

ISSN 2077-3110

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XVIII Международного семинара

Часть 2

Воронеж 2018

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российская академия наук

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

ФГБУН «Институт проблем химической физики
Российской академии наук»

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ**

Материалы XVIII Международного семинара

(г. Воронеж, 30 июня 2017 г.)

Часть 2

Воронеж 2018

УДК 53.072:519.673(06)

ББК 22.1я4

Ф 503

Физико-математическое моделирование систем: материалы XVIII
Ф503 Международного семинара; ФГБОУ ВО «Воронежский государственный
технический университет». – Воронеж: Изд-во ВГТУ, 2018. Ч. 2. 184 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

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

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

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

Редакционная коллегия

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

© Коллектив авторов, 2018

© ФГБОУ ВО «Воронежский государственный
технический университет», 2018

ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ LDMOS-ТРАНЗИСТОРОВ С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ ГРАДИЕНТОМ ПРИМЕСИ LDD-ОБЛАСТИ

Р. П. Алексеев¹, Е. Н. Бормонтов², Г. В. Быкадорова², А. Н. Цоцорин¹

¹АО «Научно-исследовательский институт электронной техники», Воронеж
ars.sega@gmail.com

²Воронежский государственный университет

В настоящей работе в среде Sentaurus TCAD проводится моделирование различных структур LDMOS-транзисторов, отличающихся конструкцией полевого электрода и структурой дрейфовой LDD-области стока: LDD-области с положительным и отрицательным градиентом легирующей примеси. Конструкция LDMOS-транзистора с LDD-областью с отрицательным градиентом примеси характеризуется меньшим сопротивлением, но большей выходной емкостью.

Ключевые слова: LDMOS-транзистор, двойная LDD-область, САПР Sentaurus TCAD.

В настоящее время одной из наиболее востребованных технологий на рынке мощной СВЧ ЭКБ является LDMOS-технология. LDMOS-транзисторы находят применение в производстве большого разнообразия мощных СВЧ-устройств для различных применений, включая: базовые станции, передача сигналов FM, УКВ, УВЧ, медицинское оборудование, РЛС и т.д. [1]. Характерной особенностью современных мощных СВЧ LDMOS-транзисторов является наличие дрейфовой LDD-области стока, позволяющей прибору работать при высоком напряжении питания. Помимо напряжения пробоя $U_{\text{проб}}$ сток-исток, LDD-область также оказывает влияние на такие параметры, как сопротивление сток-исток в открытом состоянии $R_{\text{си}}$ и межэлектродные емкости: входную $C_{\text{г}}$, проходную C_{gd} и выходную $C_{\text{д}}$.

В настоящий момент широко известен способ создания LDD-области методом многократной последовательной ионной имплантации, позволяющий получить неравномерно легированный профиль залегания примеси с положительным градиентом концентрации [2], при котором участок с большей концентрацией примеси располагается вблизи n^+ -стока. Подобная структура LDD-области в зависимости от параметров и режимов технологических процессов позволяет достичь улучшения тех или иных электропараметров прибора. Частным случаем формирования LDD-области с неравномерным распределением примеси является двойная LDD-область, создаваемая в два этапа. На первом этапе проводится ионная имплантация в кремниевую подложку на протяжении всей длины LDD-области с дозой $D_{\text{LDD опт}}$ и энергией легирования, соответствующих достижению максимального уровня $U_{\text{проб}}$ равномерно легированной LDD-области.

На втором этапе дополнительно легируется участок LDD-области, примыкающий к n^+ -стоку.

В работе [3] описан альтернативный вариант создания стоковой двойной LDD-области, при котором HDD-участок с бóльшей концентрацией примеси прилегает к затвору, т.е. формируется стоковая LDD-область с отрицательным градиентом концентрации. С целью выявления преимуществ, которые может дать рассматриваемая структура, в САПР Sentaurus TCAD на основе базовой технологии АО «НИИЭТ» была построена модель LDMOS-транзистора. Используя эту модель, был проведен расчет ряда структур, отличающихся конструкцией полевого электрода ПЭ и технологией создания LDD-области.

В настоящий момент существует несколько конструкций ПЭ: ПЭ, выполненный в первом слое металла, ПЭ в виде ступеньки вблизи затвора, называемый платой Фарадея, а также много слойные ПЭ, допускающие в том числе комбинацию двух предыдущих конструкций. В первом случае (рис. 1) введение HDD-области с высоким уровнем легирования даже при незначительной дозе имплантации D_{LDD} приводит к существенному падению пробивного напряжения $U_{проб}$ (табл. 1), так что такая структура не имеет перспектив.

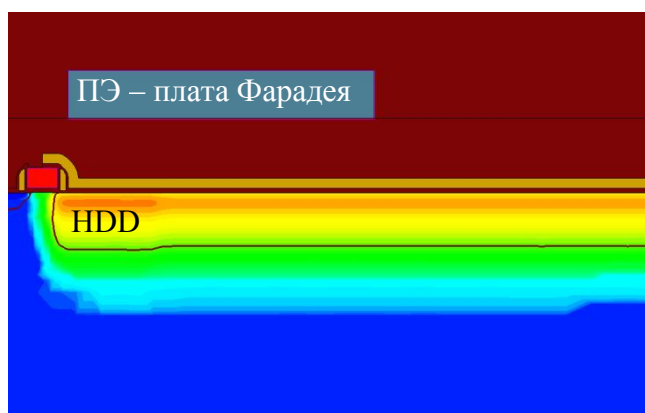


Рис. 1. LDMOS-структура с платой Фарадея в слое первого металла

Таблица 1

| D_{LDD} , ион/см ² | D_{HDD} , ион/см ² | $R_{си}$, Ом | $U_{проб}$, В |
|---------------------------------|---------------------------------|---------------|----------------|
| 2·10 ¹² | 0 | 3,95 | 115 |
| | 1,0E11 | 3,94 | 115 |
| | 3,0E11 | 3,91 | 93 |
| | 5,0E11 | 3,89 | 65 |
| | 7,0E11 | 3,88 | 43 |
| | 9,0E11 | 3,85 | 31 |
| | 1,1E11 | 3,84 | 27 |
| | 1,3E11 | 3,83 | 25 |

Ступенчатый ПЭ (рис. 2) располагается ближе к LDD-области и потому имеет большее полевое воздействие на нее. Как следствие, дополнительная доза D_{HDD} легирования HDD-участка может приближаться и даже превышать дозу, соответствующую максимальному значению $U_{\text{проб}}$ при равномерно легированной LDD-области, не приводя при этом к падению значения $U_{\text{проб}}$ (табл. 2).

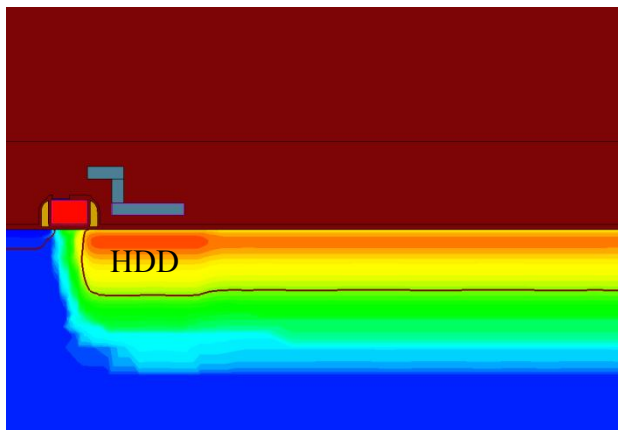


Рис. 2. LDMOS-структура с ПЭ в форме ступеньки вблизи затвора

Таблица 2

| L_{HDD} , мкм | D_{HDD} , ион/см ² | $R_{\text{си}}$, Ом | $U_{\text{проб}}$, В | $C_{\text{вых}}$, пФ | $C_{\text{прох}}$, пФ | $C_{\text{вх}}$, пФ |
|------------------------|--|----------------------|-----------------------|-----------------------|------------------------|----------------------|
| 0,7 | 1,0E+11 | 5,01 | 116,90 | 1,63 | 0,045 | 3,30 |
| | 5,0E+11 | 4,92 | 117,10 | 1,63 | 0,046 | 3,26 |
| | 9,0E+11 | 4,86 | 117,10 | 1,63 | 0,046 | 3,23 |
| | 1,3E+12 | 4,82 | 117,30 | 1,63 | 0,047 | 3,20 |
| | 1,7E+12 | 4,79 | 117,40 | 1,64 | 0,048 | 3,16 |
| | 2,1E+12 | 4,77 | 117,52 | 1,64 | 0,049 | 3,13 |
| | 2,5E+12 | 4,76 | 94,74 | 1,64 | 0,050 | 3,09 |
| | 2,9E+12 | 4,74 | 59,92 | 1,64 | 0,051 | 3,08 |
| 1 | 1,0E+11 | 4,98 | 117,00 | 1,63 | 0,045 | 3,30 |
| | 5,0E+11 | 4,86 | 117,20 | 1,63 | 0,046 | 3,26 |
| | 9,0E+11 | 4,78 | 117,50 | 1,64 | 0,047 | 3,22 |
| | 1,1E+12 | 4,76 | 117,50 | 1,64 | 0,047 | 3,20 |
| | 1,7E+12 | 4,69 | 117,90 | 1,65 | 0,050 | 3,14 |
| | 1,8E+12 | 4,68 | 117,91 | 1,66 | 0,050 | 3,13 |
| | 1,9E+12 | 4,67 | 112,90 | 1,67 | 0,051 | 3,12 |
| | 2,1E+12 | 4,66 | 101,60 | 1,68 | 0,052 | 3,11 |
| 1,2 | 5,0E+11 | 4,83 | 116,71 | 1,64 | 0,046 | 3,25 |
| | 7,0E+11 | 4,78 | 112,34 | 1,64 | 0,047 | 3,22 |
| | 9,0E+11 | 4,73 | 114,89 | 1,64 | 0,047 | 3,22 |
| | 1,1E+12 | 4,70 | 112,76 | 1,65 | 0,048 | 3,19 |

Однако при длине HDD-области, превышающей длину ПЭ больше чем на 0,4 мкм, даже малая доза легирования вызывает резкое падение напряжения пробоя. По сравнению с равномерно легированной LDD-областью двойная LDD-область с отрицательным градиентом концентрации позволяет снизить сопротивление сток-исток приблизительно на 7% без потери в емкостях и пробивном напряжении. Как показали расчеты, уменьшение основной дозы легирования LDD-области ниже $D_{LDD\text{опт}}$ позволяет увеличить дополнительную дозу, при которой еще не происходит падения $U_{\text{проб}}$, но общий уровень сопротивления такой структуры оказывается выше.

Существенным недостатком конструкции с ПЭ в форме ступеньки является ее неприменимость для мощных СВЧ LDMOS-транзисторов, рассчитанных на высокое напряжение питания, так как такие приборы характеризуются большей протяженностью LDD-области, а ступенчатые ПЭ существенно ограничены по длине. В результате ПЭ оказывает воздействие лишь на незначительную часть LDD-области, следствием чего является значительное снижение оптимальной дозы легирования $D_{LDD\text{ опт}}$ и, соответственно, увеличение сопротивления сток-исток в открытом состоянии $R_{\text{си}}$ (табл. 3).

Таблица 3

| ПЭ | D_{LDD} , ион/см ² | $R_{\text{си}}$, Ом | $U_{\text{проб}}$, В | $C_{\text{вых}}$, пФ | $C_{\text{прох}}$, пФ | $C_{\text{вх}}$, пФ |
|---------------|------------------------------------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|---------------------------|-------------------------|
| в 1-м металле | 2,1E+12 | 3,85 | 116,99 | 2,14 | 0,037 | 2,93 |
| ступенчатый | 1,4E+12 | 5,04 | 116,80 | 1,63 | 0,044 | 3,31 |

Наиболее эффективной является конструкция многослойного ПЭ, где первый слой (либо слои) формируется в виде ступеньки над краем затвора, а последний формируется в слое первого металла (рис. 3). Значения электропараметров LDMOS-структуры с двуслойным ПЭ и набором доз дополнительного легирования D_{HDD} приведены в табл. 4. D_{LDD} соответствует оптимальной дозе имплантации равномерно легированной LDD-области.

Таблица 4

| D_{LDD} , ион/см ² | D_{HDD} , ион/см ² | $R_{\text{си}}$, Ом | $U_{\text{проб}}$, В | $C_{\text{вых}}$, пФ | $C_{\text{прох}}$, пФ | $C_{\text{вх}}$, пФ |
|------------------------------------|---|----------------------|-----------------------|-----------------------|------------------------|----------------------|
| 2,2E+12 | 0 | 3,80 | 126,33 | 2,12 | 0,020 | 3,25 |
| | 8,0E+11 | 3,68 | 126,73 | 2,13 | 0,023 | 3,18 |
| | 9,0E+11 | 3,68 | 126,76 | 2,14 | 0,023 | 3,18 |
| | 1,0E+12 | 3,68 | 121,63 | 2,16 | 0,023 | 3,17 |
| | 1,1E+12 | 3,66 | 116,02 | 2,17 | 0,024 | 3,16 |
| | 1,2E+12 | 3,66 | 102,84 | 2,18 | 0,024 | 3,16 |
| | 1,5E+12 | 3,65 | 73,04 | 2,21 | 0,026 | 3,14 |
| | 2,0E+12 | 3,62 | 38,47 | 2,22 | 0,032 | 3,11 |

Для выявления преимуществ и недостатков транзисторных структур с HDD-областью, обеспечивающей отрицательный градиент концентрации двойной LDD-области, по сравнению с конструкцией со стандартной двойной LDD-областью с положительным градиентом концентрации также был проведен расчет электропараметров ряда LDMOS-структур с различными конфигурациями участка LDD2 (рис. 4). Полученные значения параметров приведены в табл. 5.

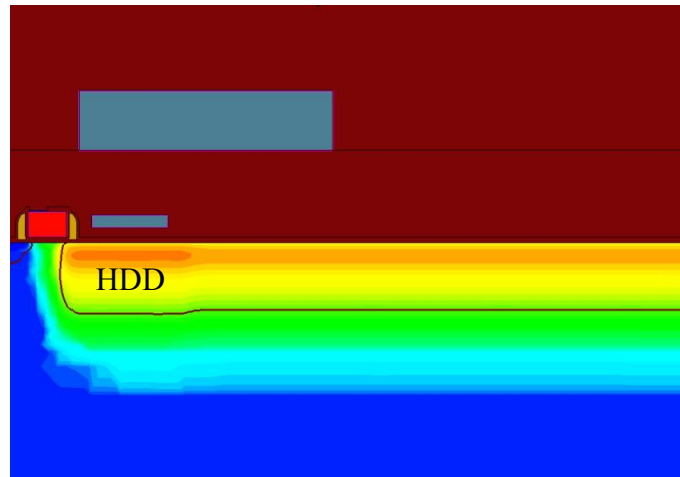


Рис. 3. LDMOS-структура с двуслойным ПЭ

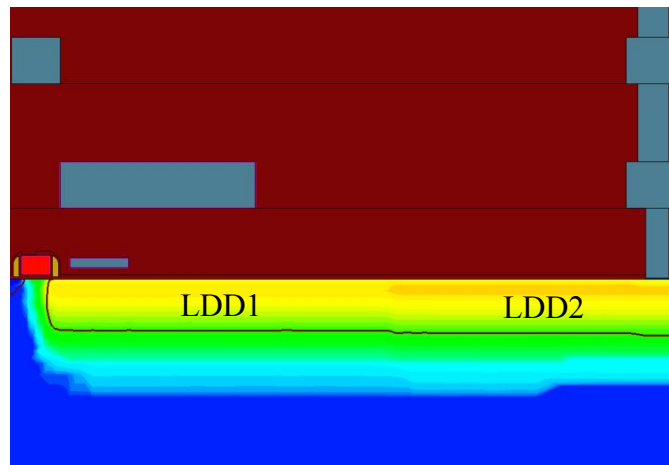


Рис. 4. LDMOS-структура с двуслойным ПЭ и стандартной двойной LDD-областью

Таблица 5

| $D_{LDD, 2}$, ион/см ² | L_{LDD2} , мкм | D_{LDD2} , ион/см ² | $R_{си}$, Ом | $U_{проб}$, В | $C_{вых}$, пФ | $C_{прох}$, пФ | $C_{вх}$, пФ |
|---------------------------------------|---------------------|-------------------------------------|------------------|-------------------|-------------------|--------------------|------------------|
| 2,2E+12 | 2 | 8,0E+11 | 3,84 | 127,50 | 2,05 | 0,018 | 3,29 |
| | | 9,0E+11 | 3,83 | 127,90 | 2,02 | 0,018 | 3,29 |
| | | 1,0E+12 | 3,81 | 127,34 | 2,02 | 0,018 | 3,29 |
| | | 1,1E+12 | 3,80 | 126,42 | 2,02 | 0,018 | 3,29 |
| | 3 | 6,0E+11 | 3,78 | 129,20 | 2,06 | 0,018 | 3,29 |
| | | 7,0E+11 | 3,75 | 128,35 | 2,06 | 0,019 | 3,29 |
| | | 8,0E+11 | 3,74 | 126,01 | 2,06 | 0,019 | 3,29 |
| | | 9,0E+11 | 3,71 | 123,55 | 2,06 | 0,019 | 3,29 |

В сравнении LDMOS-транзисторов с равномерно легированной LDD-областью предложенная конструкция с двойной LDD-областью и отрицательным градиентом концентрации позволяет улучшить все рассматриваемые параметры, либо при уменьшении общей длины LDD-области при равном $U_{проб}$ получить выигрыш в $R_{си}$ и $C_{вых}$ [4]. Анализ результатов моделирования LDMOS-структур со стоковой LDD-областью с отрицательным градиентом концентрации показывает, что стандартная двойная LDD-область обеспечивает более низкую выходную емкость (4-5%), но более высокое сопротивление (также 4-5%). Также эти две конструкции отличаются разным распределением напряженности электрического поля в LDD-области, что способно повлиять на надежность прибора, деградационные явления и т.д.

Литература

1. Theeuwen S. J. C. H. LDMOS technology for RF power amplifiers / S. J. C. H. Theeuwen, J. H. Qureshi // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 2012. – V. 60. – № 6. – P. 1755-1763.
2. Способ изготовления СВЧ LDMOS транзисторов: пат. 2498448 Рос. Федерация / В. В. Бачурин [и др.]. – № 2012119673/28; заявл. 14.05.12; опубл. 10.11.13, Бюл. № 31. – 15 с.
3. Electronic device comprising an LDMOS transistor: пат. WO2005022645A2, Philips / S. J. C. H. Theeuwen, F. Rijs, P. C. A. Hammes, I. B. Pouwel, H. F. F. Jos. / EP20030103233 20030827; опубл. 10.03.2005.
4. Алексеев Р. П. Моделирование технологии СВЧ LDMOS-транзисторов с нелинейным распределением примеси в стоковой LDD-области / Р. П. Алексеев, Е. Н. Бормонтов, Г. В. Быкадорова // Научно-практический вестник “Энергия-XXI век”, Воронеж: 2016. – №1 (94). – С.102-107.

DEVICE-TECHNOLOGICAL MODELING OF LDMOS TRANSISTORS WITH NEGATIVE GRADIENT OF DOPANT IN LDD REGION

R. P. Alekseev¹, E. N. Bormontov², G. V. Bykadorova², A. N. Tsotsorin¹

¹JSC "Scientific Research Institute of Electronic Technology", Voronezh

²Voronezh State University

This article is devoted to modeling in software package Sentaurus TCAD of different LDMOS structures which differ in construction of field plate and structure of LDD region: LDD with positive and negative gradient of dopant. Construction with negative gradient of dopant in LDD characterize lower electrical resistance but higher output capacitance.

Keywords: LDMOS power transistors, field plate of LDD region, Sentaurus TCAD.

ПЛАНИРОВАНИЕ ПРОТОННОЙ ТЕРАПИИ ГЛАЗА НА ОСНОВЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ

М. А. Долгополов, С. Ю. Бабичева

Воронежский государственный университет
babicheva.s.u@yandex.ru

Протонная терапия внутриглазных злокачественных новообразований технологически сложная процедура. В данной работе рассматривается улучшение качества дозно-анатомического планирования за счет уточненного описания модели структур глаза.

Ключевые слова: модель глаза, протонная терапия, дозно-анатомическое планирование.

Основной проблемой при проведении лучевой терапии является создание высокодозного поля в целевой области при максимальном щажении здоровых тканей. Именно точная доставка дозы, с последующей резкой остановкой частиц, делает протонную терапию (по сравнению с фотонной) наиболее предпочтительным вариантом лечения пациентов с онкологией мозга, сердца и глаз.

Применение протонов при опухолях глаза было начато в 1977 г. в Гарвардском университете (США). В России проведением и усовершенствованием процесса протонной лучевой терапией внутриглазных опухолей занимается отделение медицинской физики Института теоретической и экспериментальной физики (ИТЭФ) [1].

Проведение протонной терапии имеет многоуровневую высокотехнологичную структуру, а именно, получение топометрических данных, дозно - анатомическое планирование сеанса лечения, иммобилизация и позиционирование пациента, и сам процесс облучения [2]. Каждый из этих этапов в офтальмологии существенно отличается от аналогичных этапов лучевой терапии любых других органов человеческого тела ввиду особенностей структур глаза.

Дозно-анатомическое планирование является отправным пунктом в организации сеанса терапии. На основании результатов топометрических данных, система планирования рассчитывает дозное покрытие очага и параметры пучка заряженных частиц, необходимые для последующих этапов терапии. Качество облучения напрямую зависит от качества проведения планирования, а оно в свою очередь от точности математического описания анатомических структур глаза. Поэтому планирование протонной терапии глаза на основе моделирования является актуальным направлением деятельности.

1. Особенности взаимодействие тяжелых заряженных частиц с веществом

Протоны, проходя через вещество, взаимодействуют с электронами атомных оболочек и ядром непосредственно. Собственно говоря, под взаимодействием понимаются упругие и неупругие (возбуждение и ионизация) столкновения,

в результате которых, заряженная частица теряет свою энергию. Отклонение протонов в поле ядра событие редкое и происходит, как правило, на малые углы, поэтому они мало влияют на торможение тяжелых частиц веществом и их траекторию. *Неупругие столкновения* протонов с атомами вещества вызывают ионизацию последних посредством взаимодействия с электронами атомных оболочек с передачей некоторой энергии. Если энергия, полученная электроном больше энергии связи, то атом ионизируется. При каждом таком взаимодействии протон теряет энергию малыми порциями и практически не меняет направления своего движения [3].

Указанные потери энергии называют удельными ионизационными потерями и количественно выражают величиной $S_{\text{ион}} = (-dE/dx)$, где dE – энергия, теряемая частицей в слое вещества толщиной dE , которая зависит от энергии протона и свойств облучаемого материала. Удельные ионизационные потери энергии для тяжелых заряженных частиц описываются формулой Бете-Блоха, в случае, когда заряженная частица, пролетающая через вещество, имеет энергию большую, по сравнению с энергией связи электрона в атоме [4]:

$$S_{\text{ион}} = \left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi z^2 e^4}{m_e v^2} Z n \left[\ln \frac{2m_e v^2}{I_{\text{ион}}(1 - \beta^2)} - \beta^2 \right], \quad (1)$$

где m_e – масса электрона ($m_e c^2 = 511$ кэВ – энергия покоя электрона); c – скорость света; v – скорость частицы; $\beta = v/c$; Z – заряд атомов среды; n – плотность числа атомов среды; z – заряд частицы; $I_{\text{ион}}$ – средний ионизационный потенциал атомов вещества среды, через которую проходит частица.

