характерными временами процессов высоковольтной консолидации: время нагрева по-

рошка импульсом тока – $\tau_0 \leq 300$ мкс; время уплотнения порошка – $\tau_1 \sim 10$ мс; время охлаждения образца – $\tau_2 \geq 2$ с. Данное соотношение можно записать в виде системы неравенств: $\tau_0 < \tau_1 \ll \tau_2$. Так как удельная электрическая проводимость материала электродов-пуансонов значительно выше электропроводности порошкового материала, то проходящий через электроды-пуансоны и порошковый образец мощный импульс тока, прежде всего, адиабатически нагревает порошковый образец. Интенсивный нагрев порошкового материала образца вызывает его высокоскоростное уплотнение за счет пластического деформирования под воздействием электродов-пуансонов. Скорость уплотнения консолидируемого порошкового образца определяется параметрами пневмо-пресса, создающего механическое давление на пуансоны. Отвод тепла от консолидируемого образца в элементы оснастки происходит путем теплопроводности значительно медленнее, чем процессы нагрева и уплотнения порошка. При постоянном давлении на консолидируемый образец скорость движения пуансонов вдоль оси образца постоянна и зависит от амплитуды импульса тока. Уплотнение порошкового образца реализуется в виде стационарной волны, движущейся со скоростью V в консолидируемом образце [3], которая связана со скоростью движения пуансона U соотношением: $U = V\,(1-\rho_0/\rho)$, где: ρ_0 – начальная плотность порошкового образца, ρ – конечная плотность консолидированного образца. Скорость фронта стационарной волны V и конечная плотность ρ определяются величиной безразмерного параметра $\beta = \sigma_{\mathrm{T}}(T)/P$, где $\sigma_{\mathrm{T}}(T)$ – предел текучести вещества порошка при температуре T, P – давление на порошок со стороны пуансонов. Так как $\sigma_{\mathrm{T}}(T)$ существенно зависит от температуры T, то возможны различные режимы процесса схлопывания пор на фронте волны уплотнения при высоковольтной консолидации [3]. При $\beta > \beta_*$ – скорость схлопывания (уменьшения радиуса) поры монотонно стремится к нулю. При $\beta < \beta_*$ – скорость схлопывания поры неограниченно растет, что приводит к росту давления в финальный момент схлопывания поры и образованию расходящейся волны (кумулятивный режим схлопывания поры). Значение β_* определяется выражением (2) [4]:

$$\beta_* = \frac{3}{2}\left\{\ln\frac{\rho_m}{\rho_m-\rho_0} + \frac{\ln(\rho_m/\rho_0)}{\rho_m/\rho_0 - 1}\right\}^{-1}, \qquad (2)$$

где: ρ_m – плотность материала порошка, ρ_0 – начальная плотность порошкового образца. Кумулятивные режимы захлопывания межчастичных пор приводят к неустойчивости процесса высоковольтной консолидации порошкового материала.

Процесс захлопывания межчастичных пор может быть описан вязкопластической моделью деформации порошкового материала [3, 4]. При этом установление кумулятивных режимов захлопывания межчастичных пор определяется значениями безразмерных параметров β и R, где $R = (a/\eta)\cdot(\rho_{\mathrm{m}}P)^{1/2}$ – аналог числа Рейнольдса, a – начальный радиус поры, η – динамическая вязкость материала. Удобно рассматривать условия существования кумулятивных режимов в плоскости параметров $(1/R)$ и β.

На рис. 2 показаны области, отвечающие значениям безразмерных параметров с различными режимами захлопывания межчастичных пор. Линии 1 - 5 $(1/R_*) = f(\beta_*)$ ограничивают область **I** – кумулятивных режимов захлопывания межчастичных пор для различных значений начальной плотности порошковых образцов. На кумулятивных режимах высоковольтной консолидации возможно формирование в консолидированном материале характерной структуры пористости в виде сфероподобных изолированных пор.

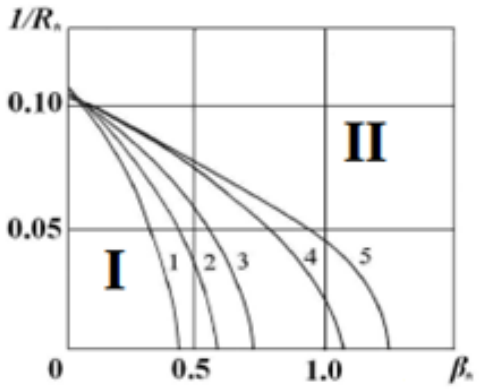


Рис. 2. Области значений параметров β и R для различных режимов захлопывания межчастичных пор:
I – кумулятивные режимы,
II – устойчивые режимы с остаточной пористостью в материале,
1 – $\rho_m/\rho_0 = 1{,}10$; 2 – $\rho_m/\rho_0 = 1{,}25$;
3 – $\rho_m/\rho_0 = 1{,}43$; 4 – $\rho_m/\rho_0 = 2{,}00$;
5 – $\rho_m/\rho_0 = 2{,}33$

На рис. 3 приведена фотографии микроструктуры образца карбида гафния, полученного на кумулятивном режиме высоковольтной консолидации порошка HfC. Оптимальный режим высоковольтной консолидации порошка HfC позволяет получить высокоплотный консолидированный образец, микроструктура которого приведена на рис. 4. Значения безразмерных параметров β и R, которые определяют оптимальные режимы для получения высокоплотных образцов, соответствуют значениям, определяемым кривыми 1-5 на рис. 2, которые разделяют области с различными режимами схлопывания пор при высоковольтной консолидации.

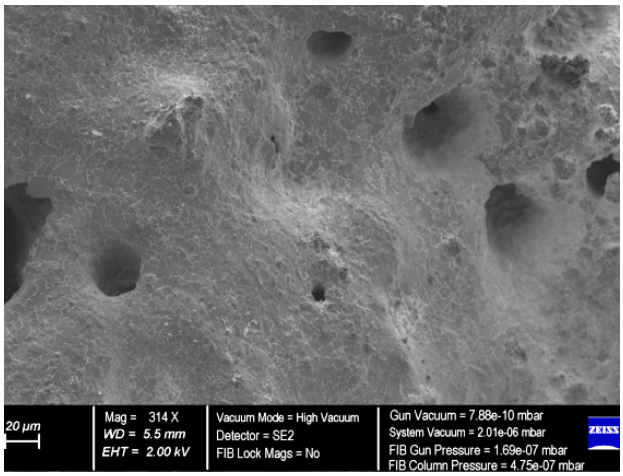


Рис. 3. Структура образца HfC, консолидированного на кумулятивном режиме

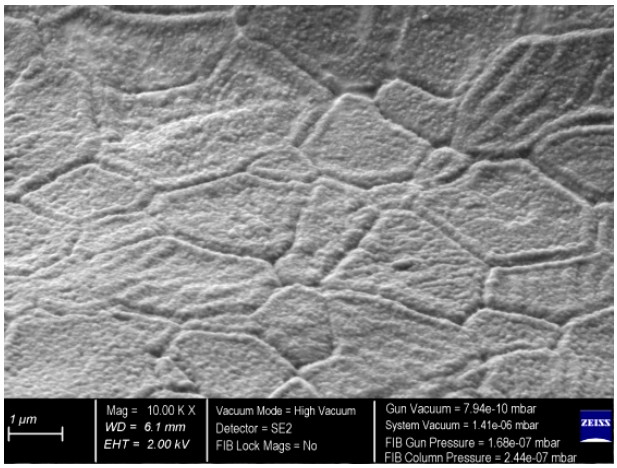


Рис. 4. Структура образца HfC, консолидированного на оптимальном режиме

Оптимальный режим высоковольтной консолидации порошка тяжелого сплава на основе вольфрама 90W-7Ni-3Fe позволил получить компактный образец с относительной плотностью 96%, равномерным распределением железо-

никелевой связки по объему образца и с сохранением исходной микроструктуры в консолидированном материале (см. рис. 5). Проведены испытания дисковых образцов данного сплава на диаметральное сжатие (по схеме «бразильского теста») для оценки сопротивления материала разрыву при действии растягивающих напряжений и выявления способности материала к пластическому деформированию (рис. 6).

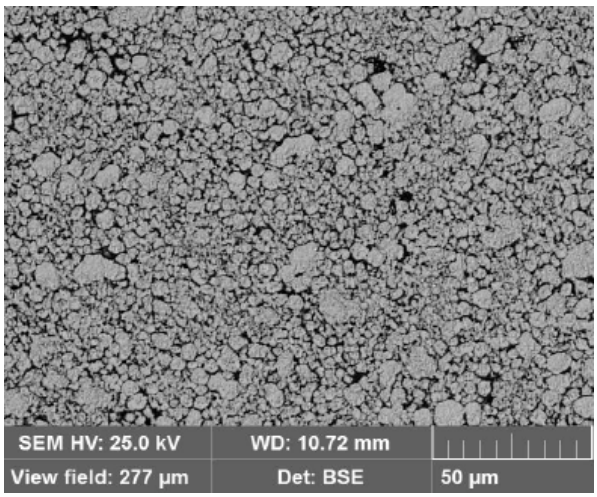


Рис. 5. Микроструктура образца 90W-7Ni-3Fe

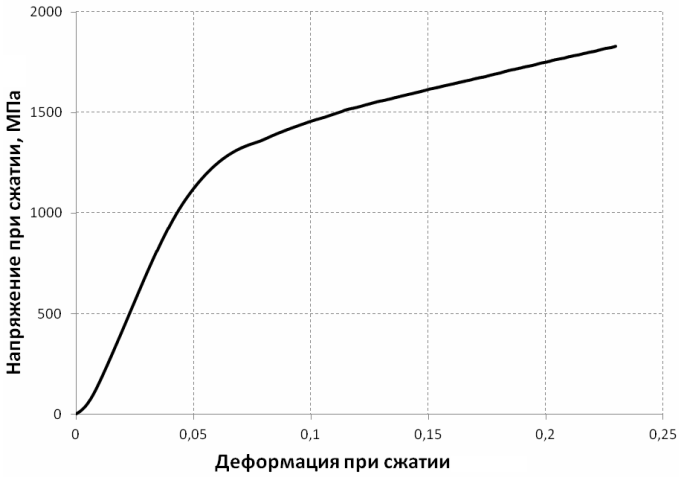


Рис. 6. Испытание на диаметральное сжатие образца 90W-7Ni-3Fe

Результаты механических испытаний образцов тяжелого сплава 90W-7Ni-3Fe, полученных высоковольтной консолидацией, показали высокую прочность (сжимающие напряжения свыше 1600 МПа без разрушения) и обладают хорошей пластичностью (величина относительной деформации ~ 0,23, см. рис. 6).

В результате экспериментального и теоретического исследования процесса высоковольтной консолидации порошковых материалов установлены основные закономерности формирования структуры консолидируемых материалов. Получены высокоплотные образцы консолидированных порошковых материалов: карбида гафния, тяжелого сплава на основе вольфрама (90W-7Ni-3Fe).

Показана возможность сохранения исходной микроструктуры порошковых материалов в компактных образцах в процессе высоковольтной консолидации. Механические испытания консолидированного образца тяжелого сплава на основе вольфрама показали его высокую прочность и пластичность.

Список литературы

1. Grigoryev E.G. Advanced methods for consolidation of powder materials by impulse electromagnetic fields. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering **558** (2019) 012014.

2. Grigoryev E.G., Olevsky E.A. Thermal processes during high-voltage electric discharge consolidation of powder materials. Scripta Materialia, vol. 66, Iss. 9 (2012) p. 662-665.

3. Grigoryev E.G., Olevsky E.A., Yudin A.V., Yurlova M.S. Wave mode high voltage consolidation of powder materials. Computational Materials Science, vol. 100 (2015) SI, p. 8–14.

4. Balankin S.A., Gorbachev L.P., Grigor'ev E.G., Skorov D.M. Cumulation effect in dynamic pressing of powdered materials. Journal of Applied Mechanics and Technical Physics, vol. 21 (1980) p. 548–551.

SIMULATION OF HIGH-VOLTAGE CONSOLIDATION PROCESSES OF POWDERS OF REFRACTORY MATERIALS

E.G. Grigoryev[1], V.Yu. Goltsev[2], A.V. Osintsev[2], A.S. Plotnikov[2], E.L. Strizhakov[3], S.V. Neskoromny[3]

[1]Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Materials Science
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka
[2]National Research Nuclear University "MEPhI", Moscow
[3]Don State Technical University, Rostov-on-Don

Abstract: experimental results of high-voltage consolidation of powders of heavy alloys based on tungsten and refractory metal carbides are presented. Electrothermal processes at contacts between powder particles and on the macroscale of a consolidated sample are considered. The results of calculations of the dynamics of the collapse of interparticle pores in the process of consolidation are presented. A criterion has been established that determines the range of technological parameters of high-voltage consolidation for the creation of high-density materials.

Keywords: high-voltage consolidation, powders of refractory materials, electrothermal explosion, cumulative regime of interparticle pores collapse.

УДК 544.18, 546.271

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МОНОГИДРАТА БОРОГИДРИДА НАТРИЯ

А.С. Зюбин, Т.С. Зюбина, О.В. Кравченко, М.В. Соловьев, М.В. Цветков, А.А. Зайцев, Ю.А. Добровольский

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

Аннотация: в рамках приближения с использованием периодических граничных условий и функционала плотности PBE с базисом проектированных плоских волн выполнено квантово-химическое моделирование кристаллической структуры моногидрата борогидрида натрия $NaBH_4*H_2O$. Определена наиболее энергетически выгодная структура кристалла, показано, что она стабильна к разделению на безводный борогидрид натрия и его дигидрат, т.е. существование кристаллического моногидрата борогидрида натрия возможно.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, гидраты борогидрида натрия.

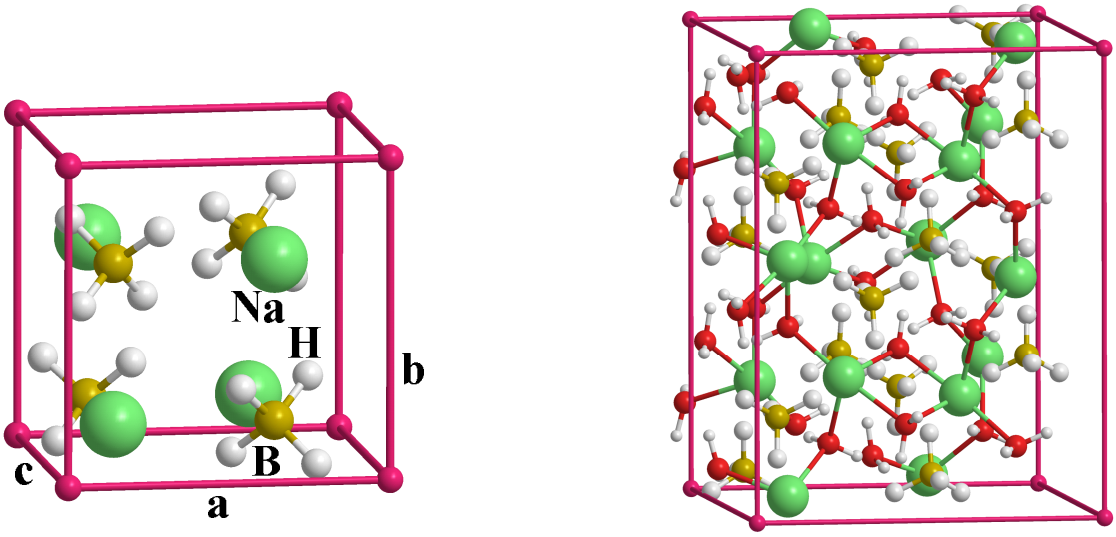
Введение

Экспериментально изучены структуры кристаллов борогидрида натрия и его дигидрата, однако соответствующий моногидрат пока не получен. Целью данной работы является выяснение с помощью квантово-химического моделирования возможности существования кристаллического моногидрата борогидрида натрия и его строения.

Методика расчетов

В данной работе для моделирования объема и поверхностей твердых тел применен подход с использованием периодических граничных условий. Для выполнения модельных расчетов использован программный комплекс VASP [1-4] (Vienna ab-initio simulation program). В качестве базиса применены проектированные плоские волны PAW [5] с соответствующим псевдопотенциалом, и функционал PBE [6]. Предел по энергии (E_c), определяющий полноту базисного набора, был принят равным 600 эВ. Для моделирования двумерных структур (поверхности кристалла) размеры размножаемых ячеек выбирались так, чтобы расстояния между ближайшими поверхностями периодически повторяющихся систем составляли не менее 10 Å. Применение этого подхода к моделированию структуры кристаллов дало следующие результаты: при сохранении кубической формы размножаемой ячейки борогидрида натрия (ГЦК-решетка, соответствующая кристаллической структуре при нормальных условиях) ребро куба при оптимизации его размера составило 6.04 Å, а при снятии ограничений была получена тетрагональная структура с ребрами 6.13×6.13×5.86 Å (рис. 1, табл. 1), что соответствует низкотемпературной модификации. Эти величины в пределах

1 – 2 % согласуются с соответствующими экспериментальными данными (6.14 и 6.16×6.16×5.91 Å [7,8]). Для дигидрата борогидрида натрия $NaBH_4$*2W (W – молекула воды) рассчитанные параметры тетрагональной ячейки составили 10.34, 6.86 и 12.01 Å, а найденные в эксперименте [9] – 10.14, 6.89 и 11.93 Å, т.е различия между расчетными и экспериментальными данными тоже не превышают 1 – 2 %.



$NaBH_4$_4 $NaBH_4$*2Wt_16

Рис. 1. Размножаемые ячейки, моделирующие фрагменты кристаллов борогидрида натрия и дигидрата борогидрида натрия

Обсуждение результатов

При рассмотрении строения кристалла дигидрата борогидрида натрия можно выделить два различных структурных фрагмента: зигзагообразные цепочки -Na-Wt-Na-Wt- и связывающие их двойные мостики >Na<Wt2>Na< (рис. 1), с равным четырем координационным числом ионов натрия по молекулам воды (Wt). Поэтому можно предположить, что кристалл соответствующего моногидрата может быть сформирован из похожих фрагментов, но уже не связанных между собой через молекулы воды вследствие вдвое меньшего их количества. Для определения наиболее энергетически выгодной структуры моногидрата было рассмотрено несколько вариантов, построенных из по-разному расположенных и не связанных между собой двучленных циклов Na<Wt2>Na и цепочек -Na-Wt-Na-Wt-. Для увеличения возможного количества ориентаций отдельных структурных фрагментов были использованы более крупные ячейки, включающие 16 $NaBH_4$, чем при моделировании $NaBH_4$ и $NaBH_4$*2Wt (4 и 8 соответственно).

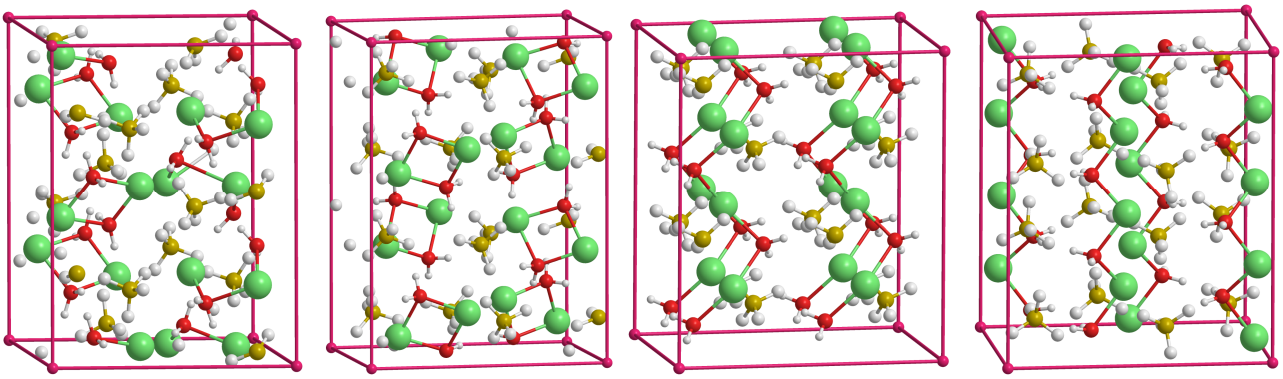
На рис. 2 приведены четыре наиболее низкие по энергии из рассмотренных структур моногидрата натрия. Согласно полученным результатам, варианты на основе двучленных циклов менее энергетически выгодны, чем на основе цепочек (табл. 1). Наиболее низкой по энергии оказалась структура D с тетрагональной ячейкой, в которой цепочки смещены друг относительно друга так, чтобы ионы натрия одной из них оказывались напротив молекул воды соседних цепочек (рис. 2, D).

Таблица 1

Оптимизированные параметры размножаемых ячеек (a, b, c, Å), энергии rE/n относительно изолированных молекул $NaBH_4$ и H_2O (в эВ), а также объемы ячеек Vol/n (Å^3) в пересчете на одну формульную единицу

Система, n	a (Å)	b (Å)	c (Å)	rE/n	Vol/n
$NaBH_4$_4a	6.13	5.86	6.13	-1.863	55.1
$NaBH_4$_4b	6.04	6.04	6.04	-1.857	55.1
$NaBH_4$*2W_8	10.34	6.86	12.01	-2.997	106.5
$NaBH_4$*W_16A*	10.51	13.81	10.01	-2.329	90.9
$NaBH_4$*W_16B	8.70	15.20	11.20	-2.353	92.5
$NaBH_4$*W_16C	9.22	13.39	11.50	-2.389	88.8
$NaBH_4$*W_16D	9.00	13.98	11.89	-2.436	93.5

* В данной ячейке угол между ребрами a и c составляет 98°.



$NaBH_4$*Wt_16A $NaBH_4$*Wt_16B $NaBH_4$*Wt_16C $NaBH_4$*Wt_16D

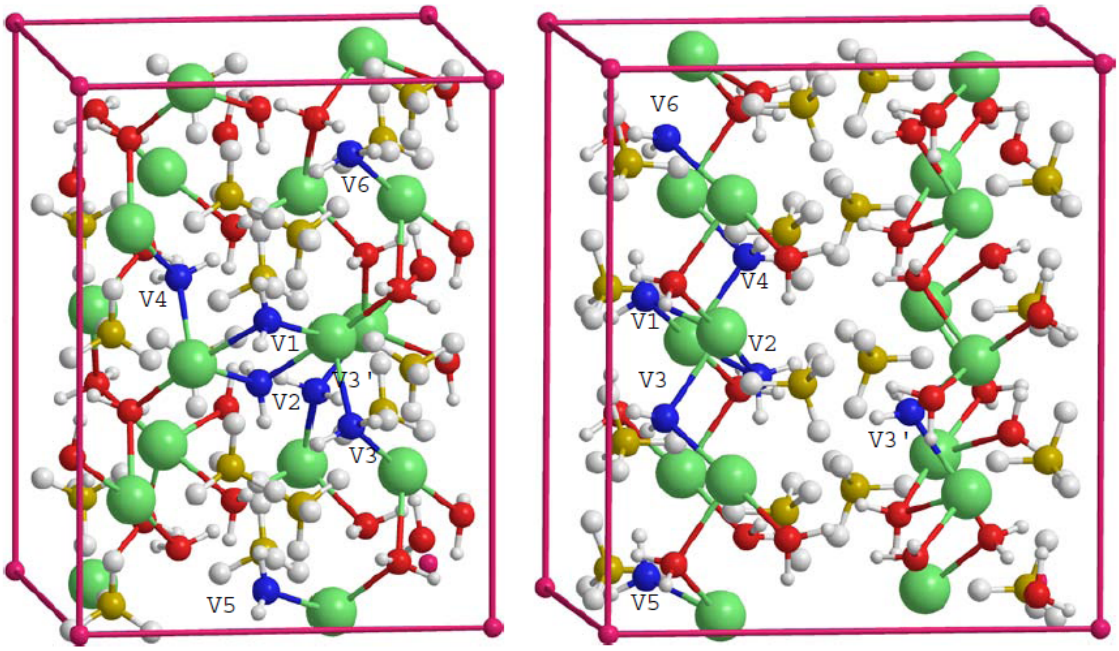
Рис. 2. Размножаемые ячейки, моделирующие фрагменты кристалла моногидрата борогидрида натрия

Если бы наиболее энергетически выгодная структура моногидрата лежала на энергетической шкале выше, чем полусумма энергий дигидрата и безводного борогидрида натрия, то можно было бы ожидать, что кристаллы моногидрата будут распадаться на смесь микрокристаллов $NaBH_4$ и $NaBH_4$*2W. Однако для варианта D энергия относительно изолированных молекул $NaBH_4$ и H_2O в пересчете на один фрагмент (rE/n) в данном варианте моделирования составила –2.436 эВ, а полусумма соответствующих энергий для $NaBH_4$ и $NaBH_4$*2W оказалась чуть выше, –2.430 эВ. Это дает основание предполагать, что существование кристаллического моногидрата борогидрида натрия вполне возможно.

Согласно полученным результатам, строение кристаллов ди- и моногидрата борогидрида натрия различается наличием или отсутствием двойных мостиков Na<Wt2>Na, связывающих цепочки -Na-Wt-Na-Wt-, при этом объем, приходящийся на одну формульную единицу вещества, различается всего на 12% (табл. 1). Поэтому один из напрашивающихся вариантов получения моно-

гидрата – обезвоживание дигидрата, однако для проверки возможности его реализации необходимо выяснить, каким образом может происходить удаление молекул воды из объема и с поверхности кристалла.

Для решения этой задачи прежде всего необходимо выяснить, какой вариант формирования поверхности кристалла $NaBH_4$*2Wt требует наименьших энергетический затрат. Нами были рассмотрены три типа поверхности – Sa, Sb и Sc, каждая из которых перпендикулярна ребрам a, b или c ячейки $NaBH_4$*2Wt_16 (рис. 1). Наиболее стабильной оказалась поверхность Sc (рис. 3), для формирования которой требуются затраты энергии 0.0083 эВ/Å^2, для Sa и Sb эти величины составляют 0.0103 и 0.0152 эВ/Å^2 соответственно. На этой поверхности можно выделить четыре варианта формирования вакансии по молекуле воды - V1, V2, V3, V4 (рис. 3). Позиции V1 и V2 соответствуют удалению молекул воды из связывающего цепочки двойного мостика Na<Wt2>Na, причем V1 находится над плоскостью, образованной лежащими вблизи поверхности атомами натрия, а V2 – под ней. V3 и V4 соответствуют молекулам воды в цепочках, расположенных над и под такой поверхностью. Еще две позиции – V5 и V6 дублируют V1 и V3, смещенные вдоль ребра b. Для объема набор вариантов менее разнообразен, здесь можно выделить лишь две позиции – в двойном мостике (Vbr) и в цепочке (Vch), являющиеся аналогами V1 и V3.



a, вид сверху **c**, вид сбоку

Рис. 3. Наиболее энергетически выгодная поверхность кристалла $NaBH_4$*2Wt и различные позиции вакансий по молекулам воды на ней

Энергии формирования вакансий (т.е. удаления молекул воды на бесконечность) в дигидрате $NaBH_4$, рассчитанные на ССП-уровне, приведены в табл. 2. Согласно этим данным, в объеме формирование вакансии более выгодно в цепочке (Vch), для удаления молекулы воды из мостика (Vbr) затраты

энергии немного выше. Формирование вакансий на поверхности требует немного меньших затрат энергии, чем в объеме, причем для двойного мостика и ориентированного наружу фрагмента цепочки (варианты V1 – V3) они практически одинаковы, и лишь для V4 немного выше.

Таблица 2

Энергии формирования вакансий по молекулам воды (в эВ) в дигидрате борогидрида натрия

dE(Vbr)	dE(Vch)	dE(V1)	dE(V2)	dE(V3)	dE(V4)	dE(V1V2)
0.74 *0.18*	0.69 *0.13*	0.60 *0.04*	0.59 *0.03*	0.58 *0.02*	0.66 *0.10*	0.80 *0.24*
dE(V1*V3)	dE(V1V4)	dE(V2V3)	dE(V2V4)	dE(V3V4)	dE(V1V5)	dE(V3V6)
0.81 *0.25*	0.82 *0.26*	0.97 *0.41*	0.78 *0.22*	0.80 *0.24*	0.86 *0.28*	0.76 *0.20*

dE(Vi) = E(16$NaBH_4$*31Wt*Vi) - E(W) - E(16$NaBH_4$*32Wt)
dE(ViVj) = E(16$NaBH_4$*30Wt*Vi*Vj) - E(Wt) - E(16$NaBH_4$*31Wt*Vi)
Прямой шрифт – энергии на уровне ССП, курсив – оценка изменений энергий Гиббса при температуре 300 К и атмосферном давлении.

Однако при оценке возможности переходов из одной структуры в другую определяющую роль играют изменения энергии Гиббса. Во многих случаях они мало отличаются от изменений полной энергии, но при разделении системы на отдельные фрагменты, в частности при отрыве молекул воды, различия могут быть существенными, прежде всего за счет энтропийных вкладов. К сожалению, в рамках используемого программного комплекса VASP нет возможности определить величины таких поправок, поэтому мы попытались оценить их с помощью расчетов отрыва молекулы воды от модельного кластера 4($NaBH_4$*2W) с использованием программы GAUSSIAN-09 [10] (базис 6-31G*, функционал B3LYP). В рамках такого подхода разница энергий Гиббса при температуре 300 К и атмосферном давлении оказалась на 0.56 эВ ниже, чем разница полных энергий. Если ввести эту поправку к энергиям, приведенным в табл. 2, то получается, что затраты энергии на формирование единичных вакансий на поверхности (прежде всего V2 и V3) близки к нулю уже при комнатной температуре (табл. 2).

Образование второй вакансии вблизи от уже существующей на поверхности кристалла требует более высоких затрат энергии (примерно на 0.2 эВ), причем наиболее легко должны удаляться молекулы воды из ориентированного наружу фрагмента цепочки (V3-V6, табл. 2). Из этих результатов следует, что наиболее энергетически выгодным является такое распределение вакансий вблизи поверхности, при котором они по возможности удалены друг от друга, причем в первую очередь следует ожидать разрушения цепочек -Na-Wt-Na-Wt-.

Если барьеры миграции вакансий невелики, то менее выгодные варианты их распределения могут преобразовываться в более устойчивые. Моделирование различных вариантов такой миграции вблизи поверхности кристалла с по-

мощью перемещения молекул воды из одной позиции в другую путем сканирования потенциальной поверхности показало, что барьеры здесь в основном невелики, менее 0.2 эВ (табл. 3). Исключение составляет трансформация V1-V2, но ее можно осуществить двойным переходом V1-V3 и V3-V2. Аналогичным образом можно осуществить и другие варианты миграции вакансий вблизи поверхности кристалла.

Таблица 3

Барьеры миграции вакансий по молекулам воды (в эВ) в дигидрате борогидрида натрия

V1-V2	V1-V3	V1-V4	V2-V3	V2-V4	V2-V3'
0.34	0.17	0.18	0.18	0.15	0.68

Из этих результатов следует, что на начальном этапе высушивания кристаллического $NaBH_4$*2Wt удаление молекул воды будет происходить из поверхностного слоя с преимущественно равномерным распределением вакансий в нем. Для удаления более глубоко расположенных молекул воды необходимо передвигать их в приповерхностный слой. С этой целью было выполнено перемещение молекулы воды из положения V3' (расположенный в следующем слое аналог V3) в позицию V2 (рис. 3, вид сбоку). Потенциальный барьер на этом пути оказался значительным, почти 0.7 эВ (табл. 3). На основании этих результатов можно ожидать, что при высушивании кристаллического дигидрата борогидрида натрия вода будет удаляться в первую очередь из поверхностных слоев, что приведет к формированию на его поверхности наночастиц безводного борогидрида. В результате при высушивании вместо кристалла моногидрата вероятнее всего будет получаться неупорядоченная смесь из наночастиц дигидрата и безводного борогидрида.

Выводы

Существование кристаллического моногидрата борогидрида натрия возможно, но получить его путем высушивания дигидрата вряд ли удастся.

Данная работа выполнена по теме Государственного задания, № государственной регистрации АААА-А19-119061890019-5, на ВЦ ИПХФ РАН.

Список литературы

1. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558.
2. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 14251.
3. Kresse G., Furthmuller J. // Comput. Mat. Science. 1996. V. 6. P. 15.
4. Kresse G., Furthmuller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.
5. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.
6. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // Phys. Rev. Letters. 1996. V. 77. P. 3865.
7. Davis R. L., Kennard C. H. L. // J. Solid State Chem. 1985. V. 59. P.393.

8. Мальцева Н. Н., Хаин В. С. Борогидрид натрия: Свойства и применение. – М.: Наука, 1985.
9. Filinchuk Y., Hagemann H. // Eur. J. Inorg. Chem. 2008. P. 3127.
10. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. at al. // Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.

QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION OF THE CRYSTALLINE STRUCTURE FOR SODIUM BOROHYDRIDE MONOHYDRATE

A.S. Zyubin, T.S. Zyubina, O.V. Kravchenko, M.V. Solov'ev,
M.V. Tsvetkov, A.A. Zaitsev, Yu.A. Dobrovolsky

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

Abstract: within the framework of the approximation using periodic boundary conditions and the PBE density functional with the basis of projected plane waves (PAW), a quantum-chemical simulation of the crystal structure of sodium borohydride monohydrate $NaBH_4*H_2O$ was performed. The most energetically favorable structure of the crystal has been determined; it has been shown that it is stable to separation into anhydrous sodium borohydride and its dihydrate, i.e. the existence of crystalline sodium borohydride monohydrate is possible.

Keywords: quantum-chemical modeling, density-functional theory, sodium borohydride hydrates.

УДК 544.18

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ И ВОССТАНОВЛЕННОГО ОКСИДА ГРАФЕНА КАК МАТЕРИАЛА ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОДА ЛИТИЙ-ИОННОГО АККУМУЛЯТОРА

Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, А.С. Корчун, Е.Ю. Евщик, В.Г. Колмаков, Ю.А. Добровольский

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

Аннотация: рассмотрены процессы адсорбции кластера кремния на поверхность восстановленного оксида графена. Расчеты выполнены на уровне PBE/PAW, wB97XD/6-31G(d,p) и wB97XD/6-31G(d,p)//6-311G(d,p)BSSE с учетом периодических условий и в кластерном приближении. Показано, что нанокластер кремния срывает с поверхности оксида графена атомы кислорода с которыми контактирует и образует поверхностный слой SiO_x. Литирование проходит по атомам кислорода и кремния. Графеновые листы слегка деформируются ("дышат") в области связи с кислородом и литием.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, наночастицы кремния, восстановленный оксид графена, литий-ионные аккумуляторы.

Введение

Литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) – одни из наиболее востребованных на сегодняшний момент химических источников энергии для электротранспорта, портативной электроники, стационарных устройств хранения энергии. Используемый на данный момент материал отрицательного электрода ЛИА – графит – обладает низким значением удельной ёмкости (372 мА·ч/г) [1], что ограничивает общую ёмкость аккумулятора. Для замены этих материалов предлагается использовать кремний, теоретическая ёмкость которого (4200 мА·ч/г) более чем в 11 раз выше, чем у графита [2, 3]. В настоящей работе рассматривается кремний-углеродный композиционный материал на основе наночастиц кремния и восстановленного оксида графена.

Методика расчетов

В качестве моделей рассматривались два слоя графена, оптимизированные с использованием теории функциональной плотности PBE и периодических граничных условий с помощью программного пакета VASP [4, 5]. Полученные геометрические параметры в дальнейшем использовались для построения кластера-подложки. В рамках PBE/PAW структуры бесконечных графеновых листов и адсорбированных на них кластеров Si_{29} и атомов кислорода оптимизировались полностью. Чтобы сравнить результаты, полученные на уровне PBE/PAW с более точным расчетом, нам пришлось моделировать кластер-подложку.

Для изучаемых систем моделирование кластера-подложки было выполнено с использованием гибридного дисперсионного функционала плотности wB97XD [6] с валентно-двухэкспонентным базисом 6-31G*, включающим поляризационные функции, с помощью программного комплекса GAUSSIAN [7]. wB97XD (включающий эмпирическую дисперсию) относится к новому классу функционала DFT, известному как функционал с разделением по диапазонам, который способен улавливать как короткие, так и дальние взаимодействия. На основе данных квантово-химического моделирования адсорбции на бесконечных листах графена был выбран для моделирования однослойный кластер-подложка с замкнутыми оборванными связями в виде $C_{96}H_{24}$. Координаты атомов углерода в модельной системе кластера-подложки были взяты из оптимизированных в рамках PBE/PAW структуры графеновых листов, оборванные граничные связи замыкались атомами водорода. Оптимизация геометрии комбинированной системы $Si_{29}O_xC_{96}H_{24}$ проведена с фиксированными координатами модельного кластера-подложки $C_{96}H_{24}$ (для сохранения формы поверхности). При оптимизации геометрии положения атомов углерода и водорода кластера-подложки фиксируются на тех позициях, которые получены из графена, и оптимизируются только положения атомов кремния и кислорода (Структура **9**). Эти вычисления выполняются на уровне wB97XD/6-31G(d, p). Там, где связывание оказывалось слабым, энергетические параметры уточнялись с учетом суперпозиции базисных наборов на уровне wB97XD/6-31G(d,p)//6-311G(d,p)BSSE). Расчеты показали, что качественных изменений при уточнении не происходит и можно проводить моделирование в рамках PBE/PAW.

Результаты расчета

В таблице приведены примеры рассчитанных соединений (структуры **1-10**) и даны наименьшие расстояния между атомами.

Что дает покрытие поверхности графена (Структура **1**) кислородом? Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим процессы адсорбции кластера кремния на поверхность чистого графена и восстановленного оксида графена.

Энергия связи, приходящаяся на 1 атом кремния, контактирующий с поверхностью графена, равна 0.1-0.2 eV/Si (Структура **2,** Si-C = 3.2-3.9 Å). При литировании такие кластеры мельчатся и увлекаются потоком лития, перемещаясь вдоль графенового листа.

В случае восстановленного оксида графена, нанокластер кремния срывает с поверхности графена атомы кислорода, с которыми контактирует, и образует поверхностный слой SiO_x (Структуры **6-9,** Si-O = 1.5-1.7 Å). За счет этого слоя на порядок увеличивается энергия связи кластера кремния с поверхностью графена (Структуры **6-7,** O-C = 2.9-3.6 Å). Литирование проходит по атомам кислорода и кремния (Структура **8**). При этом как оптимизация структуры, так и молекулярная динамика показывают, что графеновые листы слегка изгибаются ("дышат") в области связи с кислородом и литием (Структуры **3-5**). В процессе литирования структура кластера SiO_x деформируется, однако уже после 3-4 цикла меняется слабо. По сравнению с графеном, такие кластеры мельчатся и

увлекаются потоком лития в меньшей степени, чем при отсутствии кислорода, однако требуется дополнительная стабилизация материала в ходе циклирования, например, использованием карбоксиметилцеллюлозы.

Структуры рассчитанных соединений.
Наименьшие расстояния между атомами даны в Å

Структура **1**	Структура **2** 1Si/4C Si-C =3.2-3.9 C-C=4.69	Структура **3** 1Si/4C/ Si-C =4.04,4.10 Si-Li =2.56 C-Li =2.29,2.31 C-C=4.5,4.9	Структура **4** 1Si/4C/1Li C_C=4.7-5.1(MD)
Структура **5** 9C/1O	4Si/9C/1O Структура **6** O-C =3.4	Структура **7** 1Si/2C/1O O-C=2.9-3.6 Si-C=3.88 Si-O=1.54-1.71	Структура **8** 4Si/9C/1O/2Li
Структура **9** 1Si/3C/1O O-C=2.6-3.2 Si-C=2.5 Si-O=1.53-1.71	**C** **H** **Si** **O** **Li**		Структура **10** 1Si/2C/2O O-C=2.4-3.2

Выводы

Показано, что в случае восстановленного оксида графена нанокластер кремния срывает с поверхности графена атомы кислорода, с которыми контактирует, и образует поверхностный слой SiO_x, за счет которого на порядок увеличивается энергия связи кластера кремния с поверхностью графена. Литирование проходит по атомам кислорода и кремния. При этом как оптимизация

структуры, так и молекулярная динамика показывают, что графеновые листы слегка деформируются ("дышат") в области связи с кислородом и литием (Структуры **3-5**).

Работа выполнена по теме Государственного задания, № государственной регистрации АААА-А19-119061890019-5, на ВЦ ИПХФ РАН.

Список литературы

1. Obrovac M. N., Christensen L. /Structural Changes in Silicon Anodes during Lithium Insertion/Extraction // Electrochemical and Solid-State Letters. 2004. V.7(5). P.93-96.

2. Luo F., Liu B., Zheng J., Chu G., Zhong K., Li H., Huang X., Chen L./ Review—nano-silicon/carbon composite anode materials towards practical application for next generation Li-ion batteries // Journal of the Electrochemical Society. 2015. V. 162(14). P. 2509–2528.

3. Choi J.W., Aurbach D. / Promise and reality of post-lithium-ion batteries with high energy densities // Nature Reviews Materials. 2016. V. 1(4). P. 1–16.

4. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof / Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Letters//1996. V.77. P. 3865-3868.

5. G. Kresse, J. Hafner/ Ab initio molecular dynamics for liquid metals// Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558-561

6. J.-D. Chai and M. Head-Gordon, / Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections,// Phys. Chem. Chem. Phys. 2008. V.10 P. 6615-6620.

7. M. J. Fcisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, at al. Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT. 2010.

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF A SILICON-CARBON COMPOSITE MATERIAL BASED ON SILICON NANOPARTICLES AND REDUCED GRAPHENE OXIDE AS A NEGATIVE ELECTRODE MATERIAL OF A LITHIUM-ION BATTERY

T.S. Zyubina, A.S. Zyubin, A.V. Korchun, E.Yu. Evshchik, V.G. Kolmakov, Yu.A. Dobrovolsky

Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

Abstract: what is the effect of coating the surface of graphene with oxygen? To answer this question, in this work, the processes of adsorption of a silicon cluster on the surface of pure graphene and reduced graphene oxide were considered. The calculations were performed at the PBE / PAW, wB97XD / 6-31G (d, p) and wB97XD / 6-31G (d, p) // 6-311G (d, p) BSSE level taking into account periodic conditions and in the cluster approximation. It is shown that, in the case of reduced graphene oxide, a silicon nanocluster strips off oxygen atoms from the graphene surface with which it contacts and forms a SiO_x surface layer, due to which the binding energy of the silicon cluster with the graphene surface increases by an order of magnitude. Lithiation takes place over oxygen and silicon atoms. In this case, the molecular dynamics shows that the graphene sheets are slightly deformed ("breathe" in the region of contact with lithium).

Keywords: quantum chemical modeling, density functional, silicon nanoparticles, reduced graphene oxide, lithium-ion batteries.

УДК 530.145

ВНУТРЕННЕЕ ВРАЩЕНИЕ В 2,2,2-ТРИФТОРЭТАНОЛЕ И ЕГО ДЕЙТЕРИЙЗАМЕЩЕННЫХ

А.В. Котомкин[1,2], Н.П. Русакова[1], Ю.Д. Орлов[1], А.Н. Белов[1]

[1]Тверской государственный университет
prospectpobedy@mail.ru
[2]Тверской государственный медицинский университет

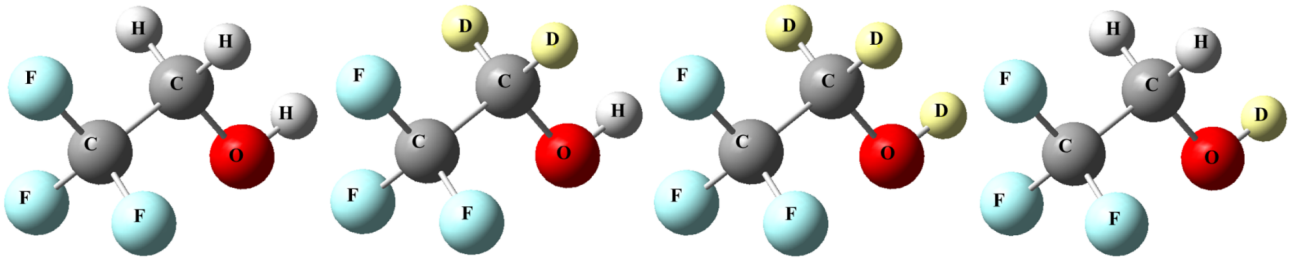
Аннотация: рассчитаны потенциальные функций внутреннего вращения вокруг связей C-O в молекулах CF_3-CH_2-OH, CF_3-CD_2-OH, CF_3-CH_2-OD и CF_3-CD_2-OD. Для каждого вращения изучены локальные минимумы, соответствующие конформациям.

Ключевые слова: трифторэтанол, потенциальная функция, конформер, внутреннее вращение.

Поиск возможных устойчивых конформеров и точный расчет энергетических и термодинамических свойств органических соединений требует учета вкладов внутренних вращений. Свойства данной степени свободы описываются посредством потенциальных $V(\varphi)$ и структурных $F(\varphi)$ функций. Функция $V(\varphi)$ есть зависимость полной электронной энергии молекулы (E_{total}) от угла вращения φ. Значения $F(\varphi)$ при каждом φ обратно пропорциональны приведенному моменту инерции вращения волчка относительно остова. Функции $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$ входят в торсионное уравнение Шредингера [1]:

$$-\frac{d}{d\varphi}F(\varphi)\frac{d}{d\varphi}\Psi + V(\varphi)\Psi = E\Psi.$$

Целью работы стал расчет и сравнение параметров потенциальных кривых $V(\varphi)$ для внутренних вращений вокруг связей C-O в молекулах: CF_3-CH_2-OH, CF_3-CD_2-OH, CF_3-CH_2-OD и CF_3-CD_2-OD.



а б в г

Рис. 1. Молекула 2,2,2 трифторэтанола CF_3-CH_2-OH (а) и ее дейтерийзамещенные CF_3-CD_2-OH (б), CF_3-CD_2-OD (в) и CF_3-CH_2-OD (г)

Построения $V(\varphi)$ вращения волчка -OH в молекулах CF_3-CH_2-OH и CF_3-CD_2-OH и -OD в молекулах CF_3-CH_2-OD и CF_3-CD_2-OD проводились путем оптимизации структур, возникающих при повороте вокруг связи C-O с шагом 10° и поиска их полных энергий E_{total} в программе GAUSSIAN 03 [2] методом rmp2/cc-pVTZ.

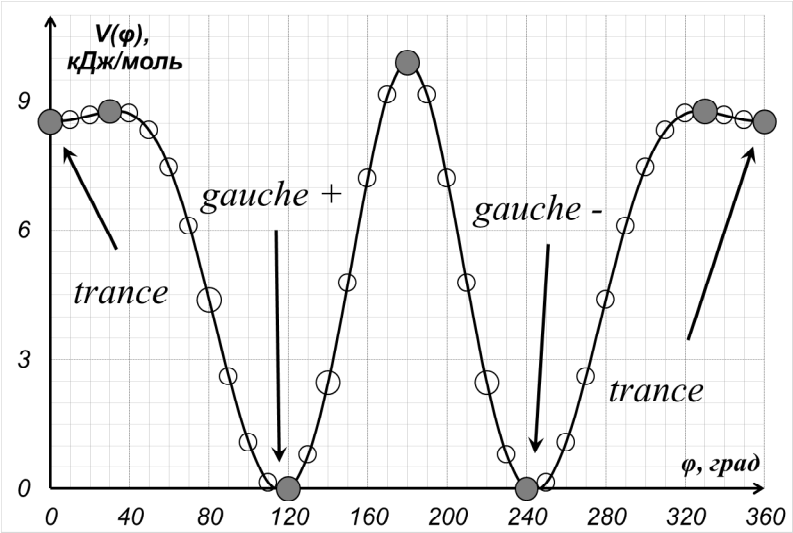


Рис. 2. Потенциальная функция $V(\varphi)$ для вращений вокруг связи С-О в молекуле 2,2,2 трифторэтанола CF_3-CH_2-OH (а) и ее дейтерийзамещенных CF_3-CD_2-OH (б), CF_3-CD_2-OD (в) и CF_3-CH_2-OD (г)

Расчет показал полное совпадение потенциальных функций внутреннего вращения для всех исследованных молекул. Начальной точке вращений соответствует транс-конформация. Помимо нее вращение показало наличие двух симметричных гош-состояний, энергия которых меньше энергии транс-состояния на 8,53 кДж/моль. Величина барьеров переходов транс-гош составила $V_{\text{транс-гош+}}$ = = $V_{\text{транс-гош-}}$ = 0,24 кДж/моль. Это значение торсионного барьера свидетельствует о состоянии локального минимума для транс-состояния. Такая малая высота легко преодолима за счет торсионных колебаний – это свободное вращение. Для обратных переходов $V_{\text{гош+-транс}} = V_{\text{гош-транс}}$ = 8,77 кДж/моль, что соответствует заторможенному вращению. Барьер перехода между гош-конформациями составил $V_{\text{гош+-гош-}} = V_{\text{гош-гош+}}$ = 9,90 кДж/моль. Таким образом, можно говорить о большей устойчивости гош-состояний и их преобладании в веществе.

Список литературы

1. Internal Rotation In Molecules / Ed. W.Y. Orville Thomas, London; New York; Sydney; Toronto, 1974

2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. at all. Gaussian 03 (Revision E 0,1 SMP), Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007,

INTERNAL ROTATION IN 2,2,2-TRIFLUOROETHANOL AND HIS DEUTERIUM-SUBSTITUTED

A. Kotomkin[1,2], N. Rusakova[1], Yu. Orlov[1], A. Belov[1]

[1]Tver State University
[2]Tver State Medical University

Abstract: potential functions of the internal rotations around the C-O bonds in CF_3-CH_2-OH, CF_3-CD_2-OH, CF_3-CH_2-OD and CF_3-CD_2-OD molecules were obtained. The local minima have been studied for all examined rotations.

Keywords: trifluoroethanol, potential function, conformations, internal rotation.

УДК 66.087

РАСЧЕТ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ В ПРОГРАММЕ COMSOL MULTIPHYSICS

М.В. Луковкин, М.С. Липкин

Акционерное общество «Энергия», Елец
misha.lukovkin@bk.ru; lipkin@yandex.ru

Аннотация: в статье рассмотрен пример проектирования призматического литий-ионного аккумулятора, взаимосвязь коэффициента диффузии и емкости аккумулятора. Представлены основные уравнения расчета, рассмотрена модель электродов призматического литий-ионного аккумулятора.

Ключевые слова: проектирование, литий-ионные аккумуляторы, расчет эксплуатационных характеристик, разрядные кривые.

При проектировании химических литий-ионных источников тока возникают проблемы расчета емкости и эксплуатационных характеристик аккумулятора. Для решения этих проблем была использована программа Comsol Multiphysics, в ней была построена модель призматического литий-ионного аккумулятора с теоретической емкость 4,15 А·ч основным веществом в положительном электроде при этом выступал литий-кобальт оксид (LCO). Было проведено сравнение характеристик аккумуляторов с несколькими разными материалами положительного электрода и сравнение разрядных кривых аккумулятора ЛИА-4, которое производит предприятие АО «Энергия», г. Елец, и результатами расчета.

Расчет в программе Comsol Multiphysics происходит с помощью метода конечных элементов, при этом используются:

1. Уравнение Батлера-Вольмера (1)-(3) для расчета поляризации электродов:

$$j = j_0 \cdot \left(\exp\left[\frac{a_a zF}{RT}\left(E - E_{eq}\right)\right] - \exp\left[-\frac{a_c zF}{RT}\right]\left(E - E_{eq}\right)\right); \quad (1)$$

$$j = j_0 \cdot \left(\exp\left[\frac{a_a zF\eta}{RT}\right] - \exp\left[-\frac{a_c zF\eta}{RT}\right]\right); \quad (2)$$

$$\eta = E - E_{eq}; \quad (3)$$

где j – плотность тока, А/м^2; j_0 – плотность обменного тока, А/м^2; E – электродный потенциал, В; E_{eq} – равновесный потенциал, В; T – абсолютная температура, К; z – количество электронов, участвующих в электродной реакции; F – постоянная Фарадея; R – универсальная газовая постоянная; a_c – коэффициент передачи катодного заряда; a_a– коэффициент передачи анодного заряда; η – активация сверхпотенциальная.

2. Уравнение определения поверхностной плотности тока в фазе раствора [1]:

$$i_2 = -k\nabla\Phi_2 + \frac{2kRT}{F}\left(1 + \frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c}\right)(1 - t_+^0)\nabla \ln c, \quad (4)$$

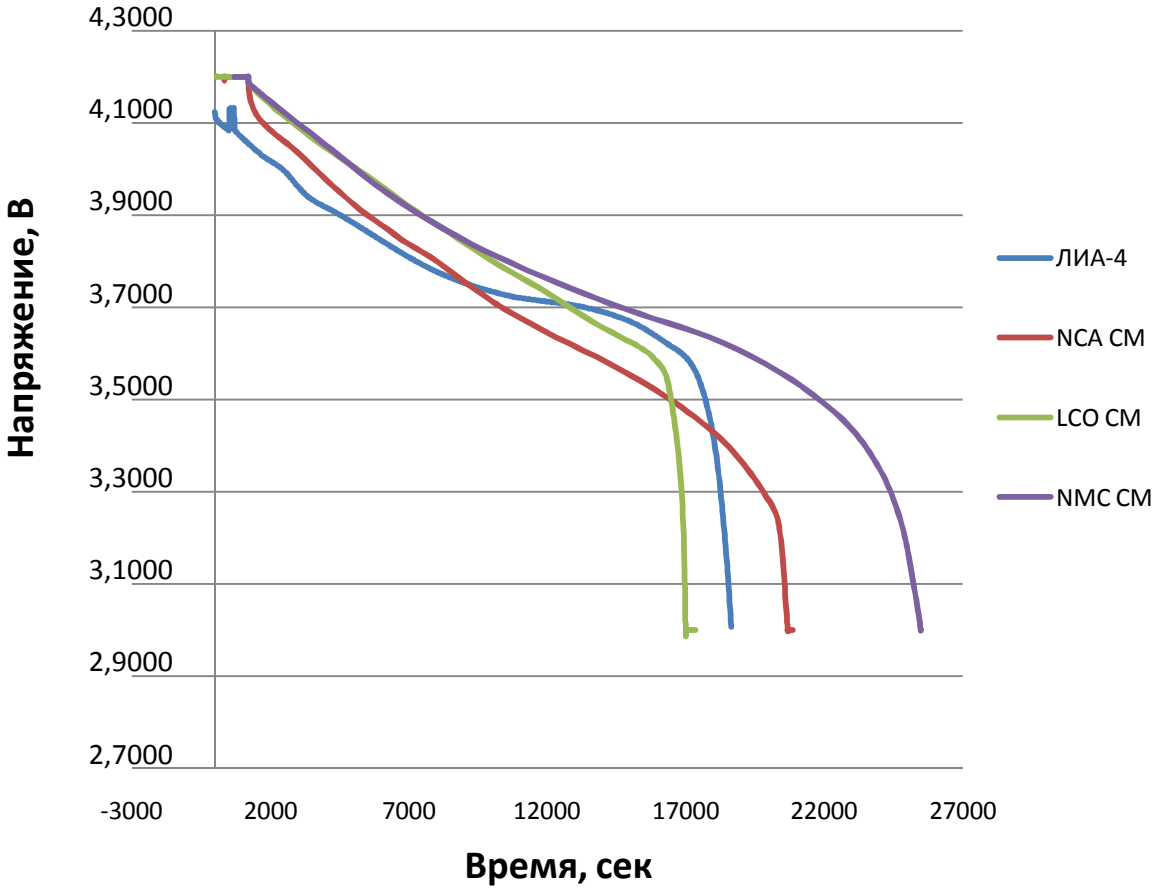
где i_2 – поверхностная плотность тока в фазе раствора,мА/см^2; k – ионная проводимость электролита, См/см; $Ф_2$ – электрический потенциал, В; F – постоянная Фарадея; R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура, К; c – концентрация соли, моль/дм^3; t – время, сек; f – проводящий наполнитель; “–” – отрицательный электрод; “+” – положительный электрод;

3. Уравнение диффузии интеркалированных частиц в твердой фазе с граничными условиями второго рода, представляющее собой уравнение диффузии в сферически симметричном зерне материала.

При построении модели учитывались несколько вариантов материалов положительного электрода, при этом основная модель аккумулятора строилась на материале с основным веществом литий-кобальта-оксид (LCO) с процентным содержанием в общей массе 90%.При расчете для сравнения были выбраны несколько материалов положительного электрода такие как:

1) NCA – $Li(NiCoAl)O_2$ – Литий-никель-кобальт-алюминий-оксидный;
2) NMC – $Li(NiCoMn)O_2$ – Литий-никель-марганец-кобальт-оксидный;
3) LCO – $LiCoO_2$ – Литий-кобальт-оксидный.

Результаты расчета разрядных характеристик (см. рисунок) показывают, что наибольшую емкость будет иметь аккумулятор с материалом NMC. Срав-



Зависимость напряжения от времени при разряде. ЛИА-4 – аккумулятор производства АО «Энергия», г. Елец; NCACM, LCOCM, NMCCM – аккумуляторы, рассчитанные в программе. Разряд током 0,2С (0,82 А).

нение рассчитанной и экспериментальной разрядных кривых для материала LCO показывает, что используемые параметры модели (данные программы) позволяют с хорошей степенью точности предсказывать емкость аккумулятора. Различие формы разрядных кривых обусловлено разностью между справочными данными и характеристиками материала, используемого при изготовлении аккумулятора, а именно, зависимостями ЭДС от степени разряженности, плотностями тока обмена, коэффициентами диффузии лития, сопротивлением твердоэлектролитной пленки.

Список литературы

1. M. Doyle, J. Newman, A. S. Gozdz, C. N. Schmutz, and J. M. Tarascon, “Comparison of Modeling Predictions with Experimental Data from Plastic Lithium Ion Cells”, J. Electrochem. Soc., vol. 143, no. 6, pp. 1890–1903, 1996.

CALCULATION OF THE PERFORMANCE CHARACTERISTICS OF LITHIUM-ION BATTERIES IN THE COMSOL MULTIPHYSICS PROGRAM

M.V. Lykovkin, M.S. Lipkin

JSC “Energy”, Yelets

Abstract: the article considers an example of designing a prismatic lithium-ion battery, the relationship between the diffusion coefficient and the battery capacity. The basic calculation equations are presented, the model of prismatic lithium-ion battery electrodes is considered.

Keywords: design, lithium-ion batteries, performance calculation, discharge curves.

УДК 539.2

О ФОРМИРОВАНИИ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМ В МОДЕЛИ АБСОЛЮТНО ТВЕРДЫХ СФЕР

Г.А. Мельников, Н.М. Игнатенко, А.С. Громков

Юго-Западный государственный университет, Курск
melnikovga@mail.ru, inmkstu@bk.ru

Аннотация: в модели твердых сфер частиц вещества рассмотрен эффект Ефимова в случае присутствия во взаимном расположении трех частиц «золотой» пропорции. Показано, что в этом случае формируется связанное состояние частиц вещества, представляющее собой дискообразный кластер. В структуре дискообразного кластера возможно образование тороидальной квантово-размерной области.

Ключевые слова: модель, эффект Ефимова, «золотая» пропорция, кластер, квантово-размерная область.

Будем исходить из результатов теории Ефимова для трехчастичного кластера (рис. 1a) [1]. В относительном расположении трех частиц формируется равнобедренный треугольник, соотношения между сторонами которого определяются случайным образом, однако в результате флуктуаций в хаотичной системе частиц возможно возникновение ситуации, когда соотношения между сторонами треугольника подчиняются «золотому» правилу. В этом случае диаметр взаимодействующих частиц σ_0 и расстояние до третьей возмущающей частицы L_1 определится формулой (рис. 1b) [2, 3]

$$L_1 = \frac{\sigma_0}{2\sin\frac{\theta}{2}}, \tag{1}$$

где θ – «золотой» угол.

При значении угла в 36°, который считается «золотым» [2], согласно формуле (1) получим

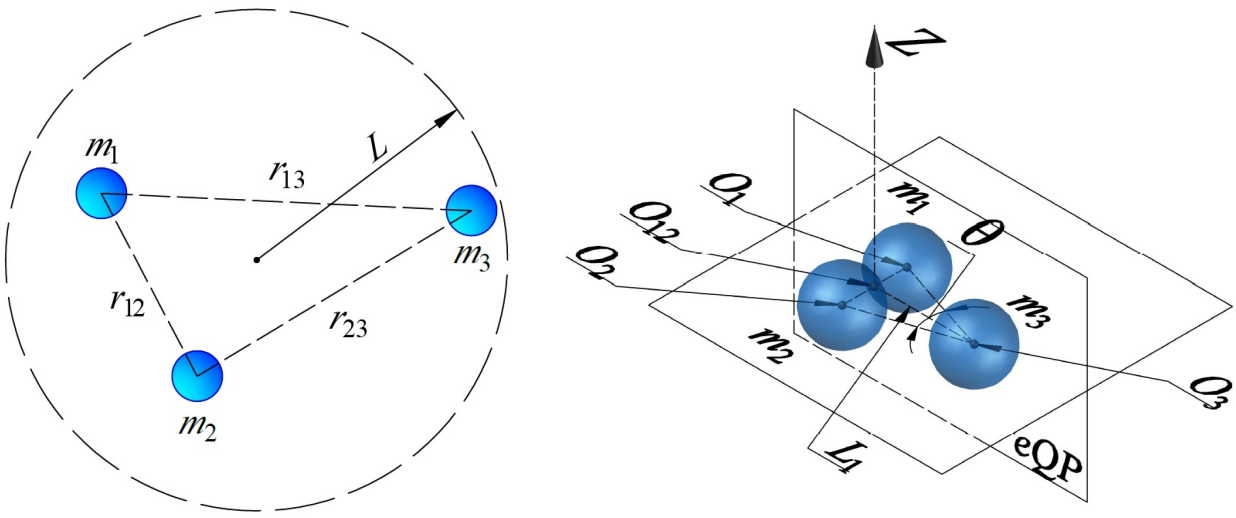
$$L_1 = \Phi \cdot \sigma_0, \tag{2}$$

где $\Phi = 1,6180339...$ – значение «золотой» пропорции («золотое» сечение) [2].

Обозначим плоскость, содержащую центр масс димера O_{12}, центр масс третьей частицы O_3 и перпендикулярную вертикальной оси симметрии димера как *экваториальную плоскость формирующегося кластера – eQP*.

В экваториальной плоскости центр масс димера и двух рядом стоящих частиц образуется «золотой» треугольник, причем на расстоянии L_1 в этой плоскости согласно формуле (1) осуществляется плотная упаковка целого числа частиц, количество которых определяется величиной «золотого» угла по формуле [4-8]

$$N_1 = \frac{360°}{\theta}. \tag{3}$$



a) b)

Рис. 1. Эффект Ефимова в трехчастичном кластере: a) произвольное расположение частиц [Naidon P. and Endo S. arX 1610.09805v2[quant-ph] 2017], b) расположение частиц по правилу «золотого» треугольника в модели абсолютно твердых сфер

В таблице приведены результаты вычислений параметров «золотых» треугольников в экваториальной плоскости формирующегося кластера. Анализ таблицы позволяет сделать вывод: «золотой» угол – это угол при вершине в равнобедренном трехчастичном треугольнике Ефимова, под которым наблюдается диаметр третьей частицы из центра масс димера. Формулы (1) и (3) определяют условия формирования трехчастичного кластера в экваториальной плоскости кластера, а так же условия возникновения «золотого» треугольника Ефимова.

Тригонометрические функции «золотых» углов

№	θ	$N_1 = \frac{360°}{\theta}$	$2\sin\frac{\theta}{2}$	$\frac{L_1}{\sigma_0}$
1	72°	5	1,17557…	0,85065…
2	36°	10	0,61803…	$\Phi = 1,618033...$
3	18°	20	0,31287…	$2\Phi = 3,23607...$
4	12°	30	0,20906…	$3\Phi = 4,85410...$
5	9°	40	0,15692…	$4\Phi = 6,47213...$
6	6°	60	0,10462…	$6\Phi = 9,70820...$
7	3°	120	0,052354…	$12\Phi = 19,4164...$
8	2°	180	0,034905…	$18\Phi = 29,1246...$
9	1°	360	0,017453…	$35\Phi = 56,6312...$ 57,2967…

Максимальное расстояние, при котором происходит захват третьей частицы в трехчастичную систему, определяется при «золотом» угле в 1°, что равносильно расстоянию от центра масс димера до центра масс третьей частицы равного

$$L_{cap} = 57{,}2938\ldots \cdot \sigma_0, \tag{4}$$

где σ_0 – диаметр частицы, в парном потенциале взаимодействия между частицами в димере.

Моделирование структуры ближнего порядка в жидкостях с помощью ЭВМ в модели абсолютно твердых сфер показало [9], что в структуре первого максимума радиальной функции распределения наблюдаются линейные цепочки из твердых сфер. Было обнаружено наличие практически прямых линий атомов длиной до шести атомов, причем направление такой линии может быть любым. Подобные линии были названы коллинеациями (collineations) [10], которые играют определенную роль в процессах переноса в жидкостях, перемещаясь как целое [9, 10].

В работе [11] на основе интегрального уравнения Борна–Грина–Ивона (BGY) изучаются структура и термодинамика жидкости, состоящей из димеров твердых сфер. Исходя из уравнения BGY получена функция распределения пар молекул димера в жидкости. Подробные результаты представлены для димеров с длинами связей $L = 0{,}6\sigma$ и $1{,}0\sigma$ (где σ – диаметр узла твердой сферы). Эти результаты, которые включают функцию распределения узлов, а также уравнения состояния вириального давления и давления сжимаемости, сравниваются с аналитическими результатами и результатами, полученными методами Монте-Карло.

В работе [12] показано, что для He^3 в случае основного состояния система He^3 образует равносторонний треугольник, *в случае возбужденного состояния один из атомов находится достаточно далеко от двух других*, причем именно эта конфигурация соответствует условиям возникновения эффекта Ефимова в трехчастичной системе. В рассматриваемом приближении вид парных потенциалов взаимодействия не оказывает существенного влияния на результаты расчетов.

Предложенная модель предсказывает свойства трехчастичной системы для He^4, диаметр атома для которого в модели абсолютно твердой сферы составляет 2,10 Å, следовательно, согласно формуле (1) захват третьей частицы димером He^4 произойдет на расстоянии приблизительно в 120 Å, что коррелирует с длиной рассеяния в модели Ефимова ($L = 104$ Å [13]).

Присутствие «золотого» сечения в структуре кластера предполагает определенный закон взаимодействия между частицами. Действительно, воспользуемся наиболее общим степенным потенциалом Г. Ми (Mie) [14]

$$\varphi\left(r_{ij}\right) = \frac{\varepsilon_0}{n-m}\left(\frac{n^n}{m^m}\right)^{\frac{1}{n-m}}\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^m\right], \tag{5}$$

$$C_{ij} = \frac{n}{\left(n-m\right)}\left(\frac{n}{m}\right)^{\frac{m}{n-m}}, \qquad \sigma_0 = \left(\frac{m}{n}\right)^{\frac{1}{n-m}} R_1. \tag{6}$$

Сравнивая соотношения (2) и (6), получим формулу, устанавливающую взаимосвязь показателей степени в потенциале взаимодействия с «золотым» сечением

$$\left(\frac{n}{m}\right)^{\frac{1}{n-m}} = \Phi, \tag{7}$$

которая позволяет определить показатели степеней в потенциале (5) Г. Ми, такими значениями могут быть $m = 2$, $n = 3$, тогда потенциал (5) примет вид

$$\varphi\left(r_{ij}\right) = \frac{9}{4}\varepsilon_0\left[\left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}}\right)^3 - \left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}}\right)^2\right]. \tag{8}$$

Особенность этого потенциала (8) заключается в том, что в трехчастичной системе Ефимова возникающее слабое, «затравочное» взаимодействие сопровождается возникновением более сильного взаимодействия, пропорционального r^{-2}. В этом случае в многочастичной системе возникает иерархия взаимодействий, когда слабые взаимодействия приводят к более сильным [1, 12].

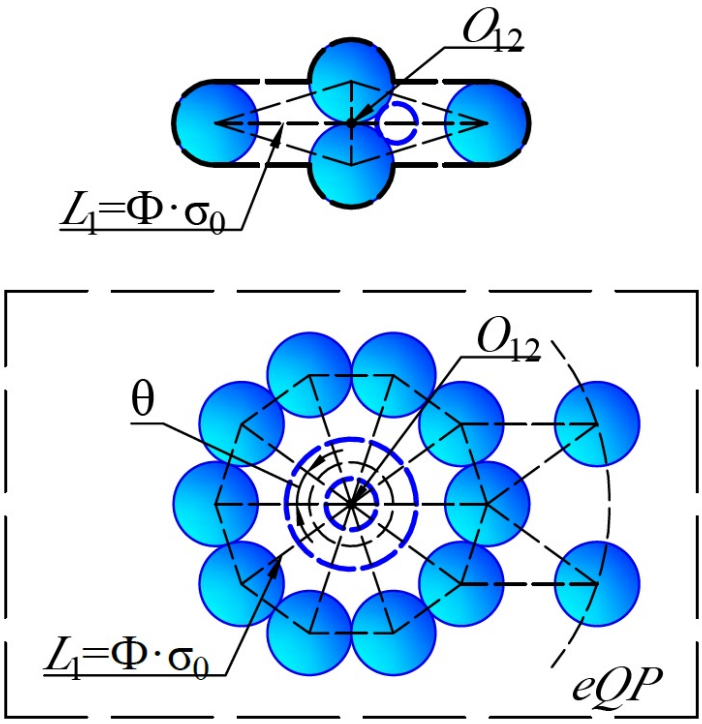


Рис. 2. Формирование дискообразного кластера абсолютно твердых сфер на основе «золотого» правила

Уравнению (7) также удовлетворяют значения показателей степени равные $m = 1$, $n = 2$, тогда потенциал (5) запишется так

$$\varphi\left(r_{ij}\right) = 4\varepsilon_0\left[\left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}}\right)^2 - \left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}}\right)\right]. \tag{9}$$

Потенциал (9) является разновидностью известного потенциала Кратцера (Kratzer-potential) [15].

Проявление эффекта Ефимова в неупорядоченной системе взаимодействующих частиц, приводит к формированию дискообразных кластеров (рис. 2),

диаметр которых определяется диаметром взаимодействующих частиц, «золотым» сечением и параметром рассеяния в модели Ефимова.

Список литературы

1. Ефимов В. И. Слабосвязанные состояния трех резонансно взаимодействующих частиц // Ядерная Физика. – 1970. – Т. 12, вып. 5. – С. 1080–1090.

2. The Fibonacci Quarterly. – URL: http://www.fq.math.ca/.

3. Cruz N., Olivares M., Villanueva J. R. The golden ratio in Schwarzschild–Kottler black holes // The european physical journal C – particles and fields. – 2017. – Т. 77, № 2. – С. 123.

4. Bertoldi D. S., Millán E. N., Guillermet A. F. Thermodynamics of the melting process in AU nano-clusters: phenomenology, energy, entropy and quasi-chemical modeling // Journal of physics and chemistry of solids. – 2017. – V. 111. – P. 286–293.

5. Мельников Г. А., Игнатенко Н. М., Пауков В. М., Сучилкин В. В. Моделирование димерных образований бензола // Физико-математическое моделирование систем. Материалы XIX Международного семинара. – 2018. – С. 148.

6. Ajlouni R. A surface-stacking structural model for icosahedral quasicrystals // Structural Chemistry. – 2019. – Т. 30, № 6. – С. 2279–2288.

7. Melnikov G., Ignatenko N., Petrova L., Manchos O., Gromkov A. On the influence of clustering processes in the liquid structure on Raman scattering // MATEC Web of Conferences. MPM 2021. – 2021. – V. 344, № 01010. – URL: https://doi.org/10.1051/matecconf/202134401010.

8. Melnikov G., Ignatenko N., Petrova L., Suchilkin V., Gromkov A. Peculiarities of quasi-crystalline films formation processes on crystal surface under irradiation with proton-ion flows // MATEC Web of Conferences. MPM 2021. – 2021. – V. 344, № 01009. – URL: https://doi.org/10.1051/matecconf/202134401009.

9. Физика простых жидкостей. Ч. 2: Экспериментальные исследования / Под ред. Г. Темперли [и др.] ; Пер. с англ. А. Г. Башкирова и Л. А. Покровского ; Под ред. Д. Н. Зубарева и Н. М. Плакиды. – Москва : Мир, 1973. – 400 с.

10. Bernal J. D. The structure of simple liquids // Proc. Roy. Soc. Lond. – 1964. – A 280. – P. 299–322.

11. Taylor Mark P., Lipson J. E. G. A site–site Born–Green–Yvon equation for hard sphere dimers // J. Chem. Phys. – 1994. – V. 100, № 518. – URL: https://doi.org/10.1063/1.466966.

12. Позднеев С. А. Многочастичная теория возникновения резонансного взаимодействия, приводящего к новому типу химической связи // Краткие сообщения по физике. ФИАН. – 2003. – № 5. – С. 3–19.

13. Grisenti R. E., Schollkopf W., Toennies J. P., Hegerfeldt G. C., Kohler T., Stoll M. Determination of the Bond Length and Binding Energy of the Helium Dimer by Diffraction from a Transmission Grating // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85, № 11. – P. 2284. – URL: 10.1103/PhysRevLett.85.2284.

14. Mie G. Zur Kinetishen Theorie der einatomigen Korper // Annalen der Physik. – 1903. – V. 11. – P. 657–672.

15. Kratzer A. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe // Zeitschrift für Physik. – 1920. – V. 3. – P. 289–307. – URL: https://doi.org/10.1007/BF01327754.

ON THE FORMATION OF CLUSTER SYSTEMS IN THE MODEL OF ABSOLUTELY RIGID SPHERES

G.A. Melnikov, N.M. Ignatenko, A.S. Gromkov

Southwest State University, Kursk

Abstract: in the model of hard spheres of matter particles, the Efimov effect is considered in the case of the presence of the "golden" proportion in the mutual arrangement of three particles. It is shown that in this case a bound state of particles of matter is formed, which is a disk-shaped cluster. The formation of a toroidal quantum-well region is possible in the structure of a disk-shaped cluster.

Keywords: model, Efimov effect, «golden» proportion, cluster, quantum-dimensional region.

УДК 623.624.2

РЕЗУЛЬТАТЫ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КОНФЛИКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ РАДИОЭЛЕКТРОННОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

М.В. Павловский, К.В. Никульшин

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
pmv-160570@yandex.ru, xumuk@yandex.ru

Аннотация: в статье описан порядок функционирования, алгоритм работы и структурная схема имитационной модели конфликтного взаимодействия информационно-управляющей системы и сложной эргатической системы специального назначения, позволяющая получить количественные оценки показателя эффективности и на их основе соответствующие многопараметрические функциональные зависимости.

Ключевые слова: имитационное моделирование, сложные эргатические системы специального назначения, средства и комплексы специального назначения, информационно-управляющие системы.

Описанию элементов конфликтного взаимодействия (КВ) сложных эргатических систем специального назначения (СЭССН), организационно состоящих из совокупности образцов, комплексов и систем специального назначения (ОСН, КСН и ССН соответственно), и информационно-управляющей системы (ИУС) противоборствующей стороны посвящен ряд работ [1–10]. При этом под СЭССН понимается структурно и закономерно, сбалансировано и целесообразно связанные между собой ОСН, КСН или ССН, предназначенные для решения возложенных на них специальных задач, а также комплексы и средства обеспечения их применения и эксплуатации. Одним из условий достижения положительного результата в указанном КВ, как отмечено в [11, 12], является выбор такого сгенерированного (синтезированного) варианта состава и структуры СЭССН, который обеспечивал бы воздействие на ИУС в целом с эффективностью, не ниже требуемой.

В настоящее время математический аппарат создания имитационных моделей КВ СЭССН и ИУС хорошо проработан. Однако анализ выполненных работ [7–10] показывает, что используемые методологические подходы в целом и разработанные на их основе имитационные модели в частности при решении задач синтеза СЭССН имеют ряд недостатков, основными из которых являются:

– проведение анализа лишь в части диапазона рабочих частот СЭССН, используемого только элементарными средствами из состава ИУС;

– отсутствие учета изменения потенциальных возможностей ИУС при вариациях состава и структуры СЭССН;

– отсутствие возможности проведения оценок приращения эффективности СЭССН от изменения ее состава и структуры в любые фиксированные моменты времени при фиксации состава и структуры ИУС;

– отсутствие возможности количественно оценить приращение эффективности СЭССН в зависимости от приращения эффективности ОСН при улучшении его характеристик.

Проведенные исследования, выполненные на основе данных [1–6, 13, 14], показали, что полученные результаты позволяют устранить первые два из указанных недостатков. Но для устранения третьего и четвертого недостатков необходимо сочетание методов имитационного моделирования конфликтного взаимодействия (ИМКВ) СЭССН и ИУС [15] и методов инфлюентного анализа (ИА) [16]. Основным препятствием на пути применения аппарата ИА является отсутствие возможности нахождения количественных оценок показателя эффективности (ПЭ) альтернативных вариантов СЭССН и получения на их основе многопараметрических функциональных зависимостей состояния СЭССН от состояния ИУС противоборствующей стороны в ходе КВ в начальный и планируемый момент времени. Это препятствие было устранено с помощью создания ИМКВ СЭССН и ИУС. Рассмотрим данную ИМКВ.

Структурная схема ИМКВ СЭССН и ИУС предусматривает ряд стандартных модулей, в которых применены как новые, так и хорошо известные модели и методы. Например, в *блоке задания исходных данных или выбора анализируемого КВ* применяются стандартные процедуры заполнения баз данных (БД), их связи и взаимодействия. Новизна блока, позволяющая проводить исследования зависимости эффективности СЭССН от ее состава и структуры в динамике КВ с ИУС, заключается в построении разветвленной процедуры смены состава и структур СЭССН и ИУС. Это позволяет рассматривать КВ двух систем не только в статическом режиме, но и в динамике варьирования надсистем для СЭССН и ИУС.

При этом в *блоке выбора анализируемого конфликта* осуществляется выбор: 1) по уровням конфликтующих сторон (структуры и состав надсистем для ИУС и СЭССН должны коррелировать между собой и отвечать соответствующим правила их соотношения); 2) по оснащению надсистем и рассматриваемых СЭССН и ИУС; 3) по динамике изменения состава и структур надсистем СЭССН и ИУС, что ранее было невозможным из-за наличия не формализуемых воздействий надсистем друг на друга; 4) по длительности моделирования КВ как СЭССН и ИУС, так и надсистем.

Для организации возможности многократного прогона ИМКВ и набора статистических данных для каких-либо изменений сторон КВ при условии неизменности других, в данном блоке реализованы уникальные базы данных, в которых хранятся: сведения о структурах и составе конфликтующих и изменяющихся надсистем; сведения о характеристиках учитываемых в модели ОСН, КСН и ССН; сведения о вероятностных процессах ИМКВ, в которых наступление событий задается с помощью стандартного датчика случайных чисел (ДСЧ), но выбор промежутков их наступления задается правилами функционирования надсистем; данные о длительности и шаге моделирования. Кроме того, в блоке осуществляется ввод всех алгоритмов, функций и подпрограмм, которые используются в программе ИМКВ, а также запускается процедура форми-

рования баз данных расчета результатов конфликтного взаимодействия «ИУС–СЭССН». Основным содержанием блока является розыгрыш структур конфликтующих надсистем, для которых используются стандартные нормативы, задаваемые специальными таблицами.

В *блоке выбора порядка изменения состояния модели*, учитывая преимущественное использование в имитационных моделях пособытийного [15] метода изменения времени, созданы базы данных, в которых отражены моменты изменения состояния надсистем как по составу и структуре, так и по информационным связям. Новизной блока является динамический и автоматический учет состава и структур надсистем, что с одной стороны приводит к усложнению ИМКВ, но с другой стороны повышает ее чувствительность к изменениям информационного обмена элементов ИУС.

В *блоке выбора сетевых алгоритмов управления потоками информации* осуществлено программирование трех независимых алгоритмов маршрутизации (Беллмана-Форда, Дейкстры и волновой) при условии, что временные и частотные ограничения работы ИУС учтены. Данный блок, идеализируя работу ИУС, позволяет ожидать в реальном КВ СЭССН и ИУС более высоких результатов эффективности. Новизной данного блока стали возможность адаптированного выбора способа маршрутизации и отсутствие необходимости решения задач маршрутизации в реальном масштабе времени. Особенностью данного блока является условие его функционирования. Если в *блоке выбора порядка изменения состояния модели* принято решение о наступлении времени решения задачи маршрутизации, то блок начинает свою работу, заменяя действующие таблицы маршрутизации. Если же в *блоке выбора порядка изменения состояния модели* отсутствует решение о необходимости проведения маршрутизации, то блок исключается из порядка следования блоков ИМКВ.

Представленные три блока ИМКВ завершают прямолинейное следование блоков в составе ИМКВ, потому что следующим блоком является новый *блок выбора*. Данный блок позволяет оптимизировать состав и структуру ИУС, действующей в составе надсистемы конкурента, для различных потоков управляющих и реализующих действий и команд. Если оптимальный режим работы ИУС и ее надсистемы не найден, то осуществляется возврат к *блоку выбора анализируемого конфликта*, в котором осуществляется изменение характеристик потоков действий и команд и кратный прогон ИМКВ. Если же оптимальный режим работы ИУС и ее надсистемы найден, то характеристики потоков действий и команд запоминаются и начинается учет воздействия на ИУС и ее надсистему СЭССН и соответствующей надсистемы, осуществляемое в *блоке определения порядка и правил воздействия СЭССН на ИУС*.

В данном блоке для всех ОСН, КСН и ССН из состава СЭССН производится расчет по стандартным формулам дальности разведки и дальности электромагнитного воздействия определяются возможности КВ СЭССН на ИУС, что приводит к снижению эффективности ее функционирования, следовательно, вынуждает надсистему конкурента принимать деструктивные воздействия на надсистему СЭССН. Эти деструктивные воздействия могут стать как анало-

гичными по физической сущности, так и представлять действия по физическому уничтожению конкурентом надсистемы СЭССН.

Следующим блоком ИМКВ является *блок единовременного анализа результатов КВ*, в котором производится расчет физического воздействия надсистем друг на друга, оценка влияния СЭССН на ИУС конкурента, а также учет аналогичного воздействия надсистемы конкурента на нашу СЭССН. Новизна данного блока заключается в подсчете результатов каждого отдельного конфликта но только в один действующий момент моделирования. Это значение сохраняется в соответствующей базе данных и служит основой для получения итоговой оценки результатов КВ СЭССН и ИУС.

Результаты вычислений в данном блоке в виде обратной связи поступают в *блоки выбора анализируемого конфликта, выбора сетевых алгоритмов управления потоками информации, а также определения порядка и правил воздействия СЭССН на ИУС.* Они служат для учета результатов единовременного КВ только в один момент моделирования, что позволяет: осуществить адаптивную маршрутизацию потоков команд и действий конкурента; учесть КВ надсистем; осуществить изменение состав и структуры ИУС конкурента по данным изменившейся обстановки.

Завершает работу ИМКВ *блок расчета результатов конфликта*, в котором решается задача ветвления. Если заданное время моделирования истекло, или достигнут необходимый результат КВ двух надсистем, то осуществляется расчет финальных характеристик всей ИМКВ. Если же время работы ИМКВ не достигло своего допустимого максимума, то осуществляется повторный прогон всей ИМКВ начиная с блока *задания исходных данных или выбора анализируемого КВ*, в котором осуществляется изменение необходимых БД по результатам произведенного прогона ИМКВ.

Описанная структура ИМКВ представлена на рис. 1, на котором над стрелками показаны те результаты работы каждого предшествующего блока, которые необходимы в функционировании последующего блока. При этом «предшествующий» и «последующий» блоки определяются не только прямым следованием блоков, но и наличием обратных связей.

Таким образом, осуществлено описание работы ИМКВ, в котором указаны все существенные для моделирования процессы, БД и порядок взаимодействия блоков. Кроме того, при описании разработанной ИМКВ указаны не только стандартные программы и решения, но также описаны ее отличительные признаки, позволяющие говорить о новизне, практической и научной значимости представлено ИМКВ. Отличительным свойством разработанной ИМКВ стала возможность расчета эффективности КВ не по промежуточным ПЭ отдельных конфликтов отдельных элементов СЭССН и ИУС, а построение прозрачных и понятных правил расчета итогового значения ПЭ КВ двух надсистем.

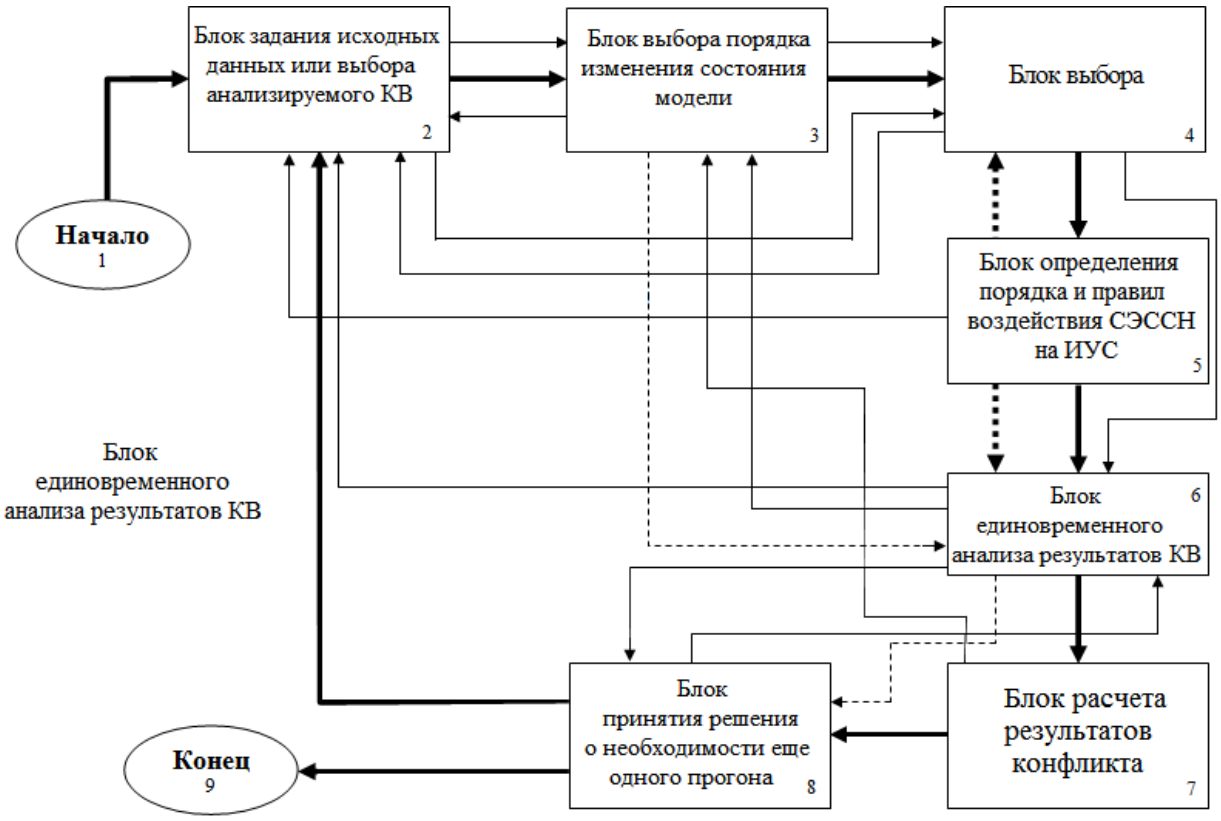


Рис. 1. Структурная схема ИМКВ ИУС и СЭССН

Данная ИМКВ разрабатывалась в интересах оценки ПЭ КВ двух надсистем, находящихся в антагонистическом конфликте. Однако без каких-либо доработок данная ИМКВ может быть применена для любых других видов конфликта, но при этом необходимо будет ввести в ИМКВ БД со степенями потери каждой надсистемой своих потенциальных возможностей из-за поражения ее ИУС или СЭССН.