Для определённой среды с данным зарядом Z величина dE/dx является функцией только её кинетической энергии E : $dE/dx = \varphi(E)$. Рассчитывая потерю энергии с определенным шагом и учитывая зависимость $dE/dx = \varphi(E)$, получим ряд значений энергий и соответствующие им величины пройденных частицей расстояний, просуммировав которые получают общее расстояние, пройденное в веществе заряженная частица до полной остановки. Удельные потери энергии возрастают с уменьшением энергии частицы и особенно резко перед ее остановкой в веществе. Так образуется так называемый пик Брэгга. Ткани, находящиеся за пиком практически не получают ионизационную дозу, что делает протонную терапию альтернативой применению фотонов.

Помимо удельных (средних) ионизационных потерь при расчетах поглощенной дозы учитываются также их флуктуации, несколько уширяющие пик Брэгга. Будем учитывать, что пробег заряженных частиц в веществе носит статистический характер, то есть существует разброс значений относительно его среднего значения R_0 . Найдем величину, которая характеризует такие отклонения (дисперсию) по формуле:

$$\sigma^2(x) = \frac{m/m_e}{32(\pi n_0 Z z^2 r_e^2)^2} \int_{E(x)}^{E_0} dE \frac{[(1 + E)^2 - 1]^2 [(1 + E)^4 - 1] K(E)}{(1 + E)^6 L_{\text{ион}}^3(E)}, \quad (2)$$

где m_e – масса электрона; Z – заряд атомов среды; n_0 – плотность числа атомов среды, определяемая формулой $N_A \rho / A$; r_e – классический радиус электрона, который равняется $2,8 \cdot 10^{-13}$ см; z – заряд частицы; m/m_e – соотношение массы протона к массе электрона, равное 1836; E – энергия частицы в единицах $m_e c^2$, полученная ранее при интегрировании формулы Бете-Блоха; $K(E)$ – поправка на эффект связи электронов в атоме; $L_{\text{ион}}$ – ионизационный логарифм.

В качестве примера по формуле Бете-Блоха реализован алгоритм нахождения средних потерь энергии протонов в воде от их начальной энергии и потерь энергии при учете флуктуаций. Результаты расчетов представлены на рис. 1.



Рис. 1. График сравнения средних потерь энергии протона и потерь с учетом флуктуаций

Этот график отражает сравнение средних потерь энергии пика Брэгга для протонов с энергией 150 МэВ с учетом флуктуаций энергии (зеленая линия) и без (красная линия). Узкий пик Брэгга (1-2 мм) одновременно снижается по высоте и расплывается по ширине (до 8 мм). При этом положение пика не смещается, а наиболее широкая его область имеет наибольшую начальную энергию, следовательно, наибольший пробег. Флуктуации нарастают по мере проникновения вглубь вещества, что связано с аккумулярованием потерь энергии протона, и вносят существенный вклад в распределение средних потерь энергии.

Очевидно, что в протонной терапии можно управлять глубиной доставки дозы, варьируя начальную энергию протонов. Для изменения начальных энергий протонов после ускорителя наиболее часто используются веерные фильтры, представляющие собой алюминиевые пластины различной толщины (рис. 2), после прохождения которых пучок теряет часть энергии и создает протяженный непрерывный набор пиков, образующих после сложения модифицированную кривую Брэгга с нужным дозным распределением.

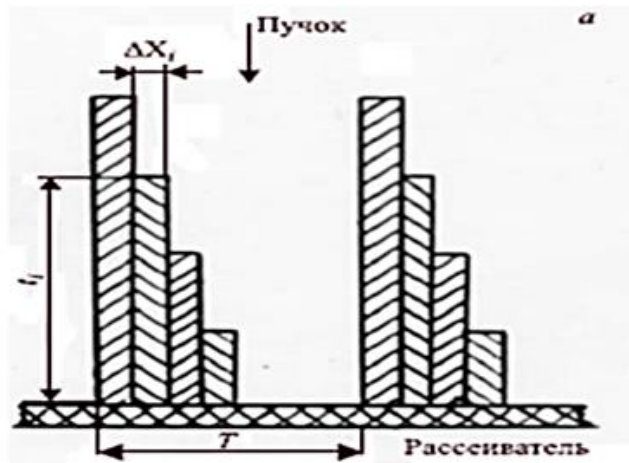


Рис. 2. Схема поперечного сечения фильтра

2. Протонная терапия в офтальмологии

Протонная терапия в случае внутриглазных новообразований является основным эффективным методом лечения. К таким наиболее часто встречающимся внутриглазным новообразованиям относится увеальная меланома – высокозлокачественная опухоль, представляющая для пациента не только угрозу потери зрения, но и жизни.

Облучение внутриглазных опухолей имеет свою специфику. Помимо стандартных процедур диагностики, маркировка мишени, процедур усадки, позиционирования и фантомных измерений особое внимание при лечении глаз уделяется характеристикам протонного пучка и дозно-анатомическому планированию. Размеры глаза его структур и целевой области конечны, следовательно, требуется подобрать такую энергию пучка, чтобы частицы останавливались в целевой области, которая должна полностью попадать в 80% изодозу. В офтальмологии применяют энергии пучка от 80 до 120 МэВ, имеющие пробег в веществе около 35 мм [5].

В офтальмологии в системах планирования применяется «схематический глаз» по Гультранду. Схематический глаз представляет собой центрированную оптическую систему, создаваемую гомогенными средами. Хотя схема глаза по Гультранду построена приближенно, с ее помощью можно производить расчеты с точностью, вполне достаточной для практических целей.

Оптическую систему глаза образуют роговица, влага передней камеры глаза, хрусталик и стекловидное тело, т. е. соответствующие им четыре среды. Заметим, что при рассмотрении предмета человек непроизвольно старается расположить глаз таким образом, чтобы достигалась наибольшая острота зрения, и лучше всего различаются цвета. Самый центр сетчатки глаза, где фокусируется пучок света – это макула или желтое пятно – и в особенности центральная ямка (или фовеа) являются наиболее чувствительными местами сетчатки (при дневном зрении). Линия, которая определяет направление наибольшей светочувствительности и проходит через центры хрусталика и желтого пятна, называется зрительной осью.

Оптическая ось глаза (нормаль, идущая от роговицы через центр зрачка) не совпадает со зрительной линией (линия, соединяющая фиксируемую точку с центральной ямкой сетчатки). Между этими линиями имеется угол α , колеблющийся в пределах $\pm 7^\circ$. Это несовпадение влечет за собой неточности позиционирования, распределения дозовой нагрузки, а, следовательно, и всего облучения. Когда же дело касается схематического глаза, то зрительная и оптическая оси считаются совпадающими [6].

Глаз является очень сложным органом для дозно-анатомического планирования. Трудности возникают уже на первом технологическом этапе подготовки к проведению сеанса – лучевой диагностике, главной задачей которой является получение точной информации о топографии внутренних структур глаза, плотности мишени и ее границах.

К диагностическим исследованиям относят рентгеновское и магниторезонансное томографические обследования, а также введение томограмм и КТ срезов в программу планирования облучения. Портальные рентгеновские снимки используются для позиционирования пациента – еще одного технологического этапа.

Данные методы практически беспомощны перед структурами глаза, которые являются рентгенопрозрачными. Для обозначения границ опухоли хирургически подшиваются танталовые (рентгеноконтрастные) маркеры, по топографии которых, строится как можно более точная математическая модель структур глаза и их границ для дозно-анатомического планирования.

Вторая проблема заключается в водоеквивалентности сред глаза. Плотность для всех тканей глаза, кроме хрусталика и роговицы (склеры), составляет $1,015 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, для хрусталика — $1,067 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$; для склеры — $1,071 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ [5].

Следовательно, для наилучшего дозно-анатомического планирования необходимо с высокой точностью описать структуры глаза (толщины, радиусы и т.д.) так как плотности сред хоть и близки по значению друг к другу, но потери энергии заряженных частиц в них различны $\left(-\frac{dE}{dx}\right) \rho$.

3. Входные данные и алгоритм расчета поглощенной дозы

Построение плоской модели глаза основано на параметрах «схематического глаза» по Гульстранду. Выбраны и описаны ключевые структуры глаза: роговица, водянистая влага, хрусталик, стекловидное тело.

Центром стандартной системы координат X, Y выбран центр глаза, лежащий на оптической оси. Будем считать, что излучение проходит параллельно оптической оси, поэтому координаты источника отсчитываются от центра глаза. На оси X ниже центра глаза схематично представили целевую область в виде круга $R = 0,4$ мм, с учетом 1 мм планируемого объема мишени (planned treatment volume, PTV). Величины, использующиеся для описания модели глаза по Гульстранду, представлены в таблице, построенная модель на рис. 3.

| Область | Описание | Значение, мм |
|----------------|---|--|
| Центр глаза | Координаты центра глаза X, Y | $X = Y = 0$ |
| Глазное яблоко | Радиус глаза R | $R = 12$ |
| Лимб | Диаметр лимба D | $D = 12,5$ |
| Роговица | Толщина роговицы H | $H = 5$ |
| Хрусталик | Толщина хрусталика H От передней поверхности до роговицы h Радиус передней поверхности R1 Радиус задней поверхности R2 Диаметр хрусталика D | $H = 3,6$ $h = 3,6$ $R1 = 10$ $R2 = 6$ $D = 9,5$ |

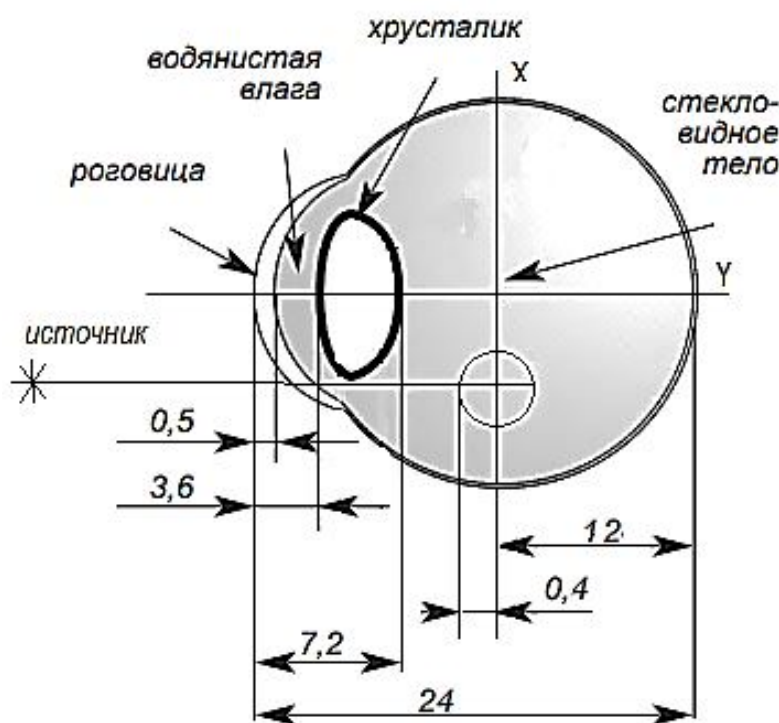


Рис. 3 Созданная модель глаза

К сложным математическим расчетам можно отнести построение хрусталика представляющий собой тело, напоминающее двояковыпуклую линзу, передняя поверхность которой менее выпукла, чем задняя, а также процесс пересчета толщин всех сред при сдвиге источника (по оси X), которые проходят заряженные частицы, поскольку облучение конформное.

Отдельное внимание уделено описанию потерь энергии, которые различны на границах сред (воздух – роговица – водянистая влага – хрусталик – стекловидное тело – опухоль).

4. Результаты и обсуждение

В результате построения модели была получена зависимость, представленная на рис. 4.

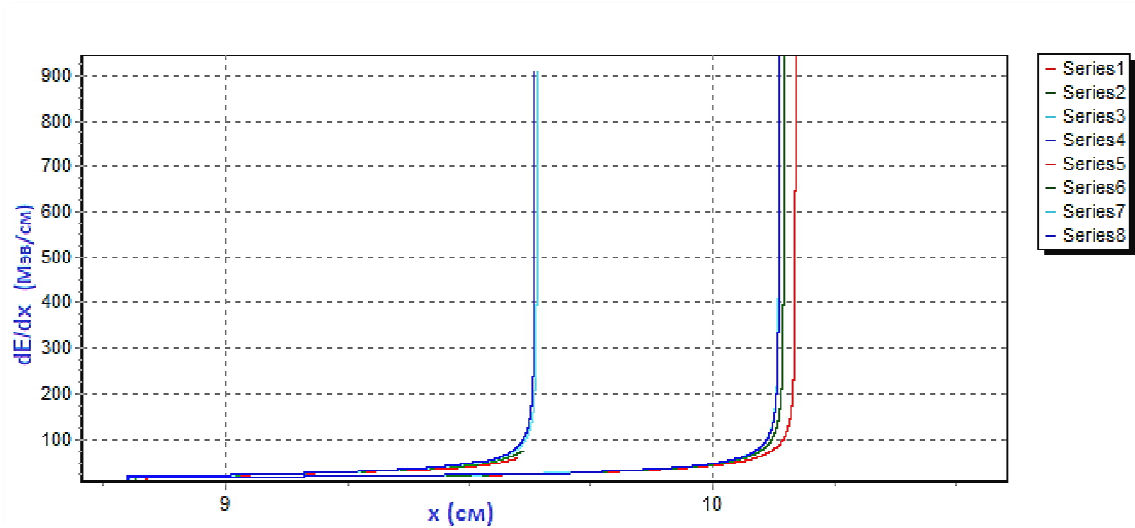


Рис. 4. График зависимости потерь энергии протонов от глубины

Источник находился в 10 см от центра глаза. Потери энергии при прохождении протонами воздуха небольшие из-за малой плотности воздуха. Дальнейшие изменения средних потерь энергии на границах разделов сред довольно плавные, так как структуры водозэквивалентные. Серия линий, начинающая давать пики Брэгга с точки 9,6 см соответствует передней границе опухоли. Серия линий, расположенная за 10 см соответствует задней границе опухоли. Источник смещали от центра вдоль оси X опухоли с шагом 1 мм (вверх по опухоли, т.к. при смещении вниз значения будут теми же, поскольку опухоль описывается кругом) производился пересчет толщин всех сред, рассчитывалась точка останова пучка (на передней и задней границе опухоли) и подбиралась необходимая энергия.

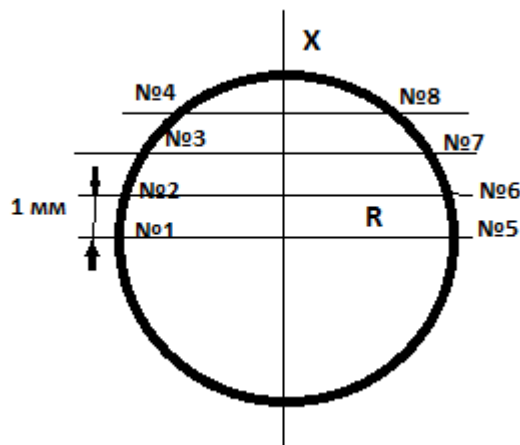


Рис. 5. Схема прохода пучков протонов через опухоль (графическое пояснение к рис. 4)

Линия №1 средним потерям энергии протонов на ближнем крае опухоли, установка расположена на оси, соответствующей ее центру. Линия №2 соответствует средним потерям энергии при смещении на 1 мм вдоль оси X положения установки, по отношению к исходному (т.е. ось пучка параллельна оси центра опухоли). При этом заметим, что пробег, соответствующий линии №1 меньше пробега, соответствующего линии №2 из-за вида границы целевой области, а также начальной энергии пучка. Так же необходимо подчеркнуть тот факт, что при изменении положения установки изменяются и толщины сред, через которые пройдет пучок, т.е. при каждом смещении требуется находить не только точку остановки пучка на границе опухоли, но и пересчитывать толщины всех затрагиваемых сред. Точно такие же пояснения применимы и к другим линиям серий.

На основании полученных результатов можно определять необходимый диапазон энергий протонов для точной доставки дозы в опухоль.

Литература

1. Орлов Д. Г., Владимирова О. М., Ерохин И. Н. и др. Представление структур глаза для использования в системе дозно-анатомического планирования протонной терапии внутриглазных злокачественных новообразований // Росс. офтальмол. журнал. - 2013. - Т. 6. - № 4. - С. 48-54.
2. Фотина И. Е. Основы лучевой терапии. Дистанционная радиотерапия: учебное пособие / И. Е. Фотина. - Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2010. - 104 с.
3. Климанов В. А. Радиобиологическое и дозиметрическое планирование лучевой и радионуклидной терапии. Часть 2. Лучевая терапия пучками протонов, ионов, нейтронов и пучками с модулированной интенсивностью, стереотаксис, брахитерапия, радионуклидная терапия, оптимизация, гарантия качества / В. А. Климанов; Учебное пособие.- М.: НИЯУ МИФИ, 2011. - 604 с.
4. Черняев А. П. Взаимодействие ионизирующего излучения с веществом / А. П. Черняев - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. - 152 с.
5. Канчели И. Н., Владимирова Я. П. Влияние выбора модели глаза на результаты дозно-анатомического планирования протонной терапии внутриглазных образований. // Росс. офтальмол. журнал. - 2016. – Т. 6. - С. 19-25.
6. Аветисов Э. С. Зрительная линия. Малая медицинская энциклопедия. - М.: Изд. СЭ. 1966. - Т. 3. - С. 979.

PLANNING PROTON THERAPY OF THE EYE BASED ON SIMULATION

M. A. Dolgoplov, S. Y. Babicheva

Voronezh State University

Proton therapy of intraocular malignant neoplasms technologically complicated procedure. In this paper we consider improving the quality dose-anatomical treatment planning due to the refined descriptions of the structures of the eye model.

Keywords: eye model, proton radiation therapy, dose-anatomical treatment planning.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО РЕЛАКСАЦИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ В АМОРФНЫХ СПЛАВАХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов, И. М. Пашуева

Воронежский государственный технический университет
bondarev_a_v@mail.ru

Методом Монте-Карло проведено моделирование релаксации намагниченности в моделях аморфных сплавов системы Re-Tb, а также чистого аморфного тербия, после выключения внешнего магнитного поля. Установлено, что релаксация намагниченности проходит в два этапа. На первом этапе наблюдается резкий спад намагниченности, а на втором этапе – медленное убывание намагниченности по логарифмическому закону.

Ключевые слова: аморфные сплавы, тербий, спиновое стекло, метод Монте-Карло, релаксация намагниченности.

Аморфные сплавы (АС) рения с тяжелыми редкоземельными металлами (Tb, Gd, Dy, Ho, Er) при концентрациях магнитных атомов, превышающих порог протекания, обладают свойствами спинового стекла [1]. Исследование релаксационных процессов в спиновых стеклах представляет значительный интерес для понимания природы спинового стекла [2, 3].

Методом молекулярной динамики построены модели атомной структуры АС $\text{Re}_x\text{Tb}_{100-x}$ ($x = 20, 29, 49, 59$ и 91 ат. %), а также чистого аморфного тербия, содержащие по 100 000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Межатомное взаимодействие описывалось полиномиальным потенциалом [4].

Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга исследовались магнитные свойства построенных моделей. Для описания взаимодействия между магнитными моментами атомов тербия использован модельный гамильтониан [5]:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - D \sum_i (\vec{n}_i \cdot \vec{S}_i)^2 - \mu h \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

где J_{ij} – интеграл обменного взаимодействия между спинами с номерами i и j ; D – константа случайной анизотропии; \vec{S}_i – гейзенберговский спин, находящийся в i -м узле аморфной структуры; \vec{n}_i – единичный вектор, определяющий направление оси локальной анизотропии; $\mu = 9,72 \mu_B$ – эффективный магнитный момент атома Tb; h – напряженность внешнего магнитного поля.

Зависимость интеграла обменного взаимодействия от межатомного расстояния r задана в виде линейной функции:

$$J(r) = \begin{cases} J_0 \frac{r_{\min} - r}{r_{\min} - r_1}, & r \leq r_{\min}, \\ 0, & r > r_{\min}, \end{cases} \quad (2)$$

где $J_0 = 19,26$ К – среднее значение обменного интеграла; r_1 – положение первого пика на парциальной парной функции радиального распределения $g_{\text{Tb-Tb}}(r)$; r_{\min} – положение первого минимума функции $g_{\text{Tb-Tb}}(r)$.

Зависимость константы анизотропии от концентрации атомов тербия для АС Re-Tb была выбрана в виде:

$$D/J_0 = 6,6 \cdot x/100, \quad (3)$$

где x – концентрация атомов Tb, ат. %. В модели чистого аморфного Tb константа анизотропии изменялась в широких пределах ($D/J_0 = 0 - 20$).

Для чистого аморфного Tb расчет релаксации намагниченности проводился при постоянной температуре $T = 1$ К. Сразу включалось внешнее магнитное поле напряженностью 1000 кЭ, направленное вдоль оси Oz , после чего система выдерживалась в поле в течение 9–20 циклов по 10^3 МК-шагов/спин до выхода намагниченности на постоянное значение (от 0,999 при $D/J_0 = 0$ до 0,93 при $D/J_0 = 20$). Затем поле выключалось, и исследовалась зависимость проекции намагниченности на ось Oz , нормированной на намагниченность насыщения, от времени $M(t)$.

При всех исследованных значениях отношения $D/J_0 > 0$ релаксация намагниченности проходит в два этапа. На первом этапе, протекающем непосредственно после выключения магнитного поля, намагниченность резко (за 1–2 цикла, состоящих из 10^3 МК-шагов/спин) уменьшается на некоторую величину ΔM_z . При увеличении D/J_0 величина скачка намагниченности монотонно увеличивается (рис. 1) и, возможно, выходит на постоянное значение $\sim 0,4$ при $D/J_0 \rightarrow \infty$. Можно предположить, что на этом этапе происходит разориентация магнитных моментов атомов Tb от состояния, в котором спины ориентированы по направлению внешнего поля, к состоянию, в котором ориентация спинов определяется главным образом направлением осей локальной анизотропии.

На втором этапе релаксации наблюдается очень медленный спад намагниченности с течением времени без признаков выхода на какое-либо равновесное значение. На этом этапе происходят повороты магнитных моментов атомов Tb на небольшие углы, что обусловлено конкуренцией обменного взаимодействия и случайной анизотропии.

Для проверки этого предположения были рассчитаны функции распределения $F(\theta)$ углов между направлениями магнитных моментов атомов Tb и направлениями соответствующих им осей случайной анизотропии при $D/J_0 = 6,6$ и $T = 1$ К в процессе релаксации намагниченности (рис. 2).