Адекватность модели следует из графика, представленного на рис. 2, на котором представлены взаимно-однозначное соответствие ПЭ и применения трех различных СЭССН для одной и той же ИУС. При этом результаты практических измерений показаны сплошной линией, расчетные аналитические значения представлены штрихпунктирной линией, а результаты имитационного моделирования КВ изображены двойной сплошной линией.

Представленные данные позволяют предположить, что использование данной ИМКВ для осуществления прогноза хода и исхода КВ перспективных СЭССН и ИУС в составе конкурирующих надсистем является обоснованным и точным, так как не превышает допустимых ошибок прогнозирования на срок десять-пятнадцать лет.

С учетом представленных в постановке задачи данных применение ИМКВ позволит не только рассчитать для перспективных СЭССН зависимости ПЭ от количества используемых СЭССН (рис. 3), но, что самое главное позволит за счет изменения состава и структур СЭССН находить те элементы этих систем (то есть ОСН, КСН или ССН), которые обеспечивают необходимый прирост итогового ПЭ и позволяют его получить с наименьшим использованием ресурсов надсистемы.

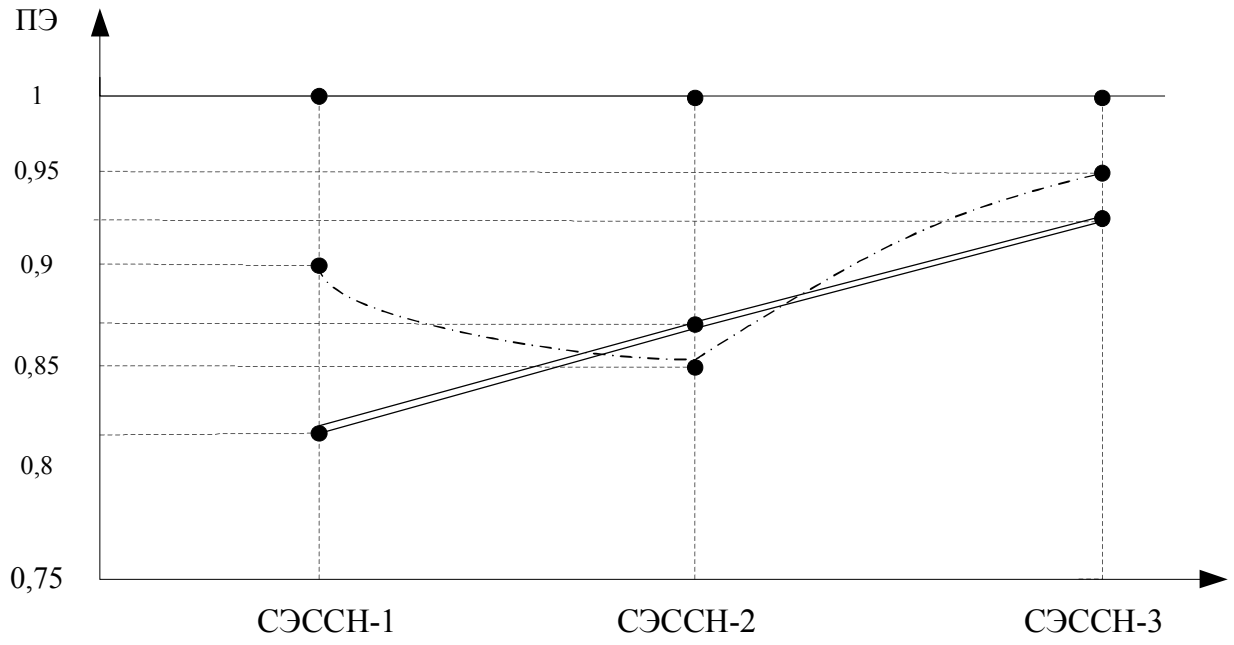


Рис. 2. Результат применения ИМКВ по известным ИУС и СЭССН

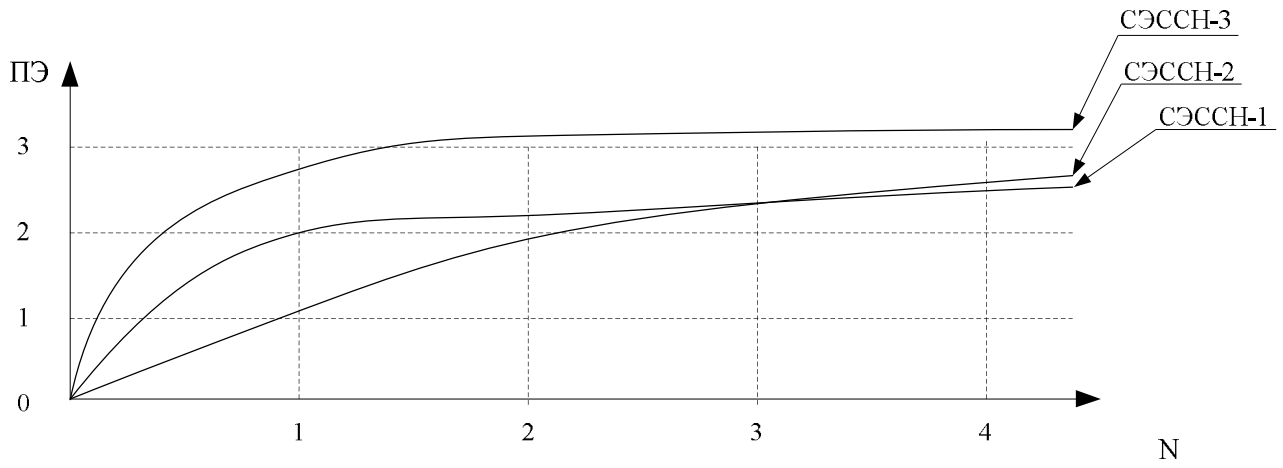


Рис. 3. Ожидаемые графики КВ перспективных ИУС и СЭССН

Таким образом, получена ИМКВ СЭССН и ИУС, представляющих основные элементы конкурирующих надсистем, которая позволит спрогнозировать ход и исход конфликтного взаимодействия этих надсистем.

Список литературы

1. Павловский М. В., Тюкачев Н. А. Имитационное моделирование радиоэлектронного конфликта сложных эргатических систем: исходные данные // Вестник ВГТУ. Серия «Системный анализ и информационные технологии». №3, 2015. С. 17–23.

2. Павловский М. В., Тюкачев Н. А. Имитационное моделирование радиоэлектронного конфликта сложных эргатических систем: динамика структур сторон конфликта // Вестник ВГТУ. Серия «Системный анализ и информационные технологии». №3, 2015. С. 24–32.

3. Павловский М. В., Тюкачев Н. А. Имитационное моделирование радиоэлектронного конфликта сложных эргатических систем: динамика загрузки сторон // Вестник ВГТУ. Серия «Системный анализ и информационные технологии». №4, 2015. С. 13–21.

4. Павловский М. В., Гаршина В. В. Алгоритм множественного доступа с прослушиванием несущей и обнаружением конфликта и анализа энергетического конфликта // Сборник материалов XV МНТК «Информатика: проблемы, методология, технологии». 2016. С. 371–375.

5. Павловский М. В., Тюкачев Н. А. Учет функционирования алгоритмов маршрутизации информационных потоков // Сборник материалов XV МНТК «Информатика: проблемы, методология, технологии». Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2016. С. 375–381.

6. Павловский М. В. Проблемы физико-математического моделирования конфликтного взаимодействия сложных эргатических систем специального назначения // ФММС: материалы XXI Международного семинара. 2020. С. 79–84.

7. Зайцев И. В., Молев А. А., Колесников А. С. Оценка показателей качества функционирования когнитивных систем радиосвязи на основе их моделирования в среде Anylogic // VII ВНПК «ИММОД-2015». 2015. Т. 2. С. 121–126.

8. Молев А. А., Колесников А. С. Моделирование в среде Anylogic систем радиосвязи, построенных на основе когнитивных техноголий // Материалы XV МНМК «Информатика: проблемы, методология, технологии». 2015. Т. 1. С. 349–354.

9. Зайцев И. В., Молев А. А. Оценка пропускной способности когнитивной системы связи в условиях воздействия помех на ее ключевые элементы // Успехи современной радиоэлектроники. 2017. С. 52–62.

10. Зайцев И. В., Молев А. А. Программный комплекс имитационного моделирования когнитивных систем радиосвязи в условиях воздействия помех // Информационно-измерительные и управляющие системы. 2017. №10. С. 42–52.

11. Месарович М. Теория иерархических многоуровневых систем / М. Месарович, Д. Мако, И. Такахара. М.: Мир, 1973. 633 с.

12. Дружинин В. В., Конторов Д. С. Основы военной системотехники. М: МО СССР, войска ПВО, 1983. 416 с.

13. Трухаев Р. И. Модели принятия решений в условиях неопределенности М.: Наука, 1981. 258 с.

14. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1973. 578 с.

15. Иващенко А. В., Сыпченко Р. П. Основы моделирования сложных систем на ЭВМ. Ленинград: ЛВВИУС, 1988. 271 с.

16. Трухаев Р. И. Инфлюентный анализ и принятие решений (детерминированный анализ). М: Наука, 1984. 235 с.

RESULTS OF SIMULATION MODELING OF CONFLICT INTERACTIONS OF COMPLEX ELECTRONIC SUPPORT SYSTEMS

M.V. Pavlovsky, K.V. Nikulshin

Military Educational and Scientific Center of the Air Force
«N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin Air Force Academy», Voronezh

Abstract: the article describes the order of functioning, the algorithm of operation and the block diagram of the simulation model of the conflict interaction of the information and control system and a complex ergatic system of special purpose, which allows to obtain quantitative estimates of the efficiency indicator and on their basis the corresponding multiparametric functional dependencies.

Keywords: simulation modeling, complex ergatic systems of special purpose, means and complexes of special purpose, information and control systems.

УДК 519.673+542.65

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФУНКЦИИ ЖЕЛАТЕЛЬНОСТИ ХАРРИНГТОНА ДЛЯ ВЫБОРА МЕТОДИКИ ОСАЖДЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА В ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СХЕМЕ ОЧИСТКИ ВОДЫ

Ю.Г. Смирнов, И.В. Ивенина

Ухтинский государственный технический университет
ysmirnov@ugtu.net

Аннотация: в статье рассмотрен математический аппарат на основе обобщенной функции желательности Харрингтона для формирования интегральной оценки методики получения наночастиц магнетита. Использование указанного подхода позволило решить задачу выбора оптимальной методики регенерации магнитных наночастиц в технологической схеме очистки пластовых вод от нефтяного загрязнения.

Ключевые слова: функция желательности Харрингтона, регенерация наночастиц магнетита, выбор методики.

Введение

В ходе экспериментальных исследований, результаты которых представлены в публикациях [1, 2], установлена высокая эффективность извлечения эмульгированной нефти из загрязненной воды в неоднородном магнитном поле после обработки водонефтяной эмульсии наночастицами магнетита. В неоднородном магнитном поле, создаваемом в сепараторе, частицы магнетита увлекают за собой эмульгированную нефть, вызывая ее направленное движение. Собранная магнитами нефть легко извлекается из воды в виде нефте-магнетитной массы.

Для обеспечения замкнутого цикла нефте-магнетитную массу подвергают переработке, заключающейся в восстановлении рабочего материала, то есть магнетита, и повторного его использования. Введение узла регенерации ферромагнитных наночастиц в технологическую схему позволяет оптимизировать три важных составляющих: экологическую, экономическую и техническую [3].

Осаждение магнетита осуществляют подщелачиванием раствора, содержащего смесь солей железа (II, III) в эквимолярных соотношениях. В качестве основной химической реакции для получения наночастиц изначально использовали метод Рене Массарта [4], основанный на использовании раствора аммиака для осаждения магнетита.

Однако, с практической точки зрения, использование раствора аммиака имеет существенные недостатки, такие как: опасность производства при работе с аммиаком и связанные с этим меры предосторожности; образование солей аммония, являющихся дополнительным источником загрязнения воды; особенности транспортировки; высокая стоимость аммиака по сравнению с другими возможными осадителями.

В связи с выше сказанным возникла необходимость в поиске другого реагента для осаждения магнетита. Среди возможных осадителей наилучшие технологические качества показал гидроксид натрия (NaOH). Для увеличения эффективности осаждения были испробованы разные концентрационные соотношения реагирующих растворов солей железа и осадителя.

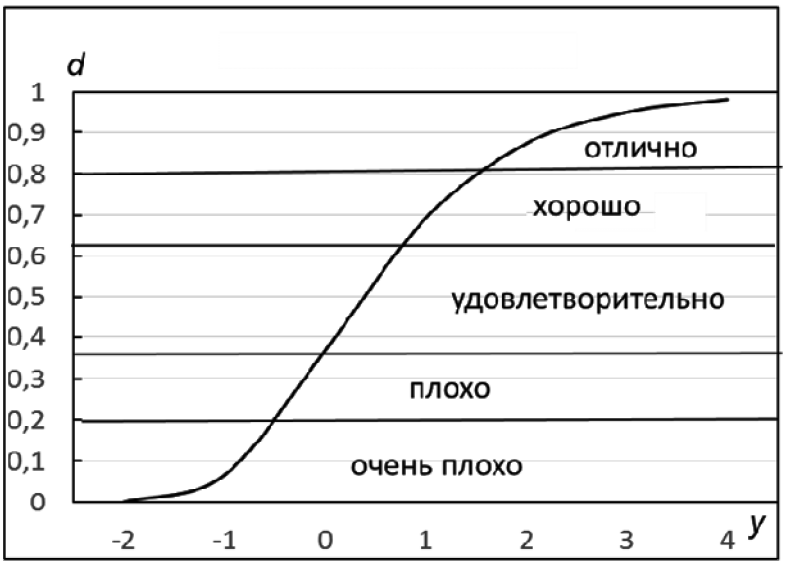
Целью настоящей работы является выбор оптимальной методики получения наночастиц магнетита в узле регенерации в рамках технологической схемы очистки воды. Достижение этой цели стало возможным благодаря результатам серии экспериментов [5], в ходе которых был получен ряд показателей, позволяющих произвести сравнительную оценку рассматриваемых методов осаждения.

Математический аппарат

Для решения многокритериальных задач, к каким относится рассматриваемая задача, одним из наиболее удобных способов выступает обобщенная функция желательности Харрингтона [6]. Для построения обобщенной функции Харрингтона для конкретной решаемой задачи необходимо преобразовать натуральные значения рассматриваемых показателей в безразмерную шкалу желательности, которая откладывается по оси абсцисс [7]. Переводя значения частных показателей в безразмерную шкалу желательности, получим набор частных желательностей d_i. Значение $d_i = 0$ соответствует худшему значению данного показателя, а значение $d_i = 1$ – самому лучшему. Значение $d_i = 0{,}37$ соответствует нижней границе допустимых значений.

Аналогично [8], покажем порядок решения рассматриваемой задачи. Функция желательности отражает зависимость показателей желательности d, от безразмерных показателей y, в которые переводят натуральные показатели. Данная зависимость выражается соотношением:

$$d = \exp\left(-\exp(-y)\right) \tag{1}$$



Вид функции желательности Харрингтона. Выделены интервалы стандартных оценок по шкале желательности и соответствующие им лингвистические оценки.

Обобщенный показатель желательности D получается в результате свертки частных значений функции желательности d_i без учета коэффициента весомости, как среднее геометрическое, по формуле

$$D = \sqrt[n]{\prod_i^n d_i}. \quad (2)$$

На самом деле частным показателям могут быть присвоены разные веса с учетом экспертных оценок. Учет коэффициентов весомости показателей способствует повышению точности комплексной оценки.

При учете коэффициентов весомости m_i, формула для обобщенного показателя желательности выглядит следующим образом:

$$D = \prod_i^n (d_i)^{m_i}. \quad (3)$$

Рассмотрим порядок выбора коэффициентов весомости показателей. Для оценки целесообразности выбранного метода подготовки магнетита в цикле очистки воды от нефтяного загрязнения использовали четыре показателя.

Во-первых, экологический критерий, связанный с возможной опасностью побочных продуктов реакций получения магнетита. Кроме ферромагнитных наночастиц, образующихся в ходе обменной реакции, в состав продуктов могут входить вещества, наносящие не меньший вред при попадании в природную среду, чем сами нефтепродукты.

Эти соображения и привели к поиску метода осаждения магнетита, альтернативного методу Массарта.

Второй критерий, не менее важный, – технологический, связанный с обеспечением эффективности метода очистки сточных вод от нефти. Необходимо было доказать, что наночастицы магнетита, полученные щелочным осаждением, не уступают частицам, полученным по методу Массарта, в способности связываться с микрокаплями нефти и извлекать ее из водной фазы.

В случае неэффективности данная технология была бы не целесообразна в промышленных масштабах, даже при условии ее большей экологичности.

Таким, образом экологический и технологический критерии для сравнения двух методов регенерации магнетита являются равноценными и должны иметь наибольший вес по сравнению с оставшимися – по 30%.

Третий критерий – экономический, связанный с закупкой и транспортировкой реагентов для цикла регенерации.

Для производственных условий, учитывая значительные объемы очищаемой воды, даже небольшая ценовая разница может иметь важное значение. Поэтому данный критерий также немаловажен, хотя и получил меньший вес по сравнению с выше названными.

Последний, четвертый, критерий связан с безопасностью условий труда при работе с реагентами. Известно, что обращение с летучими и токсичными веществами предполагает особые правила хранения и работы с ними, а также использование дополнительного оборудования в складских и рабочих помещениях, что также может потребовать дополнительные расходы на предприятии.

На наш взгляд, последние два фактора весьма взаимосвязаны и имеют равный по отношению друг к другу вес. Однако эти два критерия не являются определяющими в выборе технологии и поэтому их вклад в сравнительной характеристике методов оценен ниже – в 20%.

Алгоритм расчета сводится к следующему.Для линейного участка функции Харрингтона можно перевести значения натуральных показателей x в безразмерные y по формуле

$$y_0 = a_0 + a_1 x. \tag{4}$$

Из формулы (1), логарифмируя дважды, получим

$$\ln\left(\ln\frac{1}{d}\right) = -y. \tag{5}$$

С учетом соотношений (4) и (5) получим систему уравнений

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_1 = -\ln(-\ln(d_1)), \\ a_0 + a_1 x_2 = -\ln(-\ln(d_2)). \end{cases} \tag{6}$$

Решение этой системы уравнений (5) позволяет найти значения коэффициентов a_0 и a_1.

Таким образом, получаем уравнение линейной зависимости между рассматриваемым натуральным показателем x и безразмерным y. По этому уравнению можно найти значение безразмерного показателя y для любого значения x, а далее по формуле (1) – соответствующий показатель желательности d.

Для решения поставленной задачи, ориентируясь на линейный участок функции Харрингтона, положим d_1 = 0,8 («отлично»), d_2 = 0,37 («удовлетворительно»). Тогда, с учетом (6), получим

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_1 = 1{,}50, \\ a_0 + a_1 x_2 = 0{,}006. \end{cases} \tag{7}$$

Из (7), подставляя в качестве x_1 и x_2 их значения, соответствующие оценкам «отлично» и «удовлетворительно», находим численные значения коэффициентов a_0 и a_1 для первого показателя, затем аналогичным образом поступаем для нахождения указанных коэффициентов для всех других показателей.

Результаты и обсуждение

Ниже в табл. 1 и 2 приведен набор параметров (натуральных показателей), полученных экспериментальным путем, позволяющих произвести сравнительную оценку рассматриваемых методик регенерации.

Там же наряду с исходными параметрами приведены также рассчитанные по выше приведенным формулам безразмерные показатели и частные желательности для каждого параметра.

Таблица 1

Сравнительные показатели по результатам разделения водонефтяной эмульсии при помощи магнетита, полученного осаждением гидратом аммиака, с магнетитом, полученным осаждением гидроксидом натрия

Загрязнитель и его содержание в воде до очистки	Соотношение нефть: магнетит, масс.	Содержание нефти в воде (мг/л) после очистки магнетитом, полученным через осаждение:					
		гидратом аммиака			гидроксидом натрия		
		x_i, мг/л	y_i	d_i	x_i, мг/л	y_i	d_i
Ярегская нефть (80 мг/л)	1:1	4,3	1,019	0,6970	0,63	2,010	0,8746
Ярегская нефть (80 мг/л)	1:2	2,5	1,505	0,8009	0,17	2,134	0,8884
Усинская нефть (20 мг/л)	1:0,5	6,2	0,506	0,5472	2,6	1,478	0,7960
Усинская нефть (20 мг/л)	1:1	5,5	0,695	0,6071	2,5	1,505	0,8009
Усинская нефть (20 мг/л)	1:2	3,4	1,262	0,7534	2,55	1,492	0,7985
Усинская нефть (20 мг/л)	1:3	2,04	1,629	0,8219	1,65	1,735	0,8382
Усинская нефть (20 мг/л)	1:4	0,64	2,007	0,8743	1,00	1,910	0,8624

Таблица 2

Сравнение токсичности и стоимости реагентов-осадителей

Критерий оценки	Используемый для осаждения раствор					
	гидрата аммиака			гидроксида натрия		
	x_i	y_i	d_i	x_i	y_i	d_i
Летучесть, ПДК в воздухе рабочей зоны	Летучий, ПДК аммиака 20 мг/м^3	–0,48	0,20	Не летучий, ПДК не регламентируется	1,5	0,80
Особые условия работы с реагентом	Требуется вытяжка	–0,48	0,20	Нет	1,5	0,80
ПДК продуктов реакции осаждения магнетита в воде объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования	Ионы аммония – 1,5 мг/л (по азоту)	–0,48	0,20	Ионы натрия – 200 мг/л	1,5	0,80
Стоимость (цены на сентябрь 2021 г.)	От 48 (техн.) до 480 (ч.д.а.) руб/кг	1,34	0,77	От 46 (техн.) до 76 (ч.д.а.) руб/кг	1,50	0,80

Расчет обобщенных показателей желательности с учетом коэффициентов весомости дал следующие значения:

– если для осаждения наночастиц магнетита использовать раствор аммиака, для обобщенного показателя желательности получаем значение $D_1 = 0,569$;

– в случае использования для этой цели раствора гидроксида натрия получаем обобщенный показатель желательности $D_2 = 0,829$.

Вычисленные обобщенные показатели желательности соответствуют лингвистическим оценкам «удовлетворительно» (D_1) и «отлично» (D_2).

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что методика регенерации наночастиц магнетита с использованием в качестве осадителя гидроксида натрия существенно лучше методики с использованием раствора аммиака.

Список литературы

1. Лютоев А. А., Смирнов Ю. Г., Ивенина И. В. Извлечение эмульгированных примесей нефти из воды при помощи высокодисперсных частиц магнетита // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. – 2014. – № 4. – С. 40-45.

2. Ивенина И. В, Смирнов Ю. Г., Лютоев А. А. Исследование эффективности извлечения нефти из водонефтяной эмульсии при помощи ферромагнитных наночастиц // Научно-технический вестник Поволжья. – 2018. – № 10. – С. 98-101.

3. Ивенина И. В, Смирнов Ю. Г., Лютоев А. А., Истомина Е. И. Разработка технологии регенерации наночастиц магнетита в процессе очистки воды от эмульгированной нефти // Научно-технический вестник Поволжья. – 2018. – № 7. – С. 24-28.

4. Massart R. Preparation of aqueous magnetic liquids in alkaline and acidic media // IEEE Trans. Magn. – 1981. – V. 17. – № 2. – P. 1247-1248.

5. Ивенина И. В., Смирнов Ю. Г. Исследование возможности использования гидроксида натрия в цикле регенерации ферромагнитных наночастиц в ходе тонкой очистки воды от эмульгированной нефти // Естественные и технические науки. – 2020. – №3(141). – С. 271-275.

6. Harrington, E. C., Jr. The Desirability Function // Industrial Quality Control. – 1965. – V. 21. – № 10. – P. 494-498.

7. Никулин А. Н., Должиков И. С., Климова И. В., Смирнов Ю. Г. Оценка результативности и эффективности системы управления охраной труда на горном предприятии // Безопасность труда в промышленности. – 2021. – № 1. – С. 66-72.

USE OF THE HARRINGTON DESIRE FUNCTION TO CHOOSE THE METHOD OF DEPOSITION OF MAGNETITE NANOPARTICLES IN TECHNOLOGICAL SCHEME OF WATER PURIFICATION

Yu.G. Smirnov, I.V. Ivenina

Ukhta State Technical University

Abstract: the article considers the mathematical apparatus based on the generalized Harrington desirability function for the formation of an integral assessment of the method for obtaining magnetite nanoparticles. Using this approach allowed us to solve the problem of choosing the optimal method for the regeneration of magnetic nanoparticles in the technological scheme for treating formation waters from oil pollution.

Keywords: Harrington desirability function, regeneration of magnetite nanoparticles, choice of technique.

УДК 538.915

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГЕМИОКСИДА МЕДИ

В.Р. Радина[1], Е.Р. Лихачев[2], С.И. Курганский[1]

[1]Воронежский государственный университет
[2]Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
viminova@inbox.ru

Аннотация: в данной работе представлены результаты расчета зонной структуры и плотности состояний соединения Cu_2O. Расчет проведен в рамках метода ЛППВ с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии. Для более точного расчета ширины запрещенной зоны гемиоксида меди E_g был использован потенциал mbj.

Ключевые слова: гемиоксид меди, электронная структура, плотность электронных состояний, ширина запрещенной зоны, метод ЛППВ.

Медь, как переходный элемент со степенями окисления Cu^+ и Cu^{+2}, может находиться в двух стехиометрических оксидных фазах Cu_2O и CuO. Соединение Cu_2O (гемиоксид меди) является перспективным материалом для использования во многих приложениях микро- и наноэлектроники [1-3]. Это относится не только к объемному материалу, но и к его наноформам – нанонитям [2] и нанопленкам [1, 3], подобно основному материалу электроники – кремнию, где дальнейшие перспективы также связывают с наноформами [4].

В данной работе представлены результаты теоретического исследования зонной структуры и плотности состояний соединения Cu_2O.

На рис. 1 показана элементарная ячейка гемиоксида меди. Соединение Cu_2O имеет кубическую сингонию кристаллической решётки и относится к пространственной группе Pn3 [5].

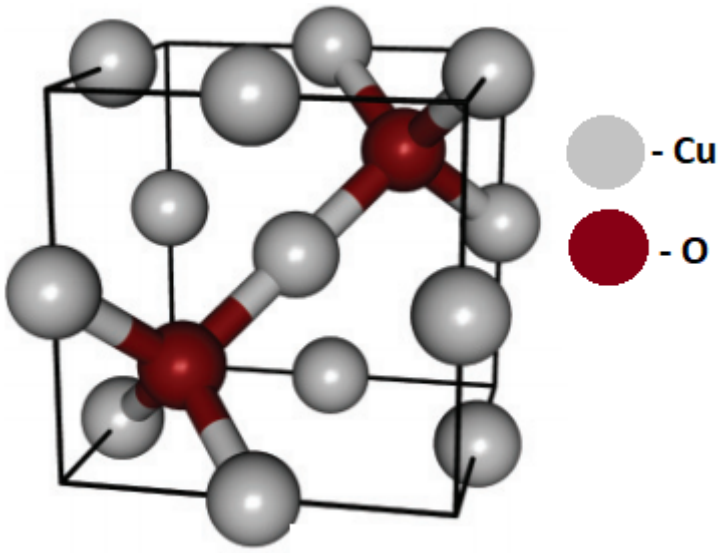


Рис. 1. Элементарная ячейка соединения Cu_2O [6]

В этом оксиде атомы кислорода находятся в тетраэдрическом окружении из атомов меди. Атом меди в ближайшем окружении имеет два атома кислорода и 12 атомов меди во второй координационной сфере, образующих усеченный куб, имеющий 6 квадратных и 8 треугольных граней. Элементарная ячейка гемиоксида содержит две формульные единицы (шесть атомов).

Расчет электронной структуры был проведен методом линеаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в программном пакете Wien2k [7] с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии. При построении кристаллического потенциала МТ-приближение не применялось, а использовался потенциал общего вида (Full-Potential), позволяющий получить зонную структуру полупроводников с точностью, сопоставимой с методом ОПВ [8]. Для более точного расчета ширины запрещенной зоны гемиоксида меди E_g был использован модифицированный потенциал Becke-Johnson (mbj) [7], который позволяет получить величину E_g, близкую к экспериментальным значениям.

На рис. 2 показана зонная структура соединения Cu_2O. Из рисунка видно, что уровень Ферми попадает в запрещенную зону. Наличие в основном состоянии энергетических щелей, целиком заполненных валентных зон и пустых зон

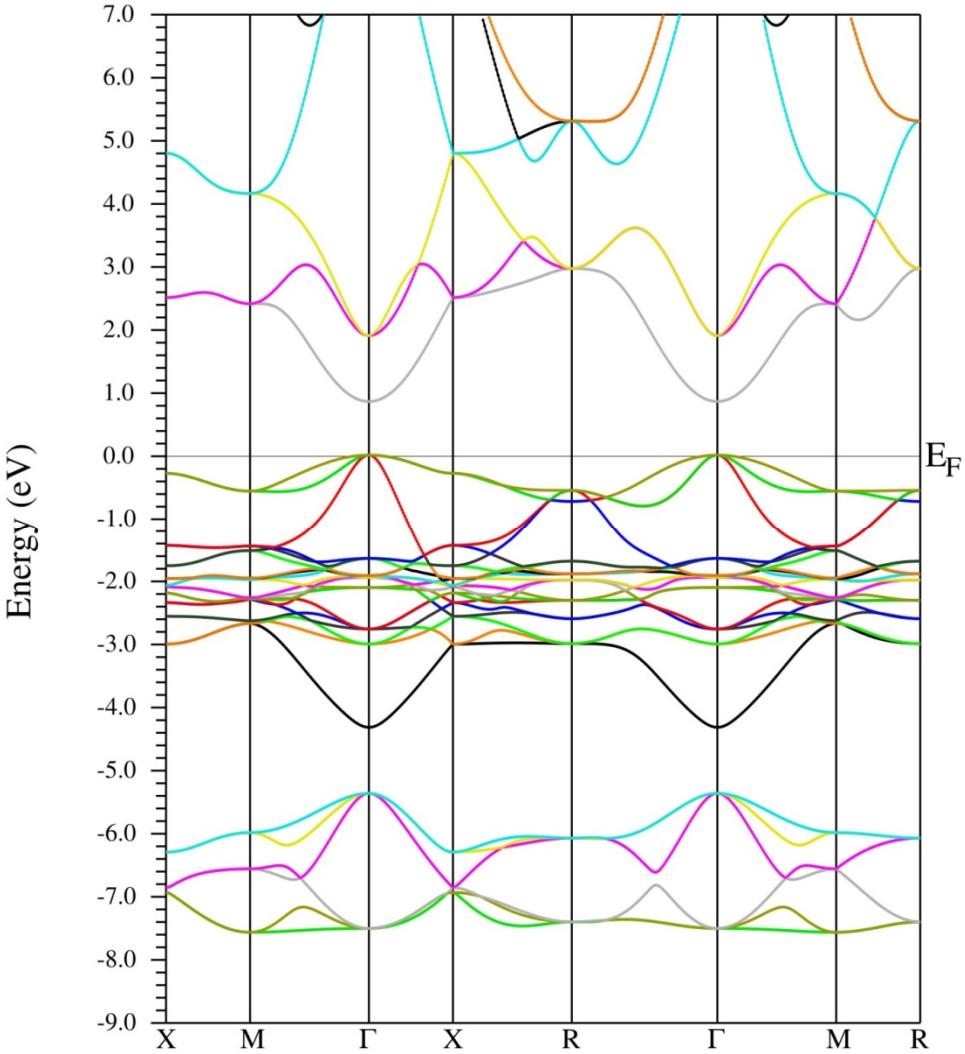


Рис. 2. Зонная структура соединения Cu_2O

проводимости типично для полупроводников. Ширина запрещенной зоны Cu_2O согласно расчету составляет 0,91 эВ, что близко к экспериментальному значению 0,99 эВ [6]. В Cu_2O заполнены 28 энергетических зон, включая две *2s*-зоны кислорода, лежащие при энергии ~20 eV ниже уровня Ферми

На рис. 3 приведены спектры полной и локальных парциальных плотностей электронных состояний атомов меди в соединении Cu_2O.

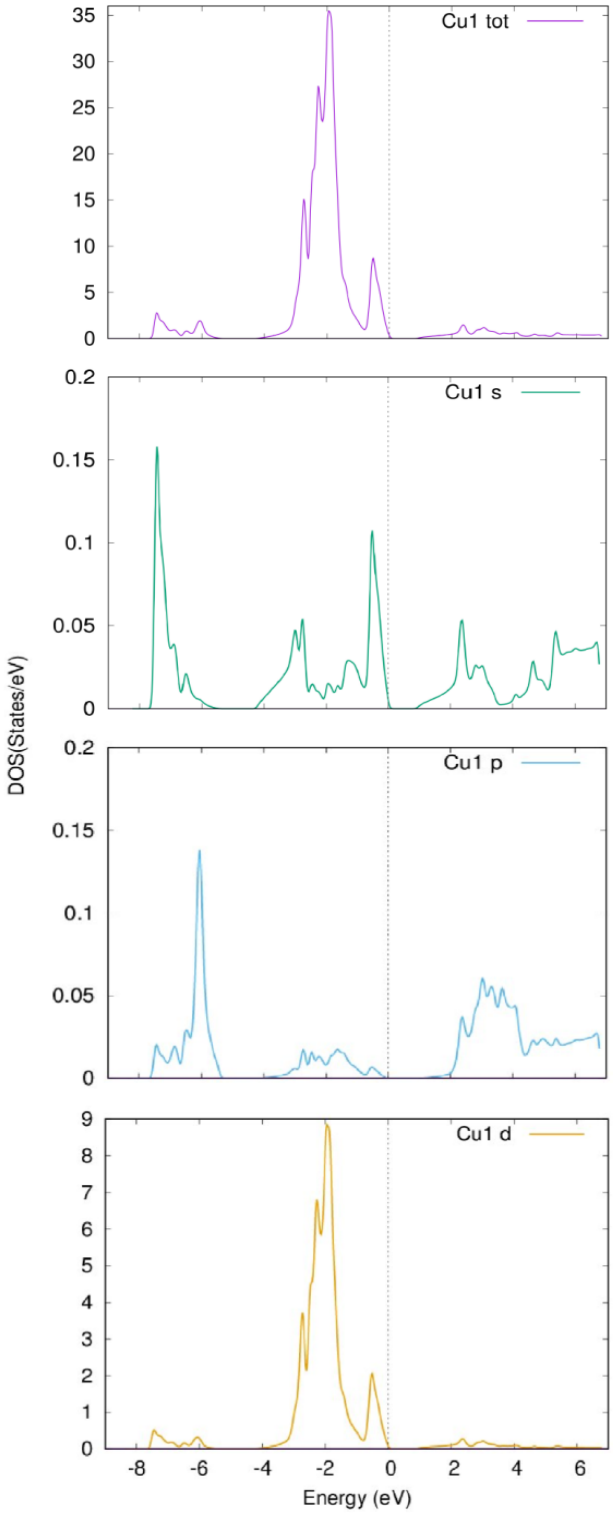


Рис. 3. Полная и парциальные плотности электронных состояний Cu в соединении Cu_2O

Проанализировав полученный результат, можно сделать вывод, что основной вклад в полную плотность состояний дают *d*-состояния меди. Видно, что наибольшая интенсивность этих состояний приходится на верхнюю часть валентной зоны в области главного максимума полной плотности состояний при энергии ~ –2 эВ. Состояния меди *s*- и *p*-симметрии дают незначительный вклад в формирование валентной зоны и заметны главным образом в ее нижней части.

На рис. 4 продемонстрированы спектры полной и локальных парциальных плотностей электронных состояний атомов кислорода в соединении Cu_2O.

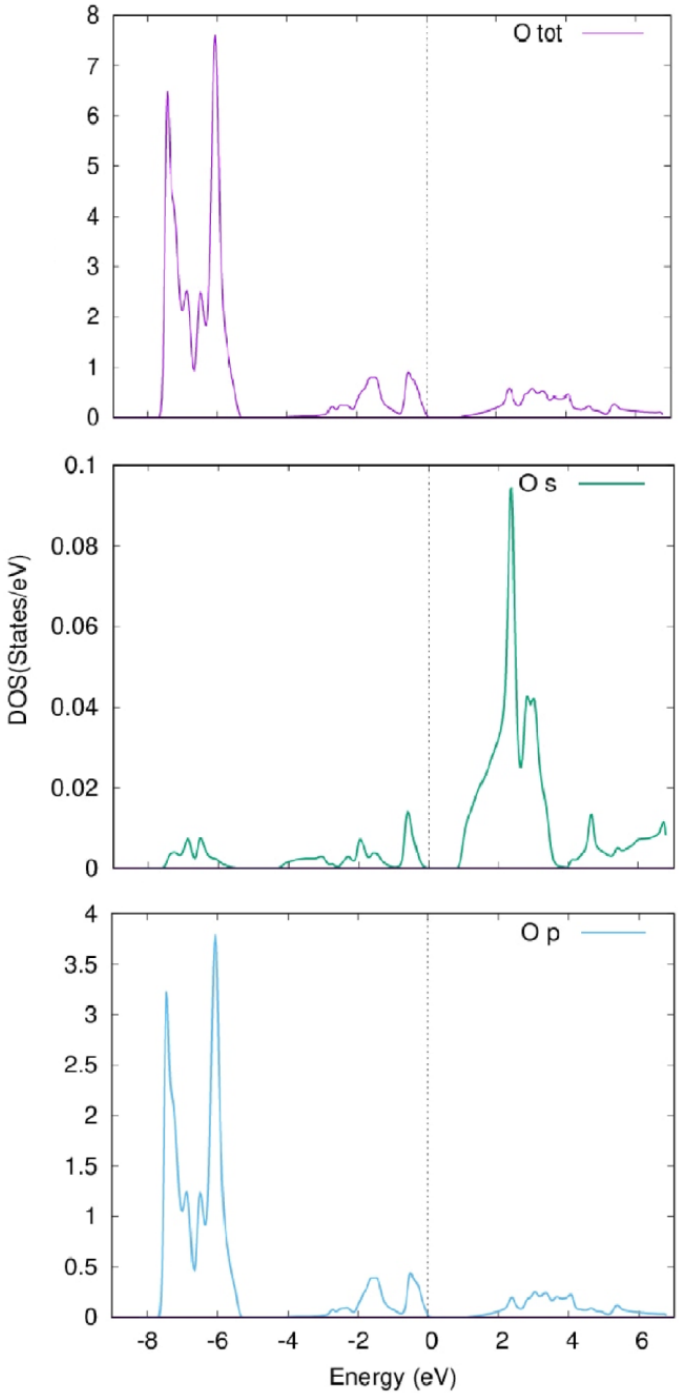


Рис. 4. Полная и парциальные плотности электронных состояний O в соединении Cu_2O

Доминирующий вклад в полную плотность состояний дают *p*-состояния, которые имеют два пика при энергиях –7.5 и –6 эВ. Относительная интенсивность этих состояний достигает своего максимума у дна валентой зоны. Вклад 2*s*-состояний кислорода в формирование валентной зоны Cu_2O незначителен. Состояния атомов кислорода 2*s*-симметрии формируют субвалентную зону, почти полностью образованную 2*s*-состояниями кислорода и расположенную при энергиях от –21.5 до –19.5 эВ.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

Список литературы

1. Wilson, S. S. Interface stoichiometry control to improve device voltage and modify band alignment in ZnO/Cu_2O heterojunction solar cells / S. S. Wilson, J. P. Bosco, Y. Tolstova, D. O. Scanlon, G. W. Watsonc, H. A. Atwater // Energy Environ. Sci. – 2014. – V. 11. – P. 3606–3610.

2. Li, Z. Tetrafunctional Cu_2S thin layers on Cu_2O nanowires for efficient photoelectrochemical water splitting / Z. Li, Z. Zhang // Nano Res. – 2018. – V. 11. – P. 1530–1540.

3. Sathisha, Critical investigation on Cu-O bonding configuration variation in copper-oxide thin films for low-cost solar cell applications / Sathisha, Shaik Mahammad Rafia, Habibuddin Shaikc, P. Madhavid, Yellareswara Rao Kosurie, Sheik Abdul Sattara, K.Naveen Kumara // Materials Science in Semiconductor Processing. – 2019. – V. 96. – P. 127–131.

4. Борщ, Н. А. Пространственная структура и электронный спектр кластеров $TiSi_n^-$ (n = 6 – 18) / Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский // Журнал физической химии. – 2014. – Т. 88, № 10. – С. 1523 – 1529.

5. Asbrink, S. A Refinement of the Crystal Structure of Copper (II) Oxide with a Discussion of Some Exceptional E.s.fl.'s / S. Asbrink, L.-J. Norrby // Acta Cryst. – 1970. – T. 26. – C. 8–15.

6. Heinemann, M. Band structure and phase stability of the copper oxides Cu_2O, CuO, and Cu_4O_3 / M. Heinemann, B. Eifert, C. Heiliger // Phys. Rev. B – 2013. – V. 87. – P. 11511.

7. Schwarz, K. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences / K. Schwarz, P. Blaha, G. K. H. Madsen // Comput. Phys. Commun. – 2002. – V. 147. – № 1–2. – C. 71–76.

8. Farberovich, O. V. Problems of the OPW method. II. Calculation of the band structure of ZnS and CdS / O. V. Farberovich, S. I. Kurganskii, E. P. Domashevskaya // Physica status solidi (b). – 1980. – V. 97, № 2. – P. 631–640.

SIMULATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE COPPER HEMIOXIDE

V.R. Radina[1], E.R. Likhachev[2], S.I. Kurganskii[1]

[1]Voronezh State University
[2]Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

Abstract: the paper considers the results of calculating the band structure and density of states of the Cu2O compound. The computation was carried out within the LAPW method using the generalized gradient approximation (GGA) for the exchange-correlation energy. For a more accurate determination of the band gap E_g of copper hemioxide was used to the potential mbj.

Keywords: copper hemioxide, electronic structure, density of states, band gap, LAPW method.

УДК 550.838.4 : 537.621.4

СТАЦИОНАРНОЕ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ МОДЕЛИ ПРЯМОШОВНОЙ СТАЛЬНОЙ ТРУБЫ

В.С. Стариков[1], В.Н. Глазнев[2]

[1]АО Предприятие подводно-технических работ «Пётр», Воронеж
[2]Воронежский государственный университет
stvase@mail.ru

Аннотация: приведены результаты лабораторных исследований намагниченности стальной прямошовной трубы и сформирована её физико-математическая модель, включающая компоненты остаточной и индуктивной намагниченности объекта. Даны методы расчёта стационарного магнитного поля от такой модели, которые можно использовать для анализа практических материалов магнитных наблюдений над трубопроводами и диагностирования технического состояния труб.

Ключевые слова: магнитная модель стальной прямошовной трубы, остаточная намагниченность, индуктивная намагниченность, стационарное магнитное поле.

Для трубопроводных систем по транспортировке нефти и газа часто используются прямошовные стальные трубы, специфика изготовления которых заключается в горячей прокатке стального листа, служащего заготовкой для трубы, и последующего формирования готового трубного изделия с продольным сварным швом [1]. В процессе эксплуатации трубопроводов, расположенных в грунте и пересекающих водные преграды, требуется постоянный мониторинг их технического состояния. При отсутствии данных о точном положении трубопровода часто возникают проблемы с локализацией стальных трубопроводных сооружений расположенных даже на незначительной глубине. Поэтому для решения данной проблемы применяют высокоточную магнитную съёмку, которая позволяет определить планово-высотное положение стальной трубы, а при хороших условиях выполнить диагностирование технического состояния исследуемого объекта [2].

Дистанционные магнитные исследования трубопроводов выполняются в различных вариантах: измерений модуля индукции магнитного поля, градиентов модуля индукции и векторных измерений компонент индукции поля [3-7]. В результате интерпретации материалов таких съёмок оценивается пространственное положение объектов (стальных труб), которое обусловлено методикой и точностью съёмки поля, а также наличием техногенных помех. Однако использование данных магнитометрии для дистанционного исследования стальных трубопроводов ограничено отсутствием адекватных моделей изучаемых объектов. До настоящего времени используются простейшие модели, в которых рассматриваются поля тонких стержней бесконечной или ограниченной длины [4, 8, 9]. Фактически такие модели далеки от реальной ситуации при наличии сложного намагничения стальных труб, характеризующихся магнитной восприимчивостью и остаточной намагниченностью материала изделия.

Ранее авторами на реальных объектах были изучены магнитные характеристика материала типичной стальной прямошовной трубы большого диаметра. Так прямые измерения магнитной восприимчивости показали, что магнитная восприимчивость может варьировать по длине и периметру трубы в больших пределах [2], то есть значимо влияет на величину намагниченности объекта и его внешнее магнитное поле. В целом натурные измерения магнитных свойств материала труб большого диаметра показали, что степень изменения магнитной восприимчивости вполне достоверно может оцениваться по данным стандартных методов полевой магнитометрии.

Кроме того, лабораторные измерения величины остаточной и индуктивной намагниченности образцов материала трубы [10, 11] позволили составить модельные представление о сложном распределении остаточной намагниченности материала по периметру прямошовной трубы Было установлено, что величина модуля остаточного намагничения (*Jrem*) материала стальной трубы может достигать 15000 А/м. и сложным образом распределена по образующей трубы, изготовленной из единого стального листа материала заготовки. Значение модуля индуктивного намагничения (*Jind*) примерно в три-четыре раза меньше, а соответствующая ей величина индуктивного намагничения хорошо соответствует ранее полученными результатами [2, 12].

Опираясь на полученные результаты, была предложена физико-математическая модель трубы, представляющая распределение остаточной и индуктивной намагниченности, сложным образом распределённых на стенке стальной трубы. Первая из намагниченностей формируется в материале трубы внешними магнитными полями на стадии прокатки стального листа, при его охлаждении ниже температуры Кюри, и преобладающей ориентировкой вектора намагничения в плоскости этого листа [10, 11]. Вторая, индуктивная намагниченность, обусловлена высокой магнитной восприимчивостью материала стальной трубы и формируется в современном нормальном поле Земли [8]. Таким образом, суммарный вектор намагничения для любой точки нашего объекта можно записать в виде

$$J_{x,y,z} = Jrem_{x,y,z} + Jind_{x,y,z} = Jrem_{x,y,z} + \chi \frac{B_{x,y,z}}{\mu_0},$$

где $J_{x,y,z}$ – компоненты вектора намагничения; $Jrem_{x,y,z}$ – компоненты вектора остаточного намагничения; $Jind_{x,y,z}$ – компоненты вектора индуктивного намагничения; $B_{x,y,z}$ – компоненты вектора нормального поля Земли; χ – магнитная восприимчивость материала трубы; μ_0 – магнитная проницаемость вакуума. Отметим, что ориентировка вектора остаточного намагничения обусловлена спецификой изготовления изделия, а индуктивного – зависит от пространственного положения элемента изделия (отрезка трубы) в системе координат геомагнитного поля [8].

Вычисление стационарного магнитного поля от нашего объекта можно выполнить, аппроксимируя с достаточной точностью стенку трубы совокупностью тонких стержней, ориентированных по длине трубы. Оптимизация раз-

биения объекта на дискретные элементы обусловлена геометрическими параметрами изделия: диаметром трубы и толщиной её стенок. Поскольку размеры трубных элементов, составляющих трубопровод, ограничены по длине, то в качестве базовой модели дискретного элемента трубы воспользуемся выражением для ограниченного по простиранию произвольно намагниченного тонкого цилиндра [10], ориентированного по одной из осей координат, например, “*y*”. Суммируя компоненты индукции магнитного поля от всех дискретных элементов, получим компоненты поля от всего изделия, а также модуль вектора индукции поля, который собственно и используется в качестве измеряемой величины в современных магнитометрах.

Составленная программа вычисления компонент индукции и модуля вектора магнитного поля для трубного элемента, позволяет рассчитывать внешние поля отдельного изделия, а также моделировать различные сочетания полей от нескольких трубных элементов, собственно и представляющие модель стального трубопровода.

В качестве примера работы программы, приведём карты модуля вектора индукции магнитного поля от стальной прямошовной трубы диаметром 530 мм и длиной 10 метров, расположенного на глубине 3 м от уровня съёмки магнитного поля. При расчётах принималась во внимание остаточная и индуктивная намагниченность изделий. Рассматривалась модель одного элемента прямошовной трубы (рис. 1); модель составленная их двух элементов прямошовных труб при одинаковом направлении векторов остаточного намагничения соседних трубных элементов (рис. 2); и аналогичная модель при антипараллельной ориентировке векторов остаточного намагничения соседних трубных элементов (рис. 3).

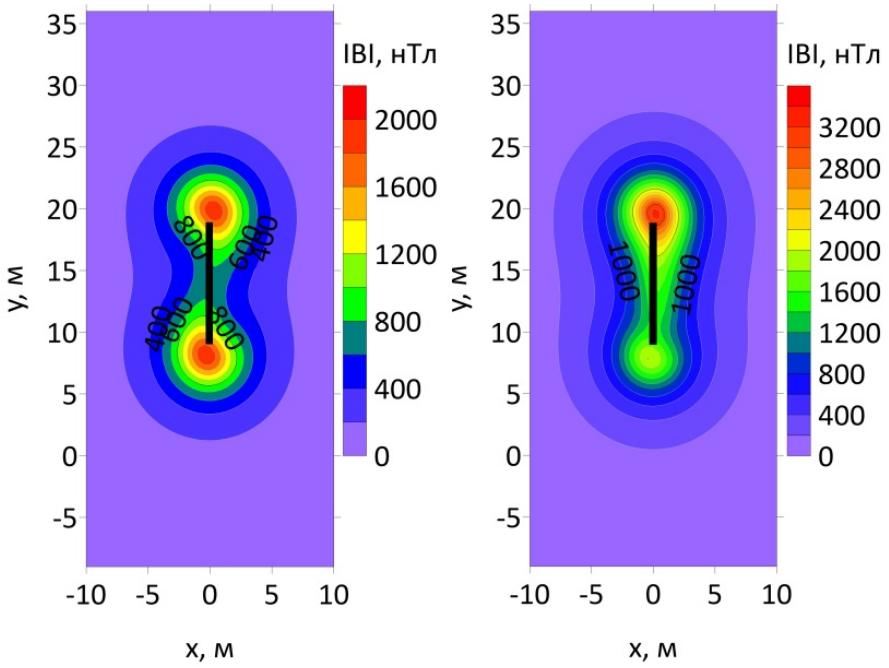


Рис. 1. Модуль вектора индукции магнитного поля одиночного трубного элемента: слева без учёта индуктивного намагничения, справа с учётом индуктивного намагничения

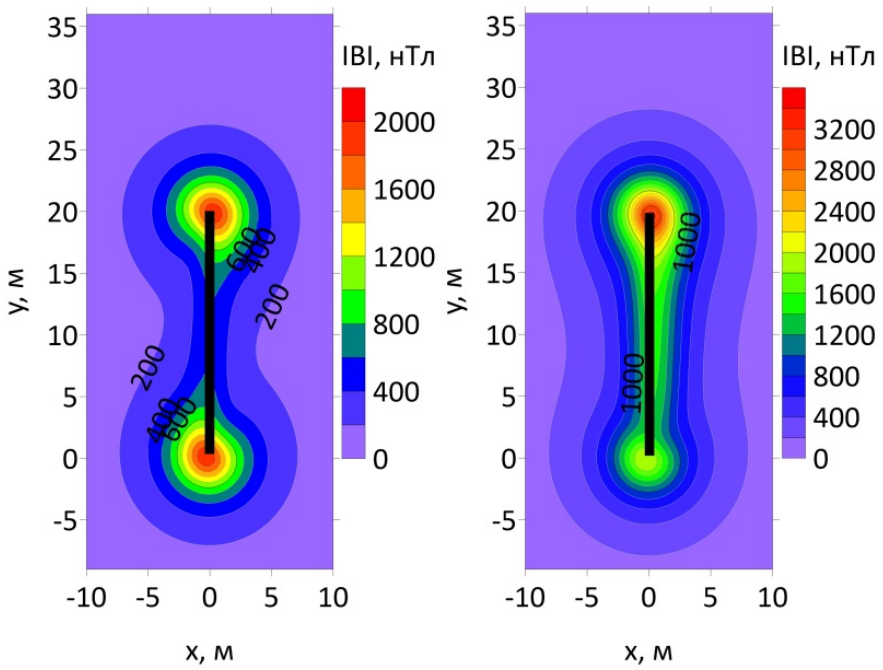


Рис. 2. Модуль вектора индукции магнитного поля над составной трубой из двух стандартных прямошовных труб (компоненты вектора остаточного намагничения труб колинеарны): слева без учёта индуктивного намагничения, справа с учётом индуктивного намагничения

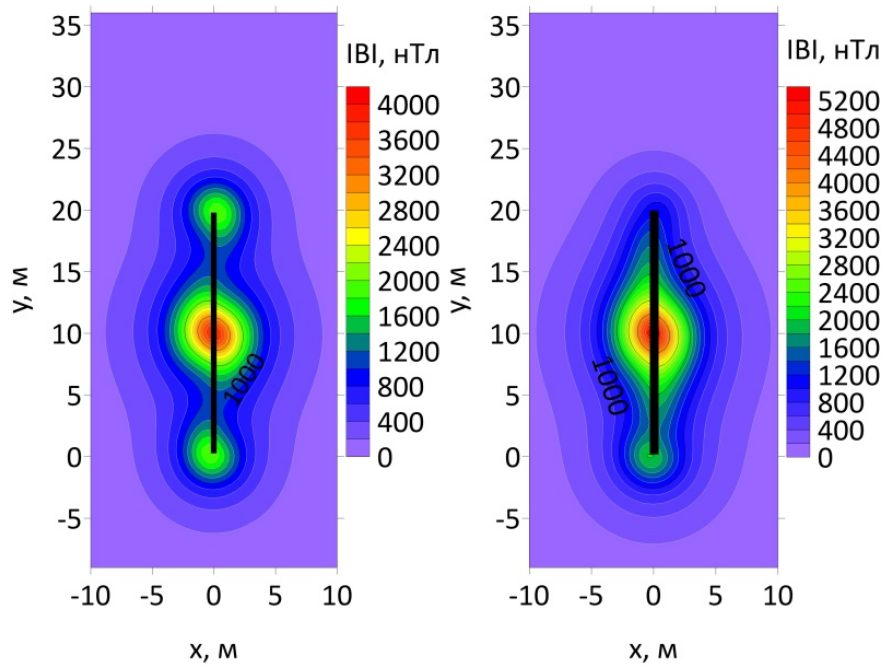


Рис. 3. Модуль вектора индукции магнитного поля над составной трубой из двух стандартных прямошовных труб (компоненты вектора остаточного намагничения труб антипараллельны): слева без учёта индуктивного намагничения, справа с учётом индуктивного намагничения

Как явствует из приведённых карт полей, магнитные аномалии составных объектов существенно зависят от взаимного направления компонент векторов остаточного намагничения. В случае одинаковой ориентировки векторов намагничения соседних труб (рис. 2) аномалия магнитного поля над стыком труб не образуется, что вполне согласуется с общетеоретическими позициями формирования магнитных аномалий от ограниченных по простиранию объектов. В противоположном случае, при антипараллельности векторов намагничения (рис. 3) магнитная аномалия над стыком труб – более интенсивна, чем над краевыми частями составной трубы.

Представленные результаты демонстрируют два основных варианта морфологии аномального магнитного поля, которые вполне могут транслироваться на аномальное поле всего трубопровода, формируемых за счёт различия в ориентировке намагничения отдельных сегментов труб. Индуктивная намагниченность является вполне значимой величиной при расчёте внешнего магнитного поля от стальной прямошовной трубы и должна обязательно учитываться при анализе данных полевых магнитных съёмок над трубопроводами.

Предложенные методы расчёта компонент индукции внешнего магнитного поля, основанные на аппроксимационном подходе и опирающиеся на выявленные соотношения для компонент вектора остаточного и индуктивного намагничения трубы, следует использовать при интерпретации практических материалов над трубопроводами.

Список литературы

1. Сокуренко В.П., Ворона В.М., Ившин П.Н., Кузенко Н.Ф., Ганзина В.Ф. Трубы стальные электросварные прямошовные. ГОСТ 10704-91 / М.: Росстандарт, 2015.

2. Стариков В.С. Инженерная магнитометрия при исследовании технического состояния стальных трубопроводов большого диаметра // Вестник ВГУ. Сер.: Геология, 2016, №3. С. 114-118.

3. Альбанова Е.В., Крапивский Е.И., Некучаев В.О. Исследование возможностей оценки технического состояния трубопроводов с помощью магнитных методов // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2005, № 11. С. 9-12.

4. Крапивский Е.И., Некучаев В.О. Дистанционная магнитометрия газонефтепроводов / Ухта: Изд. УГТУ, 2011. 142 с.

5. Любчик А.Н. Способ дистанционного магнитометрического контроля технического состояния магистральных трубопроводов // Записки Горного института. 2012. Т. 195. С. 268-271.

6. Zhao W., Huang X., Chen S., Zeng Z., Jin S. A detection system for pipeline direction based on shielded geomagnetic field // Int. J. of Pressure Vessels and Piping. 2014. 113. № 1. – P. 10-14.

7. Новикова П.Н., Ворошилов В.А., Копытин В.В. и др. Инженерная магниторазведка при обнаружении подземных коммуникаций в условиях помех техногенного происхождения // 18-я молодёжная научная школа по геофизике. Сборник научных материалов. Пермь: ГИ УрО РАН, 2017. С. 147-151.

8. Захаров В.П., Логачев А.А. Магниторазведка / Л.: Недра, 1979. – 351 с.

9. Глазнев В.Н., Стариков В.С. Применение методов магнитометрической съёмки для исследования подводных переходов трубопроводов различной протяжённости в условиях

мелководья / Сборник докладов 5-й Международной научно–практической конференции и выставки «Инженерная и рудная геофизика 2009».

10. Глазнев В.Н., Стариков В.С. Остаточная намагниченность и внешнее магнитное поле прямошовных стальных труб, как объекта инженерных изысканий // Вестник ВГУ. Сер.: Геология. 2018. № 3. С. 83-92.

11. Стариков В.С., Глазнев В.Н. Магнитные свойства и аномальное магнитное поле прямошовных стальных труб / Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей: Сборник научных трудов. Вып. 1 (46). Пермь: ГИ УрО РАН, ПГНИУ, 2019. С. 337-340.

12. Eskola L., Jokinen T., Soininen H., Tervo T. Some remarks on static field thin sheet models // Journal of Applied Geophysics. 1993. V. 30. P. 229–234.

STATIONARY MAGNETIC FIELD OF THE MODEL OF LONGITUDINAL STEEL PIPE

V.S. Starikov[1], V.N. Glaznev[2]

[1]«PETER» Joint-Stock C°. Diving Services, Voronezh
[2]Voronezh State University

Abstract: the results of laboratory studies of the magnetization of steel longitudinal pipe are given and its physical and mathematical model is formed, including the components of residual and inductive magnetization of the object. Methods for calculating the stationary magnetic field from such a model are given, which can be used to analyze practical materials of magnetic observations over pipelines and diagnose the technical condition of pipes.

Keywords: magnetic model of steel longitudinal pipe, residual magnetization, inductive magnetization, stationary magnetic field.

УДК 621.07.44

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ ОТЛИВКИ НА ОСНОВЕ CAD-СИСТЕМ

Т.И. Сушко, Р.Ш. Караев, Т.В. Пашнева

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
Tat120675@yandex.ru

Аннотация: приведены примеры моделирования физических процессов затвердевания отливки «ступица» с использованием CAD-систем.

Ключевые слова: моделирование, металлическая форма, комплекс характеристик качества.

Математическая модель – это констелляция дифференциальных уравнений, различающихся граничными, технологическими условиями, геометрическими параметрами металлической формы для генерирования условий в ней окончательной формы твердой отливки. Средства математического моделирования процессов затвердевания отливок позволяют широко интерпретировать традиционные расчёты с унифицированными системами питания отливок, для формирования нужного комплекса характеристик в конечном изделии, в нашем случае отливок. К требуемому комплексу характеристик отливок, характеризующих качество, технологи «приходят» посредством анализа динамики заполнения жидким сплавом металлического ящика, риска и указаний на трехмерной модели мест возникновения и скопления повреждений, дефектов. После проработки виртуального процесса заливки указывают направления усовершенствования технологии литья на всех этапах посредством CAD-систем, включая профессиональные литейные моделирующие программы [1], например, LVM Flow. В ней технологу удается последовательно создать весь алгоритм реализации технологического маршрута от детали к отливке, посредством геометрические взаимосвязи между их элементами и моделирования отдельных элементов деталей и их взаимодействия в целом. Помощником для этого является CAD-программа SolidWorks Russia.

Целью данной работы является поиск вариаций создания отливки с надобными характеристиками, отливаемой в кокиль, из оловянной бронзы, исходя из анализа необходимых параметров качества посредством моделирующих систем.

Для разработки трехмерной модели (рис. 1) и моделирования процесса затвердевания отливки в металлической форме используется деталь «ступица» ответственного назначения, массой 387,45 кг, геометрические параметры: высота – 1080 мм, наружные диаметры – 331,43 и 425,00 мм, внутренние диаметры – 265,60 и 332,20 мм соответственно, конусность 1:11,8. Комплексные решения SolidWorks базируются на передовых технологиях гибридного параметрического моделирования.

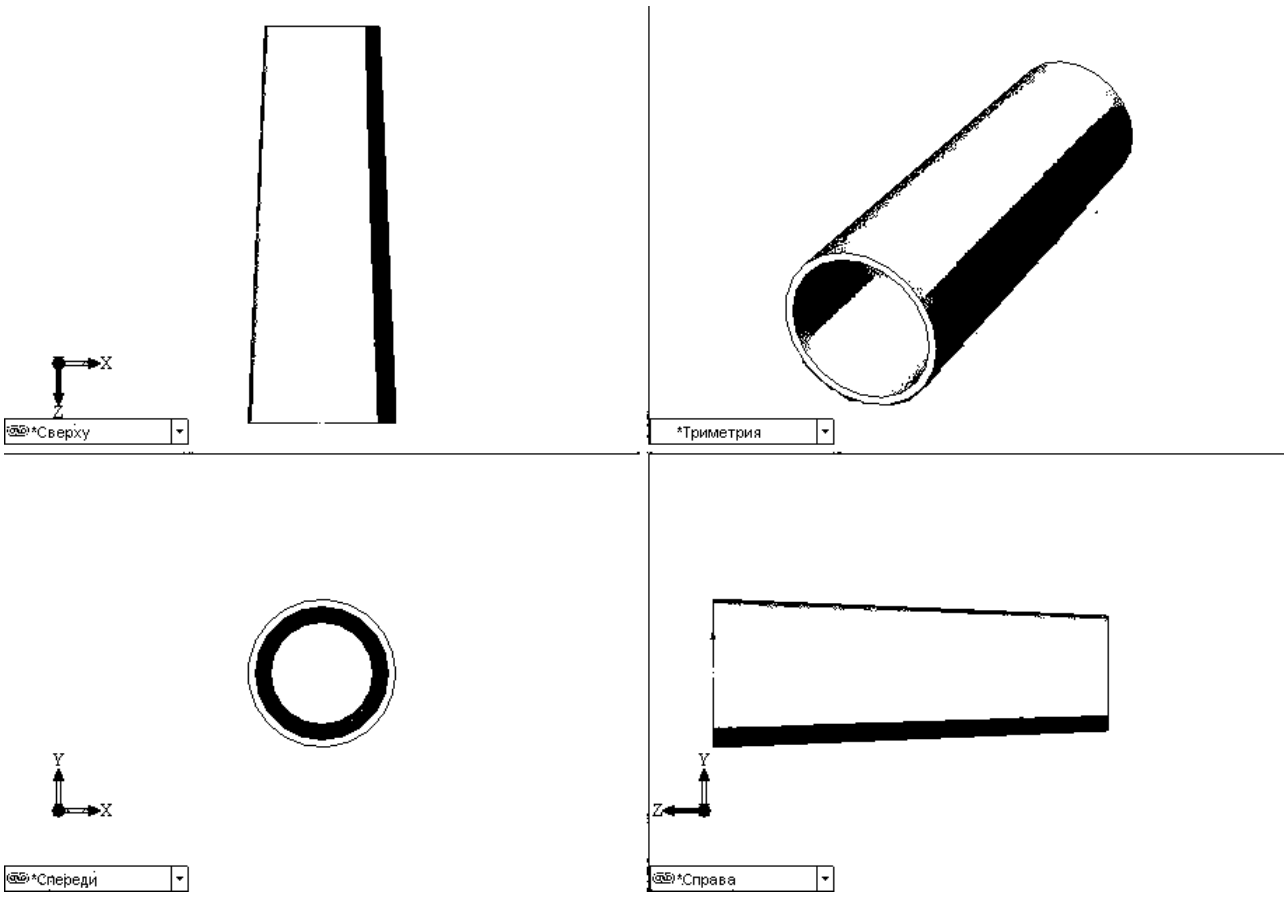


Рис. 1. Трехмерная модель отливки

Ступица из оловянной бронзы в процессе эксплуатации подвергается переходным физическим вращательным нагрузкам в области температур от 100 °С до 200 °С, следовательно, материал изделия должен быть без риска недоливов, трещин и других видов дефектов, а параметры качества согласованы конструктором и заказчиком. Заливаем в металлическую форму марки СЧ 20. Параметры моделирования в соответствии с реальной практикой для отливок такого класса в соответствии с СКМ Flow:

– время заливки расплава в форму порядка 30 с;
– скорость потока расплава выбираем 15 кг / с;
– температура заливки сплава приблизительно 1150 °С;
– температура нагрева кокиля около 250 °С;
– температура «подрыва» кокиля порядка 500 °С.

В произвольном разрезе трехмерных моделей ступицы обнаружены дислокации мест дефектов по нежелательному сокращению жидкого сплава (так называемой усадке) и пузырьков газов (пористости) (от 37 до 99,9 % в объеме одного узла трехмерной модели (рис. 2-3)). Анализ заполнения формы показал его полное быстрое выстывание в отливке, преимущественно в верхней части формы и торможение питания ее нижней части. Для подтверждения данного процесса произведен расчёт температурно-временных полей в СКМ LVMFlow. [5].

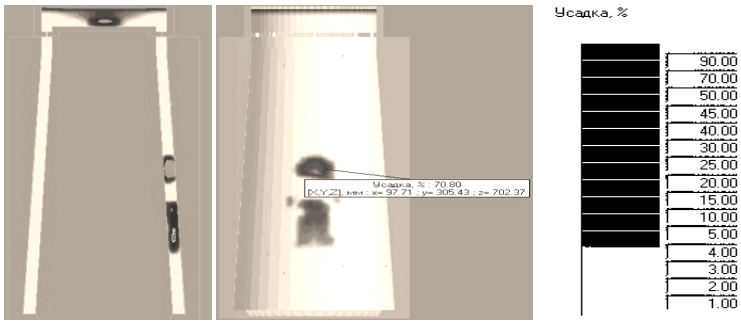


Рис. 2. Сокращение жидкого сплава и дефекты

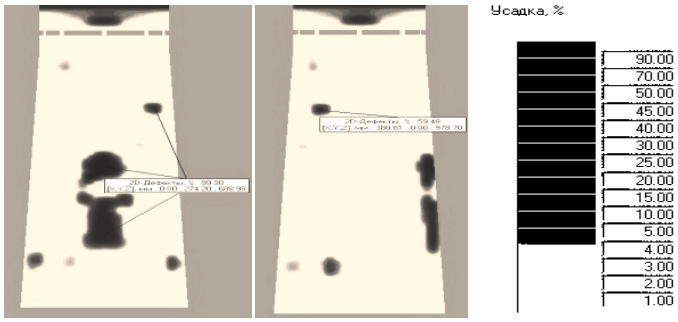


Рис. 3. Обнаруженные дефекты качества

Затвердевание сплава в отливке прерывается с увеличением времени охлаждения, а верхняя разогретая системой питания прибыль препятствует его протеканию в нижнюю часть ступицы. Мы наблюдаем несоблюдение основ литейной технологии принципа затвердевания и следствие, места дефектов и недоливов. Анализ скопления газов в порах ступицы представлен на рис. 4. По нашему наблюдению, в разных точках ступицы произвольные ее значения достигают не менее 0,4 по критерию Ниямы, газы не смогли покинуть ее, так как охлаждение прибыльной части было намного скоротечней, чем всей отливки в целом.

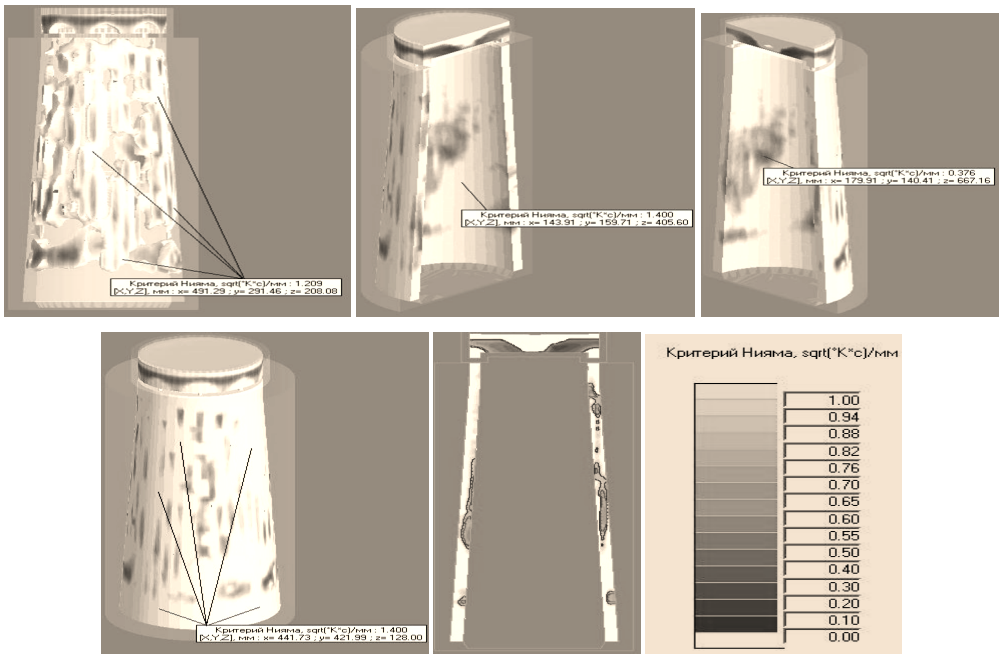


Рис. 4. Микропористость

Потребовалось дополнительно время моделирования для установления причин быстрой кристаллизации отливки. Графики зависимости температуры ступицы и формы от времени представлены на рис. 5.

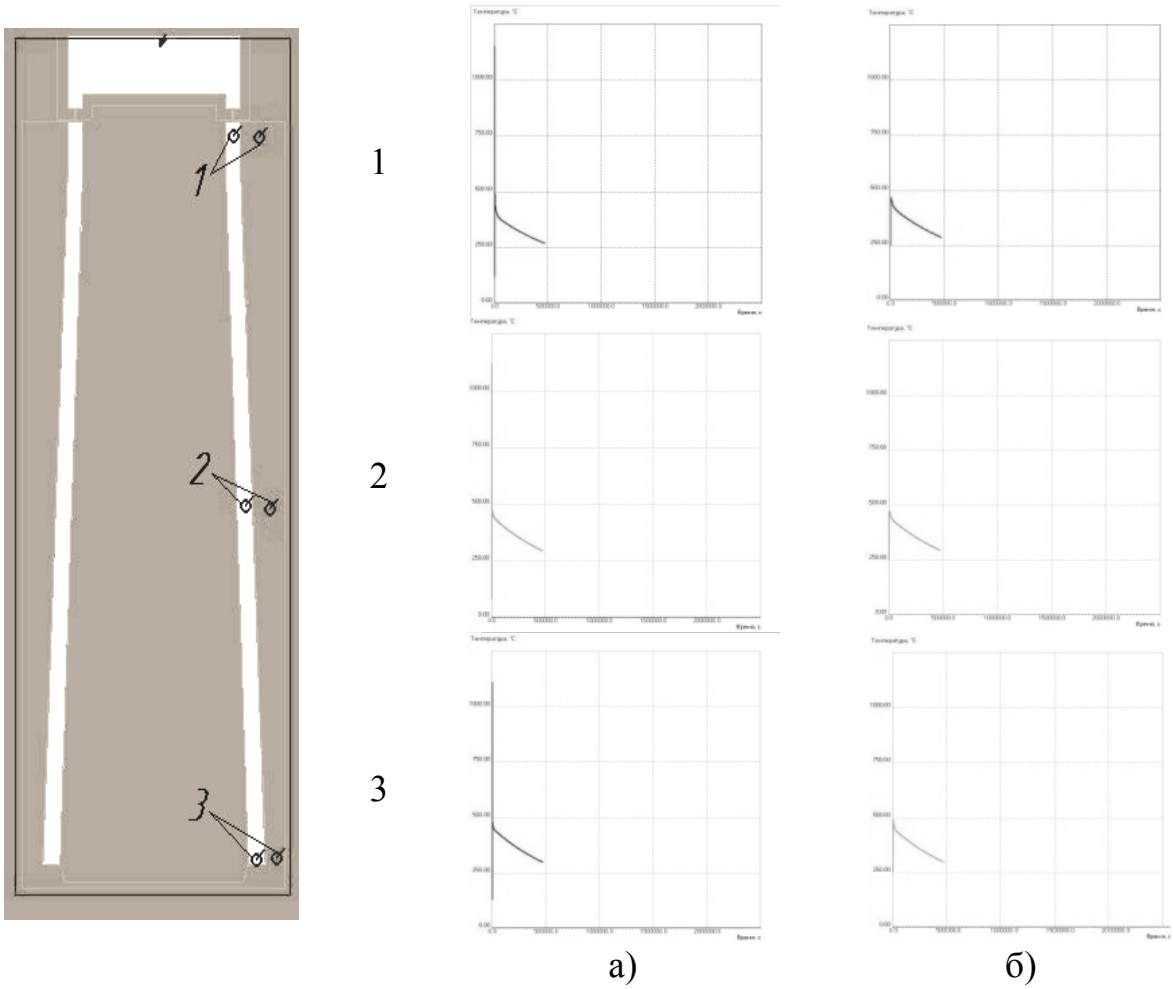


Рис. 5. Графики зависимости температуры ступицы и кокиля от времени: графики температур для отливки (а); графики температур для кокиля (б)

По нашему мнению, температуры ступицы и металлической формы со временем уменьшаются по всему ее размеру постоянно равномерно. Графические зависимости скорости заполнения расплавом чугунного кокиля от времени и давления расплава действующего на форму от времени позволили оценить наличие проблем, оказывающих негативное влияние на качество ступицы. В начальный момент времени скорость расплава максимальна, и падает по мере увеличения заполнения формы. Перепады скорости заполнения демонстрируют вероятность размыва песчаного стержня в центральной части ступицы, который оформляет ее внутреннюю полость. Его разрушение смещает геометрию как самой ступицы, так и способствует замешиванию инородных частиц в расплав. Следовательно, такой тип технологии будет неверен, что подтверждает заводской брак. Дальнейшая отработка технологии без натурных экспериментов позволит решить данную проблему.

Список литературы

1. Воронин Ю. Ф., Матохина А. В. Моделирование влияния причин возникновения дефектов на качество отливок // Литейщик России. – 2005. – № 8. – С. 33-37.

2. Сушко Т. И., Турищев В. В., Пашнева Т. В., Попов С. В. Компьютерное моделирование физического питания отливок СВС в литье по выплавляемым моделям // Вестник Магнитогорского техн. университета им. Г.И. Носова. – 2018. – Т.16. – № 1. – С. 45-53.

3. Сушко Т. И., Караев Р. Ш., Чернышев И. И., Попов С. В. Моделирование физического затвердевания отливки при литье в кокиль в системе LVM Flow // Современные научные исследования и разработки. – 2018. – Т. 1. – № 11(28). – С. 688-692.

4. Сушко Т. И., Чернышев И. И., Караев Р. Ш., Пашнева Т. В. Моделирование влияний изменений температурно-фазовых полей на образование дефектов стальной отливки посредством LVM Flow // Физико-математическое моделирование систем: материалы XVIII Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2018. Ч. 2. С. 140-144.

SIMULATION OF THE PHYSICAL HARDENING PROCESS OF A CASTING BASED ON CAD-SYSTEMS

T.I. Sushko, R.Sh. Karaev, T.V. Pashneva

Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N.E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

Abstract: examples of modeling of the physical processes of solidification of the casting "hub" using CAD systems are given.

Keywords: mathematical modeling, solid casting, chill casting.

УДК 621.0744

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ИНСТРУМЕНТ РЕАЛИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНОСТИ СИСТЕМЫ ПРИ АНАЛИЗЕ КАЧЕСТВА ОТЛИВКИ

Т.И. Сушко, Р.Ш. Караев, Т.В. Пашнева

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил
«Военно-воздушная академия имени проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
Tat120675@yandex.ru

Аннотация: В статье рассматривается анализ качества получаемой детали из оловянной бронзы «Втулка» при литье в кокиль посредством CAD-программ, совмещающих компьютерное проектирование и моделирование процессов затвердевания отливки и позволяющих анализировать функциональность системы в целом.

Ключевые слова: литье в кокиль, CAD-программа, деталь из оловянной бронзы.

Подготовка военных специалистов, владеющих пакетом программ для ускорения внедрения информационных технологий при замене и ремонте деталей авиационной техники, выбора методов, средств и инструментов, способствующих поиску оптимальных с точки зрения качества деталей технологических процессов, несет определённые трудности, в основном технического характера. Актуальным и экономически обоснованным является подготовка военных инженеров, владеющих современными CAD-программами и способными аппроксимировать полученные знания ускоренной замены некачественной детали в рамках создания уникальных условий на базе ВУНЦ ВВС ВВА для ремонта боевой летательной техники. Курсанты по средствам компьютерного моделирования оценивают результат своих действий, нахождение и исправления собственных ошибок на примерах реального производства деталей используемый в практической деятельности предприятий, в том числе и оборонного комплекса.

Цель работы – анализ качества получаемой детали из оловянной бронзы «Втулка» при литье в кокиль посредством CAD-программ, совмещающих компьютерное проектирование и моделирование процессов затвердевания отливки и позволяющих анализировать функциональность системы в целом. Объект исследования – «втулка» из оловянной бронзы БрО5Ц5С5, масса детали и отливки 225 кг и 387,45 кг, геометрические параметры: высота – 1160 мм, наружные диаметры – 351,43 и 451,00 мм, внутренние диаметры – 285,58 и 352,40 мм, конусность 1:12,7. В качестве критериев оптимальности технологического процесса при литье в кокиль выбираем: принцип направленного затвердевания при конструировании системы питания (а именно, система с литниковой чашей и дождевой подвод), протяженные термические узлы в соответствии с толщиной стенок кокиля, определяемой ГОСТ 16237 – 70), наличие дефектов усадочного происхождения в допустимых пределах в объеме узла отливки, газовую пористость (оценка по критерию Нияма). Математическая модель оптимизации по-

строена на математической модели гидродинамики и реализована в виде программы компьютерного моделирования LVMFlow Russia на основе метода Control Volume (CVM),позволяющего моделировать сложные гидродинамические процессы заполнения формы, температурные поля системы литниковая система-отливка-форма, скорости в форме, плотности кристаллизующегося металла в форме и оптимизацию размеров отливки. Задавались геометрические, количественные характеристики и граничные условия: время заливки расплава в форму выбираем 30 с; скорость потока расплава задаем 15 кг/с; температура заливки сплава 1150 °С; температура нагрева кокиля задаем 250 °С. Трехмерные модели отливки с разными вариантами питания представлены на рис. 1. Для создания условий ламинарного течения расплава в форме выбрали из литературных источников количество отверстий в чаше с дождевым подводом равное 8, позволяющее минимизировать перемешивание, окисление расплава и захват инородных частиц. Радиус отверстий в литниковой чаше задавали равным 6 мм.

а) б)

Рис. 1. Трехмерные модели отливки: а) вариант с литниковой чашей; б) вариант с дождевым подводом

Компьютерное проектирование помогает компоновать сборочный чертёж кокиля как из индивидуальных деталей, формирующих именно данную деталь, так и с привлечением унифицированных деталей. Реализация компьютерного проектирования, в котором все данные являются параметрами, доступными в любой момент для корректировки, позволяет вносить изменения в конструкцию кокиля при отработке технологии изготовления отливки, находить многовариантные альтернативные решения по его промышленному дизайну и техническим характеристикам. Данный подход является наглядным способом представления оригинала и удобным инструментом для решения геометрических задач. В качестве базовой CAD-программы нами выбрана русифицированная версия SolidWorks Russia. Она поддерживает жизненный цикл изделий и обладает всеми возможностями для оформления чертежей в ЕСКД. Программное обеспечение комплекса SolidWorks Russia функционирует на платформе Windows XP, Windows Vista. На рис. 2 представлена трехмерная модель кольцевого стопочного кокиля из серого чугуна, согласно требованиям технологии перед заливкой его подогревают до 250 – 350 °С.

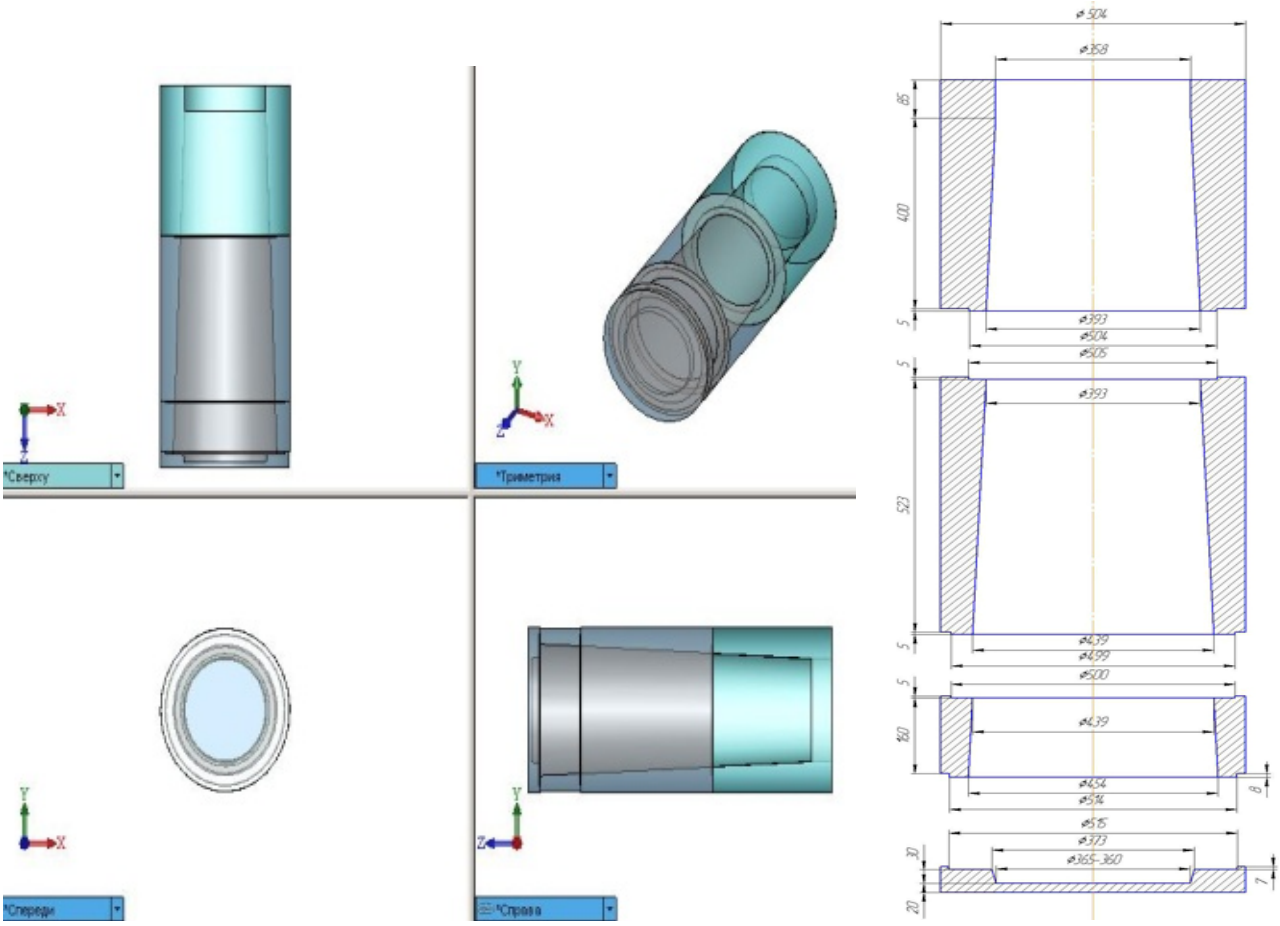


Рис. 2. Трехмерная модель кокиля и эскиз кокиля

Базовый вариант изготовления отливки показал недостатки по выбранным критериям оптимальности, невозможность реализации качества детали. А вариант со второй системой питания наглядно продемонстрировал выполнение условий направленного затвердевания, отсутствие дефектов усадочного характера, положительные значения критерия Нияма в пределах от 0,85 и выше, соответствующих минимальной концентрации газа в теле отливки (рис. 3, 4).