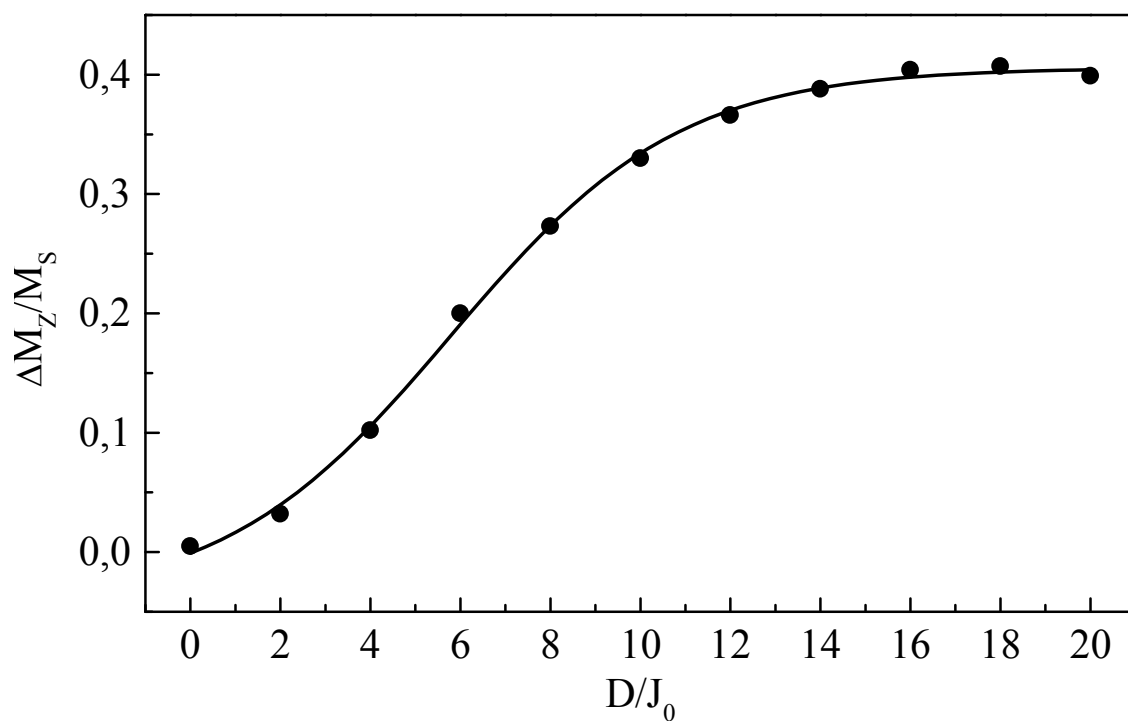


Рис. 1. Скачок намагниченности после выключения внешнего магнитного поля для модели аморфного Tb при $T = 1$ К

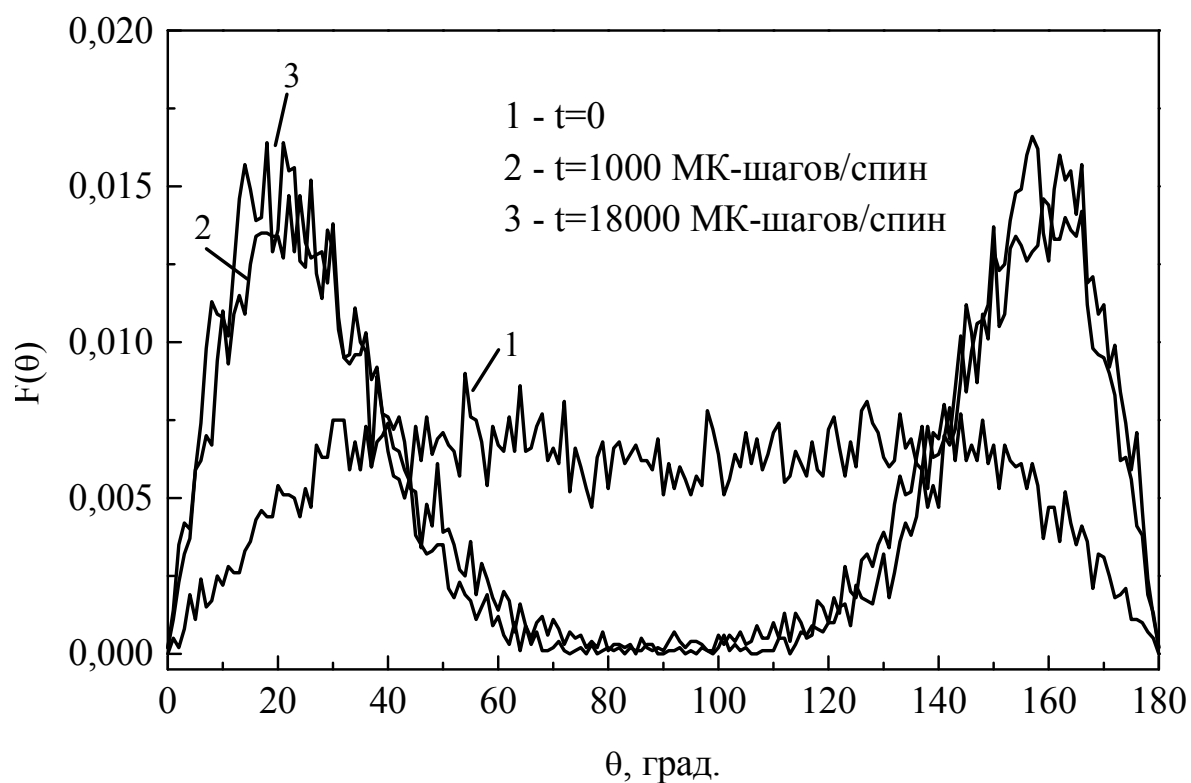


Рис. 2. Функция распределения углов между направлениями спинов и направлениями осей случайной анизотропии для модели аморфного Tb при $D/J_0 = 6,6$ и $T = 1$ К

В момент, непосредственно предшествующий выключению внешнего магнитного поля, функция $F(\theta)$ представляет собой практически равномерное распределение по углам от $\sim 30^\circ$ до $\sim 150^\circ$, так как в очень больших полях ($H = 1000$ кЭ) намагниченность полностью определяется величиной внешнего поля, а влияние случайной анизотропии пренебрежимо мало. Через один цикл, состоящий из 10^3 МК-шагов/спин, после выключения внешнего поля функция $F(\theta)$ претерпевает существенные изменения: на ней появляются два высоких максимума при $\theta = 20^\circ$ и $\theta = 160^\circ$ и широкий минимум при $\theta = 70^\circ - 110^\circ$. Это подтверждает предположение о том, что на первом этапе релаксации происходит переориентация спинов от направления, задаваемого внешним полем, к направлениям, близким к направлениям осей случайной анизотропии. В дальнейшем вид кривой $F(\theta)$ почти не меняется, лишь максимумы становятся немного выше. На рис. 2 также приведена функция $F(\theta)$, рассчитанная через 18 циклов по 10^3 МК-шагов/спин после выключения внешнего поля. Следовательно, на втором этапе релаксации происходят повороты спинов на небольшие углы, что обусловлено конкуренцией обменного взаимодействия и случайной анизотропии.

На рис. 3 приведены зависимости проекции намагниченности на ось Oz от времени для модели аморфного Tb при различных значениях отношения D/J_0 . Из рис. 3 видно, что при $D/J_0 = 0$ намагниченность с течением времени остается практически постоянной. При всех остальных значениях D/J_0 зависимости $M(t)$ являются монотонно убывающими.

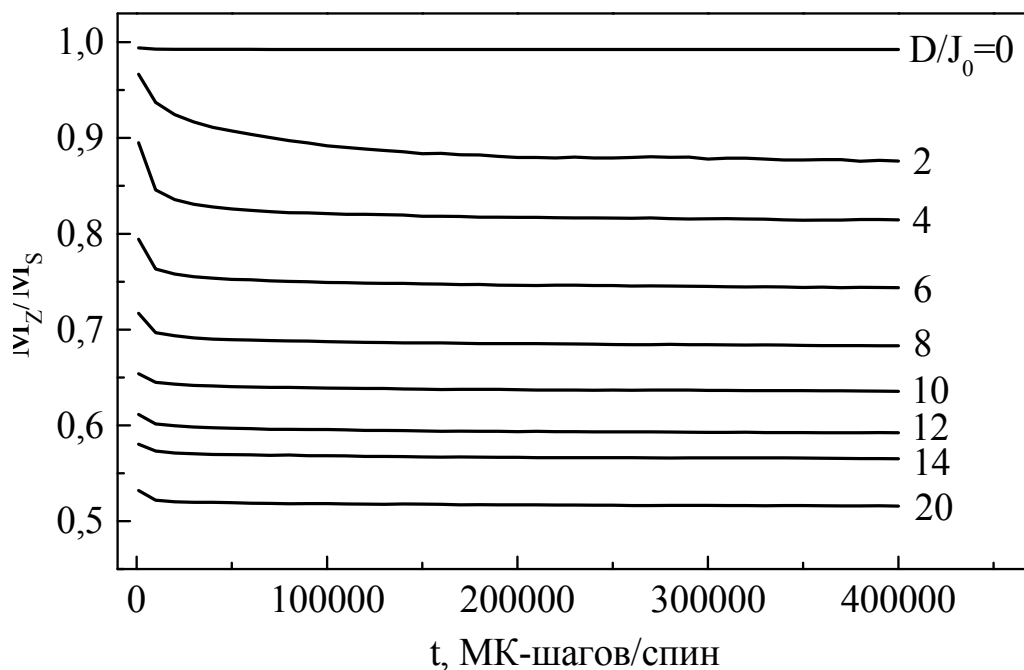


Рис. 3. Зависимость намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля для модели аморфного Tb при $T = 1$ К

При всех значениях константы анизотропии зависимость $M(t)$ хорошо аппроксимируется логарифмической функцией:

$$M(t) = a - b \cdot \ln t, \quad (4)$$

где a и b – подгоночные параметры.

Экспериментально подтверждено, что именно такая логарифмическая релаксация намагниченности имеет место в реальных спиновых стеклах [2, 3, 6, 7]. При приложении магнитного поля к образцу, охлажденному до $T < T_f$ без поля, намагниченность сначала скачком (за микроскопические времена) увеличивается, а затем медленно растет, приближаясь к равновесному значению по закону, близкому к логарифмическому. Если образец охлажден в поле до $T < T_f$, то после выключения поля намагниченность сначала падает скачком, а затем медленно уменьшается, оставаясь конечной даже через время 10^5 с [3]. Эта особенность свидетельствует о том, что в спиновых стеклах имеется широкий спектр времен релаксации, который простирается до макроскопических времен. Минимумы энергии, соответствующие различным наборам ориентаций спинов, отделены друг от друга макроскопически высокими барьерами, и поэтому релаксация происходит за макроскопически большие времена.

Для модели аморфного Tb при $D/J_0 = 6,6$ исследована релаксация намагниченности при различных температурах. На рис. 4 приведены проекции намагниченности на ось Oz от времени после выключения внешнего магнитного поля, рассчитанные при температурах от 10 до 70 К с шагом 10 К.

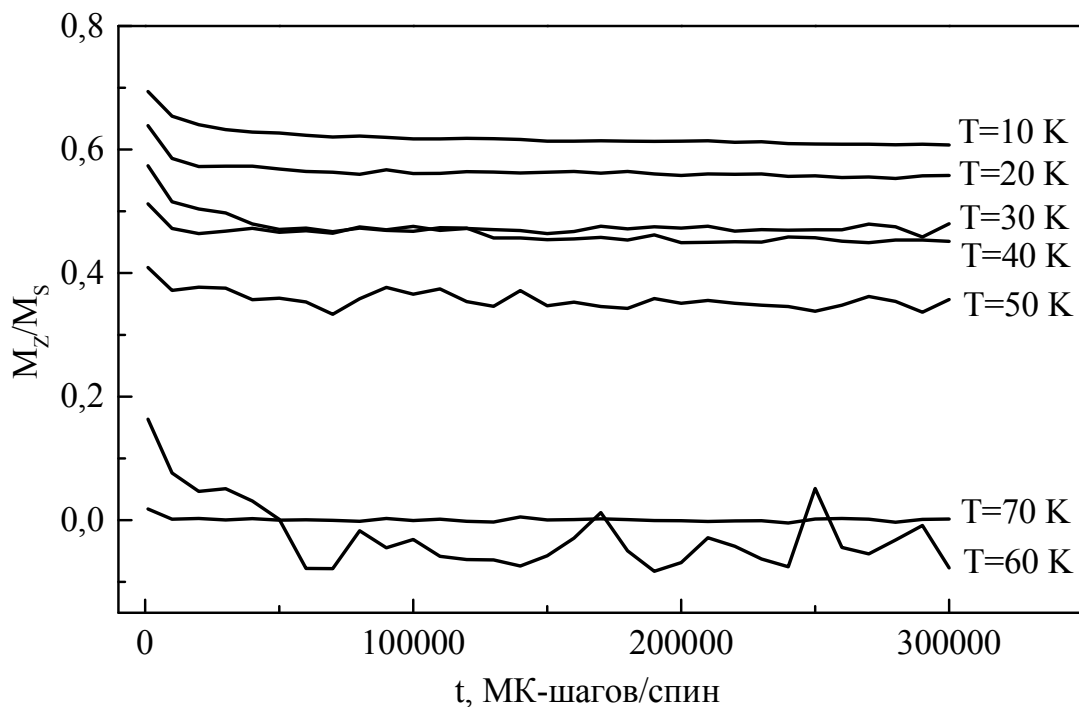


Рис. 4. Зависимость намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля для модели аморфного Tb ($D/J_0 = 6,6$) при различных температурах

При температурах $T = 10 - 50$ К, соответствующих спин-стекольному состоянию, намагниченность уменьшается со временем очень медленно, по логарифмическому закону (4). При температуре $T = 60$ К, близкой к температуре спин-стекольного перехода T_f , намагниченность быстро уменьшается и флуктуирует вокруг нулевого значения. При температурах $T > 60$ К, соответствующих парамагнитной фазе, намагниченность очень быстро спадает до нуля.

Аналогичным образом была исследована релаксация намагниченности в моделях АС $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$ ($x = 20, 29, 49, 59, 91$ ат. %). На рис. 5 приведена величина скачка намагниченности после выключения внешнего магнитного поля для АС Re-Tb при $T = 1$ К в зависимости от концентрации атомов тербия. Эта зависимость хорошо аппроксимируется убывающей экспонентой.

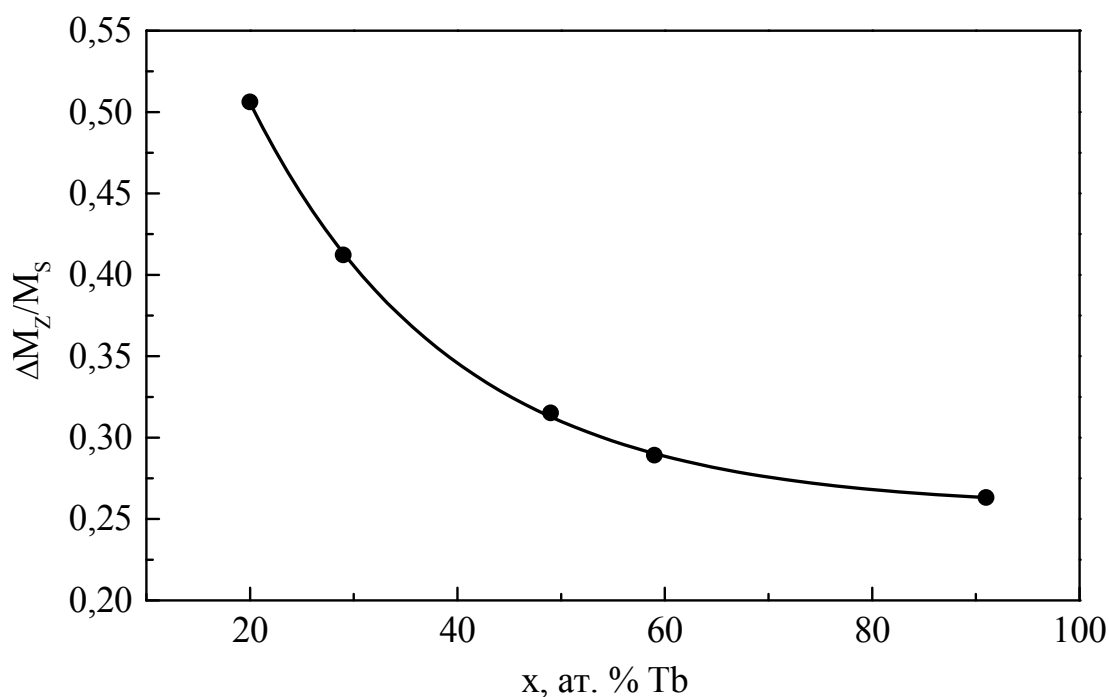


Рис. 5. Скачок намагниченности после выключения поля для моделей АС Re-Tb при $T = 1$ К

На рис. 6 приведена зависимость намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля для моделей АС Re-Tb при $T = 1$ К. Для сплавов всех исследованных составов релаксация намагниченности также имеет логарифмический характер.

Таким образом, в данной работе установлено, что в моделях аморфного тербия и АС системы Re-Tb в спин-стекольной фазе релаксация намагниченности имеет двухстадийный характер. На первом этапе происходит резкий спад намагниченности на некоторую величину ΔM_z , а на втором этапе – медленное уменьшение намагниченности по логарифмическому закону. Объяснение механизма двухстадийной релаксации дается на основе модели случайной анизотропии в АС Re-Tb.

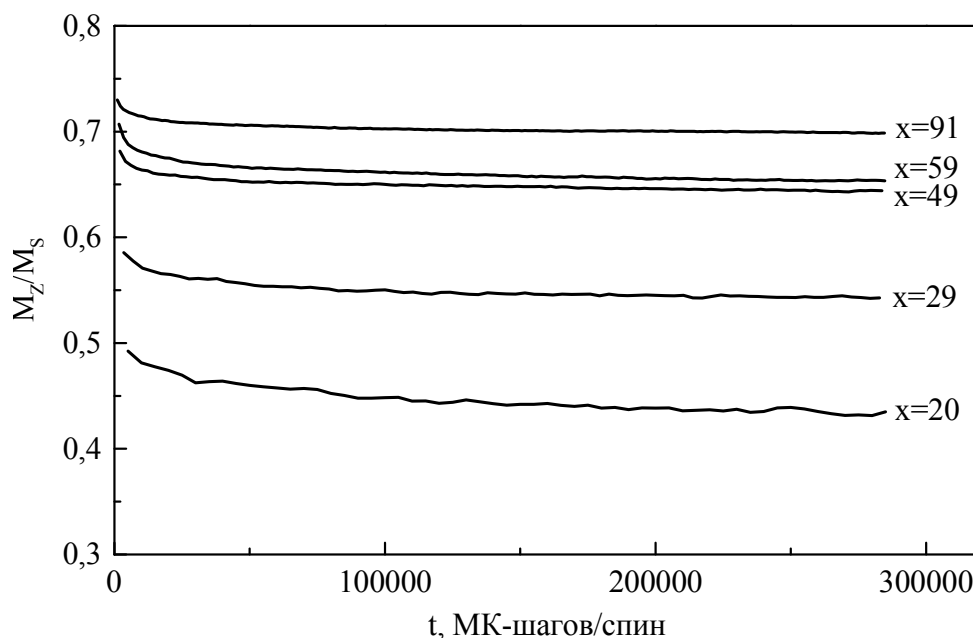


Рис. 6. Зависимость намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля для моделей АС Re-Tb при $T = 1$ К

Литература

1. Ю. В. Бармин, С. Ю. Балалаев, А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов, В. В. Ожерельев // Изв. РАН. Сер. физ. – 2006. – Т. 70. – № 8. – С. 1145.
2. С. Л. Гинзбург. Необратимые явления в спиновых стеклах. – М.: Наука, 1989. – 152 с.
3. В. С. Доценко // УФН. – 1993. – Т. 163. – № 6. – С. 1.
4. И. Л. Батаронов, А. В. Бондарев, Ю. В. Бармин // Изв. РАН. Сер. физ. – 2000. – Т. 64. – № 9. – С. 1666.
5. R. Harris, M. Plischke, M. J. Zuckermann // Phys. Rev. Lett. – 1973. – Vol. 31. – № 3. – P. 160.
6. И. В. Золотухин, Ю. В. Бармин. Стабильность и процессы релаксации в металлических стеклах. – М.: Металлургия, 1991. – 158 с.
7. H. Takayama // J. Magn. Magn. Mater. – 2004. – Vol. 272-276. – P. 256.

MONTE CARLO SIMULATION OF MAGNETIZATION RELAXATION IN AMORPHOUS ALLOYS OF RARE-EARTH METALS

A. V. Bondarev, I. L. Bataronov, I. M. Pashueva

Voronezh State Technical University

Using the Monte Carlo method, we simulated the magnetization relaxation in the models of the Re-Tb amorphous alloys and of pure amorphous Tb after switching off the external magnetic field. We established that the magnetization relaxation goes in two stages. On the first stage the sharp drop of the magnetization is observed, and on the second stage the slow decreasing of the magnetization by the logarithmic law is observed.

Keywords: amorphous alloys, terbium, spin glass, Monte Carlo method, magnetization relaxation.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ АМОΡФНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Re-Gd

А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов, И. М. Пашуева, А. И. Бочаров

Воронежский государственный технический университет
bondarev_a_v@mail.ru

Методом молекулярной динамики исследована атомная структура аморфных сплавов системы Re-Gd в широком интервале концентраций. Функции радиального распределения и параметры топологического ближнего порядка находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Композиционный ближний порядок исследовался с помощью парциальных функций радиального распределения. Установлено, что основные параметры топологического ближнего порядка r_i/r_1 и Z_1 не зависят от состава сплава.

Ключевые слова: аморфные сплавы, рений, гадолиний, параметры ближнего порядка, угловые корреляционные функции.

Для исследования атомной структуры аморфных металлических сплавов (АС) широко используются методы компьютерного моделирования [1, 2]. Однако до настоящего времени атомная структура аморфных сплавов тугоплавких переходных металлов с редкоземельными металлами остается малоизученной. В данных системах, полученных методом ионно-плазменного напыления, возможно образование аморфного состояния в широком интервале концентраций.

Методом молекулярной динамики были построены модели атомной структуры АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ (12, 37, 61, 67, 93 ат. %), содержащие по 100 000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Для описания межатомного взаимодействия в исследуемой системе был использован сферически симметричный парный потенциал, имеющий вид полинома четвертой степени [3]:

$$U(r) = \begin{cases} C_1 \cdot (r - r_k)^4 + C_2 \cdot (r - r_k)^3 + C_3 \cdot (r - r_k)^2 & \text{при } r \leq r_k, \\ 0 & \text{при } r > r_k, \end{cases} \quad (1)$$

где r_k – радиус обрезания потенциала, C_1, C_2, C_3 – коэффициенты.

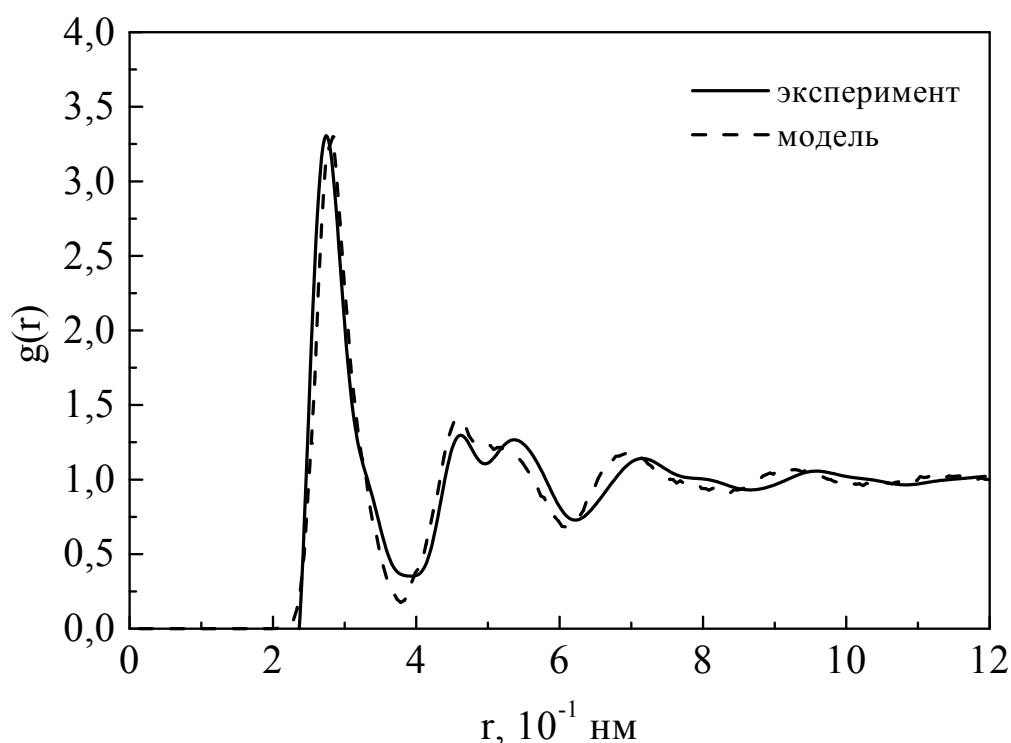
Значение r_k было выбрано приблизительно равным расстоянию до первого минимума парной ФРП $g(r)$. Для расчета коэффициентов C_1, C_2 и C_3 использовались значения для равновесного межатомного расстояния, энергии атомизации, атомного объема и модуля объемного сжатия. Параметры потенциала, рассчитанные для атомных пар Re-Re, Re-Gd и Gd-Gd, приведены в табл. 1.

Для численного интегрирования уравнений движения применялся алгоритм Верле в скоростной форме [4]. Шаг интегрирования по времени составлял $2 \cdot 10^{-15}$ с. Моделирование проводилось при постоянной температуре $T = 300$ К.

Параметры полиномиального потенциала для АС Re-Gd

| Атомные пары | $C_1, 10^3 \text{ эВ/нм}^4$ | $C_2, 10^3 \text{ эВ/нм}^3$ | $C_3, 10^2 \text{ эВ/нм}^2$ | $r_k, 10^{-1} \text{ нм}$ |
|--------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------------|
| Re-Re | -6,4188 | -3,9867 | -4,5543 | 3,699 |
| Re-Gd | -0,8191 | -1,6072 | -2,4660 | 4,266 |
| Gd-Gd | -1,8013 | -0,0226 | -0,6971 | 4,833 |

Парная функция радиального распределения $g(r)$, рассчитанная для модели АС $\text{Re}_{88}\text{Gd}_{12}$, приведена на рис. 1 в сравнении с функцией $g(r)$, рассчитанной по данным рентгенодифракционного эксперимента [5]. Для других составов функции $g(r)$ имеют аналогичный вид. Экспериментальные и модельные функции радиального распределения хорошо совпадают. Таким образом, построенные модели адекватно воспроизводят атомную структуру исследуемых АС.

Рис. 1. Парная функция распределения атомов АС $\text{Re}_{88}\text{Gd}_{12}$

Значения параметров топологического ближнего порядка атомной структуры АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$, определенных по функциям радиального распределения, приведены в табл. 2. Здесь r_1, r_2, r_3 – радиусы координационных сфер, $\sigma(r_1)$ – среднеквадратическое отклонение положений атомов в первой координационной сфере, Z_1 – координационное число первой сферы. Из табл. 2 видно, что модельные параметры топологического ближнего порядка с хорошей точно-

стью совпадают с экспериментальными. Результаты моделирования подтверждают сделанный на основе данных рентгенодифракционного эксперимента вывод о независимости топологического ближнего порядка от состава сплава: относительные радиусы координационных сфер r_i/r_1 и координационное число первой сферы Z_1 не изменяются во всем диапазоне составов исследуемых сплавов. Наблюдается увеличение среднеквадратичного отклонения положений атомов в первой координационной сфере $\sigma(r_1)$ для составов с концентрацией атомов Gd, близкой к 50 ат. %, свидетельствующее об увеличении статистического разброса в положениях атомов.

Таблица 2

Параметры топологического ближнего порядка АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$

| x , ат. % Gd | $r_1, 10^{-1}$ нм | r_2/r_1 | r_3/r_1 | r_4/r_1 | $\sigma(r_1), 10^{-1}$ нм | Z_1 |
|-----------------|-------------------|-----------|-----------|-----------|---------------------------|-------|
| 12, эксперимент | 2,74 | 1,66 | 1,92 | 2,57 | 0,14 | 13,1 |
| 12, модель | 2,76 | 1,60 | 1,84 | 2,52 | 0,13 | 13,1 |
| 37, эксперимент | 2,88 | 1,63 | 1,88 | 2,52 | 0,25 | 12,9 |
| 37, модель | 2,85 | 1,66 | 1,94 | 2,48 | 0,24 | 13,2 |
| 61, эксперимент | 3,16 | 1,62 | 1,85 | 2,60 | 0,26 | 13,0 |
| 61, модель | 3,12 | 1,66 | 1,93 | 2,48 | 0,23 | 12,9 |
| 67, эксперимент | 3,28 | 1,61 | 1,81 | 2,60 | 0,21 | 13,1 |
| 67, модель | 2,16 | 1,66 | 1,95 | 2,49 | 0,24 | 13,3 |
| 93, эксперимент | 3,54 | 1,62 | 1,90 | 2,59 | 0,16 | 13,2 |
| 93, модель | 3,40 | 1,65 | 1,93 | 2,48 | 0,14 | 13,2 |

Таким образом, установлено, что основные параметры топологического ближнего порядка: r_i/r_1 и Z_1 для АС системы Re-Gd не зависят от состава сплава.

Для всех исследованных составов были рассчитаны распределения координационных чисел. На рис. 2 приведены распределения координационных чисел для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x = 12, 61$ и 93 ат. %). Для всех составов, кроме $x = 93$ ат. % Gd, максимум распределения приходится на $Z_1 = 12$, для АС $\text{Re}_7\text{Gd}_{93}$ максимум приходится на $Z_1 = 13$.

Построены угловые корреляционные функции (УКФ) $g(\omega)$ для атомов, являющихся геометрическими соседями, т.е. имеющих общую грань многогранника Вороного. На рис. 3 приведены общие УКФ для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x = 12, 61$ и 93 ат. %). Первый максимум УКФ, приходящийся на угол около 60° , может быть образован правильными треугольниками, образующими грани тетраэдров. Второй максимум приходится на угол $105^\circ - 109^\circ$,

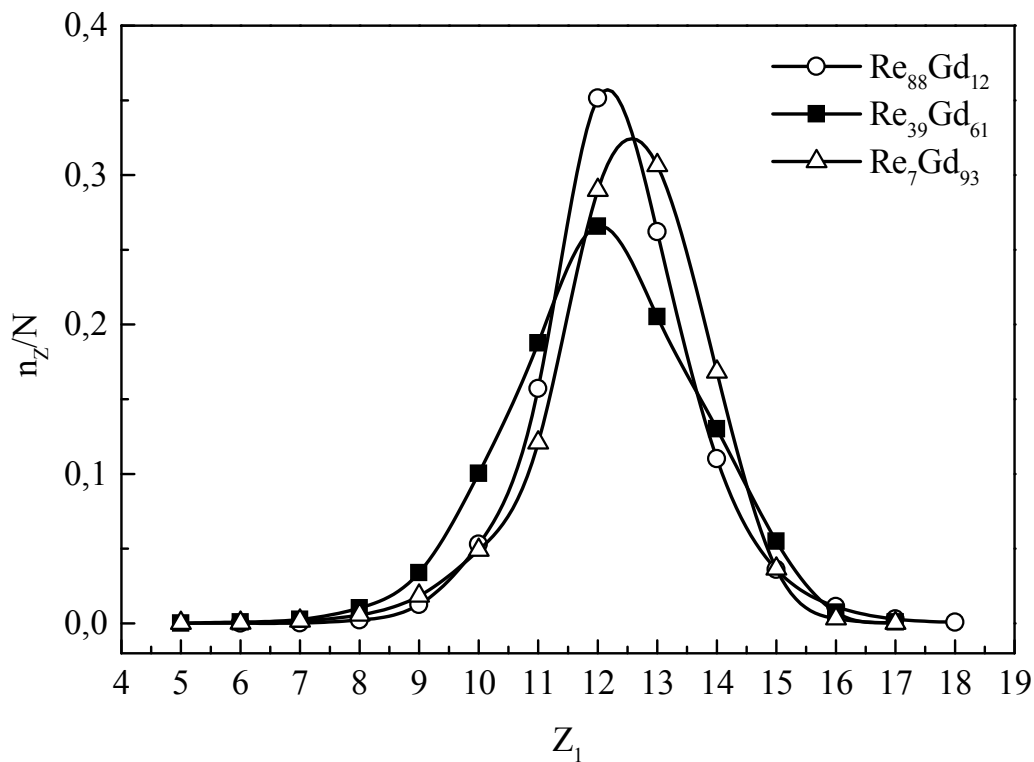


Рис. 2. Распределение координационных чисел Z_1 для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x = 12, 61$ и 93 ат. %): N – общее число атомов; n_Z – число атомов с координационным числом Z_1

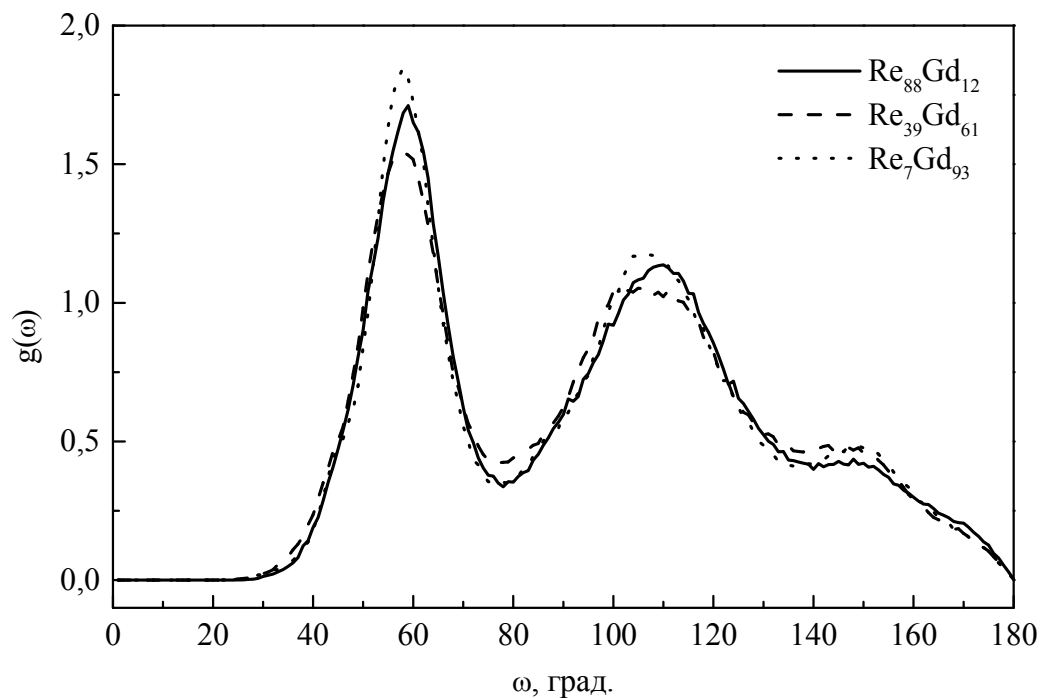


Рис. 3. Общие угловые корреляционные функции моделей АС Re-Gd

что близко к углу 110° между ребрами тетраэдров, имеющих общую грань. Третий небольшой по высоте пик приходится на угол около 150° , возможно, являющийся комбинацией углов 60° и 90° . Таким образом, в структуре АС сис-

темы Re-Gd преобладает политетраэдрический ближний порядок. На рис. 4 приведены парциальные УКФ, построенные вокруг атомов Re, на рис. 5 – вокруг атомов Gd. Общие УКФ практически не изменяются с изменением состава сплава. На парциальных УКФ положения максимумов систематически сдвигаются в сторону бóльших углов при увеличении концентрации атомов Gd.

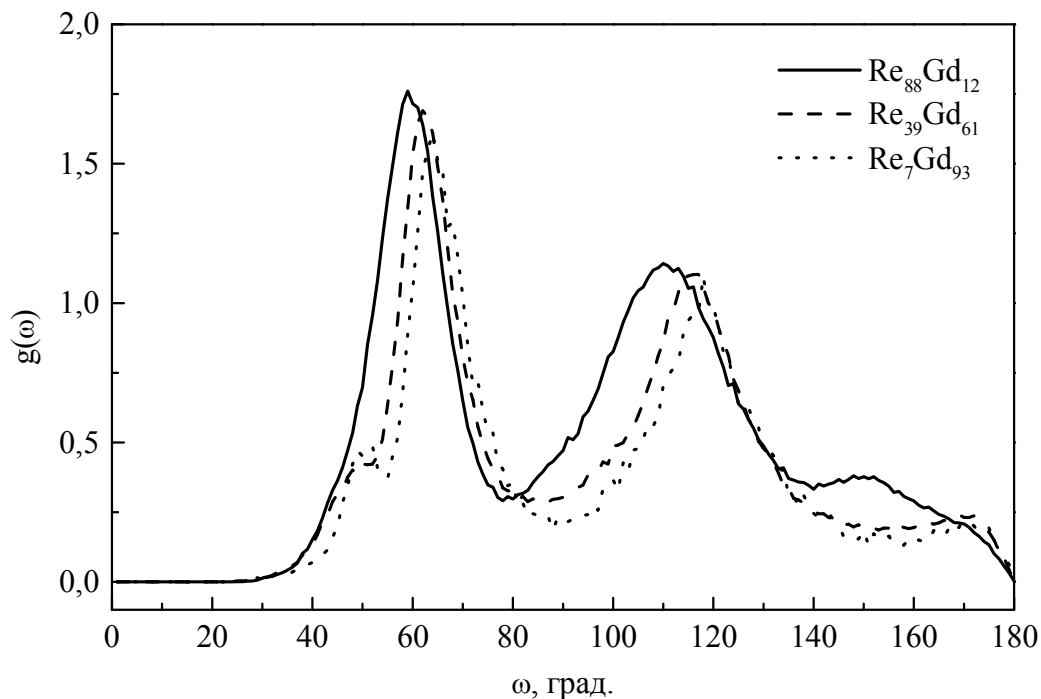


Рис. 4. Парциальные угловые корреляционные функции моделей АС Re-Gd, построенные вокруг атомов Re

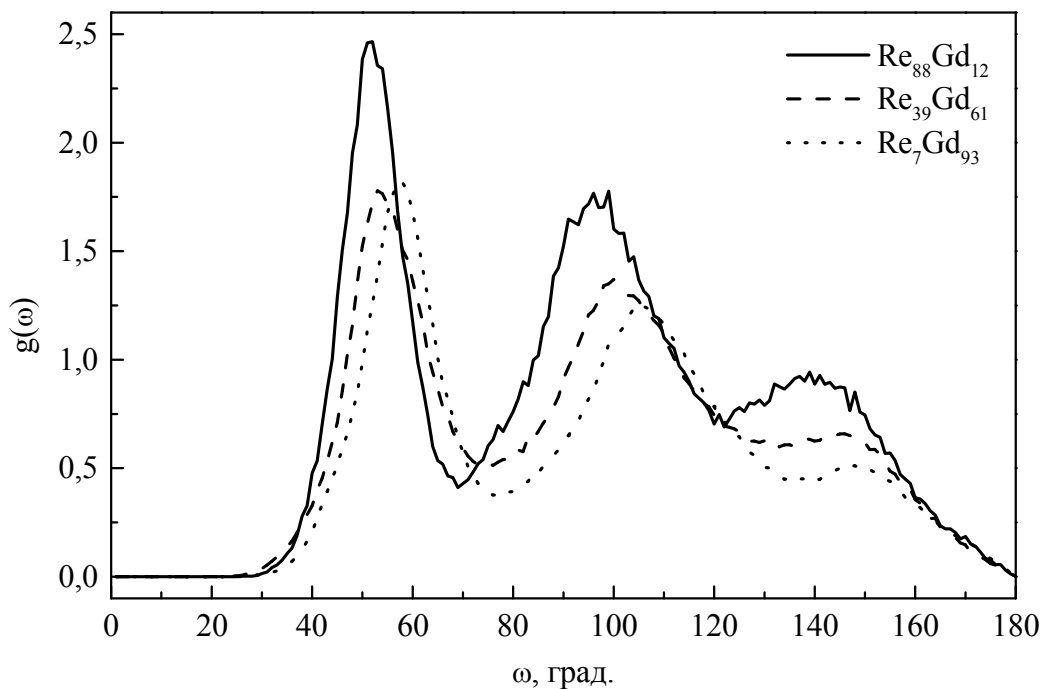


Рис. 5. Парциальные угловые корреляционные функции моделей АС Re-Gd, построенные вокруг атомов Gd

Отсутствие изменений общих УКФ и значений Z_1 при изменении состава сплава свидетельствует о существовании локальных корреляций в расположении атомов, стабильных по отношению к такому изменению. Такими локальными структурными единицами могут служить координационные многогранники соответствующих кристаллических соединений [6, 7]. В системе Re-Gd такими соединениями являются сложноупакованные тетраэдрические кристаллические структуры – фазы Лавеса, координационные многогранники которых (многогранники Франка–Каспера) характеризуются большими значениями координационных чисел: 12, 14, 15 и 16. Наличие в структуре значительной доли атомов с координационным числом $Z_1 = 13$ свидетельствует о существовании в структуре значительной доли таких локальных атомных конфигураций, которые можно свести к набору искаженных многогранников Франка–Каспера с $Z_1 = 15$ и $Z_1 = 16$, лишившихся соответственно двух и трех атомов.

Структура композиционного ближнего порядка АС Re-Gd изучалась с помощью парциальных парных функций радиального распределения $g_{\text{Re-Re}}(r)$, $g_{\text{Re-Gd}}(r)$ и $g_{\text{Gd-Gd}}(r)$. Положения первых пиков функций $g_{\text{Re-Re}}(r)$ и $g_{\text{Gd-Gd}}(r)$ согласуются с атомными радиусами этих элементов.

Положения максимумов на функциях $g_{\text{Re-Re}}(r)$ и $g_{\text{Re-Gd}}(r)$ для атомных пар Re-Re и Re-Gd не изменяются с изменением состава сплава. Положения максимумов на функциях $g_{\text{Gd-Gd}}(r)$ также остаются постоянными почти для всех составов: $r_1 = 0,354\text{--}0,362$ нм при $x = 37\text{--}93$ ат. % Gd, что близко к диаметру атома гадолия ($d_{\text{Gd}} = 0,358$ нм). Лишь при $x = 12$ ат. % Gd имеет место заниженное значение $r_1 = 0,346$ нм. С увеличением концентрации атомов Gd первый пик функции $g_{\text{Gd-Gd}}(r)$ становится более узким и высоким. Относительные радиусы координационных сфер r_i/r_1 для всех трех типов атомных пар не изменяются с изменением состава сплава.

Парциальные координационные числа $Z_{\text{Re-Re}}$, $Z_{\text{Re-Gd}}$, $Z_{\text{Gd-Re}}$ и $Z_{\text{Gd-Gd}}$ были рассчитаны как среднее число геометрических соседей определенного сорта.

Параметры композиционного ближнего порядка, рассчитанные по парциальным функциям радиального распределения, приведены в табл. 3.

Таблица 3

Параметры композиционного ближнего порядка АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$

| Сплавы | $\text{Re}_{88}\text{Gd}_{12}$ | $\text{Re}_{63}\text{Gd}_{37}$ | $\text{Re}_{39}\text{Gd}_{61}$ | $\text{Re}_{33}\text{Gd}_{67}$ | $\text{Re}_{33}\text{Gd}_{93}$ |
|--|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| $r_1^{\text{Re-Re}}, 10^{-1}$ нм | 2,77 | 2,76 | 2,76 | 2,75 | 2,76 |
| $r_1^{\text{Re-Gd}}, 10^{-1}$ нм | 3,10 | 3,07 | 3,10 | 3,10 | 3,11 |
| $r_1^{\text{Gd-Gd}}, 10^{-1}$ нм | 3,46 | 3,62 | 3,57 | 3,54 | 3,60 |
| $\sigma(r_1)^{\text{Re-Re}}, 10^{-1}$ нм | 0,113 | 0,109 | 0,104 | 0,103 | 0,106 |
| $\sigma(r_1)^{\text{Re-Gd}}, 10^{-1}$ нм | 0,132 | 0,127 | 0,122 | 0,115 | 0,118 |
| $\sigma(r_1)^{\text{Gd-Gd}}, 10^{-1}$ нм | 0,081 | 0,085 | 0,088 | 0,093 | 0,091 |
| $Z_1^{\text{Re-Re}}$ | 11,6 | 7,6 | 4,3 | 3,6 | 0,7 |
| $Z_1^{\text{Re-Gd}}$ | 1,9 | 5,4 | 8,1 | 8,7 | 11,1 |
| $Z_1^{\text{Gd-Re}}$ | 14,2 | 9,1 | 5,2 | 4,3 | 0,8 |
| $Z_1^{\text{Gd-Gd}}$ | 2,4 | 6,6 | 9,8 | 10,6 | 13,3 |

Из анализа приведенных выше результатов можно сделать вывод о том, что для атомных пар Re-Re и Re-Gd основные параметры композиционного ближнего порядка – радиус первой координационной сферы r_1 и относительные радиусы координационных сфер r_i/r_1 – практически не зависят от состава сплава.

Литература

1. Белашенко Д. К. Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ. – М.: МИСиС, 2005. – 408 с.
2. Полухин В. А., Ватолин Н. А. Моделирование аморфных металлов. – М.: Наука, 1985. – 288 с.
3. Батаронов И. Л., Бондарев А. В., Бармин Ю. В. // Изв. РАН. Сер. физ. – 2000. – Т. 64. – № 9. – С. 1666.
4. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
5. Бондарев А. В., Бармин Ю. В., Батаронов И. Л. и др. // Вестник ВГТУ. Серия Физико-математическое моделирование. – 2006. – Т. 2. – № 8. – С. 48.
6. Бармин Ю. В., Вавилова В. В., Золотухин И. В. и др. // Доклады АН СССР. – 1989. – Т. 307. – № 2. – С. 371.
7. Бармин Ю. В., Золотухин И. В., Вавилова В. В. и др. // Доклады АН СССР. – 1989. – Т. 304. – № 4. – С. 895.

COMPUTER SIMULATION OF ATOMIC STRUCTURE OF AMORPHOUS ALLOYS OF THE Re-Gd SYSTEM

A. V. Bondarev, I. L. Bataronov, I. M. Pashueva, A. I. Bocharov

Voronezh State Technical University

Using the molecular dynamics method, we studied the atomic structure of Re-Gd amorphous alloys in the wide range of concentrations. Radial distribution functions and parameters of the topological short-range order are in good agreement with the experimental data. The compositional short-range order was studied by partial radial distribution functions. It was established that the basic parameters of the topological short-range order r_i/r_1 and Z_1 do not depend on the composition of the alloy.

Keywords: amorphous alloys, rhenium, gadolinium, short-range order parameters, angular correlation functions.

РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Re-Gd

А. В. Бондарев, В. В. Ожерельев, И. Л. Батаронов

Воронежский государственный технический университет
bondarev_a_v@mail.ru

Методом дифракции рентгеновских лучей исследована атомная структура аморфных сплавов системы $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x=12, 37, 61, 67, 93$ ат. %). Рассчитаны структурные факторы и радиальные функции распределения, определена концентрационная зависимость параметров топологического ближнего порядка: радиусов координационных сфер r_i , координационного числа первой сферы Z_1 и среднеквадратичного отклонения положений атомов в первой сфере $\sigma(r_1)$. Установлено, что основные параметры топологического ближнего порядка (Z_1 и r_i/r_1) не зависят от состава сплава.