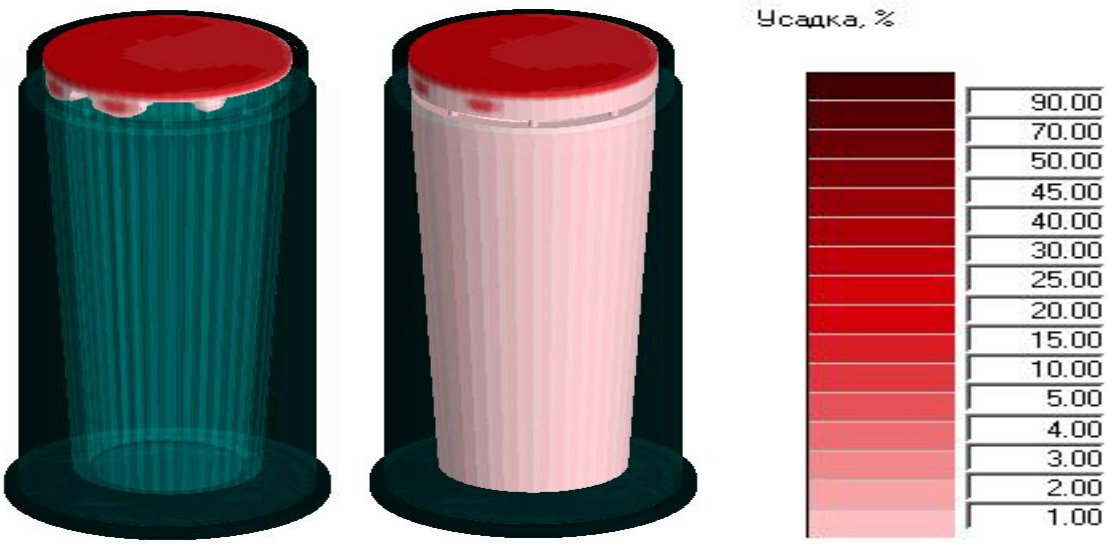


Рис. 3. Отсутствие усадочных дефектов

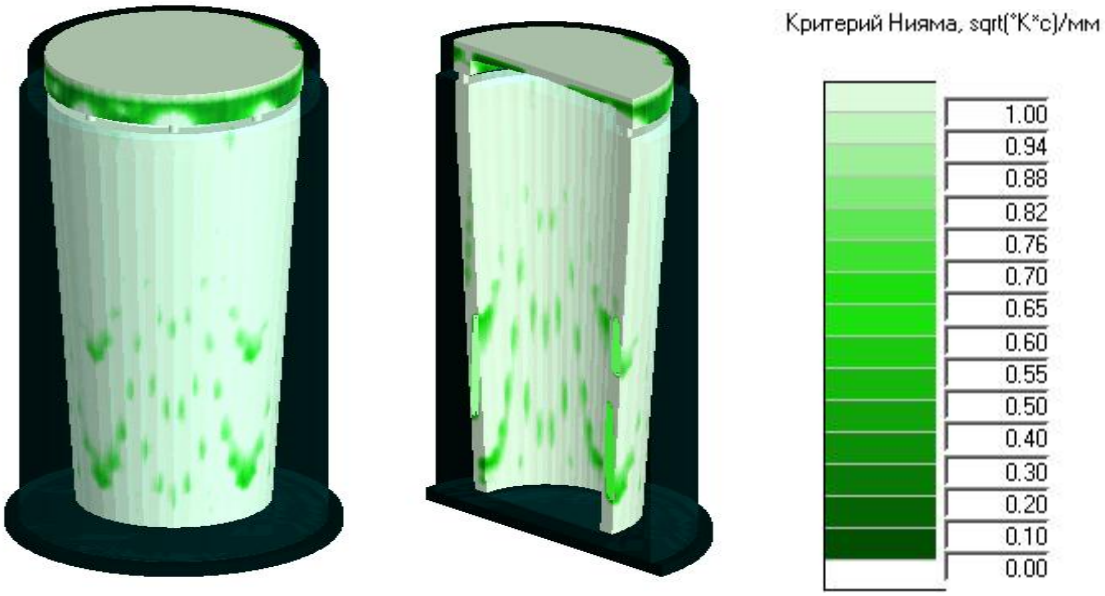


Рис. 4. Критерий Нияма

Кристаллизация отливки протекает равномерно после заполнения расплавом всей формы, не создает турбулентных завихрений, доступно питание всех частей отливки, ввиду чего она и получается без усадочных дефектов, перегрев кокиля вследствие усиления теплопроводности минимальный, охлаждение подприбыльной зоны спокойное. На рис. 5 представлены графики работ термодатчиков в теле отливки и формы, подтверждающие наши рассуждения.

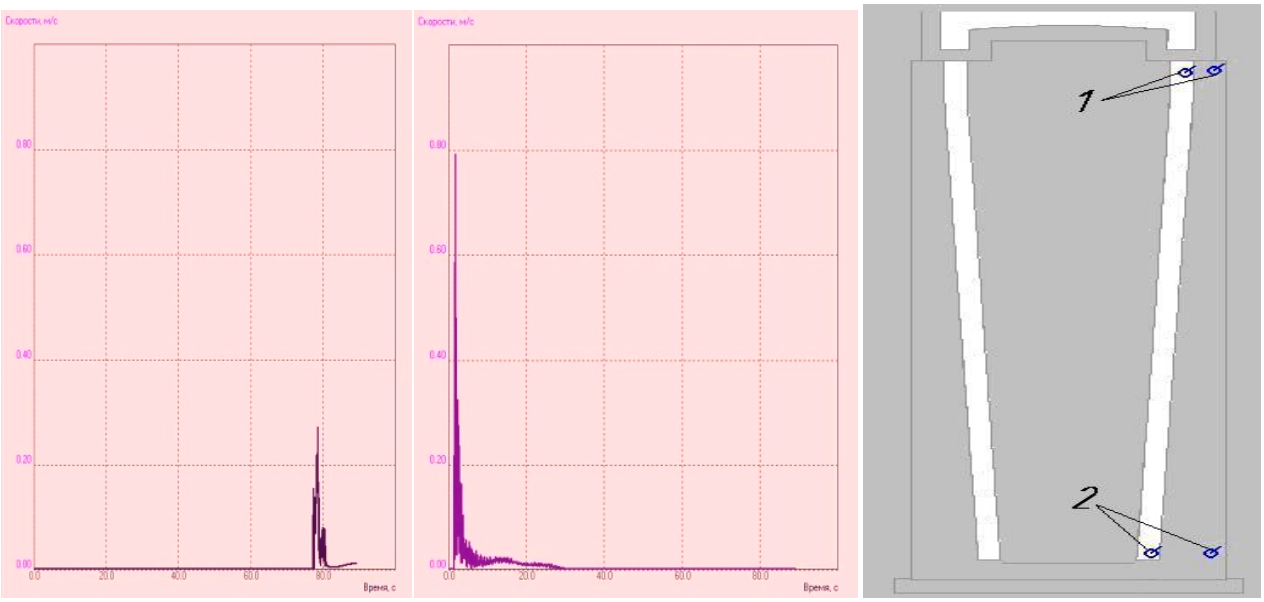


Рис. 5. Графики зависимости от времени: а) скоростей в отливке; б) давлений расплава при заливке на основе термодатчиков

Вариант с дождевым подводом в кокиль позволяет изготавливать отливку с требуемым набором теплофизических и прочностных свойств, не прибегая к реальным экспериментам. Такой подход является наглядным материалом для обучения при выполнении курсовых работ, создания трехмерных моделей дета-

лей и элементов оснастки, которые необходимы для сквозного проектирования деталей, выращивания моделей методом прототипирования и ремонта деталей в кратчайшие сроки.

Список литературы

1. Монастырский А. Внедрение современных методов разработки и оптимизации технологических процессов в литейном производстве // CAD master. – 2010. – № 2. – С. 62-64.

2. Сушко Т. И. Компьютерное моделирование физического питания отливок СВС в литье по выплавляемым моделям / Т. И. Сушко, В. В. Турищев, Т. В. Пашнева, С. В. Попов // Вестник Магнитогорского технического университета им. Г. И. Носова. – 2018. – Т. 16. – № 1. – С. 45-53.

3. Сушко Т. И., Караев Р. Ш., Чернышев И. И. Пример автоматизированного проектирования детали для машиностроения на основе твердотельного моделирования // Современные проблемы естествознания. Инженерный анализ объектов обеспечения авиации [текст]: Актуальные проблемы естествознания. Сб. ст. по материалам IV науч.-практ. конф. «Молодёжные чтения, посвященные памяти Ю. А. Гагарина» (2021 г.). – Воронеж: ВУНЦ ВВС «ВВА», 2021. – С. 170-174.

COMPUTER SIMULATION AS A TOOL FOR IMPLEMENTING THE SYSTEM FUNCTIONALITY IN ANALYSIS OF CASTING QUALITY

T.I. Sushko, R.Sh. Karaev, T.V. Pashneva

Military Educational and Scientific Center of the Air Force
“N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

Abstract: the article deals with the analysis of the obtained part from tin bronze “Bushing” when casting into a chill mold by means of CAD-programs that combine computer design and modeling of casting solidification processes and allowing to analyze the functionality of the system as a whole.

Keywords: chill casting, CAD-program, tin bronze part.

УДК 621.0744

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК СПОСОБ КОРРЕЛЯЦИИ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ОТЛИВКИ

Т.И. Сушко, Р.Ш. Караев, С.В. Ильинский, Т.В. Пашнева

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил
«Военно-воздушная академия имени проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
Tat120675@yandex.ru

Аннотация: представлен пример корреляции технологического процесса изготовления стальной отливки «Крышка» методом литья по выплавляемым моделям посредствам CAD/CAE-систем.

Ключевые слова: литье по выплавляемым моделям, стальная отливка «Крышка», системы питания отливки.

Одним из важных вопросов в литье по выплавляемым моделям (ЛВМ) остается вопрос своевременного выявления технологических, геометрических, количественных параметров литья, приводящих к появлению дефектов отливок. Для решения данной проблемы используются CAD/CAE-системы. Основной причиной дефектов остается несовершенство конструкций питания и отсутствие унифицированных методов их конструирования.

Цель данной работы – корреляция технологии изготовления стальной отливки «Крышка» посредством CAD/CAE-систем. Для построения трехмерных моделей используем русифицированную версию SolidWorks Russia, поддерживающую жизненный цикл изделий для оформления чертежей в ЕСКД. Программное обеспечение комплекса SolidWorks Russia функционирует на платформе Windows XP, Windows Vista. Математическая модель оптимизации построена на математической модели гидродинамики и реализована в виде программы компьютерного моделирования LVMFlow Russia. Численное решение гидродинамической задачи производится основе метода Control Volume (CVM). В алгоритм теплового расчета на границе металл-форма заложен учет теплопередачи и неравномерности выделения скрытой теплоты затвердевания, при этом в модели граничной передачи используют физические представления распределенных пятен плотного контакта и теплопередачи через зазор. Также решается сопряженная задача расчета температурно-фазовых полей отливки и температурных полей, расчет тепловых процессов ведется методом конечных элементов. Решение задачи питания отливки строится исходя из понятий усадочных дефектов в объеме узла отливки, пористости по оценке критерия Ниямы и на представлениях о физике процесса. Образование микропористости связано с недостатком давления в некоторой области двухфазной зоны, находящейся ниже уровня заполнения формы, а макропористости и раковин обусловлено падением уровня расплава ниже этой области. Расчет основан на вычислении объемной усадки и принципа направленного затвердевания. При этом решается задача определения на каждом шаге изолированных зон питания отливки.

В качестве объекта для исследования выбрана стальная 10Х18Н11БЛ отливка «Крышка» массой 3,4 кг. На рис. 1 представлена ее трехмерная модель. Геометрические параметры для изготовления прототипов детали составляют 270×170×35 мм.

Система питания отливки металлом в ЛВМ состоит из унифицированных конструктивных элементов, в нашем случае это система включающая: литниковую воронку и ход, стояк, зумпф, прибыль, располагающиеся, таким образом, чтобы можно было максимально использовать объем корковой формы.

Система питания для данной конфигурации отливки возможна как с двумя моделями на стояке (рис. 2), так и с тремя моделями (рис. 3).

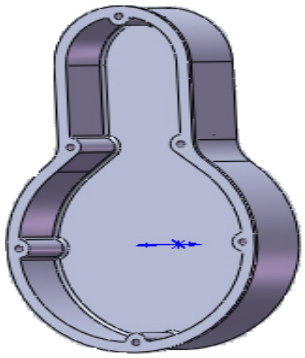


Рис. 1. Трехмерная модель отливки

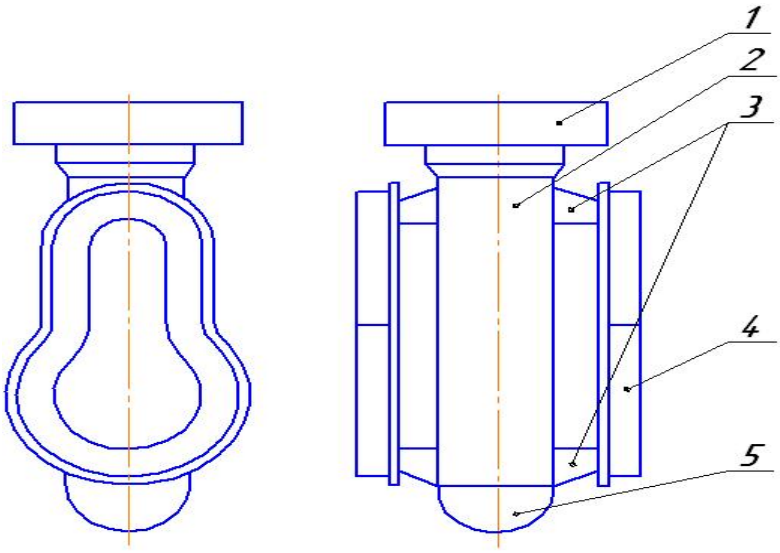


Рис. 2. Система питания с двумя моделями: 1 – литниковая чаша; 2 – стояк; 3 – питатель; 4 – отливка; 5 – зумпф

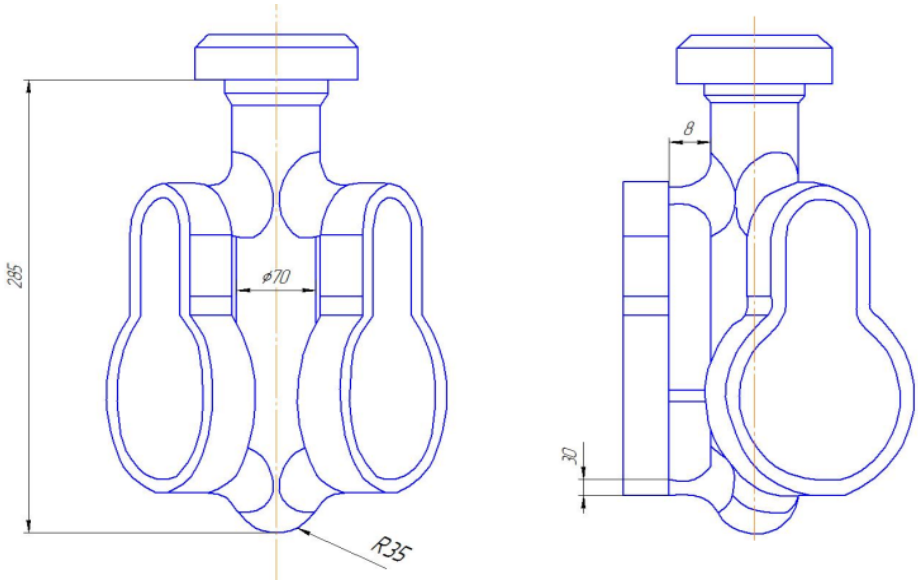


Рис. 3. Модельный блок с тремя моделями на стояке

Расчет тепловых процессов в системе LVMFlow показан на рис. 4.

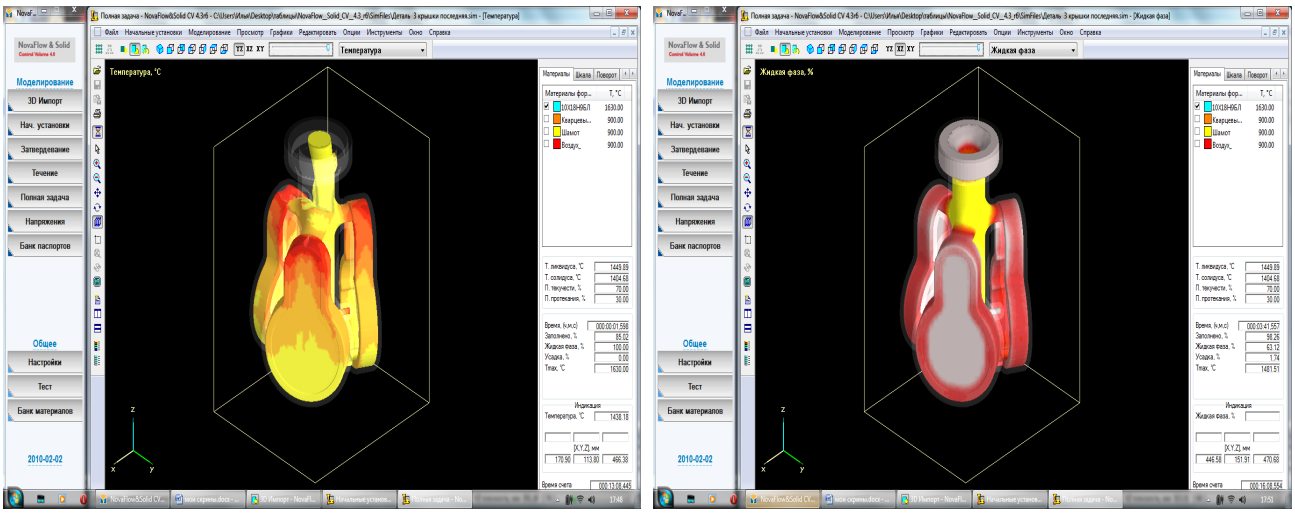
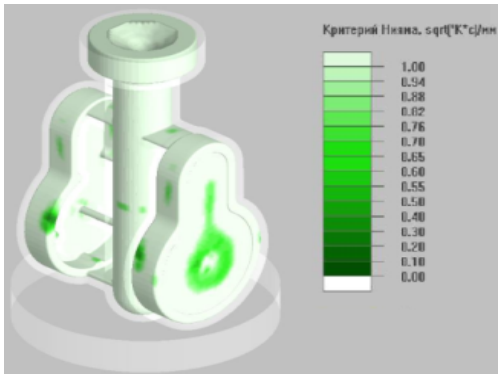
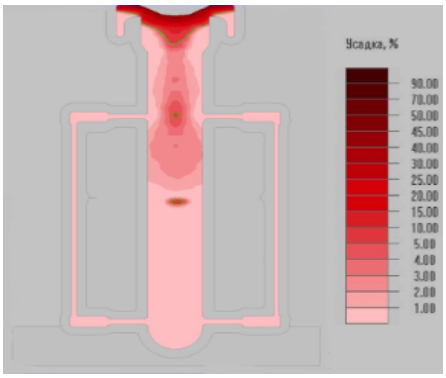


Рис. 4. Расчет тепловых процессов

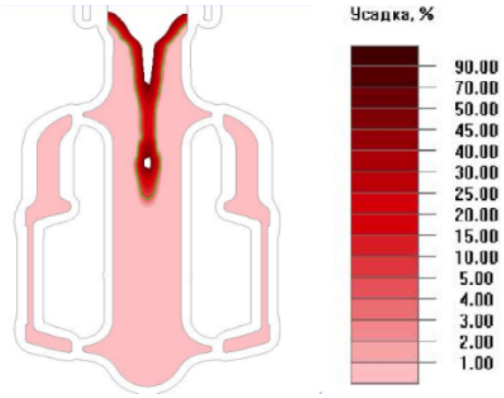
Компьютерное моделирование процесса заполнения корковой формы задавалось с учетом геометрических размеров отливки и конструктивных элементов пресс-формы, теплофизические параметры процесса, технологические свойства: формование без шамотной крошки; число слоев защитного покрытия принимаем равным 9; температура заливки стали 1630 ºС; температура прогрева огнеупорного покрытия формы 900 ºС; температура формы 900 ºС; время заливки, по нашим расчетам, около 6 секунд. Корреляцию проводим по наличию усадочных дефектов и критерию Ниямы в теле затвердевшей отливки для системы питания с двумя и тремя моделями на литнике (рис. 5).



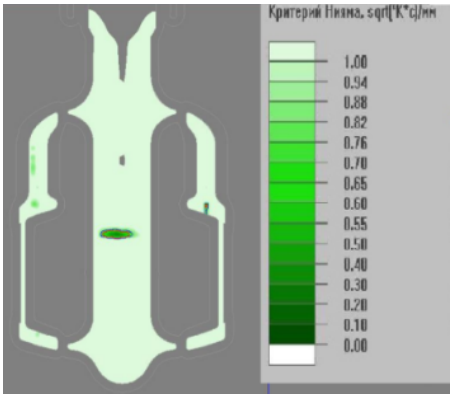
а) критерий Нияма



б) усадка 2,0%



в) – усадка 2,2%



г) – критерий Нияма

Рис. 5. Критерии корреляции технологии

По нашим оценкам, микропористость в двух представленных вариантах практически идентична, максимальное число Нияма около 0,55 К·с/мм, что для отливки такого класса является вполне допустимым числом, соизмеримым с параметром качества. Количество и процент дефектов усадочного происхождения не присутствует в теле отливки. Таким образом, возможна конструктивная замена питания отливки и сохранение ее качества.

Список литературы

1. Монастырский А. Внедрение современных методов разработки и оптимизации технологических процессов в литейном производстве // CAD master. – 2010. – № 2. – С.62-64.

2. Сушко Т. И. Компьютерное моделирование физического питания отливок СВС в литье по выплавляемым моделям / Т. И. Сушко, В. В. Турищев, Т. В. Пашнева, С. В. Попов // Вестник Магнитогорского технического университета им. Г. И. Носова. – 2018. – Т. 16. – № 1. – С. 45-53.

3. Сушко Т. И., Караев Р. Ш., Чернышев И. И. Пример автоматизированного проектирования детали для машиностроения на основе твердотельного моделирования // Современные проблемы естествознания. Инженерный анализ объектов обеспечения авиации [текст]: Актуальные проблемы естествознания. Сб. ст. по материалам IV науч.-практ. конф. «Молодёжные чтения, посвященные памяти Ю. А. Гагарина» (2021 г.). – Воронеж: ВУНЦ ВВС «ВВА», 2021. – С. 170-174.

4. Сушко Т. И. Анализ причин брака при производстве стальных корпусных отливок посредством СКМ ЛП LVMFlow // Т. И. Сушко, А. С. Леднев, Т. В. Пашнева, И. Г Руднева // Вестник Магнитогорского технического университета им. Г. И. Носова. – 2012. – № 1(37). – С. 26-29.

COMPUTER MODELING AS A WAY TO CORRELATE CASTING MANUFACTURING TECHNOLOGY

T.I. Sushko, R.Sh. Karaev, S.V. Ilyinskii, T.V. Pashneva

Military Educational and Scientific Center of the Air Force
“N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

Abstract: an example of the correlation of the technological process of manufacturing a steel casting “Cover” by the method of investment casting using CAD / CAE systems is presented.

Keywords: investment casting, steel casting “Cover”, casting power systems.

УДК 544.478

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОЗДАНИЯ НИКЕЛЕВО-ПАЛЛАДИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА МЕТОДОМ РЕПЛИК

Е.Д. Рябков, А.А. Тихонова, В.Р. Иванов

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М. В. Ломоносова, Москва
annochka-tikhonova@list.ru

Аннотация: повсеместное использование катализаторов приводит к вопросу об их эффективности и экономичности. В данной работе описана часть параметрической модели, позволяющей получить никелево-палладиевый катализатор, применимый в реакциях гидрирования или электродный материал для топливных элементов и электрохимических сенсоров.

Ключевые слова: наноструктурирование, электролиз, катализатор гидрирования.

В современном мире трудно назвать область промышленности, в которой бы не применялись катализаторы. При стремлении ускорить какие-либо производственные процессы мы сталкиваемся с проблемами упрощения и удешевления процесса создания катализатора, а также увеличения каталитической активности материалов.

Наноструктурированные материалы обладают уникальными химическими и физическими свойствами, благодаря чему зарекомендовали себя как хорошие катализаторы. На данный момент известно большое число методов наноструктурирования, например, реактивное ионное травление [1] или синтез с использованием жестких шаблонов [2]. В работе А. П. Антропова и др. описан электрохимический метод получения наночастиц [3]. Методом высоковольтной анодной обработки получали наноперфорированный слой оксида алюминия на алюминиевой фольге. Суть метода заключается в том, что алюминиевая фольга помещается в раствор ортофосфорной кислоты в качестве анода, и при пропускании тока на поверхности металла формируется наноструктурированный слой оксида алюминия. На полученную матрицу осаждается никель и образуется основа с наноразмерными структурами заданной морфологии. При этом получается никелевая реплика, которая обладает высокой каталитической активностью. Данная работа была взята за основу нашего исследования. В своей работе мы дополнительно модифицировали нановорсинки никеля частичками палладия при помощи электрохимической обработки (рис. 1).

Такой метод можно использовать для увеличения каталитической активности наноструктурированного материала. Наноструктурированный материал исследовался методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с возможностью элементного анализа методом спектроскопии отражения рентгеновских лучей. Таким образом подтверждалась успешная модификация наноструктур никеля палладиевыми наночастицами (рис. 2).

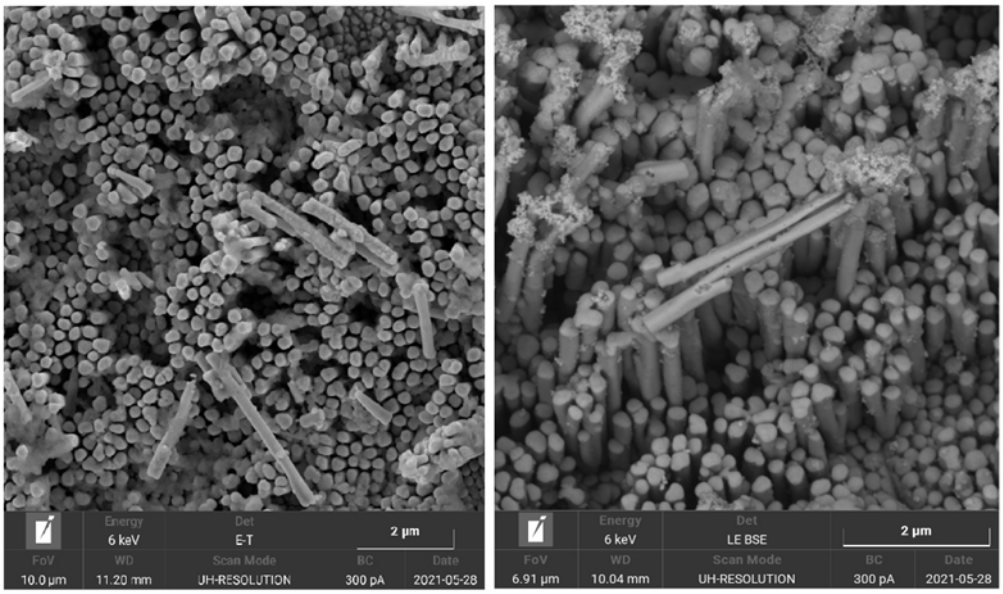


Рис. 1. Снимки СЭМ наноструктур никеля до модификации (слева) и после модификации наночастицами Pd0 (справа)

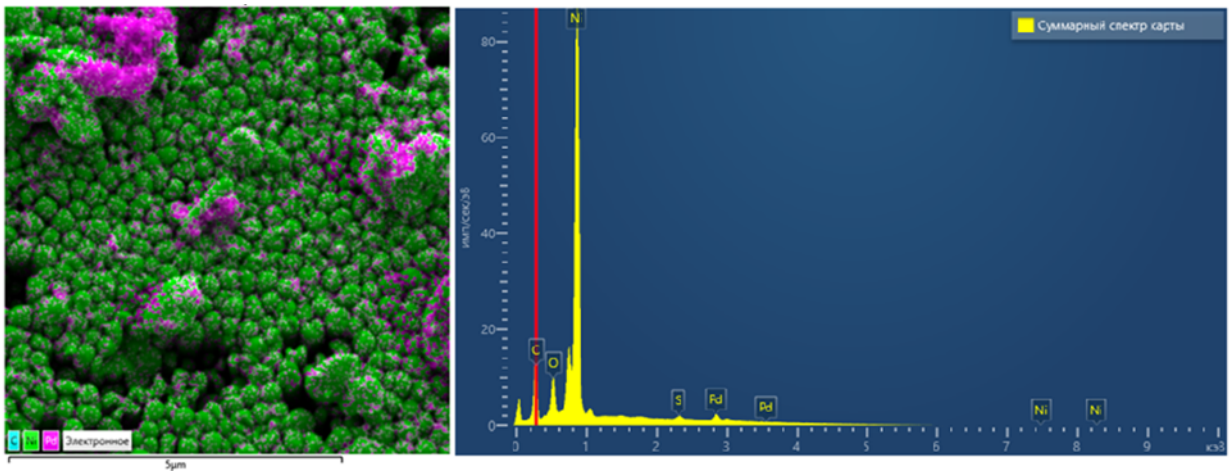


Рис. 2. Результаты элементного рентгеновского анализа для образца модифицированного никелевого материала

В ходе данных исследований была выявлена проблема, требующая решения для успешного продолжения исследований. Проблема заключалась в том, что без параметрической модели процесса выращивания на поверхности никелевых наноструктур наночастиц палладия невозможно получить оптимально модифицированный наноструктурированный материал для дальнейших исследований его каталитических и электрокаталитических свойств. Поэтому в данной работе представлена часть параметрической модели процесса формирования наночастиц палладия на поверхности никелевых наноструктур, которая касается влияния подаваемого напряжения в электрохимическую ячейку. Влияние напряжения на процесс образования наночастиц исследовалось по двум параметрам: средний диаметр наночастиц (рис. 3) и плотность распределения наночастиц по видимой поверхности наноструктур (рис. 4).

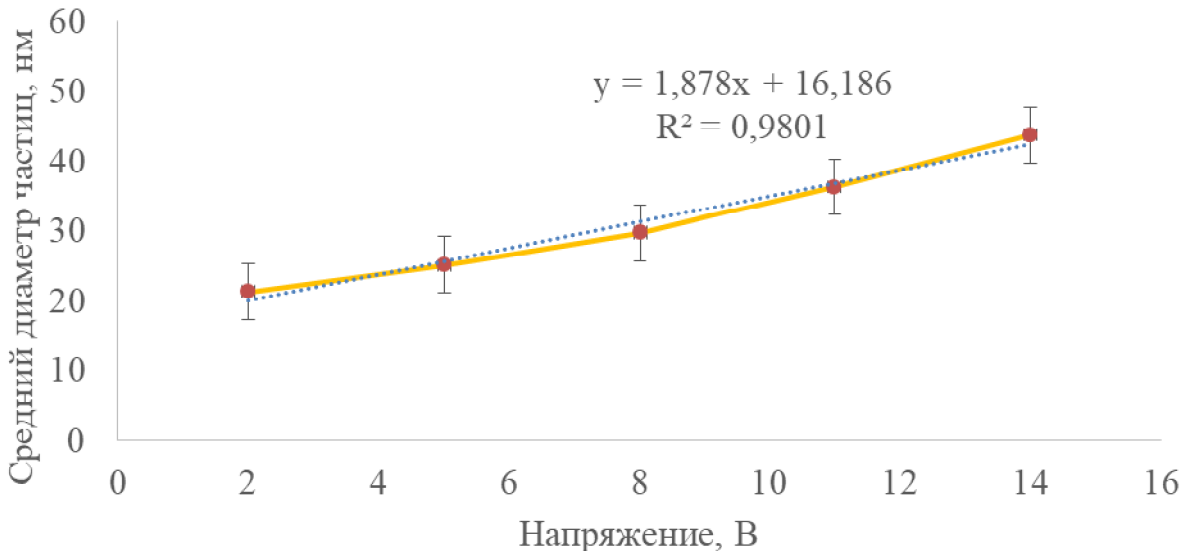


Рис. 3. Влияние напряжения на размер образующихся наночастиц

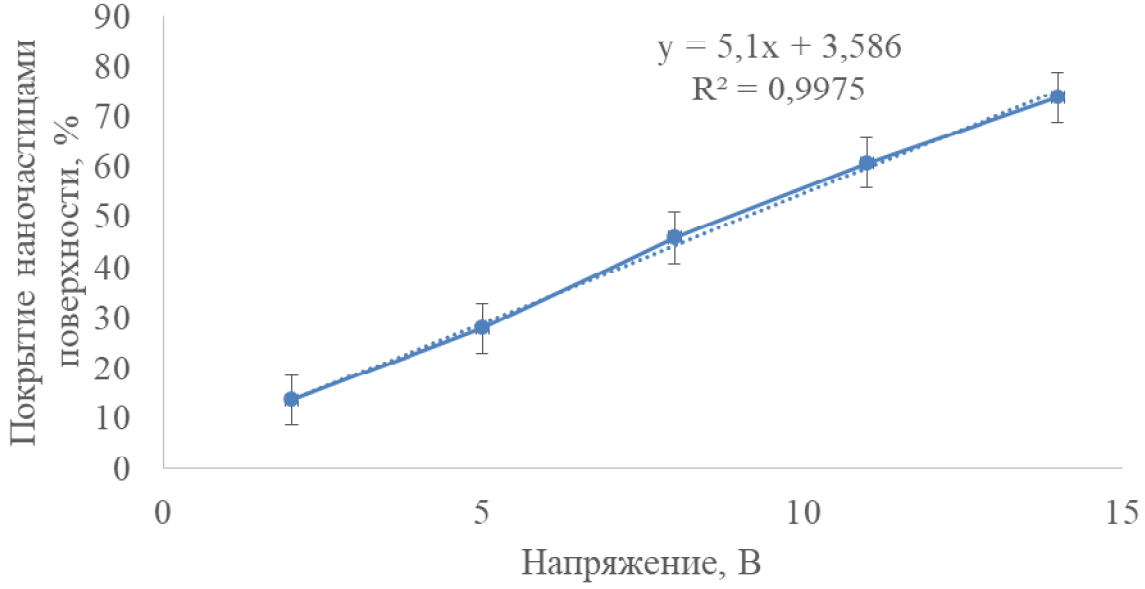


Рис. 4. Влияние напряжения на распределение образующихся наночастиц

В результате была выявлена линейная зависимость среднего диаметра наночастиц от подаваемого напряжения, при которой с увеличением напряжения наблюдалось незначительное увеличение размера наночастиц.

Также была получена линейная зависимость плотности покрытия поверхности никелевых наноструктур палладиевыми наночастицами от подаваемого напряжения на электрохимическую ячейку при катодной обработке материала. По полученным результатам наблюдалось быстрое увеличение количества образовавшихся наночастиц на модифицируемой поверхности при увеличении напряжения (рис. 5.)

В дальнейшем нашей научной группой планируется проведение исследований, направленных на построение недостающих частей параметрической модели данного процесса, а именно исследование влияния времени экспозиции, концентрации ионов палладия, температуры электролита и наличия различных

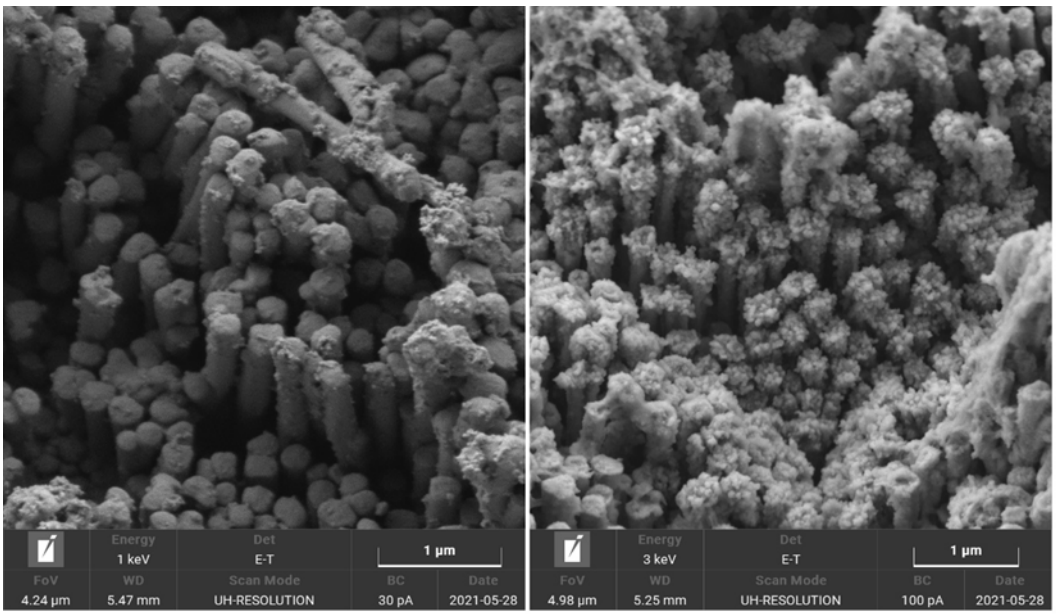


Рис. 5. Сравнение модифицированных поверхностей при $U = 2$ В и $t = 1$ с (слева) и $U = 14$ В и $t = 1$ с (справа)

добавок. Данный процесс представляется нам крайне перспективным, как один из этапов технологического процесса при изготовлении высокоэффективных и дешевых катализаторов гидрирования, а также электродных материалов для топливных элементов и электрохимических сенсоров.

Список литературы

1. Bioinspired micro/nanostructured surfaces prepared by femtosecond laser direct writing for multi-functional applications / Guoqiang Li, Jiawen Li, Yanlei Hu, Chenchu Zhang, Xiaohong Li, Jiaru Chu, Wenhao Huang // International Journal of Extreme Manufacturing (c). – 2020. – V. 2. – N. 3. – P. 032002. – doi: 10.1088/2631-7990/ab95f6.

2. Synthesis of Graphitic Mesoporous Carbon from Metal Impregnated Silica Template for Proton Exchange Membrane Fuel Cell Application / K. N. Sultana, D. Worku, M. T. Z. Hossain, S. Ilias // FUEL CELLS (c). – 2019. – V. 19. – N. 1. – P. 27-34. – doi: 10.1002/fuce.201800034

3. Manufacturing of nanopillar (ultra-dispersed) catalytically active materials through chemical engineering / A. P. Antropov, N. K. Zaytsev, Ye. D. Ryabkov, N. A. Yashtulov, P. N. Mudrakova // Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol. – 2021. – N. 16(2). – P. 105-112 (Russ., Eng.). https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-2-105-112.

MODELING OF THE PROCESS OF CREATING A NICKEL-PALLADIUM CATALYST BY THE REPLICA METHOD

E.D. Ryabkov, A.A. Tikhonova, V.R. Ivanov

MIREA - Russian Technological University, Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow

Abstract: in the modern world, catalysts are used almost everywhere, so there is a question of their cost and efficiency. This research describes a part of a parametric model that makes it possible to obtain a nickel-palladium catalyst used in hydrogenation reactions or an electrode material for fuel cells and electrochemical sensors.

Keywords: nanostructuring, electrolysis, hydrogenation catalyst.

УДК 614.872.5+621.372.8.513+621.778.1+621.983

ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ЗАТУХАЮЩИХ ВИБРАЦИЙ ПРОВОДНИКОВ

О.А. Троицкий, О.Б. Скворцов, В.И. Сташенко

Институт машиноведения им. А. А. Благонравова РАН, Москва
oatroitsky@mail.ru

Аннотация: рассматривается вибрационный отклик в проводниках на воздействие внешнего электрического импульса. Дана оценка возможных резонансных процессов. Представлены результаты экспериментальных оценок частоты вибрации.

Ключевые слова: электрический импульс, проводник, деформация, вибрация, релаксация, собственная частота, резонанс, вибропластический эффект.

Введение

Действие внешнего электрического импульса на одиночный проводник похоже на механический удар, вызывающий последующие затухающие колебания. Длительность такого процесса не совпадает с длительностью чисто электрического действия, что может служить основанием для анализа возможных резонансных явлений. Данная работа посвящена вопросам проявления различных резонансных процессов в проводнике при электроимпульсном воздействии.

Электрические резонансные явления в проводнике

Рассмотрим одиночный проводник в виде сплошного стержня круглого сечения длиной l и диаметром $d = 2r$. Образец проводника обладает собственными сопротивлением, индуктивностью и емкостью. В проводнике возможен электрический резонанс на частоте Fel. Собственную индуктивность можно оценить по формуле [1]:

$$L = \frac{\mu\mu_a l}{8\pi} + \frac{\mu l}{2\pi}\left(\ln\left(\frac{l}{d}\right) - 1\right), \tag{1}$$

где l – длина проводника; d – диаметр проводника. Величину собственного сопротивления проводника Rw можно оценить по формуле:

$$Rw = \frac{4l\eta}{\pi d^2}, \tag{2}$$

где η – удельное сопротивление материала проводника. Величину собственной емкости уединенного проводника при $l/d > 20$ можно оценить по формуле [2]:

$$C \approx 2\pi\varepsilon\varepsilon_a l\left(1 + \left(1 - \frac{\pi}{12}\right)\left(\ln\left(\frac{2l}{a}\right) - 1\right)^{-2}\right)\left(\ln\left(\frac{2l}{a}\right) - 1\right)^{-1}, \tag{3}$$

где $r = d/2$ – радиус проводника; l – длина проводника; ε – относительная диэлектрическая проницаемость. Резонансная частота соответствует вычисленным по (1) и (3) индуктивности и емкости оценивается по соотношению:

$$Fel = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}}. \quad (4)$$

Количественные оценки такой частоты, а также оценки времени *Ts* и глубины δ скин-слоя для образцов проводников приведены в табл. 1. Время *Ts* и глубина δ скин-слоя позволяют оценить продолжительность действия скин-эффекта и толщину поверхностного слоя в котором распространяется основная часть электрического тока при воздействии электрического импульса.

Таблица 1

Характеристики частотно-временных параметров электромагнитных процессов в проводниках

материал	*l*, мм	*d*, мм	*Fel*, МГц	*Ts*, мс	δ, мкм	*Rw*, мОм
медь	150	4	367	0,57	210	0,21
алюминий			368	0,36	263	0,33
серебро			368	0,65	198	0,185
золото			368	0,41	244	0,27
железо			39,2	103	16	1,17
титан			366	0,015	1283	7,76

Соответствующая такому проводнику амплитудно-частотная характеристика представлена на рис. 1.

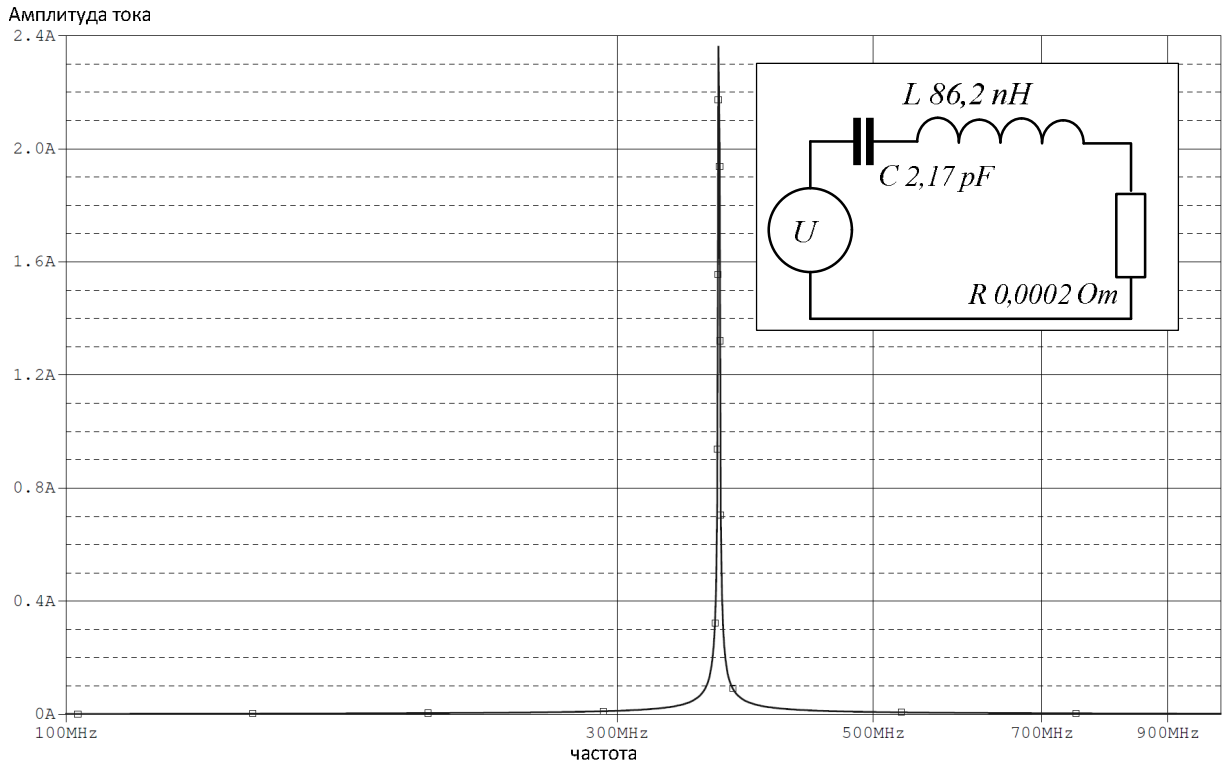


Рис. 1. Эквивалентная схема расчета электрического резонанса в одиночном медном проводнике и амплитудно-частотная характеристика для тока через проводник из меди диаметром 4 мм и длиной 150 мм

Резонансные свойства материала при вибропластическом эффекте

Собственная частота вибропластической деформации F_{VP} определяется суперпозицией волновых деформаций сдвига в материалах [3, 4] соотношением

$$F_{VP} = \frac{G}{Q}, \tag{5}$$

где G – модуль сдвига; Q – коэффициент внутреннего трения (динамической вязкости). Результаты оценки по этой формуле собственной частоты вибрации приведены в табл. 2 ниже. Данные о коэффициентах внутреннего трения (динамической вязкости) для различных материалов взяты из [5].