Ключевые слова: аморфные сплавы, структурный фактор, функция радиального распределения, параметры топологического ближнего порядка.

Исследование атомной структуры аморфных металлических сплавов является одной из важнейших задач физики аморфного состояния, необходимой как для построения теорий структуры некристаллических материалов, так и для понимания их уникальных физических свойств: электрических, магнитных, механических. Однако в данной области исследований существует ряд серьезных проблем и нерешенных вопросов. В частности, недостаточно изучена зависимость параметров ближнего порядка аморфных сплавов (АС) при изменении концентрации одного из компонентов в широком диапазоне [1].

Атомная структура аморфных сплавов $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x=12, 37, 61, 67, 93$ ат. %) исследовалась с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-3.0. В качестве источника излучения использовалась рентгеновская трубка с молибденовым анодом. Для монохроматизации излучения и уменьшения флюоресцентного фона использовался графитовый монохроматор, расположенный в дифрагированном пучке. В качестве детектора рентгеновского излучения использовался сцинтилляционный счетчик.

Съемку кривых интенсивности рассеянного рентгеновского излучения $I(2\theta)$ проводили в режиме “регистрация по точкам” с набором импульсов в каждой точке в течение 100 с. Интервал съемки составлял $5^\circ\text{-}80^\circ$ ($k=(0,77\text{-}11,37)\cdot 10\text{ нм}^{-1}$). Шаг сканирования выбрали равным $0,2^\circ$. От каждого образца было снято по 4 дифрактограммы, которые затем были усреднены между собой, что позволило добиться относительной погрешности 1-2%.

В измеренную интенсивность рассеянного рентгеновского излучения вносили поправки на воздушный фон [2], поляризацию и поглощение [3]. Затем интенсивность нормировалась в электронные единицы [4], после чего рассчиты-

вался структурный фактор $S(k)$ с учетом интенсивности некогерентного рассеяния и поправок на аномальную дисперсию атомного фактора рассеяния [4].

Для расчета функции радиального распределения использовался следующий алгоритм [5]: сначала экспериментальная функция $S(k)-1$ сглаживается путем разложения по набору базисных функций, представленных в форме волновых пакетов, а затем производится Фурье-обращение сглаженного структурного фактора. Применение этого метода значительно повышает точность восстановления профиля функции РФР и обеспечивает устойчивость к случайным ошибкам эксперимента.

Измеренные кривые зависимостей интенсивности рассеянного рентгеновского излучения от угла дифракции $I(2\theta)$ имеют вид, типичный для аморфных металлов: высокий первый пик, расщепленный второй пик с характерным плечом в области больших углов и незначительный третий пик. С увеличением концентрации атомов гадолиния угловое положение пиков смещается в сторону меньших значений угла дифракции 2θ .

Структурные факторы $S(k)$, рассчитанные по измеренным кривым интенсивности $I(2\theta)$ для всех исследуемых сплавов, приведены на рис. 1. Изменение вида кривых $S(k)$ подчиняется тем же закономерностям, что и кривых $I(2\theta)$. При увеличении концентрации атомов гадолиния положение пиков смещается в сторону меньших значений волнового вектора k . Высота первого пика структурного фактора максимальна для крайних составов (12 и 93 ат. % Gd).

По структурным факторам рассчитаны парные функции радиального распределения атомов $g(r) = \rho(r)/\rho_0$ (рис. 2) и полные ФРП $W(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$. С помощью функций $g(r)$ и $W(r)$ определены основные параметры топологического ближнего порядка: радиусы координационных сфер r_1, r_2, r_3 и r_4 , среднеквадратичное отклонение атомных положений в первой координационной сфере $\sigma(r_1)$ и координационное число первой сферы Z_1 .

Зависимости параметров топологического ближнего порядка от концентрации атомов гадолиния приведены на рис. 3–5.

Радиус первой координационной сферы АС Re-Gd возрастает прямо пропорционально концентрации атомов большего диаметра – гадолиния (рис. 3). Значения r_1 для сплавов $\text{Re}_{88}\text{Gd}_{12}$ (0,279 нм) и $\text{Re}_7\text{Gd}_{93}$ (0,354 нм) близки к значениям атомных диаметров рения ($d_{\text{Re}}=0,274$ нм) и гадолиния ($d_{\text{Gd}}=0,358$ нм) соответственно.

Относительные радиусы координационных сфер r_i/r_1 не зависят от состава сплава во всем исследуемом интервале концентраций (рис. 4). Средние значения $\overline{r_2/r_1}=1,65$, $\overline{r_3/r_1}=1,92$, $\overline{r_4/r_1}=2,55$ близки к известным из литературы значениям радиусов координационных сфер для большинства аморфных металлических сплавов ($\overline{r_2/r_1}=1,66$, $\overline{r_3/r_1}=1,98$, $\overline{r_4/r_1}=2,53$) [6].

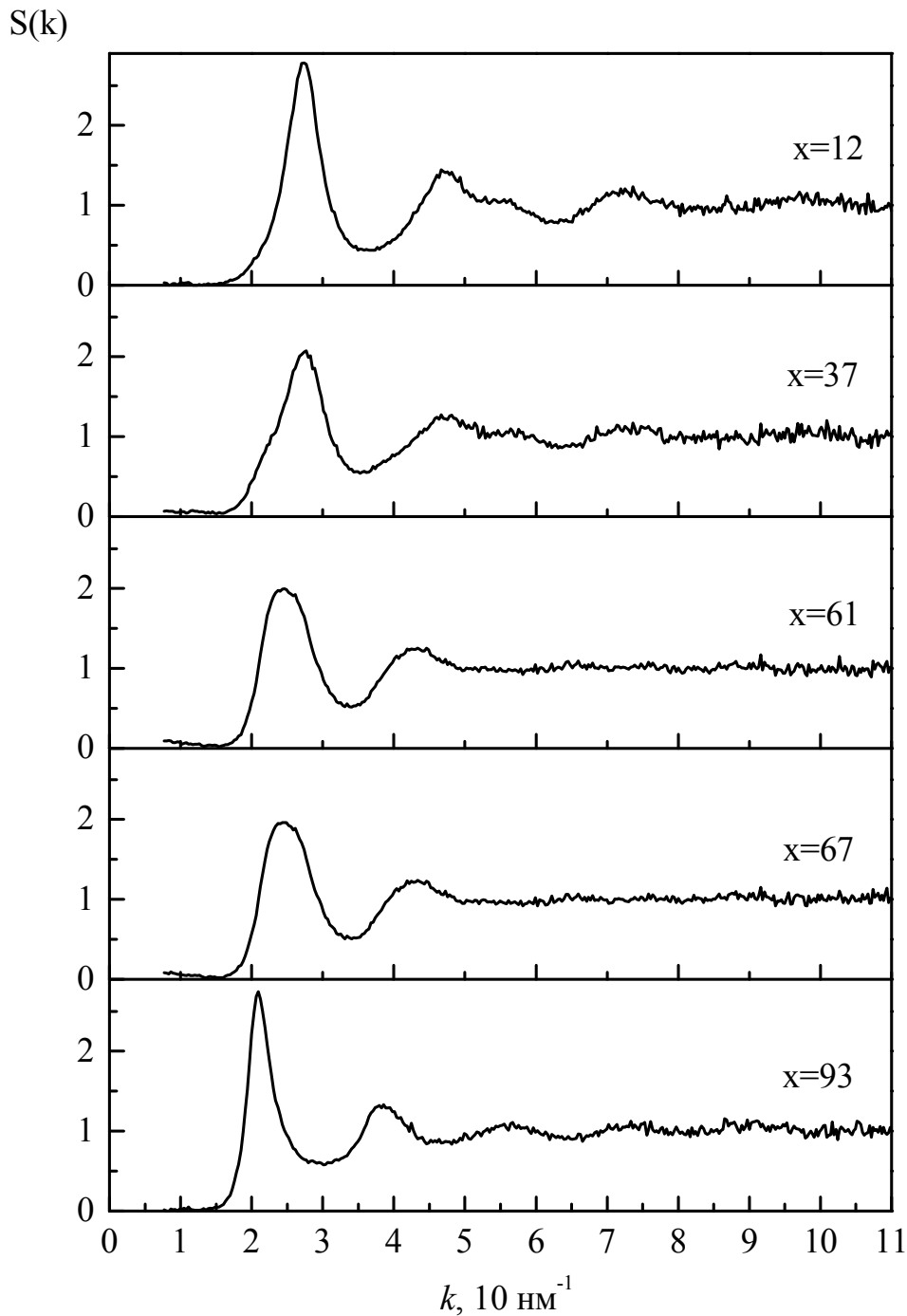


Рис. 1. Структурные факторы $S(k)$ АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$

Увеличение среднеквадратичного отклонения атомов в первой сфере для сплавов, близких к середине концентрационного интервала (рис. 5), обусловлено значительным отличием атомных диаметров компонентов ($d_{\text{Gd}}/d_{\text{Re}}=1,307$).

Координационное число первой сферы не зависит от состава сплава ($\bar{Z}_1=12,9$) и совпадает с известными из литературы средними значениями координационного числа $Z_1 \approx 11-13$ [6].

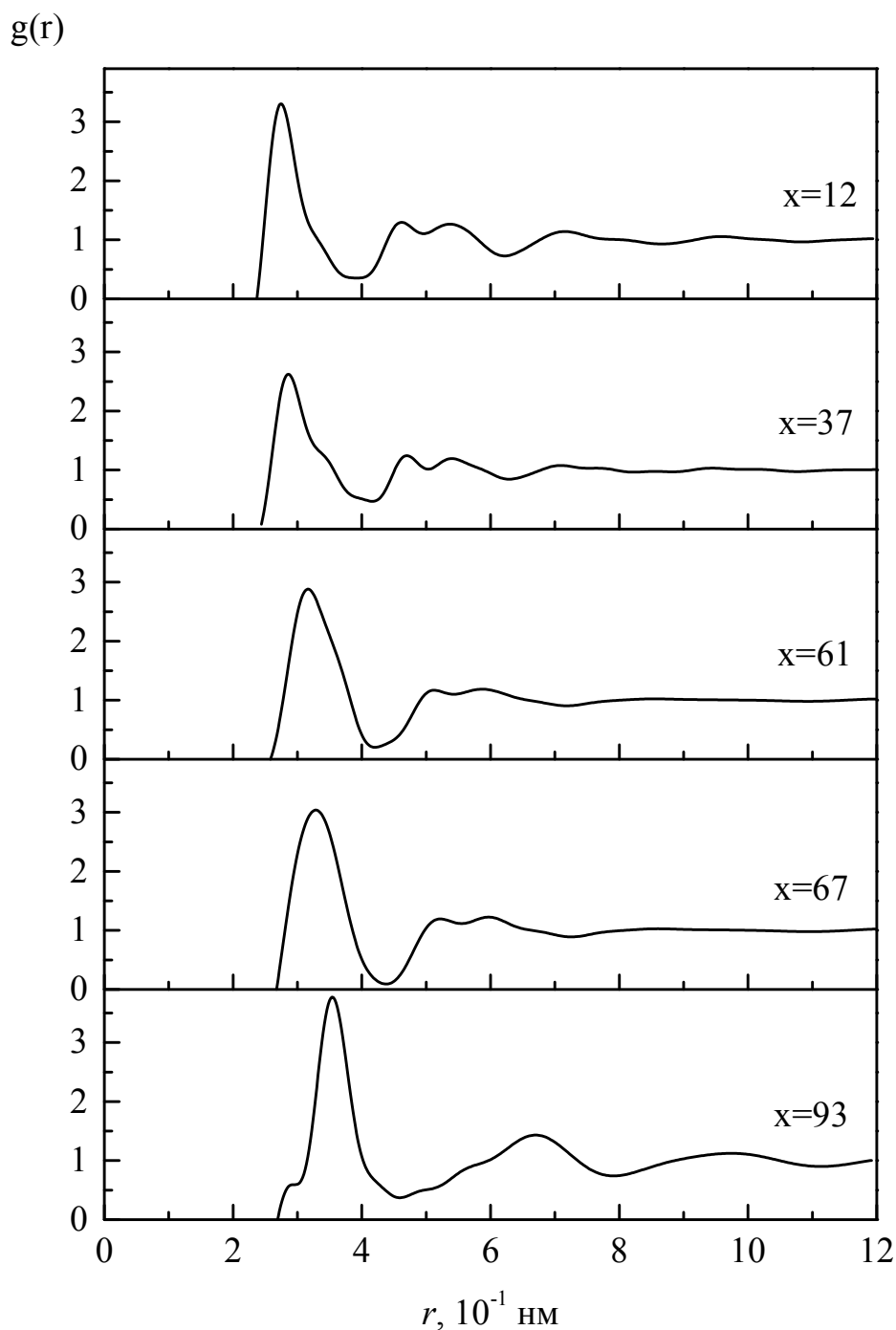


Рис. 2. Парные функции распределения $g(r)$ АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$

Итак, можно сделать вывод о том, что в АС Re-Gd в широкой области концентраций основные параметры топологического ближнего порядка (Z_1 и r_i/r_1) не зависят от состава сплава. Изменение значений r_1 и $\sigma(r_1)$ обусловлено различием в атомных диаметрах рения и гадолиния.

Тот факт, что значение координационного числа первой сферы Z_1 для АС Re-Gd остается постоянным при изменении состава сплава, свидетельствует о наличии в структуре сплавов локальных структурных единиц, стабильных по отношению к таким изменениям. Есть основания предположить, что такими

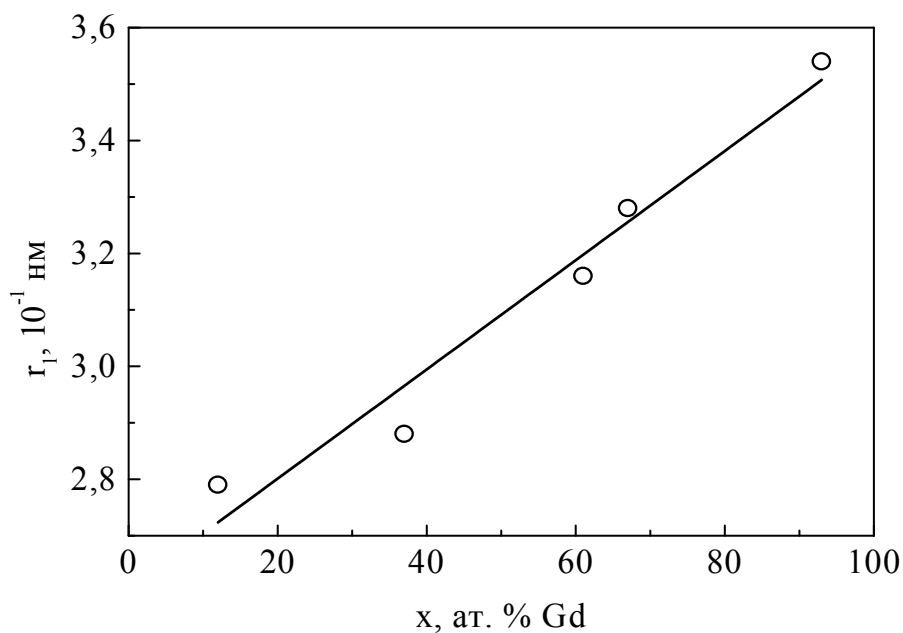


Рис. 3. Зависимость радиуса первой координационной сферы АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ от состава

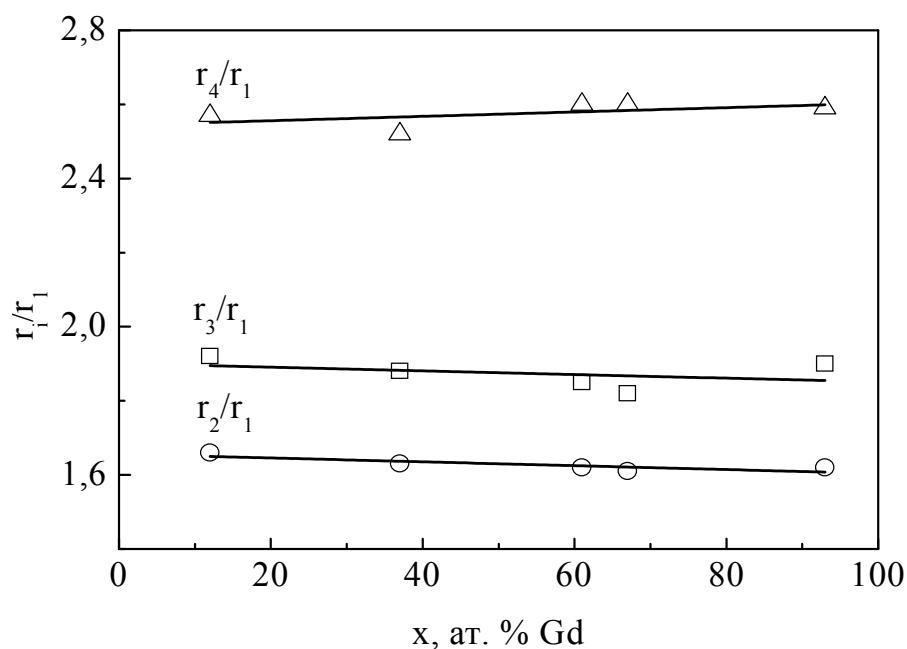


Рис. 4. Зависимость относительных радиусов координационных сфер АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ от состава

структурными единицами могут служить координационные многогранники соответствующих кристаллических соединений. В системе Re-Gd таким соединением является сложноупакованная политетраэдрическая фаза Лавеса GdRe_2 , относящаяся к семейству фаз Франка-Каспера. Ее координационные многогранники характеризуются большими значениями координационных чисел: 12, 14, 15 и 16. Среднее значения координационного числа Z_1 для данной системы близко к известному значению $\bar{Z}_1 = 13,2$ для фаз Франка-Каспера.

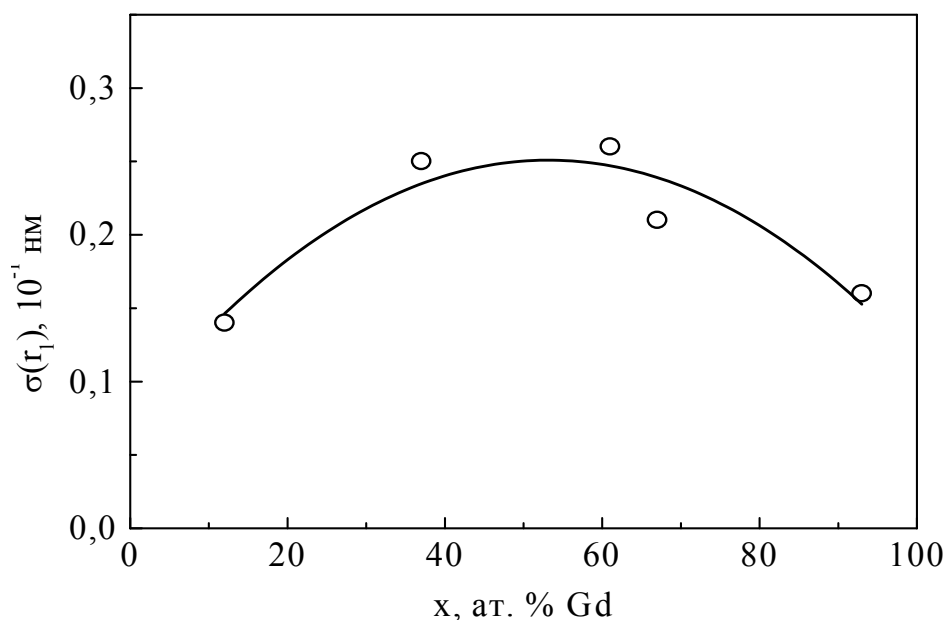


Рис. 5. Зависимость среднеквадратичного отклонения положения атомов в первой сфере АС $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ от состава

Литература

1. S. Steeb, P. Lamparter // J. Non-Cryst. Solids. 1993. Vol. 156-158. P. 24.
2. Е. В. Шелехов, Ю.А. Скаков // Заводская лаборатория. 1988. Т. 54. № 5. С. 34.
3. С. N. J. Wagner // J. Non-Cryst. Solids. 1978. Vol. 31. P. 1.
4. А. Ф. Скрышевский. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. М.: Высшая школа, 1980. 328 с.
5. И. Л. Батаронов, А. В. Бондарев, Ю. В. Бармин // Изв. РАН. Сер. физ. 2004. Т. 68. № 7. С. 1058.
6. Металлические стекла: Вып. II: Атомная структура и динамика, электронная структура, магнитные свойства / Под ред. Г. Бека, Г. Гюнтеродта. М.: Мир, 1986. 456 с.

X-RAY DIFFRACTION STUDY OF ATOMIC STRUCTURE OF AMORPHOUS ALLOYS OF THE Re-Gd SYSTEM

A. V. Bondarev, V. V. Ozherelyev, I. L. Bataronov

Voronezh State Technical University

Atomic structure of amorphous alloys of the $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$ ($x=12, 37, 61, 67, 93$ at. %) system is studied by X-ray diffraction method. We calculated the structure factors and the radial distribution functions and determined the concentration dependence of the topological short-range order parameters: the radii of coordination spheres r_i , the coordination number of the first sphere Z_1 and the mean-square deviation of atomic positions in the first sphere $\sigma(r_1)$. We established that the basic parameters of the topological short-range order (Z_1 and r_i/r_1) do not depend on the composition of the alloy.

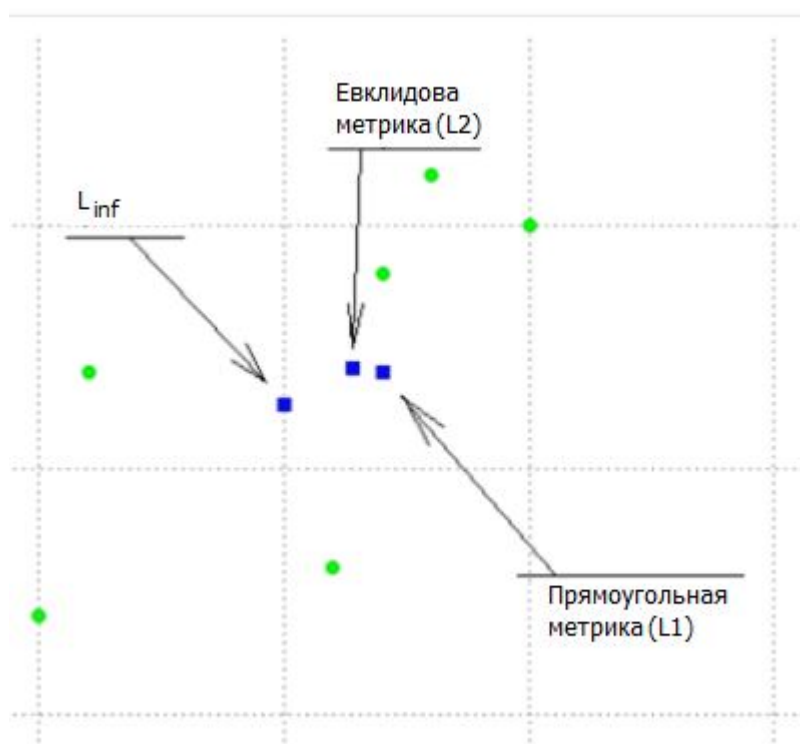
Keywords: amorphous alloys, structure factor, radial distribution function, parameters of topological short-range order.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО РАЗМЕЩЕНИЯ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АНАЛОГОВ ТОЧЕК ФЕРМА-ШТЕЙНЕРАМ. Е. Гришанов¹, В. А. Родин²¹Воронежский государственный университет
grishanov@cs.vsu.ru²Воронежский институт МВД России
vm@vimvd.ru

Для произвольного числа точек на плоскости и при дополнительных ограничениях пространственного характера с использованием различной метрики расстояния получены алгоритмы численного определения координат точки Ферма-Штейнера.

Ключевые слова: модификации задачи о точках Ферма-Штейнера, оптимальное размещение объекта, компьютерное численное моделирование, расстояние в различных метриках.

Для различных метрик и в условиях пространственных ограничений получены алгоритмы для численного определения координат точек Ферма-Штейнера. Программы написаны на языке C++. Ниже на рисунке показано несовпадение точек при измерении расстояния в разных метриках.



Возможность численного решения в метрике пространства l_2 гарантирована тем фактом, что решение задачи на плоскости всегда существует, и для эвклидовой нормы оно единственно. Простое, но элегантное «физическое» до-

казательство есть в [1]. Для нормы l_1 также существует «механическое» обоснование существования решения (вообще говоря, не единственного), основанное на теореме Вариньона из классической статики и некоторых свойствах выпуклости целевых функций. Читатель может найти его в известной монографии М.Г. Крейна и А.А. Нудельмана [2]. Отметим, также, что в указанной монографии рассмотрена весовая задача, то есть грузы на концах веревочек имеют различные массы. В случае пространственных ограничений алгоритм усложняется введением проверки на принадлежность некоторой области на карте.

Алгоритм численного решения задачи для произвольного числа точек

Разобьём алгоритм на шаги:

1) определим границы области поиска. Областью поиска будет прямоугольник, сторонами которого будут линии, проведённые вдоль координатных осей через минимальные и максимальные значения координат исходных точек. За временные минимумы и максимумы берутся координаты первой точки, затем в цикле идёт поочерёдное сравнение с входными точками, если текущая точка лежит за границами области поиска, область расширяется до её координат;

2) разобьём область поиска на равномерную сетку 3×3 . В результате получены 9 секторов и координаты их центров;

3) для каждого из девяти полученных секторов вычисляется значение целевой функции. В зависимости от используемой метрики используется

$$\Phi(x, y) = \sum_{k=1}^n \sqrt{(x - x_k)^2 + (y - y_k)^2},$$

$$\Phi(x, y) = \sum_{k=1}^n |x - x_k| + |y - y_k|$$

или

$$\Phi(x, y) = \sum_{k=1}^n \max(x - x_k, y - y_k)$$

для метрик L_2 , L_1 и L_{\inf} соответственно;

4) выбирается сектор с наименьшим значением целевой функции;

5) глобальная область поиска сужается до сектора с наименьшим значением целевой функции;

6) если границы области поиска отстоят друг от друга на значение, меньшее заданной погрешности, левый верхний угол области поиска принимается за приближённое решение задачи. В противном случае идёт возврат на шаг 2 для дальнейшего сужения области поиска.

Возможность численного вычисления гарантирована тем фактом, что решение задачи всегда существует, и для числа точек $n \geq 4$ имеется одна точка решения.

Точность приближённого нахождения координат растёт в геометрической прогрессии. В данном случае точность на шаге j составляет $\left(\frac{1}{3}\right)^j$.

Алгоритм можно останавливать на любом шаге, на котором выполняется неравенство

$$\max\left(3^{-j} \cdot (x_{\max} - x_{\min}), 3^{-j} \cdot (y_{\max} - y_{\min})\right) \leq \gamma,$$

где γ – заданная допустимая погрешность вычисления, заданная практическими соображениями.

Некоторые особенности результатов вычисления.

Для некоторых метрик, поддерживаемых алгоритмом, найдено несколько закономерностей в получаемых результатах:

1) результат вычислений для Евклидовой метрики на множестве точек с одной или несколькими осями симметрии расположен на пересечении осей симметрии;

2) результат вычислений для прямоугольной метрики может не являться единственным для множеств точек с одной или несколькими осями симметрии (значение целевой функции будет являться одинаковым для некоторого числа точек на отрезке). Если одна из осей симметрии множества точек расположена не параллельно одной из координатных осей, множество решений задачи ФТШ будет лежать на прямоугольном участке плоскости. В таких случаях алгоритм, достигая сектора, меньшего вышеописанного отрезка или участка плоскости, вернет результат вычислений в пределах этого отрезка или участка плоскости, координаты результата будут зависеть от ошибки округления ЭВМ, на которой выполняется алгоритм.

Литература

1. Иванов А. О. Теория экстремальных сетей / А. О. Иванов, А. А. Тужилин. – Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003.
2. Крейн М. Г. Проблема моментов Маркова и экстремальные задачи / М. Г. Крейн, А. А. Нудельман. – М.: Наука, 1973.

NUMERICAL MODELING OF PROBLEMS OF THE OPTIMAL LOCATION USING ANALOGUES OF THE FERMAT-STEINER POINTS

M. E. Grishanov¹, V. A. Rodin²

¹Voronezh State University

²Voronezh Institute of the Ministry of the Interior of Russia

The algorithms of numeral determination of coordinates of Fermat-Steiner point are got for the arbitrary number of points on a plane at additional limitations of spatial character with the use of different birth-certificate of distance.

Keywords: modification of the Fermat-Steiner points problem; optimal location of the object; computer numerical modeling; distance in different metrics.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЕТЯХ С ЭЛЕМЕНТАМИ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Ю. И. Дёмин, В. Д. Чернокнижников

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь
dui.ja12@yandex.ru

Рассмотрено математическое обеспечение, позволяющее учитывать элементы солнечной энергетики, при расчетах процессов в электрических сетях. Приведены данные о разработанной модели инвертора, преобразующего постоянный ток от солнечной панели в переменный.

Ключевые слова: электрические сети, моделирование процессов, постоянный и переменный ток, солнечная энергетика, инвертор.

В России значительная часть территории обладает перспективным для освоения солнечным энергетическим потенциалом [1]. В связи с этим чрезвычайно важными являются исследования, направленные на развитие и повышение эффективности фотоэлектрических систем (ФС). Практически все ФС можно условно разделить на два типа: с накопителем электрической энергии и без него. Система с накопителем, как правило, не всегда является полностью автономной, т.к. она может служить источником аварийного питания потребителей при параллельной работе с электрической сетью [2]. Функциональные схемы ФС состоят из: солнечных батарей; импульсных преобразователей постоянного напряжения, объединенные контроллером заряда-разряда аккумуляторных батарей; аккумуляторных батарей – для аккумуляции и хранения электроэнергии; автономного инвертора напряжения – для преобразования постоянного тока в переменный [3, 4] (рис. 1). Наиболее сложным при моделировании процессов в электрических сетях с элементами ФС являются преобразовательные установки, в частности, инверторы (рис. 2). В связи с изложенным, становятся актуальными исследования в области моделирования процессов в солнечных элементах и инверторах, являющихся важнейшей частью электрических сетей с ФС.

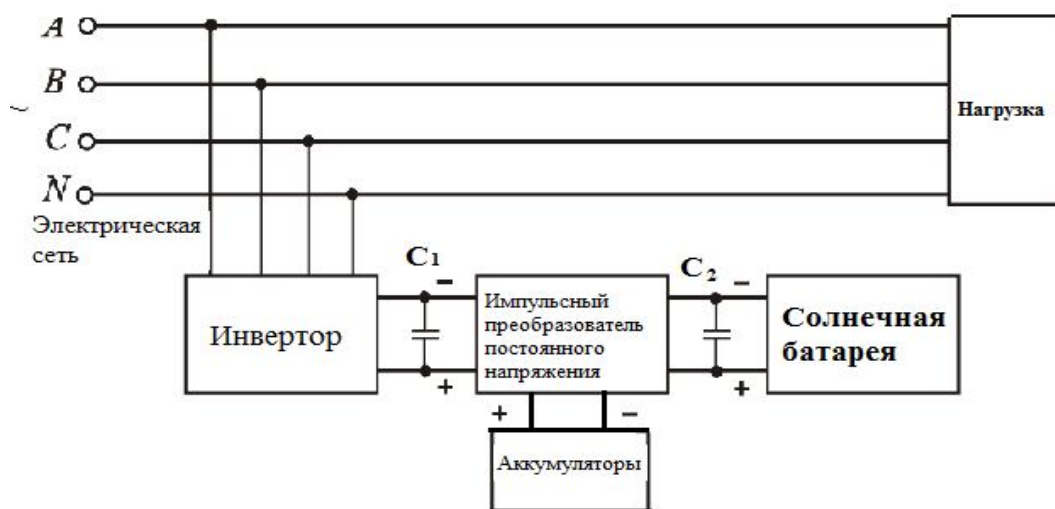


Рис. 1. Структура фотоэлектрической системы

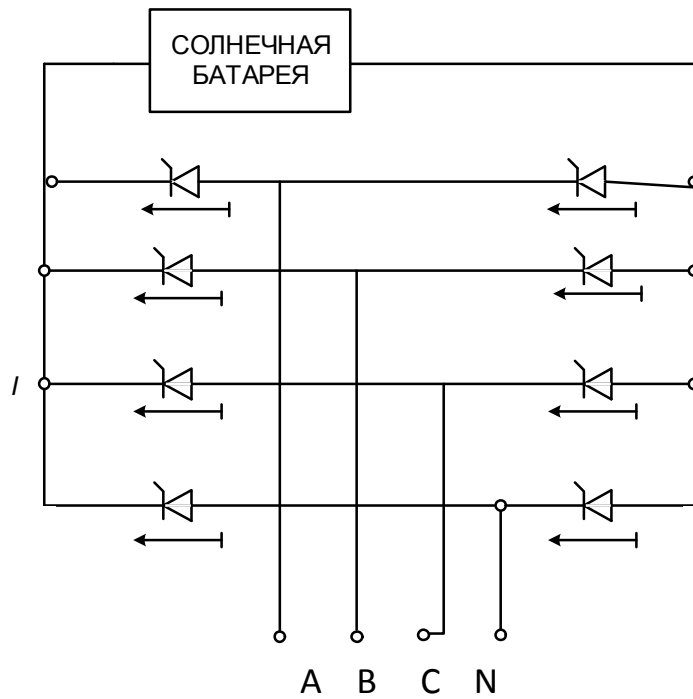


Рис. 2. Модель силовой части инвертора

Модели инверторов, как правило, базируются на принятых моделях полупроводниковых силовых элементов: тиристоров, диодов, транзисторов и т.п. В зависимости от решаемых задач модели элементов варьируются в очень широких пределах. Наиболее распространенными являются: «идеальные ключи»; резисторы, величины которых равны сопротивлениям элементов во включенном и отключенном состоянии; вольтамперная характеристика элемента [5 - 8].

Формальное математическое описание моста (рис. 2), пригодное для реализации на ЭВМ, в котором вентили (бесконтактные коммутаторы) замещены «идеальными ключами», т.е. учитывается переменная структура графа схемы, приведено в [5]: алгебро-логические и в [8]: булевы функции. Рассмотрим модель инвертора при замещении вентилях резисторами (рис. 3). Функционирование инвертора в этом случае не приводит к изменению структуры графа схемы.

Для формирования модели инвертора при замене бесконтактных коммутаторов резисторами дифференциальные уравнения реактивных элементов в системе необходимо представить в форме Коши [9]:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\varphi_1}{dt} &= f_1(\varphi_1, \varphi_2 \dots \varphi_i), \\
 \frac{d\varphi_2}{dt} &= f_2(\varphi_1, \varphi_2 \dots \varphi_i), \\
 &\dots\dots\dots \\
 \frac{d\varphi_i}{dt} &= f_i(\varphi_1, \varphi_2 \dots \varphi_i),
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

где i – количество реактивных элементов.

Уравнения (1) интегрируются с помощью методов численного интегрирования с контролем точности расчетов и автоматическим выбором шага (Рунге-

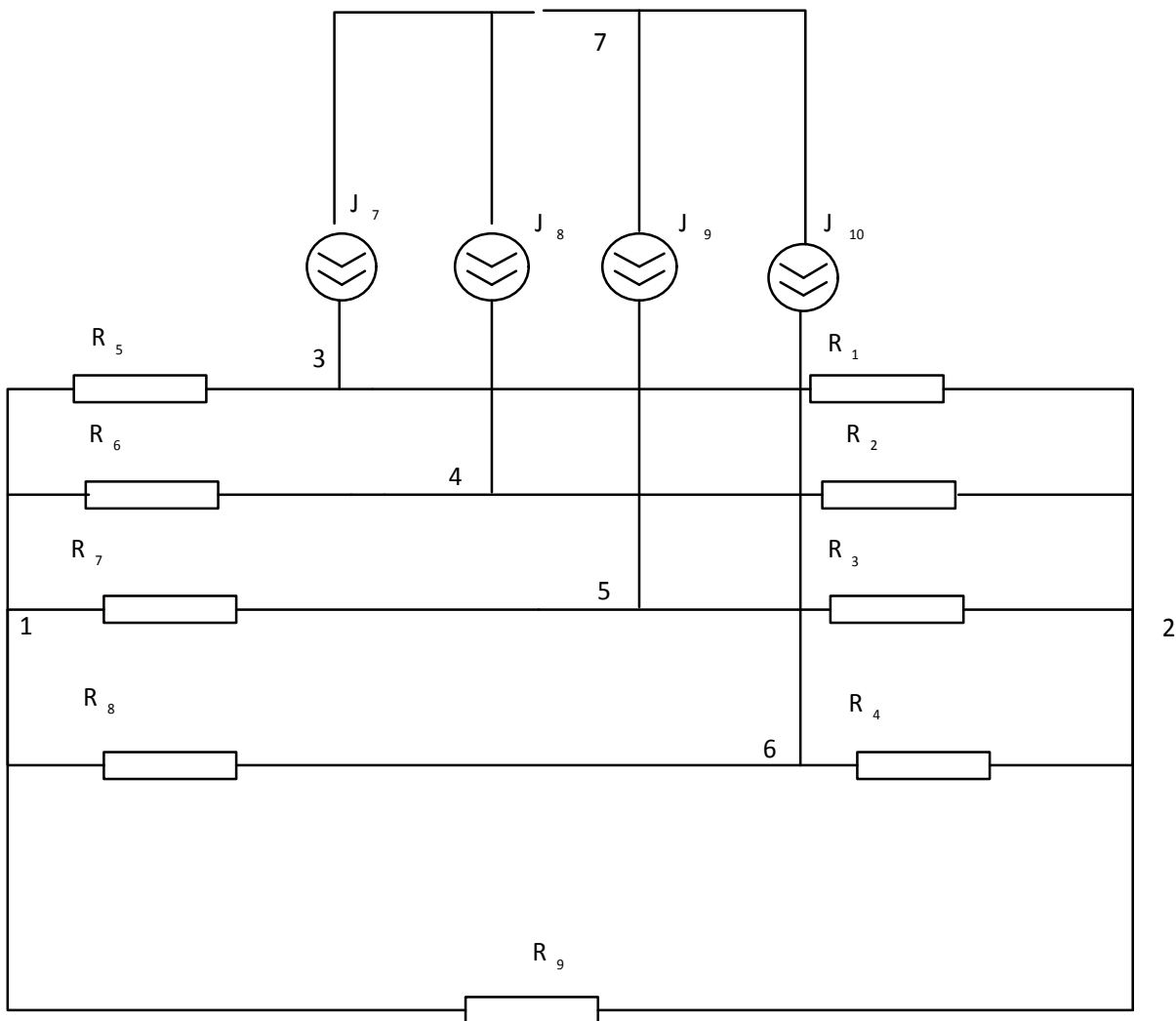


Рис. 3. Расчетная схема моста при замещении бесконтактных коммутаторов резисторами

Кутта 4 порядка, Хемминга, Адамса) [9]. В конце шага расчета индуктивности заменяются источниками тока, емкости ЭДС [10]. Коммутаторы представляются в виде резисторов с конечным сопротивлением, которое выбирается по вольтамперным характеристикам. На каждом шаге интегрирования уравнений (1) производится расчет схемы постоянного тока с подстановкой соответствующих значений интегрируемых величин сопротивлений резисторов, соответствующих предшествующему режиму. Для расчета схемы постоянного тока применяется метод узловых потенциалов в матричном виде [9]. Алгоритм расчета, соответствующий описанным моделям, приведен на рис. 4. Реализация алгоритма произведена в среде Delphi.

На рис. 5 приведен пример расчета тока в фазе инвертора (параметры цепей постоянного и фазы переменного тока: индуктивности 0.1 Гн; активные сопротивления 10 Ом), полученного с помощью описанного алгоритма.

На основе описанных алгоритмов разработаны системы моделирования электротехнических устройств, позволяющих исследовать процессы, в том числе с ФС. К ним можно отнести, например, Multisim, MATLAB Simulink, PSCAD/EMTDC [11 - 13 и др.]. Системы MATLAB Simulink и PSCAD/EMTDC

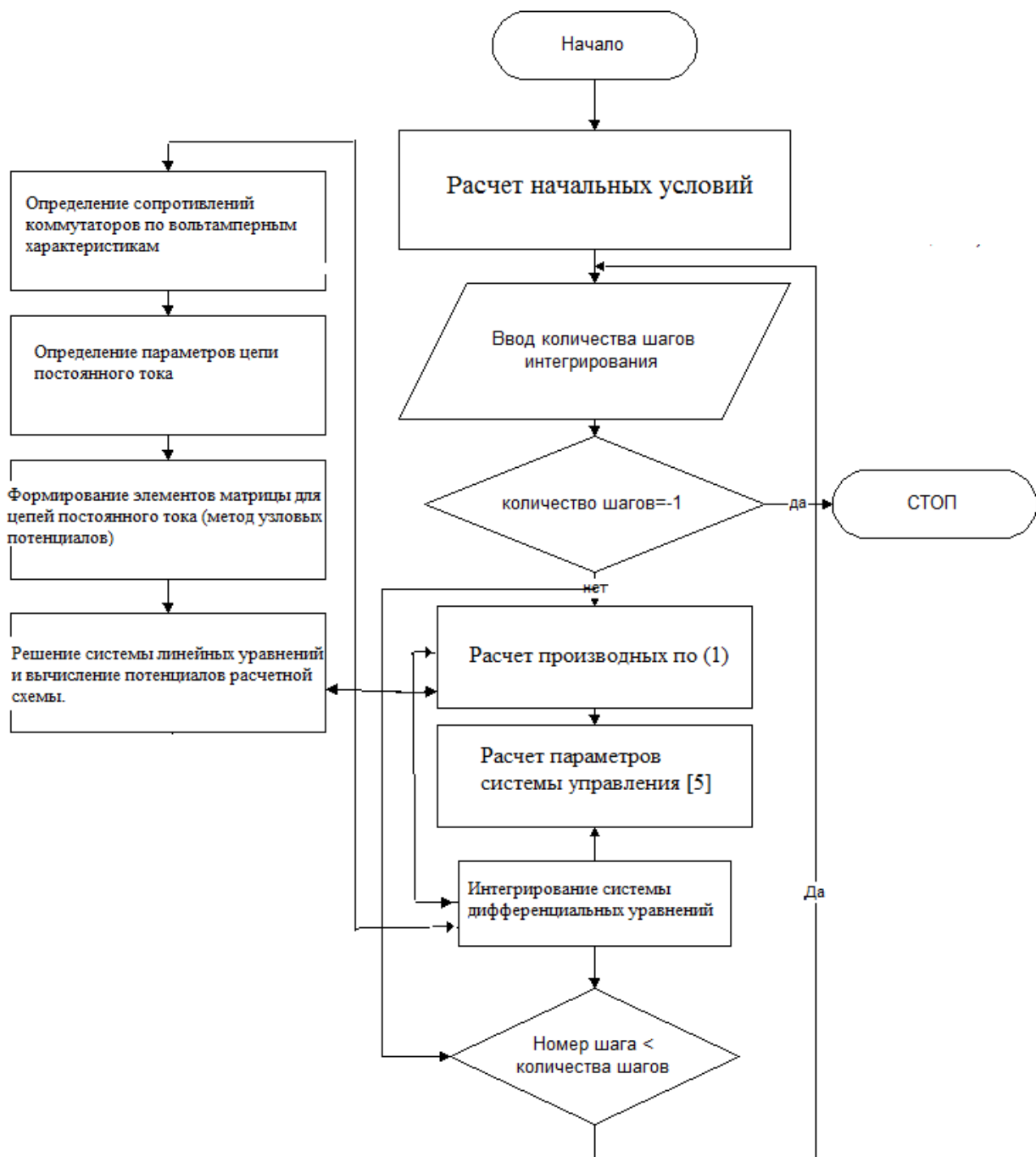


Рис. 4. Алгоритм расчета инвертора с помощью метода переменных состояний

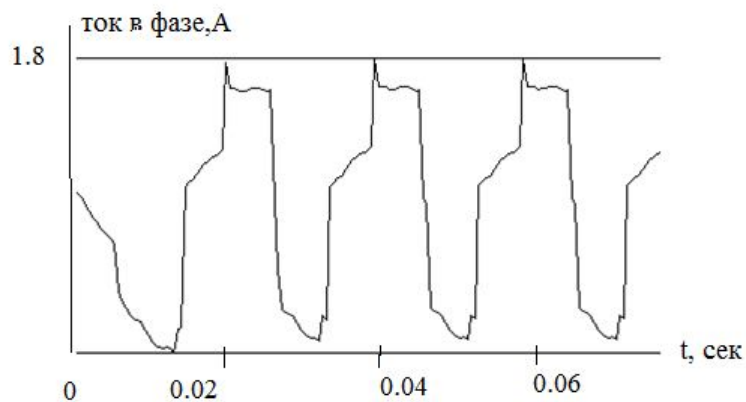


Рис. 5. Пример расчета с помощью разработанной модели тока в фазе инвертора

позволяют в полной мере моделировать и исследовать процессы ФС, работающих в электроэнергетических системах и системах электроснабжения. Multisim ориентирована, в первую очередь, на детальные исследования процессов непосредственно в элементах силовой электроники ФС: например, инверторах, выпрямителях, импульсных преобразователях и т.п. На рис. 6 приведен пример моделируемой схемы и осциллограмма параметров режима управляемого ШИМ (рис. 7) инвертора в Multisim [11]. Показана высокая точность моделирования процессов в инверторах и других элементах солнечной энергетики в электрических сетях [11].