Таблица 2

Частотные параметры вибропластического эффекта в проводниках

№ пп	материал	G, Па 10^{-9}	Q, Па·с 10^{-5}	F_{VP}, КГц
0	медь	40,7	2,7	150,7
1	алюминий	26	1,0	260
2	латунь	35,2	3.1	113,5
3	серебро	29,2	1,4	208,6
4	сталь	82	2,4	341,7
5	золото	27	1,41	191,5
6	титан	41,4	0,8	517,5

Релаксация механических деформаций на частотах механического резонанса

Рассмотрим действие электрического импульса на проводник в виде сплошного прямого стержень круглого сечения заданной длины, закрепленный на концах. Измерения вибрации для такого проводника на его поверхности показывают наличие продольные и поперечные затухающие колебания. Для сплошного круглого по сечению стержня длиной l собственная частота f_i [6]:

$$f_i = \frac{\beta_i}{2\pi}\sqrt{\frac{EJ}{ml^3}}, \tag{6}$$

где β_i – коэффициент, зависящий от выбора формы и крепления концов (см. ниже табл. 3); J – полярный момент инерции сплошного цилиндра относительно оси параллельной образующей цилиндра, радиусом R, длиной l из материала с удельной плотностью ρ:

$$J = \frac{\rho\pi R^4 l}{2}. \tag{7}$$

Оценки собственных частот изгибных колебаний стержней также представлены в [7]. Для оценки поперечных колебаний используют коэффициент Пуассона ν и, в зависимости от вида сечения стержня, оценивают коэффициент K. Для круглого сечения

$$K = \frac{6(1+\nu)}{7+6\nu}. \tag{8}$$

Собственные частоты для образца в направлении поперечного сдвига:

$$fc_i = \frac{\lambda_i}{2\pi l}\sqrt{\frac{KG}{\rho}}, \tag{9}$$

где G – модуль сдвига, $G = E/[2(1+\nu)]$; E – модуль Юнга; ν – коэффициент Пуассона; K – сдвиговый коэффициент; l – длина образца; ρ – плотность массы образца. В [8] для оценки собственных частот колебаний стержня в поперечном направлении получено соотношение для оценки собственной частоты. Частота резонанса в поперечном направлении:

$$f_i = \frac{i}{2l}\sqrt[4]{\frac{EJ}{\rho S}}, \tag{10}$$

где J – момент инерции, определяемый при перемещении в направлении перпендикулярном оси вала как для сплошного стержня круглого сечения как

$$J_Z = \frac{mr^2}{2} = \frac{\rho\pi r^4 l}{2}. \tag{11}$$

Таблица 3

Значения коэффициентов для трех первых собственных частот изгибных колебаний стержня с различными типами закрепления концов и соотношение между такими частотами

краевые условия для стержня	β_1	β_2	β_3	$\frac{f_2}{f_1}$	$\frac{f_3}{f_1}$	$\frac{f_3}{f_2}$
	22,37	61,67	120,9	2,75	5,4	1,96
	15,42	49,97	104,2	3,24	6,76	2,09

Момент инерции для стержня относительно оси перпендикулярной его оси в средине образца:

$$J_X = J_Y = \frac{ml^2}{12} = \frac{\rho\pi r^2 l^3}{12}, \tag{12}$$

где $J = J_X = J_Y$ – момент инерции, определяемый при перемещении в направлении оси сплошного стержня круглого сечения как

$$J_X = J_Y = \frac{m}{12}(3r + l) = \frac{\rho\pi r^2 l}{12}(3r + l). \tag{13}$$

Характеристики материалов проводящего стержня для некоторых металлов приведены в табл. 4.

Таблица 4

Константы используемых металлов

материал	модуль Юнга, $E \cdot 10^{-11}$, Н·м$^{-2}$	удельная плотность, кг·м$^{-3}$	коэффициент Пуассона, ν
сталь	2,1	7850	0,285
медь	1,2	8900	0,33
алюминиевий	0,71	2750	0,29
титановый сплав	1,1	4500	0,33
бронза	1,0	8950	0,33

Продольные колебания стержня в виде волн сжатия-растяжения также характеризуются наличием собственной частоты. Собственные частоты для продольных колебаний стержня (со свободными или с зажатыми концами):

$$f_i = \frac{\lambda_i}{2\pi l^2}\sqrt{\frac{EJ}{m}}, \tag{14}$$

где коэффициент λ зависит от порядкового номера формы колебаний: $\lambda_1 = 4{,}73$; $\lambda_2 = 7{,}85$; $\lambda_3 = 10{,}99$; $\lambda_4 = 14{,}14$; $\lambda_5 = 17{,}28$.

Расчет собственных частот

В качестве примера оценим собственные частоты механических колебаний для образца проводника из меди длиной 150 мм и диаметром 4 мм в соответствии с представленными соотношениями, полученными в [6-8]. Результаты такой оценки приведены в табл. 5.

Таблица 5

Оценки расчетных собственных частот для проводника в Гц

Колебания	1	2	3	4	5
поперечные [6]	30020	82770	162300		
продольные [7]	12240	24480	36720	48960	61200
продольные [8]	77530	213700	419000	692600	1035000

Экспериментальная оценка частоты колебаний при релаксации деформаций образца

Частоты затухающих вибрационных колебаний для образца из меди диаметром 4 мм длиной 150 мм. Зависимости от времени величины магнитной индукции и ускорения в осевом и поперечном направлениях показаны на рис. 2. Начало внешнего электрического импульса соответствует моменту *t0*, а его окончание соответствует моменту *t1*. В эти моменты наблюдается скачкообразное изменение величины магнитной индукции. Величина магнитной индукции, измеренная бесконтактным датчиком Холла, пропорциональна току через проводник. В момент *t0* величины магнитной индукции и тока близки к нулю и

влияние таких процессов как пинч-эффект и тепловое действие тока минимальны. В моменты *t0* и *t1* наблюдается активных сил деформирования материала проводника, а затем происходит релаксация таких деформаций. К моменту времени *t2* заканчивается влияние электрических процессов в проводнике. При этом прекращается не только влияние внешнего электрического поля, заканчивающегося в момент *t1*, но и влияние тока самоиндукции проводника, спадающего после окончания внешнего электрического импульса. После этого релаксация механических деформаций продолжается, причем в вибрационных сигналах наблюдается периодичность, которую можно оценить величиной временного интервала *t3-t2*.

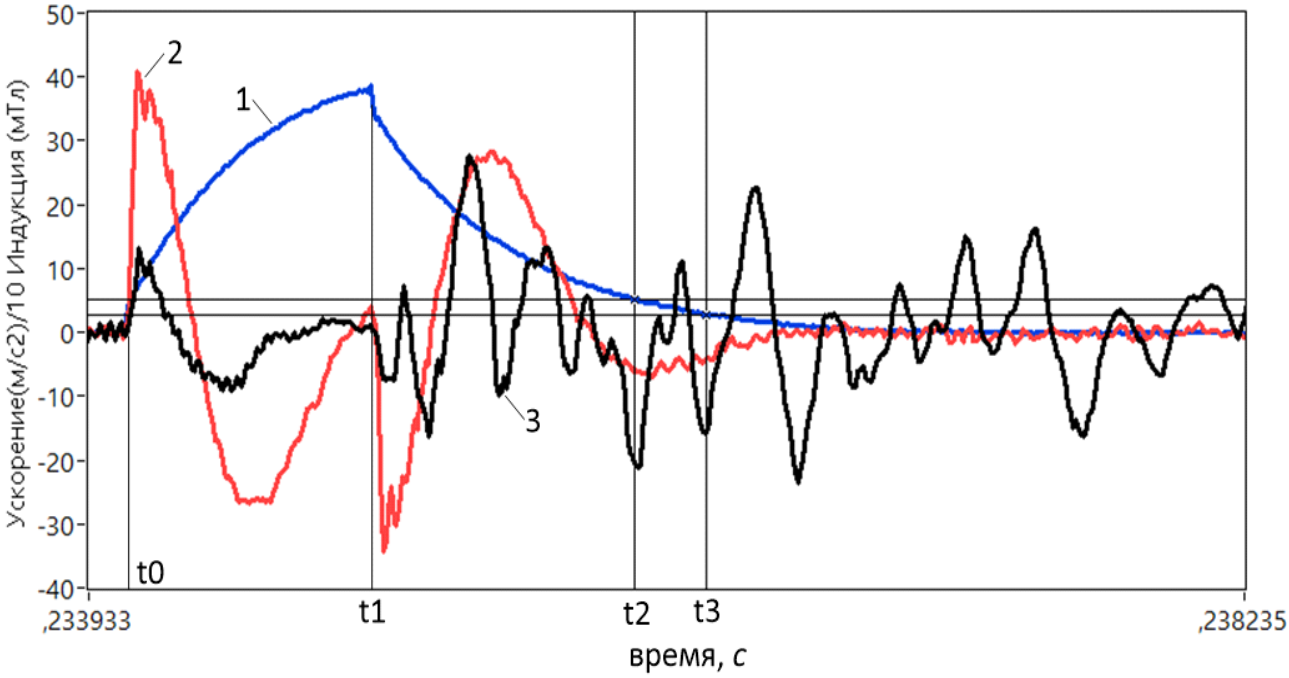


Рис. 2. Сигналы с датчиков магнитного поля (1), осевой компоненты ускорения (2) и поперечной компоненты ускорения (3) при воздействии электрического импульса амплитудой 2,5 В на проводник

Контроль периодических динамических колебаний материала целесообразно наблюдать по сигналам ускорения. Величина перемещения может быть получена двойным интегрированием данных о величине ускорения. Двойное интегрирование сигнала сопровождается существенным ослаблением высокочастотных составляющих в сигнале. В результате быстрые изменения при анализе перемещений становятся практически незаметными и быстрые вибрационные колебания релаксации деформации сглаживаются. По результатам эксперимента можно выделить для продольных колебаний проводника частоты $fa1 = 3802$ Гц и $fa2 = 9091$ Гц, а для поперечных колебаний $fp = 3413$ Гц. Полученные характерные частоты заметно ниже ожидаемых собственных частот оцениваемых по существующим методам расчета.

Выводы

Наблюдаемые характерные частоты вибрационных процессов деформаций проводника существенно ниже оценок собственных частот электрических процессов, процессов внутреннего трения при вибропластическом эффекте, а также частот собственных форм механических колебаний в продольном и поперечном направлении для исследуемых проводников.

Список литературы

1. Калантаров П. Л. Расчет индуктивностей: Справочная книга / П. Л. Калантаров, Л. А. Цейтлин. – Л.: Энергоатомиздат, 1986. – 488 с.

2. Иоссель Ю. Я. Расчет электрической емкости / Ю. Я. Иоссель, Э. С. Кочанов, М. Г. Струнский. – Л.: Энергоиздат, 1981. – 288 с.

3. Кузнецов Е. В. Синергетические принципы самоорганизации пластической деформации твёрдых кристаллических тел // Фундаментальные и прикладные проблемы техники и технологии. – 2012. – №3(293). – С. 38-41.

4. Morozenko V. N. Rezonansyj vibroplasticheskij jeffect / V. N. Morozenko, E. V. Kuznecov // Izvestija RAN. Metally. – 2000. – № 3. – P. 104-107.

5. Определение динамической вязкости металлов при ударном сжатии / Л. Б. Первухин, С. В. Сериков, И. К. Устинов, О. Д. Чуркин // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Машиностроение. – 2011. – С. 184-200.

6. Жирицкий Г. С. Конструкция и расчет на прочность деталей паровых и газовых турбин / Г. С. Жирицкий, В. А. Стрункин. – М.: Машиностроение, 1968. – 523 с.

7. Blevins R. D. Formulas for natural frequency and node shaps // VNR, 1979. – 492 p.

8. Исследование поперечно-изгибных и продольных колебаний элементов конструкций машин и оборудования / Н. В. Куцубина, И. В. Перескоков, В. В. Васильев, Т. В. Калимулина // Екатеринбург: УГЛТУ, 2012. – 35 с.

ELECTRIC PULSE EXCITATION OF DYED VIBRATIONS FOR CONDUCTORS

O.A. Troitsky, O.B. Skvortsov, V.I. Stashenko

Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow

Abstract: the vibrational response in conductors to the effect of an external electrical impulse is considered. An assessment of possible resonance processes is given. The results of experimental estimates of vibration frequency are presented.

Keywords: electrical impulse, conductor, deformation, vibration, relaxation, natural frequency, resonance, vibroplastic effect.

УДК 517.9

СПЕКТР МАТРИЦЫ СМЕЖНОСТИ ОДНОГО ПОЧТИ ПОЛНОГО ГРАФА

Н.Б. Ускова, А.Н. Шелковой

Воронежский государственный технический университет
nat-uskova@mail.ru, shelkovoj.aleksandr@mail.ru

Аннотация: с помощью методов линейной алгебры изучаются спектральные свойства матриц смежностей графов, близких к полным графам. Приведены собственные значения и собственные векторы этих матриц.

Ключевые слова: спектр графа, ядро оператора, ортонормированный базис, матрица перехода, кратность собственного значения.

Рассмотрим некоторый полный граф G, имеющий достаточно много вершин n. Его матрица смежности A представляет собой матрицу порядка n, все элементы которой равны единице. Удалим у графа G k рёбер, инцидентных разным вершинам. У полученного графа в матрице смежности A_k появятся $2k$ нулей, причём в каждой строке (или столбце) появится не более одного нуля. В работе рассматриваются спектральные свойства матрицы A_k. Отметим, что определённые свойства графа связаны со спектром его матрицы смежности. В работах [1, 2] рассмотрена спектральная теория графов и её приложения. Спектр матрицы смежности почти полного графа, общий случай без требования удаления рёбер, инцидентных разным вершинам, рассматривались в [3, 4, 5]. В этих работах для оценок отклонения спектральных компонент использовался метод подобных операторов [6], в частности, теория расщепления линейных операторов [6, 7]. В рассматриваемом нами случае не требуется привлечения метода подобных операторов. Используемые сведения из линейной алгебры можно найти в [8].

Сначала рассмотрим матрицу A, состоящую из единиц, порядка n. Её спектральные характеристики известны $[3]$. А именно, $\sigma(A)=\{0,n\}$, где символом $\sigma(A)$ обозначен спектр матрицы A. При этом собственное значение n простое и ему соответствует собственный нормированный вектор $f_n=\frac{1}{\sqrt{n}}(1,1,...,1)^T$. Собственное значение нуль полупростое, ему соответствуют собственные векторы $f_1=(1,-1,0,...,0)^T$, $f_2=(0,1,-1,0,...,0)^T$, ..., $f_{n-1}=(0,...,0,1,-1)^T$. К системе векторов f_1, f_2, ..., f_{n-1} применим процесс ортогонализации Грама – Шмидта. Получим следующую ортонормальную систему векторов h_1, h_2, ..., h_{n-1}, $h_k=\frac{1}{\sqrt{k(k+1)}}\left(\underbrace{1,...,1}_{k\text{ раз}},-k,0,...,0\right)^T$, $k=1,2,...,n-1$, в

подпространстве из $\mathbb{R}^n$, отвечающем собственному значению ноль. Вместе с вектором f_n указанная система является ортонормированным базисом в $\mathbb{R}^n$.

Так как рассматриваемый граф G является полным, то нумерация вершин произвольна. В графе G_k вершины будем нумеровать так, чтобы нули при удалении рёбер у его матрицы смежности A_k появлялись только на побочной диагонали. Нам удобно рассматривать матрицы как матрицы операторов, действующих в пространстве $\mathbb{R}^n$, относительно стандартного базиса этого пространства. Пусть у графа G удалили k рёбер, где $n > 2k+1$, инцидентных разным вершинам, и получили граф G_k. Тогда у матрицы A_k на побочной диагонали появилось $2k$ нулей, пусть это элементы с номерами a_{1n}, $a_{2,n-1}$, ..., $a_{k,n-k+1}$ и a_{n1}, $a_{n-1,2}$, ..., $a_{n-k+1,k}$, то есть

$$A_k = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & \dots & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

В этом случае размерность l ядра оператора A_k определяется формулой $l = n - 2k - 1 > 0$, то есть нуль так и остаётся собственным значением кратности l. Размерность образа такого оператора $2k+1$. Непосредственный подсчёт показывает, что у него появляется собственное значение 1, которое имеет кратность $k+1$, и собственное значение $-1-$кратности k. Заметим, что собственному значению нуль отвечают следующие собственные векторы

$$\left(\underbrace{0,\dots,0,}_{k}\underbrace{1,-1,0,\dots,0,}_{n-2k}\underbrace{0,\dots,0}_{k}\right)^T,\ \left(\underbrace{0,\dots,0}_{k},0,1,-1,0,\dots,0,\underbrace{0,\dots,0}_{k}\right)^T,\ \dots,$$

$$\left(\underbrace{0,\dots,0,}_{k}0,\dots,0,1,-1,\underbrace{0,\dots,0}_{k}\right)^T.$$

Собственному значению 1 отвечают векторы

$$(1,0,0,\dots,0,0,-1)^T,\ (0,1,0,\dots,0,-1,0)^T,\ \dots,\ \left(0,\dots,1,\underbrace{0,\dots,0}_{n-2k},-1,0,\dots,0\right)^T,$$

их k штук. Собственному значению –1 – векторы

$$\left(1,-1,0,...,0,-1,1\right)^T,\ \left(0,1,-1,0,...,0,-1,1,0\right)^T,\ ...,$$

их $k-1$ штук. Таким образом, нам осталось найти оставшиеся 2 ненулевые собственные значения исходной матрицы. Для этого удобно свести всё к нахождению собственных значений матрицы второго порядка следующим образом.

Отметим, что в ядре проектора, натянутого на подпространство из собственных векторов, отвечающих собственным значениям 1 и –1, есть следующий ортонормированный базис:

$$g_1=\left(\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2k}},...,\frac{1}{\sqrt{2k}}}_{k},0,...,0,\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2k}},...,\frac{1}{\sqrt{2k}}}_{k}\right)^T,$$

$$g_2=\left(\underbrace{0,...,0}_{k},\frac{1}{\sqrt{n-2k}},...,\frac{1}{\sqrt{n-2k}},\underbrace{0,...,0}_{k}\right)^T.$$

Составим из этих векторов матрицу перехода (по столбцам) R, размера $n\times 2$, и с её помощью найдём матрицу A'_k второго порядка, собственные значения которой и будут оставшимися ненулевыми собственными значениями исходной матрицы, по формуле

$$A'_k=R^T A_k R. \tag{1}$$

Непосредственным подсчётом легко убедиться, что

$$A'_k=\begin{pmatrix} 2k-1 & \sqrt{2k\left(n-2k\right)} \\ \sqrt{2k\left(n-2k\right)} & n-2k \end{pmatrix}.$$

Пример. Пусть $n=10,\ k=2,$ тогда

$$A_k=\begin{pmatrix} 1&1&1&1&1&1&1&1&1&0\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&0&1\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 1&0&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 0&1&1&1&1&1&1&1&1&1 \end{pmatrix}.$$

Ядро оператора A_k имеет размерность 5, что и есть кратность собственного значения $\lambda_1=0,$ соответствующие собственные векторы имеют вид

$$e_1 = (0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T,$$

$$e_2 = (0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 0)^T,$$

$$e_3 = (0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0)^T,$$

$$e_4 = (0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0)^T,$$

$$e_5 = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0)^T,$$

Собственное значение $\lambda_2 = 1$ имеет кратность 2, собственное значение $\lambda_3 = -1$ – кратность 1. Соответствующие собственные векторы

$$e_6 = (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1)^T,$$

$$e_7 = (0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0)^T,$$

и

$$e_8 = (1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 1)^T.$$

Очевидно, что в ядре проектора, натянутого на подпространство из собственных векторов e_6, e_7 и e_8, есть ортонормированный базис

$$g_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^T,$$

$$g_2 = \left(0, 0, \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, 0, 0\right)^T.$$

Тогда, используя формулу (1), получаем, что оставшиеся два ненулевые собственные значения есть собственные значения матрицы второго порядка

$$\begin{pmatrix} 3 & 2\sqrt{6} \\ 2\sqrt{6} & 6 \end{pmatrix},$$

они легко вычисляются: $\lambda_9 = \dfrac{9 - \sqrt{105}}{2}$, $\lambda_{10} = \dfrac{9 + \sqrt{105}}{2}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-01-00732.

Список литературы

1. Cvetkovic D. M., Doob M., Sachs H. Spectra of Graphs: Theory and Applications. New York, Wiley. 1998. 368 p.

2. Wang Y., Chakrabarti D., Faloutsos C. Epidemic Spreading in Real Net Works: and Eigenvalue View point. 22nd International Symposium on Reliable Distributed Systems, Oct. 2003. Proceedings. 2003. P. 25-34.

3. Козлуков С. В. Спектр матрицы смежности почти полного графа // Математическая физика и компьютерное моделирование, 2017. Т. 20, № 4. С. 18-25.

4. Kozlukov S. The method of similar operators in the study of the spectra of the adjacency matrices of graphs // Journal of Physics: Conference Series. 2018. C. 012036.

5. Kozlukov S. V. Spectra of almost-all-ones matrices // Некоторые вопросы анализа, алгебры, геометрии и математического образования. 2016. № 5-1. С. 13-14.

6. Baskakov A. G., Krishtal I. A., Uskova N. B. Similarity techniques in the spectral analysis of perturbed operator matrices // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 2019. V. 477, N. 2. P. 930-960.

7. Uskova N. B., Garkavenko G. V. Decomposition of linear operators and asymptotic behavior of eigenvalues of difference operators with growing potential // Journal of Mathematical Science. 2020. V. 246, N. 6. P. 812-827.

8. Баскаков А. Г. Лекции по алгебре. Воронеж: Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета. 2013. 159 с.

THE SPECTRUM OF THE CONNECTION MATRIX OF ONE ALMOST FULL GRAPH

N.B. Uskova, A.N. Shelkovoy

Voronezh State Technical University

Abstract: using the methods of linear algebra, spectral properties of adjacency matrices of graphs close to complete graphs are studied. The eigenvalues the eigenvectors of these matrices are given.

Keywords: graph spectrum, operator kernel, orthonormal basis, transition matrix, eigenvalue multiplicity.

УДК 372.853

МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СТУДЕНТОВ МЛАДШИХ КУРСОВ

И.П. Бирюкова, А.С. Животворев

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил
«Военно-воздушная академия им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»
ipbir95@mail.ru

Аннотация: в статье рассматривается пакет компьютерных программ, предназначенных для построения оптических моделей атмосферы при решении задач определения пространственного разрешения изображений, получаемых с помощью оптических систем дистанционного зондирования, и наклонной дальности видимости в сложных метеорологических условиях. Данный пакет рекомендуется использовать в научно-исследовательской работе студентов, обучающихся по метеорологическим направлениям подготовки.

Ключевые слова: научно-исследовательская деятельность студентов, общепрофессиональные компетенции, компьютерное моделирование, оптические модели атмосферы.

Согласно современным федеральным государственным образовательным стандартам важным компонентом профессиональной деятельности выпускников технических вузов является научно-исследовательская деятельность. Вследствие этого формирование соответствующих общепрофессиональных компетенций представляет актуальную задачу на всех этапах обучения. В то же время существуют ограничения в формах научной работы, которые могут успешно выполнять обучающиеся на младших курсах. Эти ограничения связаны с недостаточным развитием у студентов навыков проведения экспериментальных исследований и работы со сложным измерительным оборудованием, а также отсутствием специальных знаний предметной области предстоящей профессиональной деятельности. Поэтому научная работа студентов младших курсов обычно состоит в изучении теоретических положений, освоении терминологии, знакомстве с моделями и методами, используемыми в современных фундаментальных и прикладных исследованиях по теме научной работы, изучении научных публикаций, составлении обзоров и рефератов. Однако для повышения заинтересованности студентов в научной работе необходимо иметь возможность получения ими результатов, отражающих закономерности исследуемых явлений и имеющих практическое значение. В этом случае целесообразно использовать метод моделирования, который широко применяется при изучении процессов в сложных системах в различных сферах деятельности современных специалистов.

В связи с этим рассмотрим пакет компьютерных программ, который предназначен для построения оптических моделей атмосферы при решении задач определения пространственного разрешения изображений, получаемых с помощью оптических систем дистанционного зондирования, и расчетов наклонной дальности видимости в сложных метеорологических условиях (СМУ).

В СМУ ухудшение качества оптических изображений, получаемых с помощью фотографических систем, размещаемых на беспилотных летательных аппаратах, и уменьшение наклонной дальности видимости при посадке пилотируемых летательных аппаратов связаны с понижением прозрачности атмосферы, которая является спектральной характеристикой ослабления в атмосфере электромагнитного излучения видимого и инфракрасного диапазонов. В применяемых моделях принимается, что прозрачность атмосферы убывает с ростом толщины слоя воздуха, проходимого светом, по экспоненциальному закону. В этом законе показатель общего ослабления электромагнитного излучения представляется только коэффициентом аэрозольного ослабления, так как на расстояниях до 1,5 км, которые характерны для рассматриваемых задач, вклад молекулярного рассеяния мал [1]. На этих расстояниях и в диапазонах длин волн, в которых поглощение паров воды и атмосферных газов мало, главным фактором, понижающим прозрачность атмосферы, является аэрозольное ослабление, которое в СМУ, например, в условиях тумана или дымки при низкой облачности, обусловлено рассеянием и поглощением света взвешенными в атмосфере частицами воды или льда.

Компьютерные программы рассматриваемого пакета позволяют рассчитывать эффективный коэффициент аэрозольного ослабления в неоднородной атмосфере, который зависит от длины волны, распределения горизонтальной метеорологической дальности видимости по высоте над поверхностью Земли, концентрации рассеивающих частиц, а также вычислять ослабление электромагнитного излучения при прохождении вертикальных слоев атмосферы различной толщины. С помощью данных компьютерных программ имеется возможность сформировать модель распределения коэффициента ослабления по высоте на основе моделей распределения горизонтальной метеорологической дальности видимости (МДВ) по высотам в подоблачном слое, которое, в свою очередь, зависит от высоты нижней границы и типа облаков, вертикальной видимости в случае тумана, сопутствующих явлений погоды. В соответствующей программе используются четыре наиболее часто встречающихся модели вертикального распределения горизонтальной МДВ под слоистыми и слоисто-кучевыми облаками [2]:

1) модель предполагает быстрое непрерывное понижение горизонтальной МДВ от поверхности Земли до нижней границы облаков;

2) модель характеризуется медленным вблизи поверхности Земли и быстрым при приближении к нижней границе облаков уменьшением горизонтальной МДВ;

3) модель предполагает постоянное значение горизонтальной МДВ до высоты нижней границы подоблачной дымки и ухудшение видимости в слое подоблачной дымки с увеличением высоты по квадратичному закону;

4) модель предполагает возрастание горизонтальной МДВ при увеличении высоты в приземном слое, а при приближении к нижней границе облаков понижение горизонтальной МДВ до значений, равных или меньших МДВ у поверхности Земли.

В программе используются также различные модели распределения горизонтальной МДВ по высоте в условиях тумана: быстрое и непрерывное уменьшение горизонтальной МДВ от поверхности Земли до высоты вертикальной видимости в адвективном тумане или радиационном тумане третьей стадии развития; возрастание горизонтальной МДВ с высотой на первой стадии развития радиационного тумана; уменьшение горизонтальной МДВ с высотой до середины слоя радиационного тумана на второй стадии развития, а затем возрастание видимости с высотой; одинаковые значения горизонтальной МДВ при увеличении высоты в радиационном тумане с верхней границей 100-300 м.

Для расчетов параметров рассматриваемых моделей атмосферы и вероятностей описания ими ослабления электромагнитного излучения в различных погодных условиях разработан комплект программ для статистической обработки данных метеорологических наблюдений с целью определения повторяемостей в заданной местности дымок, туманов, других погодных явлений, уменьшающих прозрачность атмосферы, а также комплексов значений метеорологических величин, характерных для рассматриваемых оптических моделей атмосферы, параметров статистических распределений МДВ и высоты нижней границы облаков в заданных метеорологических условиях.

Рассмотренный пакет программ рекомендуется применять в научно-исследовательской работе студентов, обучающихся по метеорологическим направлениям подготовки, что будет способствовать формированию у них компетенций в проведении компьютерного моделирования атмосферных явлений и статистической обработке данных метеорологических наблюдений, а также позволит создать основу методологических знаний и умений для дальнейших научных исследований.

Список литературы

1. Зуев В. Е., Креков Г. М. Оптические модели атмосферы. Л: Гидрометеоиздат, 1986. 256 с.

2. Дорофеев В. В., Бакланов И. О., Жильчук И. А. Полётная видимость. Воронеж: ЦНТИ, 2013. 249 с.

SIMULATION IN RESEARCH ACTIVITIES OF JUNIOR STUDENTS

I.P. Biryukova, A.S. Zhivotvorev

Military Educational and Scientific Center of the Air Force
«N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin Air Force Academy», Voronezh

Abstract: the article discusses a package of computer programs designed to create optical models of the atmosphere in the process of solving problems of calculation the spatial resolution of images obtained using optical remote sensing systems and inclined visibility range in difficult meteorological conditions. This programs are recommended to be used in the research work of students in meteorological areas of training.

Keywords: research activity of students; general professional competencies, simulation, optical models of the atmosphere.

УДК 539.182; 519.632

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Е.Е. Щербакова, С.Ю. Князев, Н.Г. Звягина

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону
sherbakovaee@mail.ru

Аннотация: для численного решения квантово-механических задач на собственные значения для уравнения Шредингера предложен модифицированный метод коллокаций. Повышение точности численного решения достигается особым нерегулярным расположением узлов коллокации. В качестве примера численно решается уравнение Шредингера для расчета собственных значений энергии электрона в атоме водорода. Полученные численные решения в точности соответствуют теоретическим значениям.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, численное решение, метод коллокаций, метод точечных источников, атом водорода, собственные значения энергии, собственные функции, полиномы Лагерра.

Введение

При решении квантово-механических задач фундаментальное значение имеет уравнение Шредингера [1]. Несмотря на широкий спектр имеющихся как аналитических, так и численных методов решения уравнения Шредингера [2-12], проблема эффективных способов нахождения собственных энергий и собственных функций для основного уравнения квантовой механики, особенно при решении многомерных задач, продолжает оставаться актуальной. В работе [13] используется метод численного решения стационарного уравнения Шредингера, основанный на приведении его к интегральному уравнению с последующим численным решением, использующим известное фундаментальное решение. Предложенный в работе [14] численный метод является развитием метода [13]. Данный метод основан на приведении исходного уравнения математической физики к неоднородному интегральному уравнению с ядром, выражаемым через известное фундаментальное решение. Методы решения [13-14] являются обобщением метода точечных источников поля (МТИ) или метода фундаментальных решений (МФР), их можно рассматривать как частный случай метода коллокаций. В данной работе предложена методика решения уравнения Шредингера, основанная на использовании различных вариантов метода коллокаций. Приводится пример использования предложенного метода при решении конкретных задач квантовой механики на собственные значения энергии.

Метод коллокаций

Метод коллокации (МК) является одним из эффективных методов решения краевых задач математической физики [15]. Краткое описание этого метода применительно к решению линейных задач эллиптического типа изложено в работе [16].

В области Ω двумерного или трехмерного пространства с границей $\partial\Omega$ решается краевая задача для уравнения

$$L(\mathbf{r})U(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \Omega \tag{1}$$

с условиями на границе $\partial\Omega$

$$\Lambda(\mathbf{r})U(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \partial\Omega, \tag{2}$$

где $L(\mathbf{r})$, $\Lambda(\mathbf{r})$ – линейные операторы в области Ω и на границе $\partial\Omega$; $f(\mathbf{r})$ и $g(\mathbf{r})$ – заданные функции в области Ω и на границе $\partial\Omega$. Пусть задана система линейно независимых функций $\{\varphi_i(\mathbf{r})\}$, обладающих в области Ω свойством полноты. Представим решение задачи (1), (2) в виде ряда

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{\infty} C_i \varphi_i(\mathbf{r}).$$

Так как на практике ограничимся нахождением конечного числа коэффициентов разложения C_i, то будем искать приближенное решение задачи (1), (2) в виде конечной суммы

$$U_N(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{N-1} c_i \varphi_i(\mathbf{r}). \tag{3}$$

Для определения неизвестных коэффициентов разложения c_i в (3) расположим в области Ω и на границе $\partial\Omega$ соответственно N_v и N_G узловых точек, точек коллокации. В результате получается система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$\sum_{i=0}^{N-1} c_i L(\mathbf{r}_k)\varphi_i(\mathbf{r}_k) = f(\mathbf{r}_k),\ k = 1 \div N_v, \tag{4}$$

$$\sum_{i=0}^{N-1} c_i \Lambda(\mathbf{r}_k)\varphi_i(\mathbf{r}_k) = g(\mathbf{r}_k),\ k = (N_v + 1) \div N. \tag{5}$$

Решив (СЛАУ) (4)- (5), получаем искомое численное решение в виде конечной суммы (3). Следует обратить внимание на то, что соотношение (3) дает приближенное аналитическое выражение для искомой функции $U(\mathbf{r})$. Его можно дифференцировать, производить другие действия, и при этом не возникает дополнительная численная погрешность.

Основная проблема, возникающая при нахождении приближенного решения (3) связана с возможностью плохой обусловленности системы (4)-(5). Например, в [17] показано, что при интерполировании функции от двух переменных полиномами степени n определитель системы обращается в ноль, если узлы коллокации лежат на одной кривой порядка n. Поэтому, при регулярном расположении точек коллокации, избежать плохой обусловленности обычно не удается. Однако, если производить корректировку в расположении точек коллокации, производя случайным образом их небольшое смещение, то проблема, связанная с плохой обусловленностью системы (4)-(5), может быть устранена.

Различные варианты МК отличаются друг от друга в первую очередь используемой системой базисных функций $\{\varphi_i(\mathbf{r})\}$.

Определенную привлекательность имеют базисные функции, принимающие максимальное, например единичное значение в точке нахождения соответствующего узла коллокации и убывающие по мере удаления от этого узла. Рассмотрим функции следующих видов:

$$\varphi_i(x,y) = \exp\left(-k\left((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2\right)\right), \tag{6}$$

$$\varphi_i(x,y) = \frac{1}{1+k\left((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2\right)}. \tag{7}$$

Здесь постоянные k подбираются таким образом, чтобы обеспечить наименьшую погрешность численного решения. Не исключается возможность использования других базисных функций для получения решения краевых задач.

Данный метод может успешно применяться для решения разнообразных задач математической физики [16, 18]. Рассмотрим возможности применения предложенного метода на конкретных примерах при решении квантово-механических задач для уравнения Шредингера.

Особенности решения квантово-механических задач методом коллокаций

Основной задачей квантовой механики является решение уравнения Шредингера, которое мы запишем в виде

$$H\psi = E\psi\ , \tag{8}$$

где H – гамильтониан системы, E – ее энергия; волновая функция ψ является функцией координат микрочастиц системы.

Если движение микрочастиц финитное, то волновая функция на бесконечности должна обращаться в ноль. Это возможно только при вполне определенных значениях энергии системы, собственных значениях энергии. Опишем алгоритм численного решения уравнения (8) методом коллокаций для нахождения собственных значений энергии E_i и, соответствующих им, собственных функций ψ_i. Для этого, прежде всего, необходимо указать область численного решения задачи Ω. Сначала определим классически доступную область движения $\Omega_{кл}$, на границах которой потенциальная энергия системы V равна заданной энергии E. Границы области Ω должны быть несколько удалены от границ области $\Omega_{кл}$, чтобы на границах области Ω волновая функция была близкой к нулю. Далее располагаем в области Ω и на ее границе N узловых точек, точек коллокации. Расположение этих точек, как отмечалось выше, должно допускать небольшие случайные отклонения от регулярно расположенных узлов. В соответствии с формулой (3) приближенное решение уравнения Шредингера ищем в виде суммы

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{N-1} c_i \varphi_i(\mathbf{r}). \tag{9}$$

После подстановки (9) в (8) требуем выполнения уравнения Шредингера в точках коллокации с координатами $\mathbf{r}_k$, общее число которых равно $N-1$. Это приводит к СЛАУ

$$\sum_{i=0}^{N-1} c_i \left(H\left(\mathbf{r}_k\right)\varphi_i\left(\mathbf{r}_k\right) - E\varphi_i\left(\mathbf{r}_k\right)\right) = 0;\ 1 \le k \le N-1. \tag{10}$$

Для того, чтобы получить ненулевое решение необходимо использовать дополнительное условие, налагаемое на волновую функцию. Предположим, например, что в некоторой точке $\mathbf{r}_0$ волновая функция заведомо имеет ненулевое значение. Тогда, дополнив систему (10) уравнением

$$\sum_{i=0}^{N-1} c_i \varphi_i\left(\mathbf{r}_0\right) = 1 \tag{11}$$

получим неоднородную СЛАУ, решая которую находим коэффициенты c_i и, соответственно, волновую функцию (9).

Есть еще один подход к решению однородного уравнения. Представим волновую функцию в виде суммы $\psi\left(\mathbf{r}\right) = \psi_0\left(\mathbf{r}\right) + \Phi\left(\mathbf{r}\right)$, где $\Phi\left(\mathbf{r}\right)$ – некоторая, не равная тождественно нулю, заданная вспомогательная функция. Подставив волновую функцию в таком виде в уравнение Шредингера, для неизвестной функции $\psi_0\left(\mathbf{r}\right)$ получим неоднородное уравнение эллиптического типа

$$H\psi_0 - E\psi_0 = F\ ,$$

где $F(\mathbf{r}) = -(H(\mathbf{r}) - E)\Phi(\mathbf{r})$.

Это уравнение решаем численно описанным выше методом, методом коллокаций, находим $\psi_0(\mathbf{r})$, а затем вычисляем искомую волновую функцию $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \Phi(\mathbf{r})$. Выбор вспомогательной функции $\Phi(\mathbf{r})$ неоднозначен и может существенно влиять на качество конечного результата.

Как показано выше, численное решение краевых задач с помощью МК предполагает использование некоторой системы базисных функций. При решении уравнения Шредингера (8) обнаружилась неустойчивость численного решения при использовании степенных функций. Удовлетворительные результаты получены, применяя экспоненциальные (6) или гиперболические (7) базисные функции.

Решение задачи производится в соответствии со следующим алгоритмом. Задается начальное значение энергии E_0 и шаг варьирования энергии $\delta\varepsilon$. Желательно, чтобы $\delta\varepsilon \ll \Delta E$, где ΔE – расстояние между ближайшими собственными значениями энергии. Для каждого значения энергии $E = E_0 + k\delta\varepsilon$ последовательно, при $k = 0, 1, 2, \ldots$ решается система МК (4)-(5). Следует отметить, что число обусловленности C системы (10)-(11) слабо зависит от энергии E. Поэтому использование зависимости $C = C(E)$ для нахождения собственных значений энергии неэффективно.

Поэтому в качестве критерия задачи на собственные значения энергии вычисляется параметр

$$K = \left[\sum_{k=1}^{N_S} \mathrm{abs}\left(\psi\left(\mathbf{r}_k \right) \right) \right]^{-1}.$$

Суммирование производится по всем точкам (не обязательно узлам коллокации), расположенным случайным образом на границе области Ω. Число этих точек обозначим как N_S. Далее строится график зависимости критерия K от энергии E. Максимумы на этом графике должны соответствовать собственным значениям энергии электрона.

Ниже приводится пример численного решения уравнения Шредингера для атома водорода – задачи с известным теоретическим решением. При этом будем использовать атомные единицы длины $\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$ и энергии $\frac{me^4}{\left(4\pi\varepsilon_0\hbar\right)^2}$.

Уравнение Шредингера для атома водорода в атомных единицах имеет вид

$$\Delta\Psi + 2\left(E + \frac{1}{r} \right)\Psi = 0.$$

Решение уравнения Шредингера для атома водорода можно представить в виде

$$\Psi = \psi\left(r \right) Y_{lm}\left(\theta, \varphi \right),$$

где r, θ, φ – координаты электрона в сферических координатах, $Y_{lm}\left(\theta, \varphi\right)$ – сферические функции.

Для радиальной составляющей волновой функции $\psi(r)$ электрона с нулевым орбитальным моментом в сферических координатах получается уравнение

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + 2\left(E + \frac{1}{r} \right)\psi = 0. \tag{12}$$

Как известно, собственные значения энергии электрона, в соответствии с уравнением (12) равны

$$E = -\frac{0.5}{n^2}, \tag{13}$$

где n = 1, 2, 3… – главные квантовые числа.

При этом собственные функции (радиальные функции) выражаются через обобщенные полиномы Лагерра [1]:

$$\psi_n\left(r \right) \sim \exp\left(-\frac{r}{n} \right) L_{n-1}^{1}\left(\frac{2r}{n} \right). \tag{14}$$

Численное решение уравнения (12) производилось при значениях n, изменяющихся в пределах от 0.1 до 3.5 с шагом, равным 0.05. Для каждого n с помощью формулы (13) вычислялась энергия. Область численного решения уравнения (12) устанавливалась в полтора раза больше классически допустимой, т.е. координата r изменялась в пределах от 0 до $R = -\frac{1.5}{E} = 3n^2$. Число узлов коллокации составляло N=50. Эти узлы случайным образом смещались от

равномерно расположенных на отрезке (0, R) точек на величину, не превышающую $dl = 0.001R/N$. При численном решении уравнения Шредингера (12) использовались экспоненциальные (6) базисные функции. Параметр k, фигурирующий в (6) полагался равным $k = 0.10$. После численного решения уравнения Шредингера для каждого значения энергии E вычислялся критерий K. На рис. 1 представлена зависимость критерия K от параметра $10n$, определяющего собственное значение энергии электрона в атоме водорода. На графике отчетливо видны три максимума, соответствующие значениям $n = 1$, 2 и 3, что в точности соответствует теоретическим значениям (13).

Волновые функции, вычисленные численно при целочисленных значениях n в пределах от 1 до 7, также оказались в полном соответствии с расчетными теоретическими формулами (14). На рис. 2 представлен скриншот работы программы. На графике показан результат расчета волновой функции электрона в атоме водорода, полученный для квантового числа $n = 3$. Выведены графики, рассчитанные численно при числе узлов коллокации $N = 31$ и с использованием теоретической формулы (14) [1]. Представленные графики практически полностью совпадают. Погрешность при минимальном числе узлов составляет 10^{-3} %.

Рассмотренная в работе модель атома водорода показывает эффективность применения метода коллокаций при решении квантово-механических задач, задач на собственные значения энергии и собственные функции.