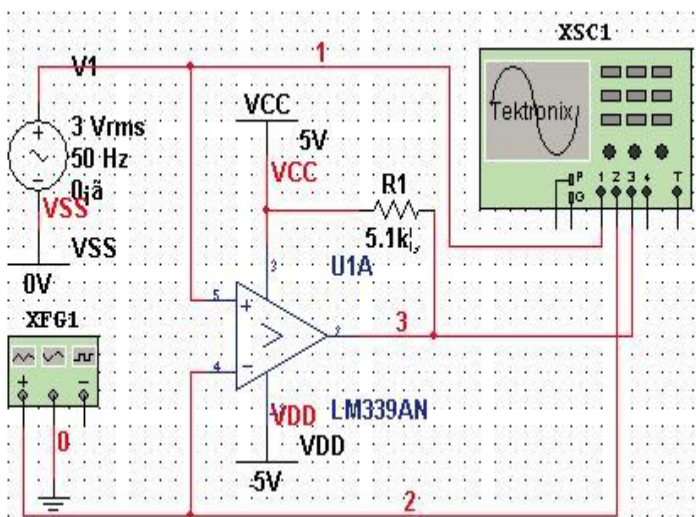


Рис. 6. Принципиальная схема моделирования однофазного инвертора в Multisim

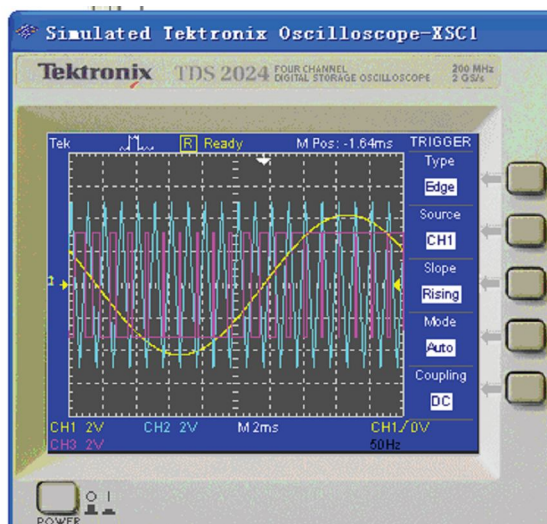


Рис. 7. Осциллограмма тока и напряжения однофазного инвертора в Multisim

Рассмотренные методы моделирования элементов ФС позволяют с достаточно высокой точностью получать процессы, пригодные для проектирования и учета солнечных батарей в составе малой распределенной генерации. При проведении большого количества расчетов процессов с электрических сетей с элементами солнечной энергетики и малой распределенной генерации целесообразно применять апробированные системы: MATLAB Simulink [13] и PSCAD/EMTDC. Для учебных целей может быть полезна NI Multisim [11] и также установки ИПЦ «Учебная техника» [14].

Рассмотрим математическую модель солнечного элемента, приведенную в [13]. На рис. 8 показана эквивалентная схема солнечного элемента, работающего на активную нагрузку. Возможность отбора максимума мощности от солнечной батареи можно оценить, рассмотрев токи, возникающие в результате внутреннего фотоэффекта. В результате облучения солнечного элемента излучением с длиной волны $\lambda = 0.2 - 2 \mu\text{m}$ через его $p-n$ переход протекает ток (рис. 8) [13]

$$I = I_s \cdot \left(\exp\left(\frac{qU}{kT}\right) - 1 \right) - I_\phi, \quad (2)$$

где I_s – ток неосновных носителей (ток насыщения); $I_s \cdot \exp(qU/(kT))$ – ток основных носителей; I_ϕ – первичный фототок; q – заряд фототока по модулю;

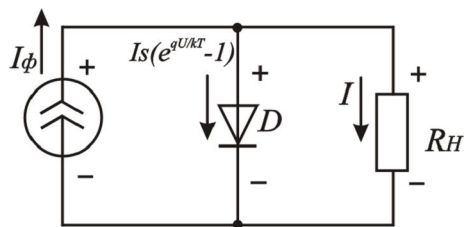


Рис. 8. Эквивалентная схема солнечного элемента

U – прямое смещение перехода; T – температура.

Соотношение (2) описывает вольт-амперную характеристику (ВАХ) идеального солнечного элемента, которое входит в состав моделей ФС и экспериментально подтверждается на установке ИПЦ «Учебная техника» [14].

Литература

1. Техничко-экономические аспекты сетевой солнечной энергетики в России / А. В. Бобыль, С. В. Киселева, В. Д. Кочаков, Д. Л. Орехов, А. Б. Тарасенко, Е. Е. Терукова // Журнал технической физики, 2014, том 84, вып. 4. – С. 86 – 93.
2. Атлас ресурсов солнечной энергии на территории России / С. Е. Фрид, Ю. Г. Коломиец, С. В. Киселева, Е. Н. Терехова - М.: ОИВТ РАН, 2010. - 85 с.
3. Охоткин Г. П. Методика расчета мощности солнечных электростанций // Вестник Чувашского университета, Электротехника и электроэнергетика, 2013. № 3. – С. 222-230.
4. Мейтин М. Фотовольтаика: материалы, технологии, перспективы / М. Мейтин // Электроника для ТЭК. – 2000. – №6. – С. 40-56.
5. Применение цифровых вычислительных машин в электроэнергетике / О. В. Щербачев, А. Н. Зейлигер, К. П. Кадомская и др. - Л.: Энергия, Ленингр. отд., 1980. – 240 с.
6. Войтехович Л. Л., Набутовский И. Б., Юрганова Т. М. Моделирование вставки постоянного тока // Тр. НИИПТ. - 1978, - № 25.
7. Dyomin J. I., Kirkoroff O. R. Mathematical model for Short-Circuit analyses in distribution system with contactless breakers // 5-Int. Symp. / Short-circuit currents in Power Systems. Warsaw (Poland), 1992. P. 1.15.1-1.15.5.
8. Демин Ю. И. Компьютерное моделирование тиристорных выключателей с искусственной коммутацией с помощью булевых функций // Изв. Вузов. Электромеханика, № 1, 2013, Новочеркасск. ЮРГТУ. – С. 157-159.
9. Чуа Л. О., Лин Пен-Мин. Машинный анализ электронных схем: Алгоритмы и вычислительные методы. - М.: Энергия, 1980. - 640 с.
10. Шакиров М. А. Методы анализа сложных электрических цепей. - Л.: ЛПИ, 1984. - 84 с.
11. Zhiping Cheng. The Application of Multisim in Power Electronic Technology. College of Electric Engineering Zhengzhou University, 450001 Henan, China, 2011, IEEE, pp. 813-816.
12. Черных И. В. Моделирование электротехнических устройств в MATLAB, SimPowerSystems и Simulink/ И. В. Черных. – М.: ДМК Пресс, СПб.: Питер, 2008. – 288 с.
13. Ильина Н. А., Тугай Д. В., Сабалаев А. Н. Четырехтактный повышающий широтно-импульсный преобразователь постоянного напряжения в постоянное в системе электроснабжения с солнечной батареей / Электроэнергетика, светлотехника та електроенергетика, Харьков, I, 2009. – С. 42 – 51.
14. Сенигов П. Н. Модель фотоэлектрической солнечной электростанции. Руководство по выполнению базовых экспериментов. МФЭСЭ.003 РБЭ (964.3) - Челябинск: ИПЦ «Учебная техника», 2012. - 23 с.

MODELING OF PROCESSES IN ELECTRIC NETWORKS WITH SOLAR POWER

Yu. I. Dyomin, V. D. Chernoknignikov

North-Caucasian Federal University, Stavropol

The mathematical support, allowing to take into account the elements of solar energy in the calculation of processes in electrical networks, is considered. The data of the developed model of the inverter, which converts direct current from the solar panel into an alternating current, are given.

Keywords: electric network, process modeling, AC and DC current, solar energy, inverter.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ
КАРБИД-КРЕМНИЕВЫХ НАНОТРУБОК ТИПА "ZIGZAG"

О. И. Дубровский, А. В. Павленко

Воронежский государственный университет
dubrovskiy@phys.vsu.ru

Методом линеаризованных присоединенных плоских волн с помощью программного пакета Wien2k проведен расчет зонной структуры карбид-кремниевых нанотрубок типа "zigzag" ($n,0$) для $n = 3 - 9$. Обнаружено, что трубки с $n > 3$ обладают полупроводниковым типом зонной структуры с прямой запрещенной щелью.

Ключевые слова: карбид кремния, нанотрубка, "zigzag", Wien2k, зонная структура.

Объектами пристального внимания для исследователей, занимающихся поиском новых материалов с заданными механическими, термодинамическими и электронными свойствами, являются наноструктурированные материалы: нанокластеры, нанотрубки, нанопленки и т.п. Изучение особенностей их электронного строения представляет большой научный и практический интерес, так как позволяет объяснить наблюдаемые у них свойства [1-5]. Интерес к карбиду кремния (SiC) обусловлен его уникальными полупроводниковыми свойствами: высокой подвижностью носителей, широкой зоной проводимости с возможностью ее изменения, высокой теплопроводностью, значительной радиационной и термической стабильностью. Это, безусловно, привлекает пристальное внимание к исследованию наноструктур на основе этого соединения.

В настоящей работе выполнен расчет электронно-энергетической структуры ряда однослойных SiC нанотрубок типа "zigzag" ($n,0$) для $n = 3 - 9$. Для вычислений использовался программный пакет Wien2k, основанный на известном методе линеаризованных присоединенных плоских волн расчета зонной структуры [6]. Структура трубок аналогична углеродным, при этом атомы Si и C чередуются таким образом, что ближайшими соседями для атомов одного сорта являются атомы другого сорта. Поскольку метод ЛППВ, лежащий в основе используемого программного пакета, предназначен для расчета электронного строения трехмерных периодических структур, исследуемая в работе структура представляла собой систему нанотрубок, периодически повторяющихся в двух направлениях, перпендикулярных оси трубки, и разделенных вакуумными промежутками. Тип такой структуры для исследуемых нанотрубок – гексагональный, при её задании использовано значение длины связи кремний-углерод, равное $1,8 \text{ \AA}$ [7], а размер вакуумной области между трубками соседних элементарных ячеек был выбран равным 6 \AA , что позволяет исключить их взаимодействие и считать трубки изолированными.

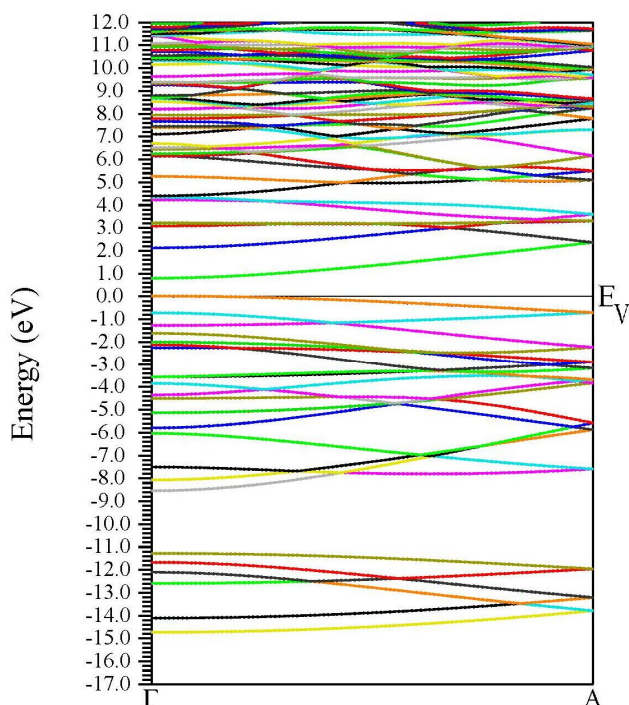


Рис. 1. Зонная структура (5,0) нанотрубки SiC

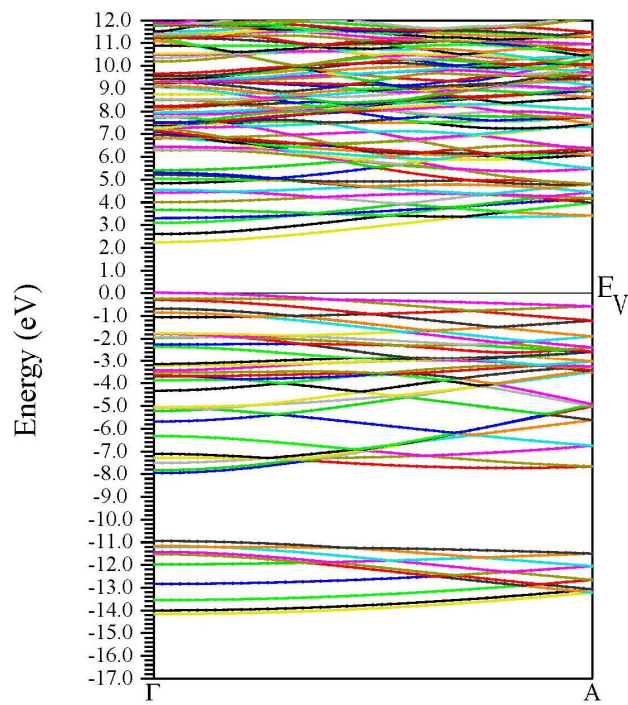


Рис. 2. Зонная структура (9,0) нанотрубки SiC

Оказалось, что в трубке (3,0), обладающей самым маленьким диаметром, энергетические зоны пересекают уровень Ферми, и эта трубка должна обладать металлическим типом проводимости. Однако, уже для трубки (4,0) в зонной структуре появляется небольшая энергетическая щель, которая затем монотонно возрастает с ростом n . Таким образом, исследуемые в работе нанотрубки, начиная с $n = 4$, обладают полупроводниковым типом зонной структуры. На рис. 1 и 2 приведены зонные диаграммы для SiC нанотрубок (5,0) и (9,0), рассчитанные для направления Γ -A в двумерной зоне Бриллюэна, параллельного оси трубки. Видно, что и потолок валентной зоны, и дно зоны проводимости наблюдаются в точке Γ , т.е. такие трубки являются прямозонными полупроводниками. Аналогичная ситуация имеет место и в остальных исследованных в работе полупроводниковых карбид-кремниевых нанотрубках.

Величины полученных в настоящей работе запрещенных щелей приведены в таблице вместе с соответствующими значениями из имеющихся в литературе работ. Наши результаты показывают, что ширина запрещенной зоны в SiC нанотрубках типа "zigzag" монотонно увеличивается с увеличением индекса хиральности n , стремясь в пределе к соответствующему значению для графеноподобного слоя SiC (2.58 эВ [8]). Видно, что результаты нашей работы не согласуются с результатами ЛПЦВ расчета [9], где величины запрещенных щелей очень малы, а трубки вплоть до $n = 7$ вообще имели металлический тип зонной структуры. Также занижены, на наш взгляд, соответствующие результаты работы [8]. Величины же, приведенные в работе [10], напротив, заметно превышают наши значения и значение для двумерного слоя (так, для трубки (10,0), например, в этой работе получена величина щели 3,04 эВ).

Ширина запрещенной зоны (в эВ) в $(n,0)$ нанотрубках SiC ($n = 3 - 9$)

| Нанотрубка | [8] | [9] | [10] | Наст. расчет |
|------------|------|------|------|--------------|
| (3,0) | 0 | 0 | 0 | 0 |
| (4,0) | 0 | 0 | 0.62 | 0.132 |
| (5,0) | 0.19 | 0 | 1.16 | 0.796 |
| (6,0) | 0.70 | 0 | 1.81 | 1.356 |
| (7,0) | - | 0.39 | 2.38 | 1.929 |
| (8,0) | 1.35 | 0.46 | 2.56 | 2.039 |
| (9,0) | 1,53 | 0.62 | 2.81 | 2.294 |

Литература

1. Курганский С. И. Геометрическая структура и спектральные характеристики электронных состояний кремниевых наночастиц / С. И. Курганский, Н. А. Борщ // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. № 5. С. 580-584.
2. Borshch N. Geometric structure, electron-energy spectrum, and growth of anionic scandium-silicon clusters ScSi_n^- ($n = 6 - 20$) / S. Kurganskii, N. Borshch // Journal of Applied Physics. 2014. Vol. 116. №12. P. 124302.
3. Борщ Н. А. Электронная структура Zn-замещенных германиевых клатратов / Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский // Физика и техника полупроводников. 2009. Т. 43. № 5. С. 590-594.
4. Сысоев И. В. Электронная структура одностенных углеродных нанотрубок типа зигзаг / И. В. Сысоев, Н. С. Переславцева, О. И. Дубровский // Конденсированные среды и межфазные границы. 2014. Т. 16. № 3. С. 318–322.
5. Лихачев Е. Р. Теоретическое исследование электронной структуры тонкой пленки диоксида олова / Е. Р. Лихачев, О. И. Дубровский, М. Д. Манякин // Физико-математическое моделирование систем: Материалы XV Международного семинара (г. Воронеж, 27 ноября 2015 г.). Ч.2. – Воронеж, 2016. – С. 113-118.
6. Blaha P. An Augmented Plane Wave + Local Orbitals. Programm for Calculating Crystal Properties revised edition WIEN2k 10.1 / P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz // Vienna University of Technology, Austria. 2010. P. 235.
7. Zhao M. Strain energy and electronic structures of silicon carbide nanotubes: Density functional calculations / M. Zhao, Y. Xia, F. Li, R. Q. Zhang, S.-T. Lee // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71. P. 085312.
8. Wu I. J. Optical properties of SiC nanotubes: An ab initio study / I. J. Wu, G. Y. Guo // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76. P. 035343.
9. Larina E. V. Band Structure of Silicon Carbide Nanotubes / E. V. Larina, V. I. Chmyrev, V. M. Skorikov, P. N. D'yachkov, D. V. Makaev // Inorganic Materials. 2008. Vol. 44. № 8, P. 823-834.
10. Baumeier B. Structural, elastic, and electronic properties of SiC, BN, and BeO nanotubes / B. Baumeier, P. Krüger, J. Pollmann // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76. P. 085407.

MODELING OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF "ZIGZAG" SILICON CARBIDE NANOTUBES

O. I. Dubrovskii, A. V. Pavlenko

Voronezh State University

Band structure of silicon carbide nanotubes of the "zigzag" type $(n,0)$ has been theoretically investigated by the WIEN2k package in the network of the linearized augmented plane-wave method for $n = 3 - 9$. It has been found that tubes with $n > 3$ have semiconducting type of band structure with direct band gap.

Keywords: silicon carbide, nanotube, "zigzag", Wien2k, band structure.

УСТОЙЧИВОСТЬ И АДАПТИВНОСТЬ К СТРУКТУРНЫМ ПЕРЕСТРОЙКАМ НАНОКЛАСТЕРИЗОВАННЫХ ФАЗ ПРЕДПЛАВЛЕНИЯ МЕДИ

Е. С. Машкина

Воронежский государственный университет
me22-1@phys.vsu.ru

Проведен анализ устойчивости и адаптивности к структурным перестройкам нанокластерных фаз предплавления меди в различных режимах нагревания. С этой целью использован универсальный алгоритм самоорганизации структур в системах с управляемой обратной связью. С помощью функции самоподобия проведены расчеты меры устойчивости и показатель способности структуры к перестройке. Выявленное преобладание нелинейной обратной связи с индексом самоподобия $m \sim 4$ свидетельствует о возникновении нелинейной обратной связи и образовании кластерных структур переходных процессов по репликативному механизму (с изменением структуры вещества).

Ключевые слова: медь, предплавление, бифуркации, нанокластер, устойчивость, адаптивность.

Переход системы в неравновесное состояние связан с нарушением устойчивости системы. Рассмотрение поведения вещества вблизи температуры плавления с позиции физики неравновесных состояний выдвигает на первый план определение свойств материала в точках неустойчивости (или точках бифуркации). Параметры, контролирующие точки перехода «устойчивость-неустойчивость-устойчивость» в области фазового перехода несут информацию о диссипативных свойствах системы [1, 2].

Целью настоящей работы является анализ устойчивости и адаптивности к структурным перестройкам нанокластерных фаз предплавления меди в различных кинетических режимах нагревания.

С помощью наших исследований переходных состояний методом дифференциально-термического анализа (ДТА) выявлено, что независимо от типа химической связи при плавлении кристаллических веществ в динамических и квазистатических режимах вблизи точки плавления возникают особые неравновесные состояния, имеющие определенное время жизни и температурно-временной интервал [3]. На основании системы термодинамических неравновесных параметров проведены расчеты кластерной структуры переходных фаз вблизи точки плавления меди [4].

Для количественного описания устойчивости нанокластеризованных фаз предплавления к структурным перестройкам нами использован универсальный алгоритм самоорганизации структур в системах с управляемой обратной связью, примененный Ивановой В. С. для конденсированных сред [1, 2]. Согласно [2] устойчивость системы контролируют критические значения управляющих параметров. Информационные свойства точек бифуркации связаны с изменением механизма действия обратных связей при переходе от положительных обратных связей, обеспечивающих стабильную эволюцию системы, к отрица-

тельным, контролирующим смену механизма адаптации структуры к внешнему воздействию. Переход от контролирующего влияния положительных обратных связей к отрицательным является неравновесным фазовым переходом. Динамика развития диссипативной системы описывается следующим образом. Исходная устойчивая структура в точке бифуркации достигает критического состояния, отвечающего порогу устойчивости структуры, начинает флуктуировать, что приводит к организации новой, более устойчивой пространственно-временной структуры. А переход «устойчивость-неустойчивость-устойчивость» контролируется отрицательной обратной связью.

Универсальным критерием устойчивости структуры является золотая пропорция [2, 5]. Обобщенный закон золотой пропорции представляется следующим уравнением [6]:

$$X^{p+1} - X^p - 1 = 0. \quad (1)$$

Уравнение (1) задает бесконечное число пропорциональных делений целого при $p \rightarrow \infty$. Решение этого уравнения дает последовательность золотых p -пропорций – иерархический ряд значений положительных корней (1): d_p : 1.618, 1.465, 1.380, 1.324, 1.285, 1.255, 1.232, 1.213 ... и соответствующий ряд значений иррациональных чисел $\Delta_i = d_p - 1$: 0.618, 0.465, 0.380, 0.324, 0.285, 0.255, 0.232, 0.213...

Корни уравнения (1) Δ_i (или d_p) являются мерой устойчивости симметрии системы, изменяющейся самоподобно при переходе от предыдущего значения Δ_i (или d_p) к последующему. Для иерархического ряда иррациональных чисел функция самоподобия F может быть представлена в следующем виде [2]:

$$F = \Delta_i^{1/m}, \quad (2)$$

где Δ_i – мера устойчивости системы; m – показатель обратной связи (или показатель способности структуры к перестройке), связанный с оператором действия в уравнении (1) соотношением $m = 2^{p+1}$. Значение $m = 1$ отвечает линейной обратной связи, при которой реализуются мультипликативные свойства системы (без изменения структуры), а $m \geq 2$ – нелинейной обратной связи, при которой реализуются репликативные свойства системы (с изменением структуры).

Функция самоподобия F определяет меру адаптивности системы сохранять устойчивость симметрии при внешнем воздействии и связывает точки структурной бифуркации следующим соотношением [2]:

$$A_m = \lambda_i / \lambda_{i+1} = F = \Delta_i^{1/m}, \quad (3)$$

где A_m – адаптивность системы к структурным перестройкам; λ_i и λ_{i+1} – предыдущее и последующее критическое значение управляющего параметра при переходе от предыдущей X_i к последующей X_{i+1} точке бифуркации.

При $\Delta_i = \text{const}$ адаптивность изменяется в геометрической последовательности $m = 1, 2, 4, 8, 16, \dots, m^*$, где m^* является пороговым показателем обратной связи.

Соотношение (3) содержит меры устойчивости симметрии системы, детерминированные спектром чисел обобщенной золотой пропорции. Это позволяет по критическим значениям управляющего параметра для предыдущей и

последующей точек бифуркации, отношение которых равно $\Delta_i^{1/m}$, определить меру устойчивости системы Δ_i и показатель обратной связи m [2, 5].

Определим меру устойчивости нанокластеризованных фаз предплавления меди. В качестве управляющего параметра выберем частоту тепловых флуктуаций предплавления f . Это объясняется следующим образом. В работах [7, 8] показано, что флуктуационным зависимостям типа $1/f^n$, каковыми являются в нашем случае тепловые флуктуации предплавления [9], можно поставить в соответствие обладающую самоподобием числовую геометрическую последовательность Фибоначчи или родственных им последовательностей. Кроме того, исследование флуктуационных переходных процессов при плавлении веществ с различным типом химической связи [9, 10] показывают иерархическую структуру анализируемых сигналов, аналогично бифуркационным диаграммам, и выявляют взаимосвязь флуктуаций вблизи точки плавления с размерами нанокластерных структур.