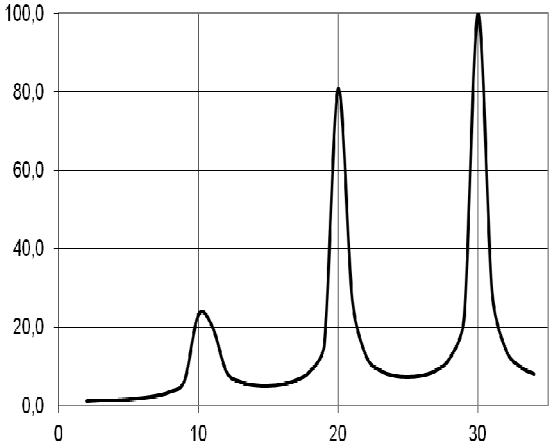


Рис. 1. Зависимость критерия K от параметра $10n$, определяющего собственные значения энергии электрона в атоме водорода

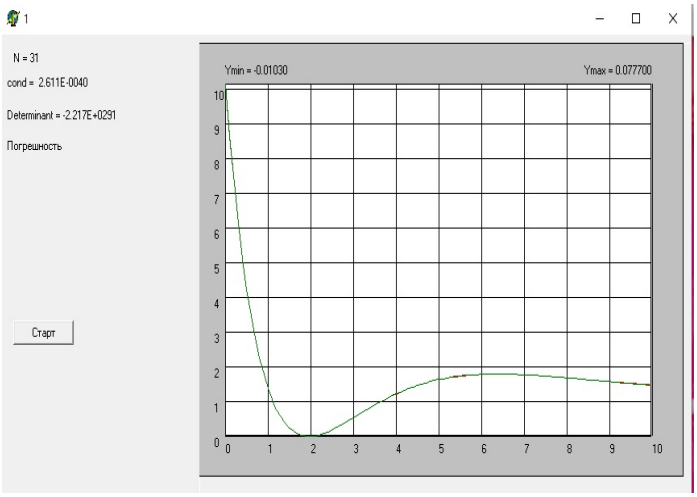


Рис. 2. Скриншот программы расчета графика волновой функции электрона в атоме водорода для квантового числа $n = 3$ при числе узлов коллокации $N = 31$

Описанный здесь алгоритм численного решения стационарных квантово-механических задач не зависит от их размерности.

Следует отметить также высокую точность результатов, полученных с использованием модифицированного метода коллокаций. Учитывая при этом чрезвычайную простоту компьютерной реализации МК, следует признать перспективными дальнейшие исследования возможностей этого метода.

Список литературы

1. Landau L. D. and Lifshitz E. M. 1977. Non-Relativistic Theory Pergamon Press Oxford
2. Miranda M. G., San G., and Dong S. 2010. Int. Mod. Phys. E 19, 123-129
3. Ikhdair S. M. and Falaye B. J. 2013. Chem. Phys. 421 84-95
4. Hnatich M., Khmara V. M., Lazur V. Yu. and Reity O. K. 2017. Theoretical and Mathematical Physics 190 (3) 345–358
5. Dias R. P. and Silvera I. F. 2017. Science 355 715-718
6. Nammas F. S. 2018. Physica A 508 187-198
7. Cherkasskii V. A. 2010. Visnyk Harkivs'kogo Nacional'nogo Universitetu, No. 926 204–211
8. Jeongnim Kim et al 2018. IOP Publishing Ltd J. Phys.: Condens. Matter 30 (19) 195901
9. Plokhotnikov K. E. 2020. Math. Models Comput. Simul. 12 (2) 221-231
10. Plokhotnikov K. E. 2021. J. Appl. Math. and Phys. 9 328-369
11. Ikhdair S. M. and Sever R. 2008. Cent.Eur.J. Phys. 6 697-703
12. Bondar D. I., Hnatich M. and Lazur V. Yu. 2007. J . Phys . A : Math . Theor. 40 (8) 1791–1807
13. Knyazev S. Yu. and Shcherbakova E. E. 2016. Russ. Phys. J. 59(10) 1616–22
14. Knyazev S. Yu. and Shcherbakova E. E. 2017. Russ. Phys. J. 60(7) 1124–32
15. Shcherbakova E. E. and Knyazev S. Yu. 2019. AIP Conference Proceedings. Proceedings of XV International scientific-technical conference "Dynamics of technical systems" (DTS-2019): electronic edition 2019. P. 050035
16. Shcherbakova E. E. and Knyazev S. Yu. 2020. Russian Electromechanics J. 63 (2-3) 76–84
17. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. – Москва: Наука, – Т. 1. – 1966. – 632 с.
18. Shcherbakova E. E. and Knyazev S. Yu. 2021. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 2020 1029(1), 012037
19. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. – Москва: Мир, 1974. – Т. 1.– 340 с.

NUMERICAL SOLUTION OF EIGENVALUE PROBLEMS AND EIGENFUNCTIONS FOR THE SCHROEDINGER EQUATION

E.E. Shcherbakova, S.Yu. Knyazev, N.G. Zvyagina

Don State Technical University, Rostov-on-Don

Abstract: a modified collocation method is proposed for the numerical solution of quantum mechanical eigenvalue problems for the Schrödinger equation. An increase in the accuracy of the numerical solution is achieved by a special irregular arrangement of collocation nodes. As an example, the Schrödinger equation is numerically solved to determine the energy eigenvalues and the eigenfunctions of the electron in the hydrogen atom. The obtained numerical solutions correspond exactly to the theoretical values.

Keywords: Schrödinger equation, numerical solution, collocation method, point-sources method, hydrogen atom, energy eigenvalues, eigenfunctions, Laguerre polynomials.

УДК 517.927

К ВОПРОСУ О РАЗРЕШИМОСТИ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОГО НЕЛИНЕЙНОГО ФУНКЦИОНАЛЬНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Г.Э. Абдурагимов

Дагестанский государственный университет, Махачкала
gusen_e@mail.ru

Аннотация: граничные задачи для нелинейных функционально-дифференциальных уравнений встречаются во многих приложениях науки и техники. Вопросы исследования положительных решений для этих задача в последнее время достаточно хорошо изучены и им посвящено достаточно большое число работ российских и зарубежных математиков. В рамках данной тематики в настоящей работе предложен неитерационный алгоритм построения приближенного положительного решения краевой задачи для одного нелинейного функционально-дифференциального уравнения второго порядка.

Ключевые слова: краевая задача, положительное решение.

Рассмотрим краевую задачу

$$x''(t) + f((Tx)(t)) = 0, \quad 0 < t < 1, \tag{1}$$

$$x(0) = 0, \quad x(1) = 0, \tag{2}$$

где $T\colon\ C \to L_p$ $(1< p < \infty)$ – линейный положительный непрерывный оператор, функция $f(u)$ неотрицательна, монотонна и $f(0) \equiv 0$.

При некоторых ограничениях степенного роста на функцию f существование и единственность положительного решения задачи (1)-(2) было установлено в работе [1].

При построении решения нелинейных краевых задач численными методами применяются итерационные схемы, которые сходятся к положительному решению. Однако не всегда возможно корректное применение итерационных процессов в данном контексте в связи с наличием помимо положительного решения тривиального решения. Поэтому была предпринята попытка получения численного алгоритма, позволяющего построить положительное решение задачи (1)-(2) при наличии тривиального решения. С помощью преобразований Ц. На [2] был предложен и реализован численный механизм построения положительного решения рассматриваемой задачи, не являющимся итерационным. В ходе реализации данного алгоритма граничная задача сводится к задаче Коши, приближенное решение которой соответственно находится с применением устойчивого метода Рунге-Кутта 4-го порядка точности.

Список литературы

1. Абдурагимов Г. Э. О существовании и единственности положительного решения краевой задачи для одного нелинейного функционально-дифференциального уравнения второго порядка // Известия вузов. Математика. 2020. № 12. С. 3-8.

2. На Ц. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач. М.: Мир, 1982, 296 с.

ON THE QUESTION OF THE SOLVABILITY OF THE BOUNDARY VALUE PROBLEM FOR ONE NONLINEAR FUNCTION EQUATION OF THE SECOND-ORDER

G.E. Abduragimov

Dagestan State University

Abstract: boundary problems for nonlinear functional-differential equations are found in many applications of science and technology. Questions of studying positive solutions for these problems have recently been fairly well studied and a fairly large number of works by Russian and foreign mathematicians are devoted to them. Within the framework of this topic, in this paper, a non-iterative algorithm for constructing an approximate positive solution to a boundary value problem for a single second-order nonlinear functional-differential equation is proposed.

Keywords: boundary value problem, positive solutions.

УДК 546.25, 538.911, 538.915

ОПТИМАЛЬНАЯ СТРАТЕГИЯ ПОИСКА СТАБИЛЬНЫХ ИЗОМЕРОВ МЕТАЛЛ-ДОПИРОВАННЫХ КЛАСТЕРОВ НА ОСНОВЕ ОЛОВА МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Н.А. Борщ[1], Н.С. Переславцева[1], С.И. Курганский[2]

[1]Воронежский государственный технический университет
[2]Воронежский государственный университет
n.a.borshch@ya.ru

Аннотация: представлены результаты компьютерного эксперимента в рамках теории функционала плотности по расчетам атомной структуры и электронного спектра стабильных изомеров кластера $TiSn_{15}^{-}$. Описаны механизмы формирования различных изомеров кластера, позволяющие оптимизировать прогностические исследования по поиску стабильных структур кластеров олова. Сравниваются результаты расчетов с использованием функционалов B3LYP, B3PW91 и PBE в комбинации с базисом DGDZVP. Проведен анализ влияния функционала на результаты оптимизационных расчетов атомной структуры. Предложена оптимальная стратегия компьютерного эксперимента по моделированию пространственной структуры кластеров на основе олова, подтвержденная сопоставлением с известными экспериментальными данными.

Ключевые слова: теория функционала плотности, атомные кластеры, электронный спектр, атомная структура.

Наноматериалы на основе олова рассматриваются как перспективные функциональные материалы. Например, наноклеточные кристаллы на основе олова обладают уникальными термоэлектрическими свойствами [1], одномерные наноструктуры на основе олова (наностержни, нанопроволоки) могут быть использованы для разработки газовых высокочувствительных сенсоров [2], наночастицы олова используются для конструирования новых анодных материалов для литий-ионных аккумуляторов [3]. Очевидно, что работы по синтезу таких материалов невозможны без достоверной информации о структуре и свойствах элементарных блоков, из которых эти материалы конструируются – атомных кластеров.

Экспериментальное исследование пространственной структуры и свойств атомных кластеров в настоящее время технически затруднительно, поэтому особое значение приобретает компьютерный эксперимент. Наиболее эффективным методом в таких экспериментах является теория функционала плотности (DFT), однако проблемой является часто встречающаяся зависимость результатов расчетов от используемого DFT-функционала [4]. Поэтому важна возможность сравнить результаты расчета с соответствующими экспериментальными данными. Для достоверного определения пространственной структуры можно комбинировать компьютерный DFT-эксперимент с методом фотоэлектронной спектроскопии [5, 6]. Известно достаточное количество работ, в которых представлены фотоэлектронные спектры различных кластеров, в том числе кластеров олова, например, [7]. Сопоставление рассчитанного электронного спектра каждого из наиболее стабильных изомеров кластера с его фотоэлектронным

спектром позволяет определить, какие именно структуры были детектированы экспериментально, поскольку профиль электронного спектра значительно зависит от особенностей атомной структуры кластера.

В данной работе представлены результаты оптимизационных расчетов атомной структуры стабильных изомеров кластера $TiSn_{15}^{-}$. Для этого кластера известны данные по исследованиям электронного спектра методом фотоэлектронной спектроскопии [7], что позволяет сопоставить результаты компьютерного эксперимента и эксперимента прикладного, тем самым оценив адекватность расчетов. Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности с использованием трех функционалов – B3LYP [8, 9], B3PW91 [10] и PBE [11, 12] в комбинации с базисом DGDZVP [13, 14]. Это дало возможность проанализировать влияние выбора DFT-функционала на результаты оптимизационных расчетов атомной структуры, а сопоставление рассчитанных данных с известными экспериментальными [7] позволило предложить оптимальную стратегию компьютерного эксперимента по моделированию пространственной структуры кластеров на основе олова.

Для каждой оптимизированной структуры получались собственные значения энергии каждой молекулярной орбитали, т.е. энергетический спектр, в котором каждую молекулярную орбиталь можно представить в виде уровня. Теоретические спектры получались после того, как каждый энергетический уровень заменялся гауссовым распределением с полушириной 0.12 эВ и интенсивности всех распределений при каждом значении энергии складывались. Совмещение рассчитанных и экспериментальных спектров по энергетической шкале проводилось по положению верхней заполненной орбитали.

Средняя энергия связи E_b вычислялась по формуле

$$E_b = \frac{15E(\mathrm{Sn}) + E^{-}(\mathrm{Ti}) - E\left(\mathrm{TiSn}_{15}^{-}\right)}{16},$$

где $E(\mathrm{Sn})$ и $E^{-}(\mathrm{Ti})$ – полные энергии свободного атома олова и аниона титана, соответственно, $E\left(\mathrm{TiSn}_{15}^{-}\right)$ – полная энергия кластера.

Для поиска наиболее стабильных изомеров кластера $TiSn_{15}^{-}$ использовался подход, аналогичный предложенному Уэйдом для боранов и карборанов и модифицированному затем Мингосом для других соединений [15, 16]. Согласно концепции Уэйда-Мингоса, стабильные кластеры, состоящие из атомов с четырьмя валентными электронами, имеют структуру так называемых *closo*-многогранников, если число валентных электронов в кластере равно $4n+2$ (n – число вершин в кластере), *nido*-многогранников, если в кластере $4n+4$ валентных электрона и *arachno*-многогранников, если валентных электронов $4n+6$. Многогранники *nido*-типа получаются из *closo*-многогранников после удаления одной из вершин, а *arachno*-многогранники – после удаления двух вершин из *closo*-структуры. Титан-допированные кластеры на основе олова имеют суммарно $4n+2$ валентных электрона в дикатионном зарядовом состоянии, то есть кластеры $TiSn_{16}^{2+}$ и $TiSn_{17}^{2+}$ является *closo*-кластерами. Можно предположить, что удалив одну вершину в кластере $TiSn_{16}^{2+}$ можно получить *nido*-структуры ней-

трального кластера $TiSn_{15}$, а удалив две вершины в кластере $TiSn_{17}^{2+}$ можно получить *arachno*-структуры дианионного кластера $TiSn_{15}^{2-}$.

На рисунке показаны наиболее стабильные *closo*-структуры кластеров $TiSn_{16}^{2+}$ и $TiSn_{17}^{2+}$. Структура кластера $TiSn_{16}^{2+}$ – многогранник с треугольными гранями, центрированный атомом титана (изомер 16-DELTA-*closo*). Кластер $TiSn_{17}^{2+}$ имеет два стабильных изомера. Изомер 17-DELTA-*closo* – многогранник с преимущественно треугольными гранями. Изомер 17-PR-*closo* имеет в основе структуры сильно искаженную шестиугольную призму.

Для кластера $TiSn_{15}^{-}$ получены пять стабильных изомеров (см. рисунок). Изомеры 15-ARH1 и 15-ARH2 можно рассматривать как *arachno*-многогранники Уэйда-Мингоса [15, 16], которые получаются удалением двух вершин из дельтаэдрического *closo*-многогранника 17-DELTA-*closo* с семнадцатью вершинами. Изомер 15-NIDO представляет собой *nido*-многогранник – он получается удалением одной вершины из дельтаэдрического *closo*-многогранника 16-DELTA-*closo* с шестнадцатью вершинами. Эти изомеры можно отнести к дельтаэдрическим структурам, поскольку они представляют собой многогранники с преимущественно треугольными гранями. Атомы олова в этих структурах образуют по четыре или пять связей Sn-Sn.

Еще два изомера кластера $TiSn_{15}^{-}$ имеют призматическую структуру, которая может быть описана как сильно искаженная шестиугольная призма с атомом титана внутри и с тремя дополнительными атомами олова. В изомере 15-PR1 два дополнительных атома олова формируют связи с одним основанием призмы, а один – с противоположным. В изомере 15-PR2 все три дополнительных атома расположены над одним основанием призмы. Большинство атомов олова в изомерах 15-PR1 и 15-PR2 формируют по три связи Sn-Sn, поэтому их можно отнести к трехсвязным структурам. Эти два изомера формируются удалением двух атомов олова из изомера 17-PR-*closo* кластера $TiSn_{17}^{2+}$.

Количество валентных электронов в анионном кластере $TiSn_{15}^{-}$ не удовлетворяет ни одному из правил Уэйда-Мингоса в 4n-модификации [16], однако находится ровно между значениями $4n+4$ и $4n+6$. Оказалось, что при формировании стабильных изомеров кластера $TiSn_{15}^{-}$ работают оба эти правила – часть основных изомеров имеет структуру *arachno*-многогранников, что характерно для систем с 4n+6 валентными электронами, а часть – структуру *nido*-многогранников, как системы с числом валентных электронов, равным $4n+4$.

По результатам всех расчетов наибольшая средняя энергия связи соответствует изомеру 15-ARH1 (см. таблицу). Однако, по результатам расчета с использованием B3LYP-функционала изомер 15-ARH1 можно назвать основным только формально, поскольку средние энергии связи в изомерах 15-ARH2, 15-NIDO и 15-PR1 лишь незначительно меньше. Поэтому, исходя из результатов B3LYP-расчета можно считать вероятность формирования каждого из этих трех изомеров практически одинаковой. По результатам B3PW91- и PBE-расчетов энергетический отрыв изомера 15-ARH1 от остальных достаточно велик, и вероятность формирования всех остальных изомеров значительно меньше.

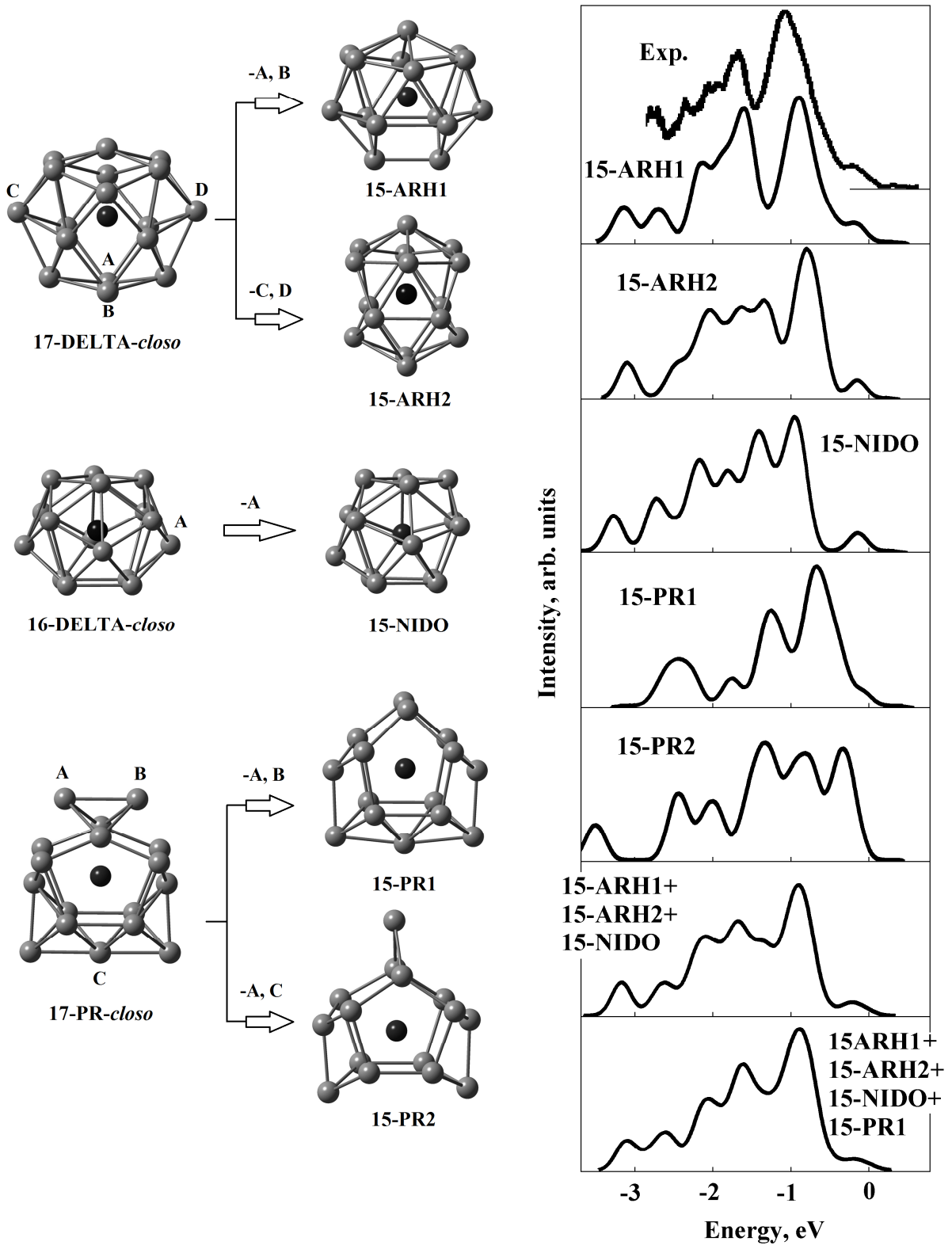


Схема формирования стабильных изомеров кластера $TiSn_{15}^{-}$, сопоставление рассчитанных электронных спектров стабильных изомеров кластера $TiSn_{15}^{-}$ с экспериментальным фотоэлектронным спектром [7]

Серым цветом показаны атомы олова, черным – атом титана. Связи Ti-Sn не показаны для упрощения рисунка.

Разницы в средних энергиях связи (эВ/атом) в кластере $TiSn_{15}^{-}$ между основным изомером и остальными для всех трех расчетов

Изомер	B3LYP	B3PW91	PBE
ARH1	**0.0000**	**0.0000**	**0.0000**
ARH2	0.0135	0.0179	0.0155
NIDO	0.0093	0.0201	0.0205
PR1	0.0130	0.0329	0.0425
PR2	0.0615	0.1015	0.1159

Сопоставление рассчитанных электронных спектров каждого изомера кластера с фотоэлектронным спектром [7] показывает, что рассчитанные спектры каждого из изомеров 15-ARH1, 15-ARH2, 15-NIDO и 15-PR1 хорошо согласуются с экспериментальным, а профиль их суммарного спектра практически идеально совпадает с профилем фотоэлектронного спектра (см. рисунок). Такое совпадение позволяет утверждать, что экспериментальный фотоэлектронный спектр [7] был получен в результате детектирования в эксперименте именно нескольких изомеров кластера $TiSn_{15}^{-}$. Суммарный спектр только дельтаэдрических изомеров, без вклада спектра изомера 15-PR1, также показывает хорошее согласие с экспериментальным, поэтому использование для оптимизации структуры функционалов B3PW91 или PBE могло привести к ошибочным выводам о невозможности или малой вероятности существования такого призматического изомера.

Результаты оптимизационных расчетов атомной структуры кластера $TiSn_{15}^{-}$ значительно зависят от используемого функционала. Наилучшее согласие с экспериментальными данными показывают результаты, полученные с использованием функционала B3LYP. В оптимизационных расчетах с использованием B3PW91- или PBE-функционала средняя энергия связи в трехсвязной структуре (изомер 15-PR1) оказалась радикально занижена относительно энергий связи в дельтаэдрических структурах. Чтобы исключить эти ошибки, наиболее эффективной стратегией поиска основных изомеров кластеров является использование всех трех функционалов, а интерпретация результатов должна проводиться с учетом их особенностей, описанных выше.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 21-53-12042. Для представленных расчетов были использованы вычислительные ресурсы Суперкомпьютерного центра Воронежского государственного университета. Расчеты выполнены с помощью программного пакета Gaussian 09 [17], визуализация структур выполнена в программе GaussView [17].

Список литературы

1. Zhu C., Yang G., Li H., Du D., Lin Y. Electrochemical Sensors and Biosensors Based on Nanomaterials and Nanostructures // Anal. Chem. 2015. V. 87. P. 230-249.

2. Jena P., Sun Q. Super Atomic Clusters: Design Rules and Potential for Building Blocks of Materials // Chem. Rev. 2018. V. 118. №11. P. 5755-5870.

3. Shi S-P., Zhao X-F., Liu X-Y. Lei D., Yan M., Jiang G. Structural and Electronic Properties in Titanium-Doped Stannum Clusters: Comparison with Their Anions and Cations // J. Clust. Sci. 2018. V. 29. P. 909-919.

4. Борщ Н.А., Курганский С.И. Влияние переходных металлов IIIB-группы на формирование замкнутых германиевых кластеров: компьютерный эксперимент в рамках теории функционала плотности // Конденсированные среды и межфазные границы. 2019. Т. 21. № 2. С. 182-190.

5. Борщ, Н.А., Курганский С.И. Атомная структура и электронные свойства анионных германий-циркониевых кластеров // Неорганические материалы. 2018. Т. 54. № 1. С. 3-10.

6. Borshch N., Kurganskii S. Geometric structure, electron-energy spectrum, and growth of anionic scandium-silicon clusters $ScSi_n^-$ (n = 6-20) // J. Appl. Phys. 2014. V. 116. №12. P. 124302.

7. Atobe J., Koyasu K., Furuse S., Nakajima A. Anion photoelectron spectroscopy of germanium and tin clusters containing a transition- or lanthanide-metal atom; MGen− (n = 8–20) and MSnn− (n = 15–17) (M = Sc–V, Y–Nb, and Lu–Ta) // Phys. Chem. Chem. Phys. 2012. V. 14. P. 9403-9410.

8. Becke A.D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior // Phys. Rev. A. 1988. V. 38. P. 3098.

9. Lee C., Yang W., Parr R.G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 785.

10. Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 5648.

11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3865.

12. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 1396(E).

13. Godbout N., Salahub D.R., Andzelm J., Wimmer E. Optimization of Gaussian-type basis sets for local spin density functional calculations. Part I. Boron through neon, optimization technique and validation // Can. J. Chem. 1992. V. 70. P. 560-571.

14. Sosa C., Andzelm J., Elkin B.C., Wimmer E., Dobbs K.D., Dixon D.A. A Local Density Functional Study of the Structure and Vibrational Frequencies of Molecular Transition-Metal Compounds // J. Phys. Chem. 1992. V. 96. P. 6630-6636.

15. Wade K. The structural significance of the number of skeletal bonding electron-pairs in carboranes, the higher boranes and borane anions, and various transition-metal carbonyl cluster compounds // J. Chem. Soc. D. 1971. P. 792.

16. Mingos D.A. A General Theory for Cluster and Ring Compounds of the Main Group and Transition Elements // Nature Physical Science. 1972. V. 236. P. 99.

17. Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch et al, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.

OPTIMAL STRATEGY FOR SEARCHING FOR STABLE ISOMERS OF METAL-DOPED TIN CLUSTERS BASED BY COMPUTER SIMULATION METHODS

N.A. Borshch[1], N.S. Pereslavtseva[1], S.I. Kurganskii[2]

[1]Voronezh State Technical University
[2]Voronezh State University

Abstract: the results of a computer DFT-experiment on calculations of the atomic structure and electronic spectrum of stable isomers of the $TiSn_{15}^-$ cluster are presented. The mechanisms of formation of various cluster isomers are described, which make it possible to optimize prognostic studies in the search for stable structures of tin clusters. The results of calculations using the B3LYP, B3PW91 and PBE functionals in combination with the DGDZVP basis are compared. The influence of the functional on the results of optimization calculations of the atomic structure is analyzed. An optimal strategy for a computer experiment on modeling the spatial structure of tin-based clusters is proposed, which is confirmed by comparison with known experimental data.

Keywords: density functional theory, atomic clusters, electronic spectrum, atomic structure.

УДК 539.213

ПЛАСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА $Cu_{57}Zr_{43}$ В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОГО СЖАТИЯ

В.В. Ожерельев

Воронежский государственный технический университет
ozher@mail.ru

Аннотация: методом молекулярной динамики проведено моделирование деформации металлического стекла $Cu_{57}Zr_{43}$ в условиях одноосного сжатия. С использованием статистко-геометрического анализа на основе построения многогранников Вороного изучена эволюция атомной структуры в процессе распространения полосы сдвига.

Ключевые слова: металлическое стекло, моделирование, молекулярная динамика, пластичность, деформация, полоса сдвига, многогранник Вороного.

В настоящей работе с целью изучения механизмов пластической деформации металлических стекол (МС) выполнено компьютерное молекулярно-динамическое моделирование эволюции атомной структуры МС $Cu_{57}Zr_{43}$ в условиях одноосного сжатия.

Модель исходного МС была получена в результате охлаждения модели расплава со скоростью 2.2×10^{12} К/с. Общее количество атомов составляло 5×10^{5}, расчетная ячейка представляла собой прямоугольный параллелепипед размерами L_x = 5.967 нм, L_y = 2.387 нм и L_z = 4.764 нм (рис. 1). Периодические условия были наложены только в направлении оси z. Взаимодействие между атомами рассчитывалось на основе многочастичного потенциала из работы [1].

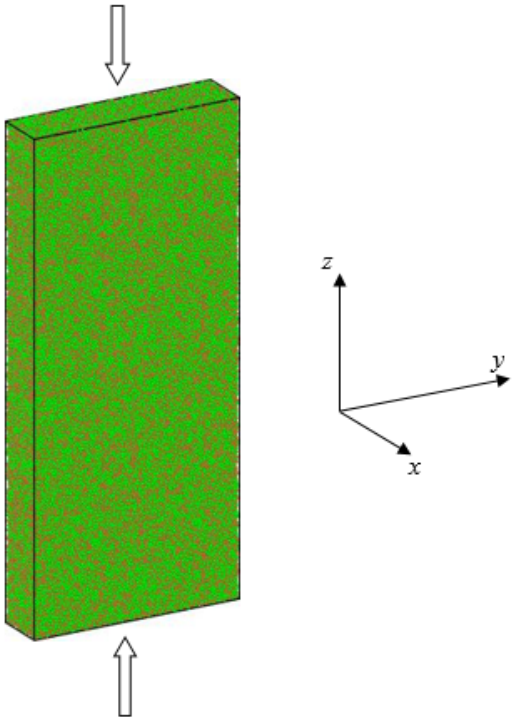


Рис. 1. Изображение модели металлического стекла $Cu_{57}Zr_{43}$

Численное интегрирование уравнений движения частиц осуществлялось по скоростному алгоритму Верле с шагом по времени 1.5 фс, для термостатирования системы использовался метод Берендсена [2].

Деформация модели осуществлялась при путем сжатия по оси z, средняя скорость деформации составляла 6.7×10^{7} $с^{-1}$. В процессе деформации поддерживалась постоянная температура 50 К. После каждого временного шага выполнялся расчет макроскопического напряжения путем усреднения атомных напряжений [3]. На рис. 2 показаны зависимости напряжения σ и средней потенциальной энергии атома от величины деформации ε. Главная особенность этих зависимостей – резкий спад при ε ≈ 6 %: в интервале деформации от 6.0 до 6.4 % величина напряжения уменьшилась от 4.6 до 2.9 ГПа. Такой характер деформационной кривой, как известно, связан с разупрочнением МС в локальных полосах сдвиговой деформации [4].

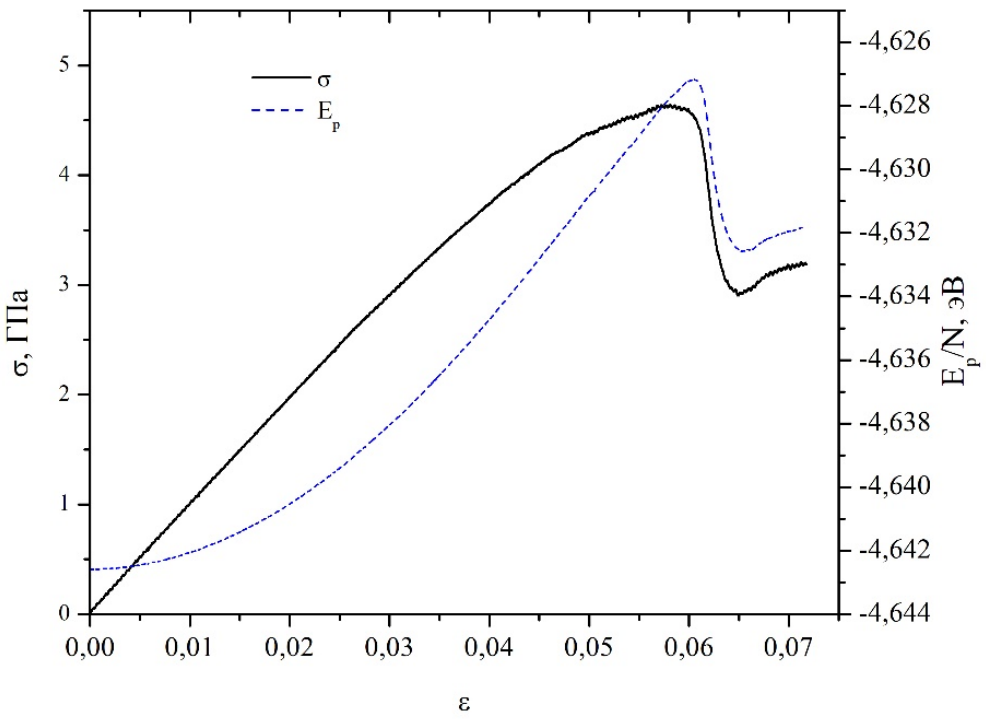
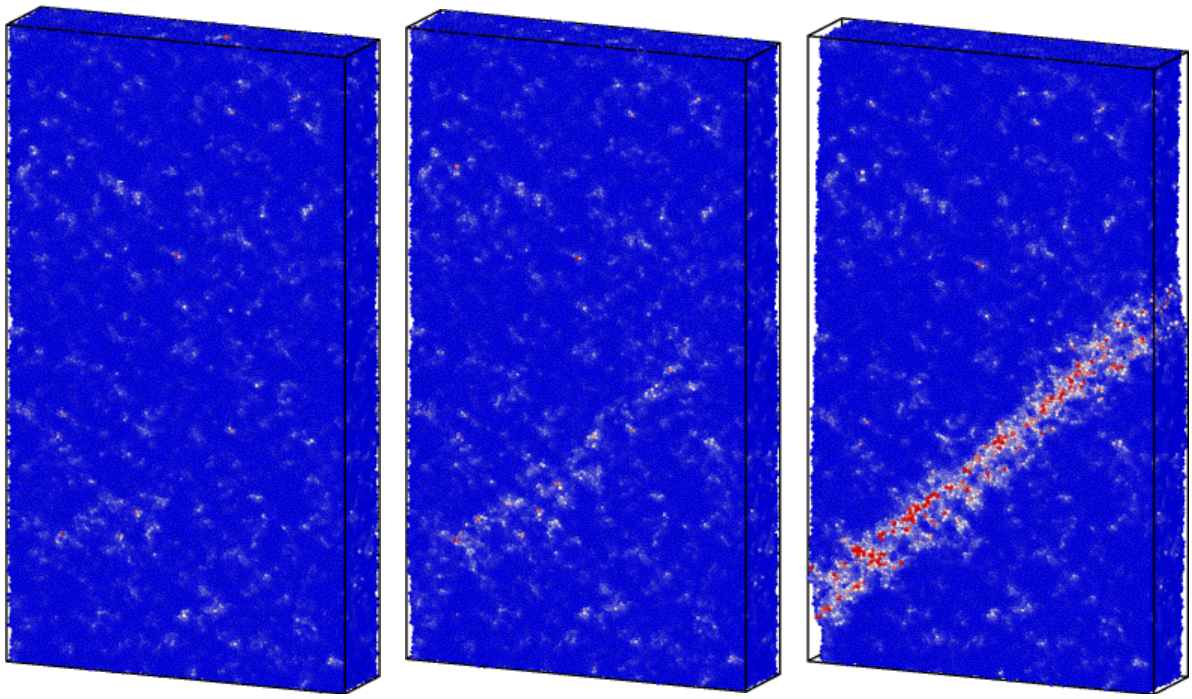


Рис. 2. Зависимости напряжения и потенциальной энергии от степени деформации

Для выявления участков, характеризуемых наибольшей пластической деформацией, выполнялся расчет и визуализация величины квадратичных неаффинных смещений $D^2_{\min}$ [5], которые произошли с момента начала деформирования. На рис. 3 показаны изображения модели при различной величине деформации, при этом цвет атома указывает величину $D^2_{\min}$. Из рис. 3 видно, что при ε > 6 % происходит локализация пластической деформации в узкую полосу сдвига, направленную под углом около 45° к направлению сжатия. Начало образования макроскопической полосы сдвига совпадает по времени с резким уменьшением величины напряжения и потенциальной энергии. После того, как

полоса сдвига окончательно сформировалась (соединила две противоположные грани образца), дальнейшее пластическое течение происходит путем скольжения одной части образца относительно другой его части вдоль этой полосы.



а б в

Рис. 3. Изображения модели МС $Cu_{57}Zr_{43}$ при степени деформации 6,0 % (а), 6,2 % (б) и 6,4 % (в)

Для анализа закономерностей перестройки атомной структуры в процессе сжатия после каждого шага деформации определялась доля (в % от общего числа атомов) многогранников Вороного (МВ) с различными топологическими индексами.

На рис. 4 показаны зависимости доли десяти наиболее часто встречающихся многогранников от степени деформации, в расчете участвовали только атомы, расположенные в области распространения полосы сдвига.

Рис. 4 показывает, что в интервале деформаций 5,9 – 6,3 % (соответствующем спаду на деформационной кривой) происходит резкое снижение доли некоторых из основных многогранников, в частности (0-2-8-2), (0-2-8-5), (0-1-10-5), (0-0-12-0), причем наиболее сильно уменьшается доля многогранников (0-0-12-0), соответствующих икосаэдрическим атомным конфигурациям.

Характер зависимостей количества МВ различного типа от степени деформации свидетельствует об определяющей доли икосаэдрических атомных конфигураций в процессе образования полосы сдвига. Пластическая деформация сосредотачивается в основном в «рыхлых» областях стекла, в которых преобладают МВ с большим количеством граней (атомные конфигурации с большими координационными числами), а доля плотноупакованных икосаэдров не-

велика. Процесс образования полосы сдвига, в которой локализуется пластическая деформация МС, сопровождается разрушением икосаэдров, расположенных в области распространения этой полосы.

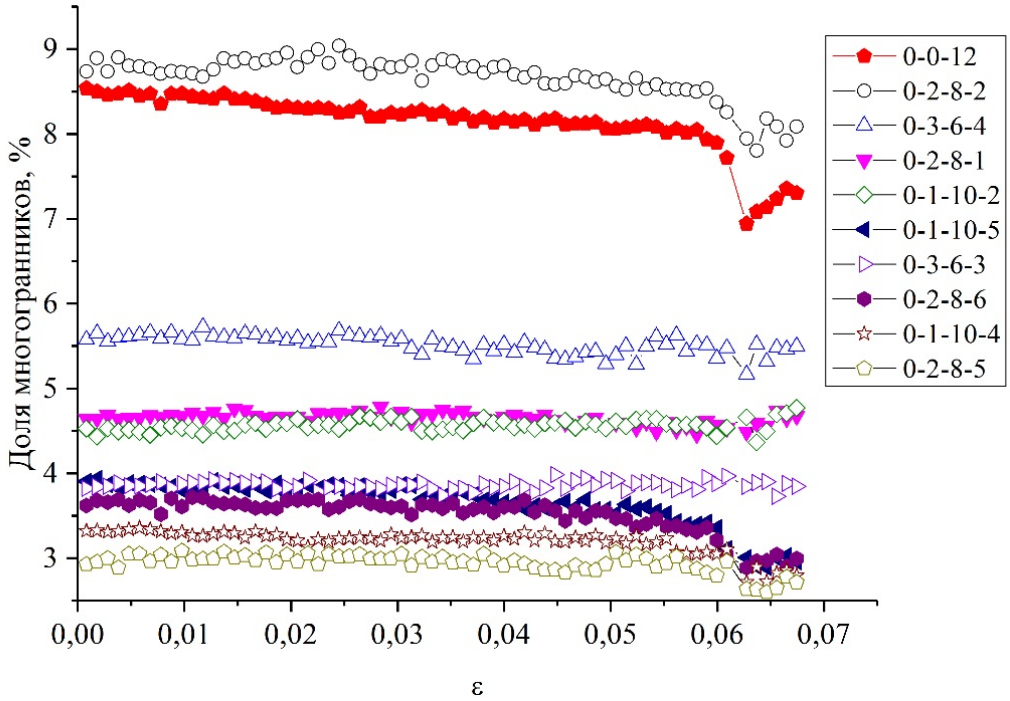


Рис. 4. Зависимость доли различных типов многогранников Вороного от величины деформации (в области распространения полосы сдвига)

Список литературы

1. Mendelev M.I., Kramer M.J., Ott R.T. et al. // Phil. Mag. – 2009. – V. 89. – № 11. – P. 967-987.

2. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F. et al. // J. Chem. Phys. – 1984. – V. 81. – № 8. – P. 3684 – 3690.

3. Egami T. // Progress in Material Science. – 2011. – V. 56. – № 6. – P. 637 – 653.

4. Takeuchi S., Edagawa K. // Progress in Materials Science. – 2011. V. 56. – №. 6. – P. 785–816.

5. Falk M.L., Langer J.S. // Phys. Rev. E. – 1998. – V. 57. – № 6. – P. 7192-7205.

PLASTIC PROPERTIES OF A MODEL OF METALLIC GLASS $Cu_{57}Zr_{43}$ UNDER UNIAXIAL COMPRESSION

V.V. Ozherelyev

Voronezh State Technical University

Abstract: the molecular dynamics method was used to simulate the deformation of $Cu_{57}Zr_{43}$ metallic glass under uniaxial compression. Using statistical-geometric analysis based on the construction of Voronoi polyhedra, the processes of evolution of the atomic structure in the region of propagation of the shear band are studied.

Keywords: metallic glass, modeling, molecular dynamics, plasticity, deformation, shear band, Voronoi polyhedron.

УДК. 517.9

ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕНИЯ ОДНОГО КЛАССА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

В.С. Купцов, А.А. Катрахова, Д.И. Витковский

Воронежский государственный технический университет
Vckuptsov@rambler.ru

Аннотация: найдены все области решения одного дифференциального уравнения третьего порядка с переменными коэффициентами и среди них выделены те, что соответствуют заданному значению устойчивости.

Ключевые слова: дифференциальное уравнение, устойчивость, область значений, характеристическое уравнения, интервал.

Пусть имеется дифференциальное уравнение

$$\frac{d^3y(t)}{dt^3}+C\frac{d^2y(t)}{dt^2}+D\frac{dy(t)}{dt}+y(t)=0,$$

требуется для коэффициентов C и D найти области устойчивости решения $y(t)$, выделив в них области с устойчивыми решениями t.

При исследовании на устойчивость решения $y(t)$ данного дифференциального уравнения, которому соответствует характеристическое уравнение $p^3+Cp^2+Dp+1=0$, обозначим его корни p_1, p_2, p_3. Согласно устойчивости по Ляпунову [1, 2], решение устойчиво, если во всех корнях p_1, p_2, p_3 имеются отрицательные вещественные части (т.е. они будут находиться слева от мнимой оси комплексной плоскости $p=\sigma+i\omega$). Для нашего уравнения вычислены варианты (см. рис. 1):

1) все корни $-a_1$; $-a_2$; $-a_3$ вещественны;

2) два корня комплексные и один вещественный: $-a_1$; $-a_2\pm\beta i$, и $a_1<a_2$;

3) два корня комплексные и один вещественный: $-a_1$; $-a_2\pm\beta i$, и $a_1>a_2$;

4) комплексные корни с положительной вещественной частью: $-a_1$; $a_2\pm\beta i$ (неустойчивое решение).

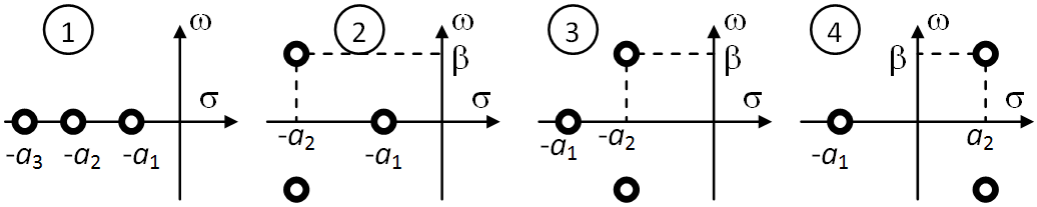


Рис. 1. Варианты расположения корней с устойчивыми (1, 2, 3) и неустойчивым (4) решениями

Для определения в комплексной плоскости областей вариантов 1, 2, 3 и 4 определяются расположения корней для границ 1-2, 1-3, 2-3, 3-4 (рис. 2).

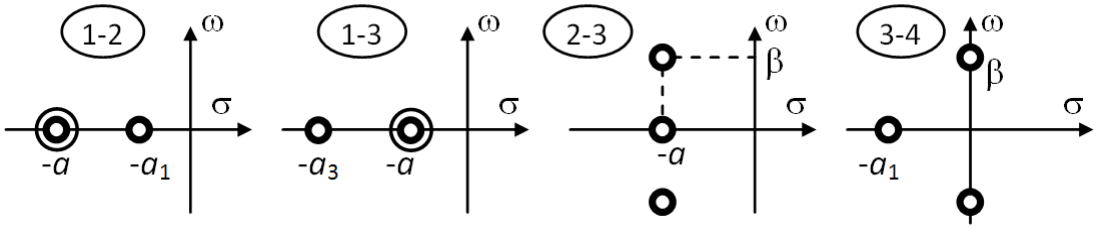


Рис. 2. Варианты расположения корней, соответствующие границам искомых областей

Связь корней с коэффициентами C и D согласно формуле Виета:

$$C=-(p_1+p_2+p_3);\ D=(p_1p_2+p_1p_3+p_2p_3);\ T=-p_1p_2p_3.$$

Если p_1, p_2, p_3 вычислены для нашего уравнения, то получим уравнения для этих границ в комплексной плоскости в параметрическом виде (рис. 2):

Для границы 1-2 имеем:

$$p_1=-a_1,\ p_2=p_3=-a,\ a\geq a_1,\ C=a_1+2a,\ D=2a_1a+a^2,\ T=a_1a^2,$$

где $a\in[1;\infty)$.

Для границы 1-3:

$$p_1=p_2=-a,\ p_3=-a_3,\ a\leq a_3,\ C=a_3+2a,\ D=2a_3a+a^2,\ T=a_3a^2,$$

где $a\in(0{,}3;\ 1]$.

Для границы 2-3:

$$p_1=-a,\ p_{2,3}=-a\pm i\beta,\ C=3a,\ D=3a^2+\beta^2,\ T=a(a^2+\beta^2),$$

где $a\in(0{,}3;\ 1]$.

Для границы 3-4:

$$p_1=-a_1,\ p_{2,3}=\pm i\beta,\ C=a_1,\ D=\beta^2,\ T=a_1\beta^2,$$

где $\beta\in(0,\infty)$.

Программа расчета комплексной плоскости на области с различными корнями уравнения: $p^3+Cp^2+Dp+T=0$ приведена на рис. 3.

В программе A12, B12, A13, B13, A23, B23, A34, B34 обозначены коэффициенты C и D и границы 1-2, 1-3, 2-3, 3-4. Величины a, a1, b, b3 соответствуют величинам a, a_1, a_2, a_3. Величины b, c, d, d1 соответствуют величинам a, β, β, a_1. Величины Aust и Bust введены для указания границы, соответствующей устойчивости $\xi=-0.3$.

Построив полученные границы в MathCAD, получим график (рис. 4), на котором области 1, 2 и 3 соответствуют устойчивым решениям дифференциального уравнения, обладающим степенью устойчивости $\xi=-0.3$. Нумерация областей совпадает с принятой на рис. 1. Области 1, 2, 3 соответствуют устойчивым решениям дифференциального уравнения, а остальная область – неустойчивому решению.

$a := 1, 1.01 .. 4 \qquad a1(a) := \frac{1}{a^2}$

$A12(a) := a1(a) + 2a \qquad B12(a) := 2a1(a)\cdot a + a^2$

$b := 0.3, 0.4 .. 1 \qquad b3(b) := \frac{1}{b^2}$

$A13(b) := b3(b) + 2\cdot b \qquad B13(b) := 2\cdot b3(b)\cdot b + b^2$

$b := 0.3, 0.4 .. 1 \qquad c(b) := \sqrt{-b^2 + \frac{1}{b}}$

$A23(b) := 3\cdot b \qquad B23(b) := 3\cdot b^2 + c(b)^2$

$d := 0.3, 0.31 .. 4 \qquad d1(d) := \frac{1}{d^2}$

$A34(d) := a1(d) \qquad B34(d) := d^2$

$Aust := 0.9 \qquad Bust := 0, 1 .. 10$

Рис. 3. Программа расчета комплексной плоскости

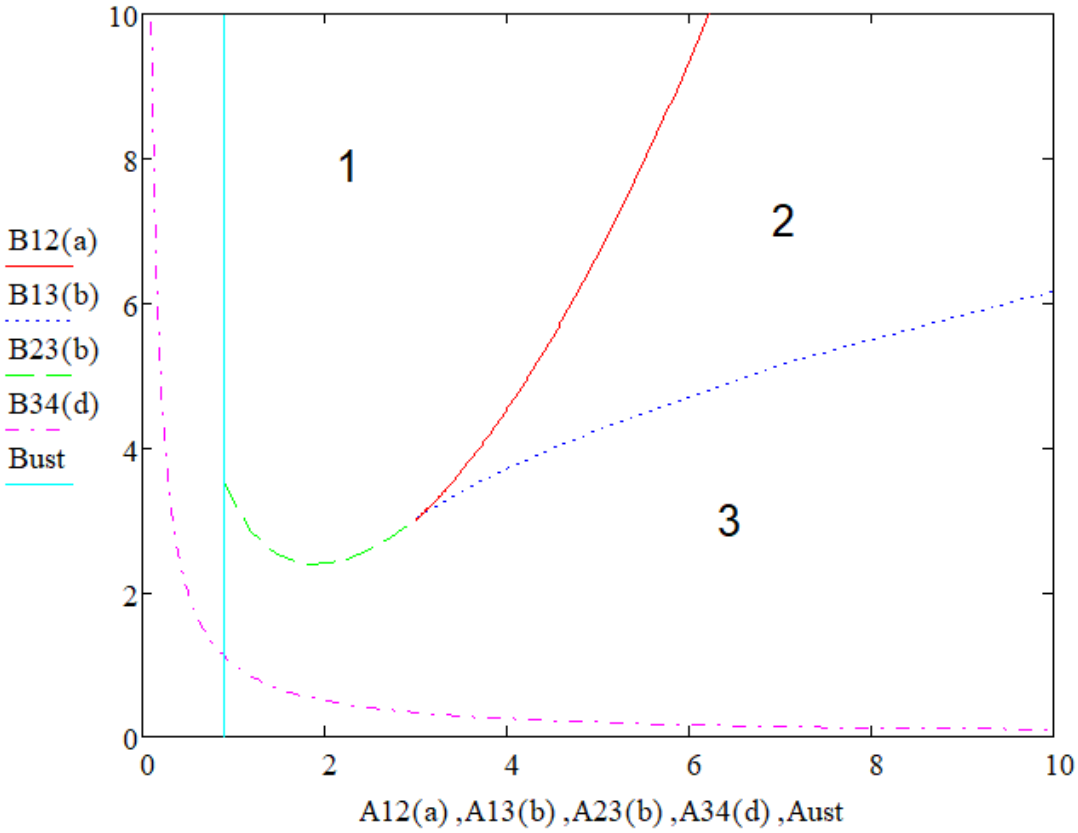


Рис. 4

Следует отметить, что представленный алгоритм решения может быть реализован на любом формальном языке. Математический пакет MathCAD в данном случае выбран из-за его удобного интерфейса.

Список литературы

1. Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. – 472 с.

2. Понтрягин Л. С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Наука, 2019. – 336 с.

PARAMETRIC STUDY OF THE STABILITY OF THE SOLUTION OF ONE CLASS OF DIFFERENTIAL EQUATIONS

A.A. Katrachowa, W.S. Kuptsov, D.I. Vitkovskiy

Voronezh State Technical University

Abstract: all domains of solution of one differential equation of the third order with variable coefficients are found, and among them those are selected that correspond to a given stability value.

Keywords: differential equation, stability, area of knowledge, characteristic equation, interval.

УДК 519.6

ОБ АППРОКСИМАЦИИ РЕШЕНИЙ ОДНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ МЕТОДОМ ГАЛЕРКИНА В СИСТЕМЕ MAPLE

А.А. Катрахова, В.С. Купцов, Д.А. Несветаев

Воронежский государственный технический университет
aik121.nyashkin@mail.ru

Аннотация: в работе произведено построение алгоритма аппроксимации решений одной краевой задачи методом Галеркина с использованием взвешенных невязок в системе Maple.

Ключевые слова: метод Галеркина, аппроксимация, невязка, система Maple.

Известно, что основная идея проекционных методов основана на свойстве гильбертовых функциональных пространств, согласно которому, если проекции некоторой функции f на систему линейно независимых функций $\{W_i\}$ равны нулю, то такая функция $f \equiv 0$. За такую функцию, которая должна обращаться в ноль, принимают невязку – разность между левой и правой частью дифференциального уравнения и граничного условия (соответственно R_Ω и R_Γ) [1]. Поскольку в функциональном анализе проекция f на функцию g определяется как скалярное произведение (f, g), то система уравнений имеет вид

$$(R_\Omega, W_i) = 0, \quad i = 1, \ldots, m \tag{1}$$

или

$$(R_\Omega, W_i) + (R_\Gamma, \overline{W}_i)\big|_\Gamma = 0,$$

в зависимости от того, учитывает ли аппроксимация неизвестной функции граничные условия или не учитывает.

Решим краевую задачу вида

$$\frac{d}{dx}(x^2 \frac{d\varphi}{dx}) - 2\varphi = -1 - \ln(x^2); \;\; \varphi(1) = 0, \;\; \varphi(2) = 0 \tag{2}$$

методом Галеркина, включая в систему уравнений взвешенных невязок дополнительно невязки для левой и правой граничных точек. В соответствии с (2) получим

$$\left(\frac{d}{dx}(x^2\varphi') - 2\varphi + 1 + \ln\left(x^2\right), W_i\right) + (\varphi - 0, W_i^{(1)})\big|_{x=1} + (\varphi - 0, W_i^{(2)})\big|_{x=2} = 0,$$

или

$$\int_1^2 \left[\frac{d}{dx}\left(x^2 \frac{d\varphi_m}{dx}\right) - 2\varphi_m + 1 + \ln\left(x^2\right), W_i\right] W_i dx + \varphi_m(1) W_i^{(1)}(1) + \varphi_m(2) W_i^{(2)}(2) = 0.$$

В качестве аппроксимации возьмем линейную комбинацию степенных функций

$$\varphi_5(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \alpha_4 x^3 + \alpha_5 x^4$$

и составим уравнения взвешенных невязок, используя одинаковые (с точностью до знака) весовые функции W_i, $W_i^{(1)}$ и $W_i^{(2)}$: 1, x, x^2, x^3, x^4, x^5, x^6. Как видно, такой выбор означает галеркинскую аппроксимацию.

Решение в системе Maple имеет вид:

```
> restart;Digits:=25;
> m:=5; a:=vector(m); g:=vector(m);
> z:=x->(sum(a[j]*x^(j-1),j=1..m));
> R1:=diff(x^2*diff(z(x),x),x)-2*z(x)+1+ln(x^2);
> R2:=z(1);  R3:=z(2);
> W:=[1,x,x^2,x^3,x^4,x^5,x^6]; WL:=subs(x=1,W);
WR:=subs(x=2,W);
> for i from 1 to m do
g[i]:=int(R1*W[i],x=1..2)+R2*WL[i]+R3*WR[i];od;
> r:=solve({g[k]$k=1..m},{a[k]$k=1..m});
> r1:=evalf(r);
> phi:=unapply(subs(r1,z(x)),x);
>st:=dsolve({diff(x^2*diff(y(x),x),x)-2*y(x)=-1-ln(x^2),
y(1)=0,y(2)=0},y(x));
> u:=unapply(subs(st,y(x)),x);
> for t from 1 by 0.25 to 2 do
printf(`x=%g  z=%8.6g   u=%g\n`,t,phi(t),u(t)); od;
> plot([phi(x),u(x)],x=1..2,color=[red,blue], thickness=[2,2]);
> evalf(int((phi(x)-u(x))^2,x=1..2))^(1/2);
> phi(2);
> phi(1);
```

Полученные по методу Галерина результаты не очень хорошо согласуются с точным решением, что наглядно показано на рис. 1.

Норма ошибки и значения граничных условий для первого подхода представлены в табл. 1.

Таблица 1

	$m=5$	$m=6$	$m=7$
δ	0.0116862293391821321	0.0038161765933925908	0.0006107514390966464
$\varphi(1)$	0.0203828767743299912	-0.004511063457989965	0.0010694727441535564
$\varphi(2)$	-0.0156135089874137048	-0.0034199041480320406	-0.0008059686550709235

Другой подход – это вариант метода Галеркина, когда одно или два граничных условия удовлетворяются точно путем специального выбора аппроксимации.

Выберем аппроксимацию

$$\varphi_m(x) = (\alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \alpha_4 x^3 + \ldots + \alpha_m x^{m-1})(x-1),$$

автоматически удовлетворяющую граничному условию 1-го рода $\varphi(1)=0$. Тогда невязка **R2** обнулится и формально ее присутствие в уравнениях **g1, g2, ...g[i]** ни на что не влияет.

```
>z:=x->(sum(a[j]*x^(j-1),j=1..m)*(x-1));
```

Видно, что новое решение лучше согласуется с точным решением (рис. 2). Норма ошибки и значение функции $\varphi(x)$ в точке $x=2$ для второго подхода представлены в табл. 2.

Таблица 2

	$m=5$	$m=6$	$m=7$
δ	0.0073104106122673734	0.001774462137199523	0.0003990216117259399
$\varphi(2)$	-0.0114929929679912020	0.0017744621371995234	-0.0006273905821157224

Получили, что сходимость, хоть и не намного, но выше, чем в предыдущем подходе.

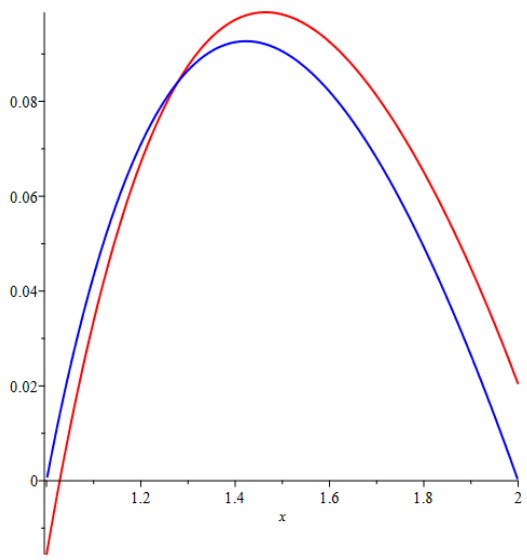


Рис. 1.

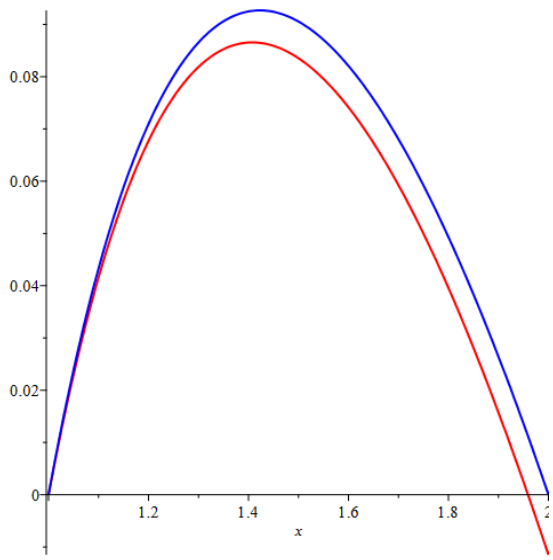


Рис. 2.

Отметим, что описанный вариант метода Галеркина, примененный выше к построению одноэлементных аппроксимаций решения [3] конкретной краевой задачи вида (2) может быть использован и в более общем случае.

Авторами рассмотрено дифференциальное уравнение вида

$$A(\varphi)=L\varphi+P \text{ в области } \Omega, \tag{3}$$

где L – соответствующий линейный оператор, а P не зависит от φ,

Решение уравнения (3) должно удовлетворять соответствующим краевым условиям, которые в общем случае имеют вид

$$B(\varphi)=S\varphi+r \text{ на } \Gamma, \tag{4}$$

где Γ – граница области Ω; S – соответствующий линейный оператор, r не зависит от φ.

Например, краевые условия Дирихле и Неймана [2] можно выразить в виде (4). Доказана оценка сходимости приближенного решения этой краевой задачи методом Галеркина с использованием двухэлементной аппроксимации сплайнами [4].

Список литературы

1. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989. – 608 с.
2. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация / под ред. Бахвалова Н. С. / М.: Мир, 1986. – 318 с.
3. Бахвалов Н. С., Лапин А. В., Чижонков Е. В. Численные методы в задачах и упражнениях / под ред. В. А. Садовничего. М.: Высшая школа, 2000. – 190 с.
4. Катрахова А. А. Оценка аппроксимаций по Галеркину решения некоторых краевых задач / в сб. Корректные краевые задачи для неклассических уравнений математической физики, Новосибирск. ИМСОАНСССР, 1980 г.

ABOUT APPROXIMATION OF SOLUTIONS OF A BOUNDARY VALUE PROBLEM BY THE GALERKIN METHOD

A.A. Katrachova, W.S. Kuptsov, D.A. Nesvetaev

Voronezh State Technical University

Abstract: in this paper, an algorithm for approximating solutions to one boundary value problem by the Galerkin method using weighted residuals in the Maple system was constructed.

Keywords: Galerkin method, approximation, residual, Maple system.

UDC 004.942: 519.17: 004.031.43: 519.876.5

MODELING OF THE FUNCTIONING OF THE SUBSYSTEM OF ASSISTANCE IN MAKING MANAGERIAL DECISIONS OF THE MANAGEMENT SYSTEM OF THE PREHOSPITAL MEDICAL CARE CENTER IN THE CONDITIONS OF THE SPREAD OF NEW STRAINS OF THE SARS-COV-2 VIRUS

I.M. Pashueva, S.M. Pasmurnov

Voronezh State Technical University
vapushka@ya.ru

Abstract: the article presents the results of modeling the functioning of the subsystem of assistance in making managerial decisions of the management system of the prehospital medical care center in the conditions of the spread of new strains of the SARS-CoV-2 virus implemented in the GPSS environment, the results of comparing the quantitative indicator, the average time of call service, the functioning of the subsystem of the management of the emergency medical center.

Keywords: simulation modeling, control system, GPSS.

The urgency of the problem of prompt provision of the necessary qualified, high-quality and timely pre-hospital care to the population is particularly acute during the period of active spread of new strains of the SARS-CoV-2 virus. The peculiarity of the work of the ambulance service during this period is characterized by an acute shortage of medical personnel, teams, an actively increasing number of calls, the appearance of a special type of ambulance teams specializing in servicing patients with suspected infection with the SARS-CoV-2 virus or with an already confirmed diagnosis. The situation is particularly acute in the quantity and quality of medical personnel: the deployment of operational additional centers for patients with a new infection implies the need to provide these centers with highly qualified personnel. At the same time, a situation is likely to arise in which medical workers themselves may need medical help, which can lead to a difficult-to-predict emergency reduction in the number of able-bodied personnel, due to the frequent mutation of the virus and its rapid spread [1, 2, 3]. The lifting of restrictions and the exit of the population from remote work to offices, the transition of educational institutions from a remote format to a full-time training format leads to an increase in traffic in the city, which in turn negatively affects the work of the pre-hospital medical care service and reduces the operational service rates of incoming calls. In this regard, there is a particularly urgent need to optimize the management of the pre-hospital medical care center in conditions of limited transport and human resources in the face of an increase in the number of incoming calls during the active spread of the SARS-CoV-2 virus.

The adaptation of the mathematical model, which is considered in more detail in previously published materials, is proposed [4, 5]. The proposed model of assistance in making operational management decisions of the management system of

the prehospital medical care center takes into account not only the typology of teams with the addition of a separate new type of teams in the subsystem of distribution of emergency medical teams working with patients with the SARS-CoV-2 virus, but also takes into account the composition and number of medical workers [6, 7].

As part of the simulation, statistical data from the functioning center of prehospital medical care in Voronezh were collected to build a simulation model. The simulation was performed in the SPSS software package in several stages, since the version for student use has a limit on the number of executable model statements. The average patient service time from the moment of the call to the moment of completion of his service was selected as the main performance indicators. As a result, the data obtained were aggregated and the following conclusions were made: the proposed model in terms of quantitative indicators of effectiveness was 5% compared with the indicators of the effectiveness of the functioning of the urban center of prehospital medical care.

Currently, the task of further increasing the performance indicators of the city emergency medical center in the conditions of the spread of the SARS-CoV-2 virus remains urgent.

References

1. Pashueva I. M. Features of modeling the subsystem of emergency medical service management in the GPSS environment / I. M. Pashueva, Bondarev A. V. // Physico-mathematical modeling of systems: materials of the XXI International seminar. Voronezh, 2020. pp. 177-179.

2. Pashueva I. M. Description and evaluation of the effectiveness of the subsystem for supporting managerial decision-making in conditions of uncertainty using a mathematical model based on risk assessment on the example of the work of the emergency medical center / I. M. Pashueva, S. M. Pasmurnov, A. V. Bondarev // Bulletin of the Voronezh State Technical University. - 2017. - Vol. 13. Issue. 6. pp.7-12.

3. Pashueva I. M. Modeling of operational management decision-making processes in the management system of centers of emergency medical services / I. M. Pashueva // Physico-mathematical modeling of systems: materials of the XIII International seminar. Voronezh, 2015. Part 2. pp.69-73.

4. Pashueva I. M. Modeling and analysis of the subsystem of management of rapid response centers using Petri nets / I. M. Pashueva, S. M. Pasmurnov // Bulletin of the Voronezh State Technical University. 2011. Vol. 7. No. 9. pp.106-109.

5. Pashueva I. M. Modeling of the work of a distributed network of ambulance services using the aggregation function / I. M. Pashueva // Physico-mathematical modeling of systems: materials of the XIII International seminar. Voronezh, 2015. Part 2. pp.65-68.

6. Pashueva I. M. Modeling of the processes of redistribution of crews of rapid response services in the event of an emergency in a separate service area // Intelligent Information Systems: Conference Materials, Voronezh, 2018. Ch2. pp. 33-36.

7. Chirkov O. N. Receiver and transmitter for orienteering on the terrain / A. V. Turk, O. N. Chirkov, L. N. Chirkova // Problems of ensuring reliability and quality of devices, devices and systems: a collection of scientific papers. Voronezh, 2020. pp. 144-148.

УДК 004.94:519.63

СОБСТВЕННЫЕ ЧАСТОТЫ КОНСТРУКТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ВОЛНОВОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ГИРОСКОПА С ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯМИ

И.Л. Батаронов, Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков, В.В. Пешков, В.А. Шунина

Воронежский государственный технический университет
vmfmm@mail.ru

Аннотация: решалась краевая задача на собственные значения уравнений электроупругости, описывающих колебания конструктивных элементов волнового твердотельного гироскопа с пьезоэлектрическими преобразователями. Найдены первые тридцать собственных частот и форм колебаний конструктивных элементов гироскопа.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод конечных элементов, конструктивные элементы гироскопа, собственные частоты, формы колебаний.

Представляемая работа является продолжением исследований упрощенной конструкции волнового твердотельного гироскопа (ВТГ), описанных в статье [1]. Основное внимание было уделено собственным частотам колебаний корпуса гироскопа. Их знание является важным при рассмотрении вопроса перекачки энергии колебаний резонатора во внешнюю среду. Это необходимо учитывать при разработке конфигурации корпуса гироскопа с целью уменьшения влияния этого фактора.

Краевая задача решалась методом конечных элементов с помощью интегрированной системы компьютерного моделирования [2]. Конструкция разбивалась на 322836 лагранжевых тетраэдральных конечных элементов 2-го порядка (число степеней свободы – 1548552).

В таблице приведены значения первых тридцати собственных частот колебаний конструктивных элементов гироскопа. Полужирным шрифтом выделены частоты колебаний корпуса гироскопа.

№	f	№	f	№	f
1	538.0058	11	**9863.5112**	21	20806.2252
2	538.0305	12	12413.3866	22	20807.9090
3	1234.4056	13	12415.6043	23	22728.5980
4	1390.0696	14	**14012.4858**	24	22728.8926
5	3414.4246	15	**14012.9840**	25	**23857.4150**
6	3414.4322	16	16256.9830	26	**23860.6422**
7	7056.0326	17	16270.1291	27	**24210.0835**
8	7058.5332	18	18160.7162	28	**24214.6880**
9	8961.2828	19	**19780.3833**	29	24965.7977
10	8961.2913	20	**19781.0455**	30	24965.8235

В качестве примера на рис. 1-4 приводятся формы колебаний корпуса гироскопа для собственных частот 11, 19, 25, 27. Формы колебаний резонатора ВТГ были показаны в [3].

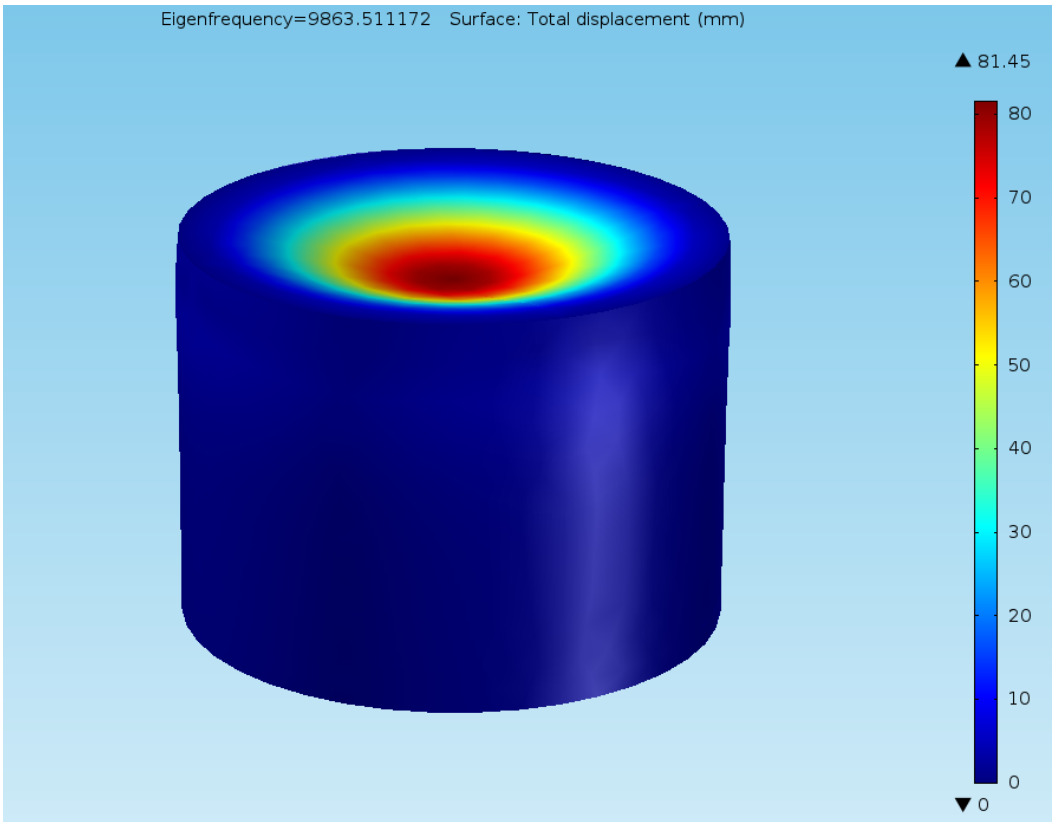


Рис. 1. Форма колебаний корпуса гироскопа (мода 11)

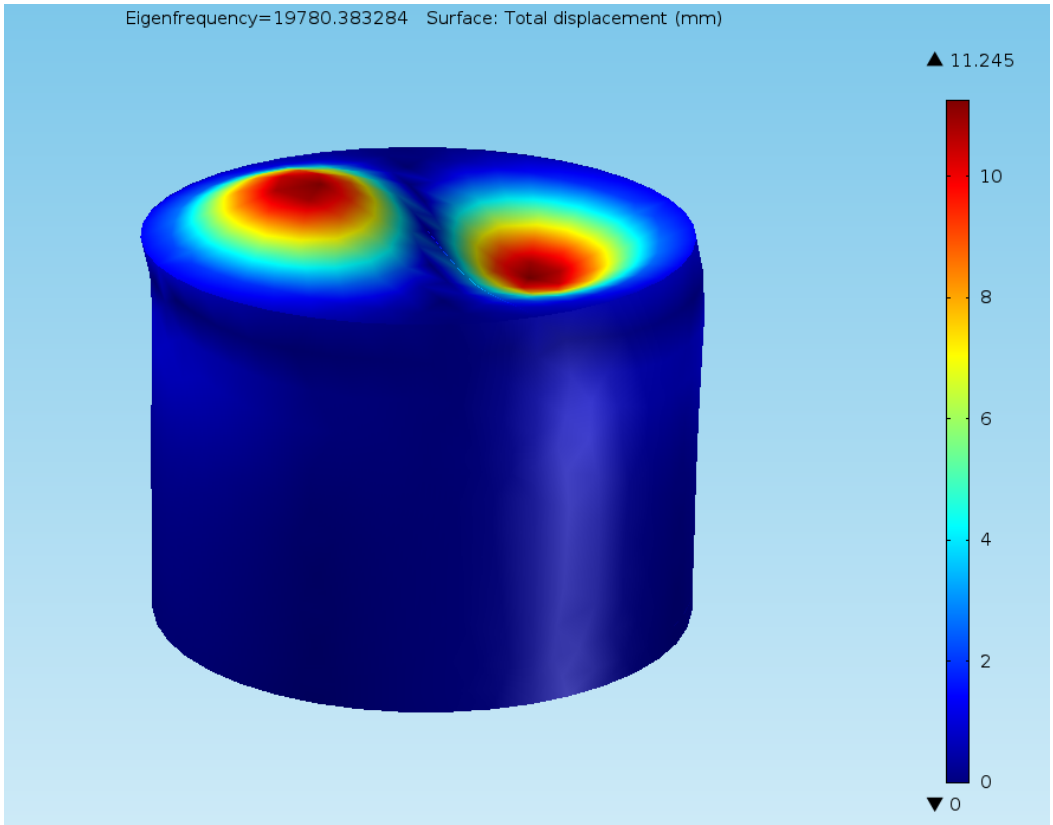


Рис. 2. Форма колебаний корпуса гироскопа (мода 19)

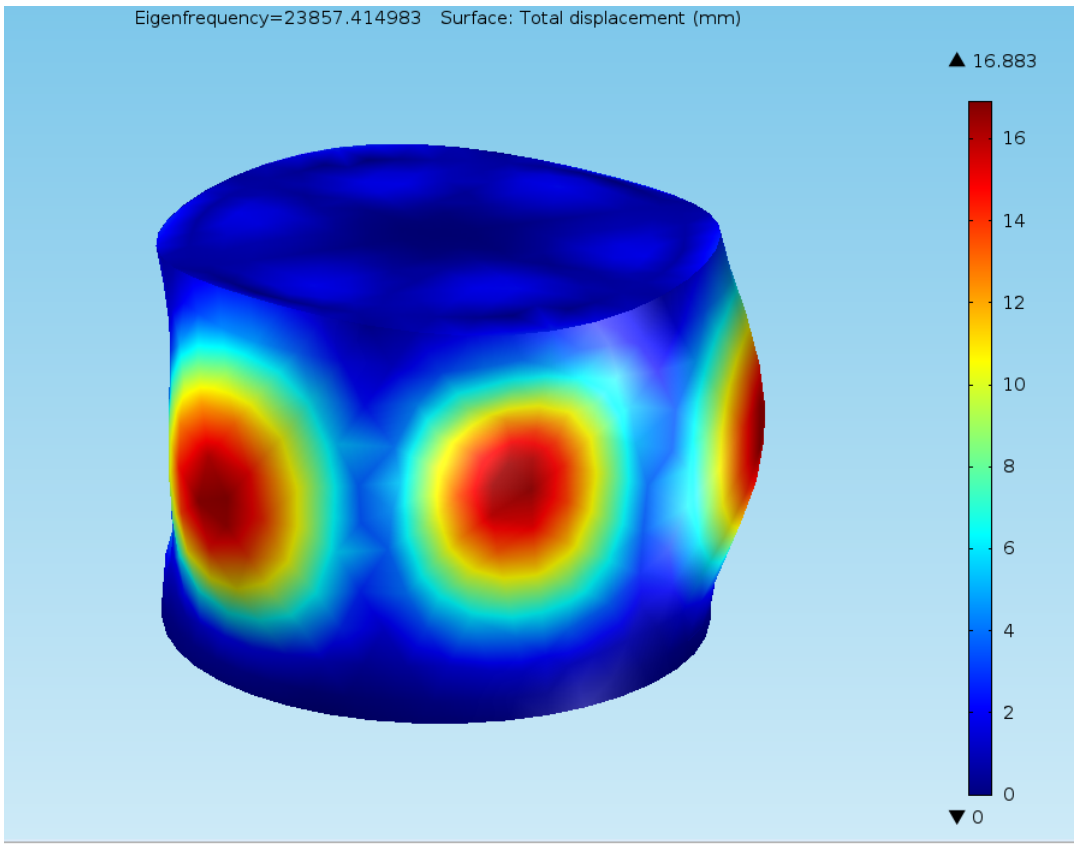


Рис. 3. Форма колебаний корпуса гироскопа (мода 25)

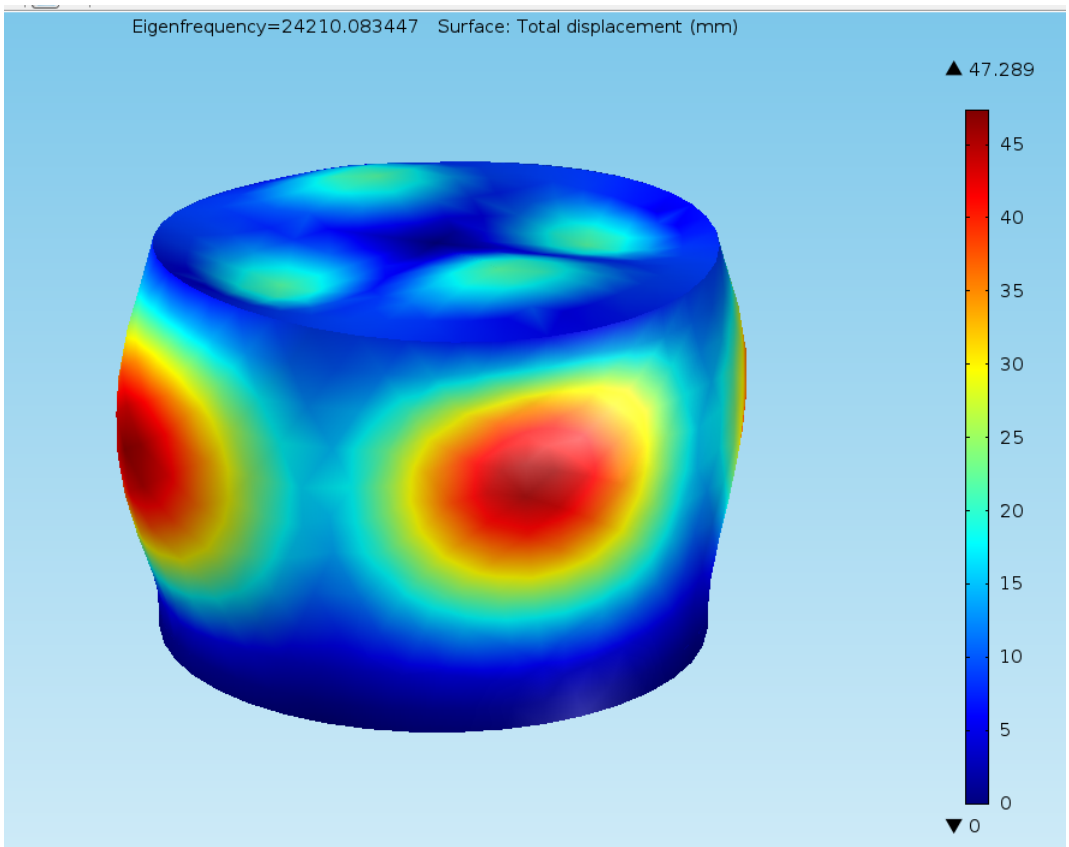


Рис. 4. Форма колебаний корпуса гироскопа (мода 27)

В заключение отметим, что конструкция корпуса ВТГ должна быть такой, чтобы значения собственных частот корпуса существенно превосходили значения рабочих собственных частот резонатора.

Список литературы

1. Влияние пьезоэлектрических преобразователей на собственные частоты резонатора волнового твердотельного гироскопа // И. Л. Батаронов, Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков и др. // Известия РАН. Серия Физическая. 2019. Т. 83. № 9. С. 1220-1223.

2. Система компьютерного моделирования физико-механических процессов в волновом твердотельном гироскопе / И. Л. Батаронов, Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков и др. // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIX Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2018. С. 162-166.

3. Моделирование волнового твердотельного гироскопа / И. Л. Батаронов, Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков и др. // Физико-математическое моделирование систем: материалы XVIII Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2018. Ч. 2. С. 174-182.

NATURAL FREQUENCIES OF STRUCTURAL ELEMENTS OF A WAVE SOLID-STATE GYROSCOPE WITH PIEZOELECTRIC TRANSDUCERS

I.L. Bataronov, G.E. Shunin, S.A. Kostryukov,
V.V. Peshkov, V.A. Shunina

Voronezh State Technical University

Abstract: a boundary value problem was solved for the eigenvalues of the electroelasticity equations describing the oscillations of the structural elements of a wave solid-state gyroscope with piezoelectric transducers. The first thirty eigenfrequencies and modes of oscillation of the structural elements of the gyroscope are found.

Keywords: computer simulation, finite element method, structural elements of a gyroscope, natural frequencies, mode shapes.

СОДЕРЖАНИЕ

Абрамова О.П. Влияние переменной амплитуды и модуляции на кубитные состояния поля деформации фрактальной структуры 3

Абрамов В.С. Активные наночастицы и бозон Хиггса в кварк-глюонной модели 9

Mamedova Y.V. Investigation of some exclusive processes using new renormalization scales 15

Баранов Н.И., Сафир Р.Е., Боженко К.В., Чередниченко А.Г., Багрий Е.И. Квантово-химические исследование каталитического алкилирования адамантана олефинами 22

Боженко К.В., Алдошин С.М., Утенышев А.Н. Компьютерное моделирование обменных взаимодействий в магнитной подрешетке бифункциональных материалов 26

Утенышев А.Н., Алдошин С.М., Боженко К.В., Ткачев В.В. Квантово-химическое изучение необычной геометрической структуры хелатных комплексов некоторых 3d металлов с 3,5-ди-(трет-бутил)-2-оксиазобензолом 29

Bereslavskii E.N. About some problems of filtration theory 33

Гетманова Е.Е. Особенности распределения энергии в цепочке маятников с кратными частотами 39

Григорьев Е.Г., Гольцев В.Ю., Осинцев А.В., Плотников А.С., Стрижаков Е.Л., Нескоромный С.В. Моделирование процессов высоковольтной консолидации порошков тугоплавких материалов 44

Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Цветков М.В., Зайцев А.А., Добровольский Ю.А. Квантово-химическое моделирование кристаллической структуры моногидрата борогидрида натрия 50

Зюбина Т.С., Зюбин А.С., Корчун А.С., Евщик Е.Ю., Колмаков В.Г., Добровольский Ю.А. Квантово-химическое исследование кремний-углеродного композиционного материал на основе наночастиц кремния и восстановленного оксида графена как материала отрицательного электрода литий-ионного аккумулятора 57

Котомкин А.В., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Белов А.Н. Внутреннее вращение в 2,2,2-трифторэтаноле и его дейтерийзамещенных 61

Луковкин М.В., Липкин М.С. Расчет эксплуатационных характеристик литий-ионных аккумуляторов в программе Comsol Multiphysics 63

Мельников Г.А., Игнатенко Н.М., Громков А.С. О формировании кластерных систем в модели абсолютно твердых сфер 66

Павловский М.В., Никульшин К.В. Результаты имитационного моделирования конфликтного взаимодействия сложных систем радиоэлектронного обеспечения 71

Смирнов Ю.Г., Ивенина И.В. Использование функции желательности Харрингтона для выбора методики осаждения наночастиц магнетита в технологической схеме очистки воды 78

Радина В.Р., Лихачев Е.Р., Курганский С.И. Моделирование электронной структуры гемиоксида меди 84

Стариков В.С., Глазнев В.Н. Стационарное магнитное поле модели прямошовной стальной трубы 89

Сушко Т.И., Караев Р.Ш., Пашнева Т.В. Моделирование физического процесса затвердевания отливки на основе CAD-систем 95

Сушко Т.И., Караев Р.Ш., Пашнева Т.В. Компьютерное моделирование как инструмент реализации функциональности системы при анализе качества отливки 100

Сушко Т.И., Караев Р.Ш., Ильинский С.В., Пашнева Т.В. Компьютерное моделирование как способ корреляции технологии изготовления отливки 105

Рябков Е.Д., Тихонова А.А., Иванов В.Р. Моделирование процесса создания никелево-палладиевого катализатора методом реплик 109

Троицкий О.А., Скворцов О.Б., Сташенко В.И. Электроимпульсное возбуждение затухающих вибраций проводников 113

Ускова Н.Б., Шелковой А.Н. Спектр матрицы смежности одного почти полного графа 120

Бирюкова И.П., Животворев А.С. Моделирование в научно-исследовательской деятельности студентов младших курсов 125

Щербакова Е.Е., Князев С.Ю., Звягина Н.Г. Численное решение задач на собственные значения и собственные функции для уравнения Шредингера 128

Абдурагимов Г.Э. К вопросу о разрешимости краевой задачи для одного нелинейного функционально-дифференциального уравнения второго порядка 135

Борщ Н.А., Переславцева Н.С., Курганский С.И. Оптимальная стратегия поиска стабильных изомеров металл-допированных кластеров на основе олова методами компьютерного моделирования 137

Ожерельев В.В. Пластические свойства модели металлического стекла $Cu_{57}Zr_{43}$ в условиях одноосного сжатия 143

Купцов В.С., Катрахова А.А., Витковский Д.И. Параметрическое исследование устойчивости решения одного класса дифференциальных уравнений 147

Катрахова А.А., Купцов В.С., Несветаев Д.А. Об аппроксимации решений одной краевой задачи методом Галеркина в системе Maple 151

Pashueva I.M., Pasmurnov S.M. Modeling of the functioning of the subsystem of assistance in making managerial decisions of the management system of the prehospital medical care center in the conditions of the spread of new strains of the SARS-CoV-2 virus 155

Батаронов И.Л., Шунин Г.Е., Кострюков С.А., Пешков В.В., Шунина В.А. Собственные частоты конструктивных элементов волнового твердотельного гироскопа с пьезоэлектрическими преобразователями 157

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXIII Международного семинара
(г. Воронеж, 26-27 ноября 2021 г.)

Издается в авторской редакции

Подписано в печать 30.11.2022.
Формат 60x84/16. Бумага писчая.
Уч.-изд. л. 10,0. Усл. печ. л. 8,5. Тираж 350 экз.
Заказ № 427.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»
394006 Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84

Отдел оперативной полиграфии издательства ВГТУ
394006 Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84