Следовательно, изменение $F(f)$ будет характеризовать изменение устойчивости нанокластерных фаз предплавления Cu в различных динамических режимах. В этом случае мера устойчивости кластерной структуры фазы пред- и постплавления представляется в виде [9, 10]:

$$F = \Delta_i^{1/m} = A_m = f_i / f_{i+1}, \quad (4)$$

где f_i и f_{i+1} – предыдущее и последующее значение характерной частоты тепловых флуктуаций плавления Cu; m – показатель способности структуры к перестройке. Характерные частоты определяются с помощью вейвлет-анализа аналогично [9].

Изменение меры устойчивости Δ_i нанокластеризованных фаз предплавления Cu в различных кинетических режимах предствалены на рис. 1. Из данного рисунка видно, что значения Δ_i , характеризующие образование нанокластерной структуры предплавления Cu, отвечают спектру чисел обобщенной золотой пропорции и имеют колебательный характер.

В таблице приведены средние значения меры устойчивости и показателя обратной связи в сравнении с рассчитанными нами в [4] параметрами кластеров фаз предплавления Cu. При скорости нагревания 5 К/мин мера устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Cu выше, чем при скорости нагревания 10 К/мин. Это согласуется с тем, что радиусы кластеров (r), в первом случае выше, т.е. устойчивость зависит от размеров нанокластерных систем.

Для определения соотношения адаптивности системы к структурным перестройкам A_m с показателем обратной связи построим спектр мер устойчивости нанокластерной структуры фазы предплавления Cu, отражающий тип обратной связи (рис. 2, 3). Как показал анализ рис. 2, 3, при скорости нагревания 5 К/мин возникают линейная и нелинейная обратные связи, показатель обратной связи m меняется в пределах 1-16. При увеличении скорости нагревания ($v=10$ К/мин) интервал значений показателя обратной связи сужается и становится 1-8. Отметим, что при анализе спектра мер устойчивости нанокластерных фаз предплавления Cu выявлено преобладание нелинейной обратной связи со средним значением показателя $m \sim 4$.

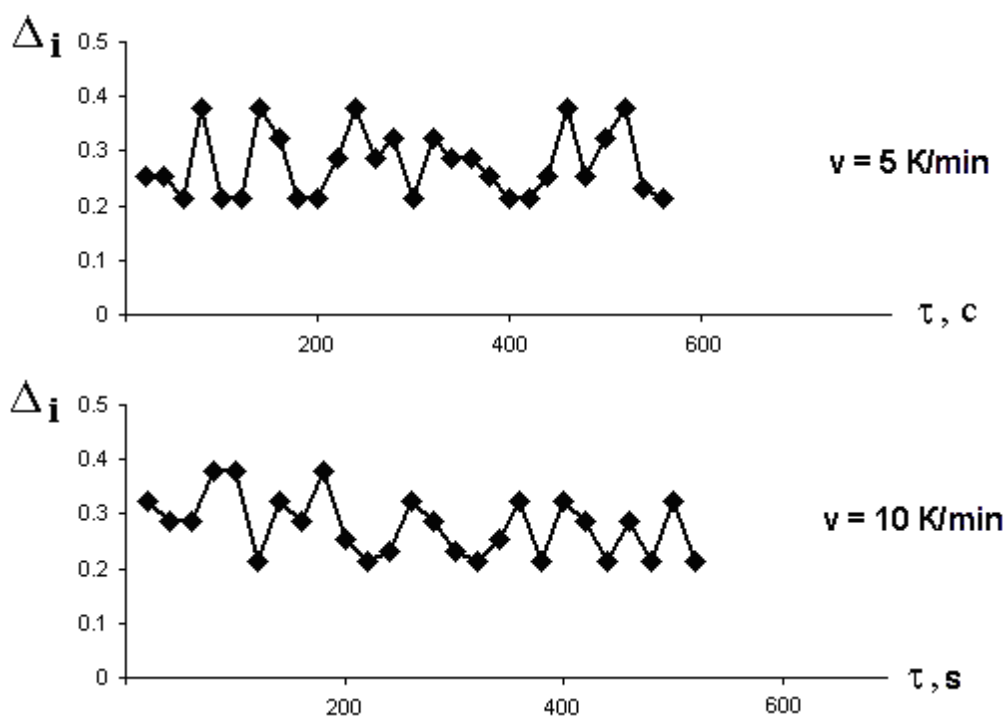


Рис. 1. Динамика изменения меры устойчивости Δ_i кластерной структуры фаз предплавления Cu в различных кинетических режимах

Параметры устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Cu в различных кинетических режимах

| $v, \text{ K/min}$ | Δ_i | m | $r, \text{ \AA}$ |
|--------------------|------------|-----|------------------|
| 5 | 0.285 | 4 | 15.2 |
| 10 | 0.255 | 4 | 13.4 |

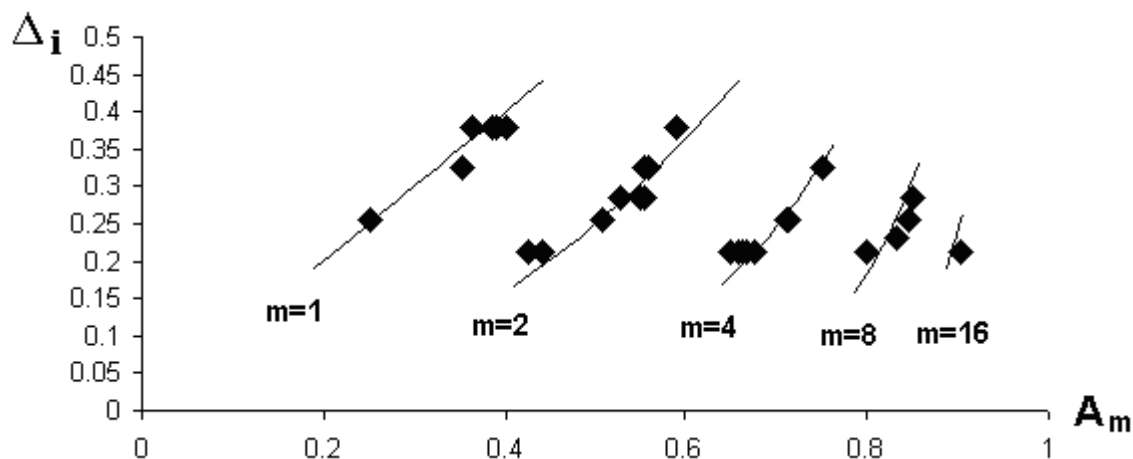


Рис. 2. Спектр мер устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Cu в динамическом режиме при $v = 5 \text{ K/мин}$

Таким образом, в Cu образование кластерной структуры предплавления в различных кинетических режимах происходит преимущественно по репликативному механизму (с изменением структуры вещества), что согласуется с прямыми структурными исследованиями ГЦК-металлов в области фазового перехода I рода [11].

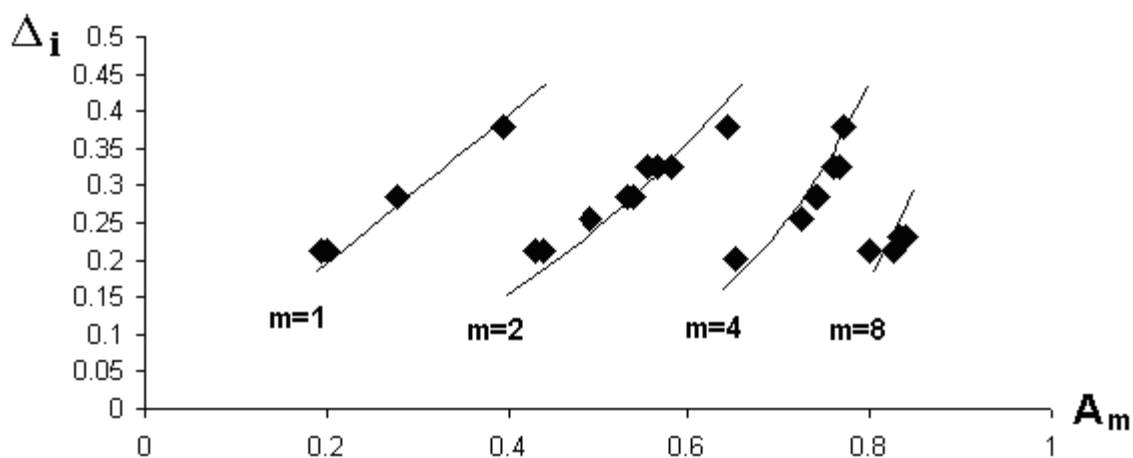


Рис. 3. Спектр мер устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Cu в динамическом режиме при $\nu = 10$ К/мин

Литература

1. Иванова В. С., Баланкин А. С., Бунин И. Ж., Оксогоев А. А. Синергетика и фракталы в материаловедении. М.: Наука, 1994. – 383 с.
2. Иванова В. С. Введение в междисциплинарное материаловедение. М.: Сайнс-пресс, 2005. – 208 с.
3. Bityutskaya L. A., Mashkina E. S. // Phase Transition. 2000. V. 71. P. 317.
4. Машкина Е. С. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2015. Т. 17. № 1. С. 80-84.
5. Иванова В. С., Фолманис Г. Э. // Нелинейный мир. 2004. Т. 2. № 2. С. 81-85.
6. Стахов А. П. Коды золотой пропорции. М.: Радио и связь, 1984. – 365 с.
7. Тимашев С. Ф. // ЖФХ. 1994. Т. 68. № 12. С. 2216-2223.
8. Тимашев С. Ф. // ЖФХ. 1995. Т. 69. № 12. С. 2260-2261.
9. Машкина Е. С., Гречкина М. В. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2013. Т. 15. № 1. С. 28-33.
10. Машкина Е. С. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Т. 13. № 3. С. 309-314.
11. Жукова Л. А. // Расплавы. 1995. № 2. С. 95-98.

STEADINESS AND ADAPTABILITY OF NANOSTRUCTURING PHASES COPPER PREMELTING PHASES

E. S. Mashkina

Voronezh State University

The analysis of steadiness and adaptability to structure transformations of copper nanocluster premelting phases has been carried out in different heating rates. The universal algorithm of self-organized structures in systems with controlled feedback have been used for determination steadiness of copper premelting transition states. Measure of steadiness and adaptability index (index of structure ability to restructuring) have been calculated by using the function of self-similarity. Prevailing of nonlinear feedback during the analysis of adaptability index ($m \sim 4$) has been revealed and pointed on replication mechanism of premelting phase formation (structure reconstruction).

Keywords: copper, premelting, bifurcations, nanocluster, steadiness, adaptability.

УМЕНЬШЕНИЕ УРОВНЯ БОКОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В РАВНОАМПЛИТУДНЫХ АНТЕННЫХ РЕШЕТКАХ ПРИ СОХРАНЕНИИ НАПРАВЛЕННЫХ СВОЙСТВ

И. А. Кирпичева

Воронежский государственный технический университет
kirpicheva89@mail.ru

Рассмотрена задача снижения уровня бокового излучения в линейной равноамплитудной антенной решетке при одновременном обеспечении сохранения ширины главного лепестка с априори заданной точностью. Путем параметрической оптимизации найдены величины расстояний между излучателями, обеспечивающие заданные требования. Для наиболее оптимального соотношения между направленными и избирательными свойствами антенной решетки приведена диаграмма направленности и изображена геометрия.

Ключевые слова: линейная неэквидистантная антенная решетка, оптимизация, генетический алгоритм, коэффициент расширения главного лепестка, уровень боковых лепестков.

Введение

Помехозащищенность радиосистемы во многом определяется свойствами приемного тракта и, в частности, характеристиками антенны. В настоящее время в радиосвязи для решения задач пространственно-временной фильтрации сигнала широко используются антенные решетки (АР) различного типа. Их популярность связана с высокими показателями коэффициентов усиления и направленного действия по сравнению с одиночными излучателями. В синфазных АР, где максимум излучения ориентирован по нормали к ее оси, крайне важной характеристикой с точки зрения помехоустойчивости является уровень боковых лепестков (УБЛ) диаграммы направленности (ДН), определяющий селективные свойства системы в направлениях прихода излучения, отличных от заданного. При снижении УБЛ антенна становится менее чувствительной к помехам, приходящим по направлениям побочного канала приема. Уменьшение уровня помех способствует повышению пропускной способности системы в целом.

В эквидистантных АР ослабление боковых лепестков ДН достигается путем подбора соответствующего амплитудного распределения, в неэквидистантных АР снижение УБЛ возможно за счет оптимального размещения излучателей [1, 2]. В таких решетках особый интерес представляет собой задача минимизации УБЛ при равномерном амплитудном распределении. Несмотря на большое число исследований, проведенных в этом направлении, и научных работ, посвященных обозначенной тематике, вопрос о предельно достижимых значениях УБЛ неэквидистантных АР изучен слабо.

В работе [3] была решена задача поиска минимаксного УБЛ в равноамплитудной синфазной неэквилидистантной АР. При этом, уменьшение УБЛ, сопровождалось расширением главного лепестка и, соответственно, ухудшением КНД решетки, что является нежелательным с точки зрения разрешающей способности системы и, а во многих задачах и вовсе недопустимым.

Цель работы – для разных значений числа излучателей и длины неэквилидистантной АР снизить УБЛ по сравнению с эквилидистантным прототипом (решетки той же длины при равномерном распределении излучателей) и не допустить расширения главного лепестка ДН. Иными словами, найти компромисс между избирательными и направленными свойствами системы.

Постановка и математическая формализация задачи

Предположим, что элементарные излучатели обладают изотропной ДН. На рис. 1 изображена геометрия исследуемой модели АР.

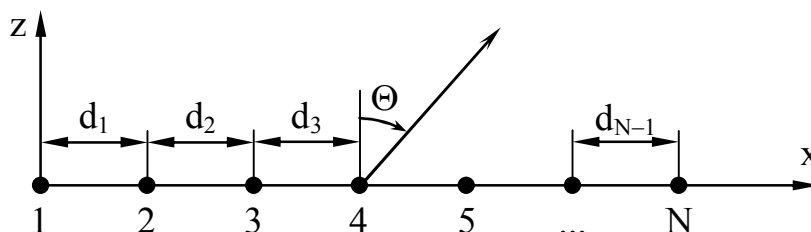


Рис. 1. Геометрия исследуемой АР изотропных излучателей

Общее число излучателей в составе решетки равно N . Длина волны излучения λ считается заданной и определяет волновое число свободного пространства $k_0 = 2\pi/\lambda$ [4]. Угол направления Θ на точку наблюдения будем отсчитывать от вертикальной оси z , совпадающей с нормалью к раскрытию решётки. Положительное значение угла Θ соответствует движению от нормали по часовой стрелке (рис. 1).

Расстояние между k -м и $(k+1)$ -м излучателями примем равным d_k , тогда координата k -го излучателя АР будет определяться как

$$x_k = \sum_{i=1}^{k-1} d_i, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (1)$$

Также будем считать, что решетка симметрична относительно центра. При таком условии расстояния между излучателями d_k , где $k = \frac{1}{2}N + 1 \dots N - 1$, расположенными справа от центра АР, в точности равны расстояниям d_k , где $k = 1 \dots \frac{1}{2}N - 1$, слева от центра

$$d_k = d_{N-k}, \quad k = 1 \dots \frac{1}{2}N - 1. \quad (2)$$

Кроме того, наложим требование на минимально допустимое расстояние между излучателями, приняв его равным d_{\min} .

Длина АР фиксирована и определяется в соответствии с выражением

$$L = \chi \cdot \lambda \cdot (N - 1), \quad (3)$$

где χ – априори заданный коэффициент разреженности АР, определяемый для аналогичной длины эквидистантной решетки отношением ее шага d к длине волны излучения λ .

В рамках представленного исследования амплитудное и фазовое распределения на АР предполагались строго равномерными; при этом амплитуды A_k и начальные фазы Φ_k токов (полей) на любом k -м элементе решетки одинаковы ($A_k = \text{const}$, $\Phi_k = \text{const}$).

Для расчета ДН решетки изотропных излучателей использовалась известная формула [5]

$$F_N(\Theta) = \sum_{k=1}^N A_k \cdot \exp(j\Phi_k) \cdot \exp(-jk_0 x_k \sin(\Theta)). \quad (4)$$

Поиск оптимальных значений периодов решетки производился с использованием модифицированного генетического алгоритма глобальной оптимизации [6], программная реализация которого доступна в сети Интернет [7]. Его достоинством по сравнению с другими подобными алгоритмами является минимальное число обращений к целевой функции за счет использования в процессе генерирования потомков локальных экстремумов.

В качестве целевой функции, минимум которой должен быть достигнут в ходе численной оптимизации, взята зависимость нормированного максимального УБЛ в дБ от варьируемых расстояний между излучателями d_k . При вычислении текущего значения целевой функции в соответствии с (1) рассчитывались координаты излучателей x_k , затем по формуле (4) – амплитудная ДН решетки, а затем и максимальный УБЛ в дБ. Чтобы в процессе поиска искомых параметров d_k , обеспечивающих минимаксный УБЛ решетки, значения координат излучателей x_k не выходили за рамки физически реализуемых значений (принимали только положительные значения, и координата крайнего правого элемента была бы не больше половины длины решетки $L/2$), вводилась штрафная функция, принимающая положительные значения при "уходе" x_k от области реализуемых значений. Аналогично накладывалось ограничение на минимальную величину расстояний d_k ($d_k \leq d_{\min}$). Для сохранения ширины главного лепестка по уровню половинной мощности на значения периодов d_k накладывалось дополнительное условие, допускающее относительное отклонение ширины главного лепестка неэквидистантной АР по сравнению с эквидистантным прототипом (коэффициент расширения главного лепестка K_p) на величину, не превышающую 10 %. Для этого в целевой функции при найденных значениях параметров расстояний d_k производился расчет ширины ДН по уровню половинной мощности («минус» 3 дБ) и определялся коэффициент расширения главного лепестка, по отношению к значению ширины ДН по уровню половинной мощности для эквидистантного прототипа, определяемого согласно [8] как

$$\Theta_h = 2|\theta_m - \theta_h|, \quad (5)$$

где $\theta_m = 0^\circ$ – угол, при котором достигается максимум ДН, θ_h – угол, при котором значение ДН уменьшается на «минус» 3 дБ по сравнению с максимальным значением, и вычисляемый как

$$\theta_h = \arcsin\left[\lambda / 2\pi d \cdot (-\Phi_k \pm 2,782 / N)\right]. \quad (6)$$

Совокупная целевая функция формировалась с учетом обозначенных ограничений.

Результаты решения задачи

Для следующих значений коэффициента разреженности решетки $\chi = 0,5; 0,6; 0,7$ и числа излучателей $N = 8; 12; 16; 20$ были найдены величины периодов равноамплитудной синфазной неэквилидистантной АР, обеспечивающие уменьшение УБЛ ДН и коэффициент расширения главного лепестка не более 10%. На рис. 2 приведены зависимости УБЛ от числа излучателей для $\chi = 0,5; 0,6; 0,7$. Сплошной линией показан УБЛ для эквидистантного прототипа. В таблицу сведены полученные при этом значения коэффициента расширения главного лепестка.

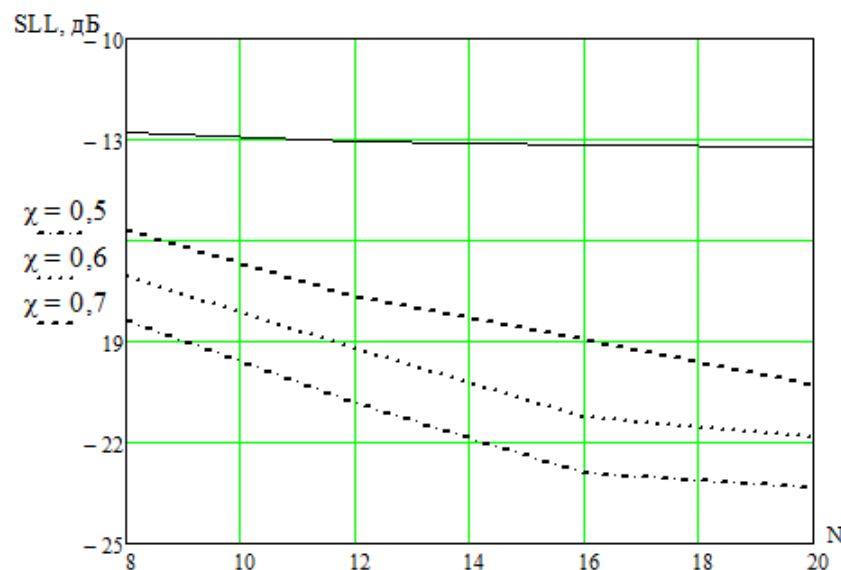


Рис. 2. УБЛ в зависимости от числа излучателей для различных значений χ при $d_{\min} = \lambda/4$

Коэффициент расширения главного лепестка для разных N и χ

| N | $K_p, \%$ | | |
|-----|--------------|--------------|--------------|
| | $\chi = 0,5$ | $\chi = 0,6$ | $\chi = 0,7$ |
| 8 | 4,8 | 2 | 3,2 |
| 12 | 6,3 | 2,1 | 1,27 |
| 16 | 7,8 | 8,9 | 3,3 |
| 20 | 6,4 | 2,15 | 0,7 |

Из графиков рис. 2 и таблицы можно сделать следующие выводы. Во-первых, при увеличении коэффициента разреженности решетки (увеличения ее

длины при неизменном числе излучателей) легче сохранять низкой величину коэффициента расширения главного лепестка ДН, при уменьшении УБЛ, что, вероятно, связано с увеличением диапазона возможных значений расстояний между излучателями, которые используются генетическим алгоритмом в процессе оптимизации. Однако, согласно рис. 2 увеличение коэффициента разреженности в целом приводит к повышению минимального УБЛ. Во-вторых, при низком значении коэффициента разреженности отчетливо проявляется взаимно противоречивый характер зависимости коэффициента расширения главного лепестка ДН и уровня бокового излучения от числа излучателей. То есть, увеличение длины решетки уменьшает УБЛ, но при этом расширяется главный лепесток, что приводит к ухудшению разрешающей способности системы. Однако, в целом, зависимость коэффициента расширения главного лепестка от числа излучателей носит осциллирующий характер, что будет являться предметом дальнейших исследований.

Наиболее оптимальной, с точки зрения автора, является решетка с числом излучателей $N=20$ и значением параметра разреженности $\chi=0,6$, так как при этом обеспечивается некий оптимум между УБЛ и шириной главного лепестка по уровню половинной мощности. На рис. 3 изображена геометрия полученной равноамплитудной синфазной неэквилидистантной АР, построенная по найденным значениям расстояний между излучателями. Здесь же, пустыми кружочками обозначена геометрия исходной эквидистантной АР.

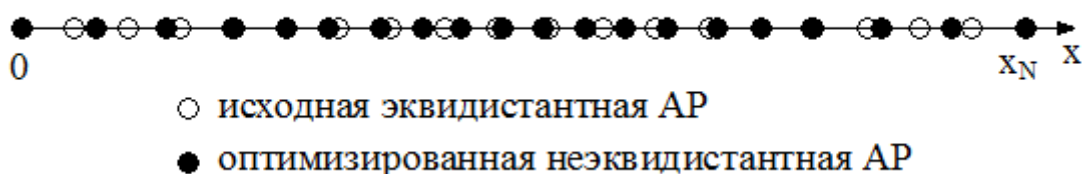


Рис. 3. Геометрия исходной и оптимизированной решеток

ДН решеток изображены на рис. 4 сплошной линией для оптимизированной решетки и штриховой – для эквидистантного прототипа.

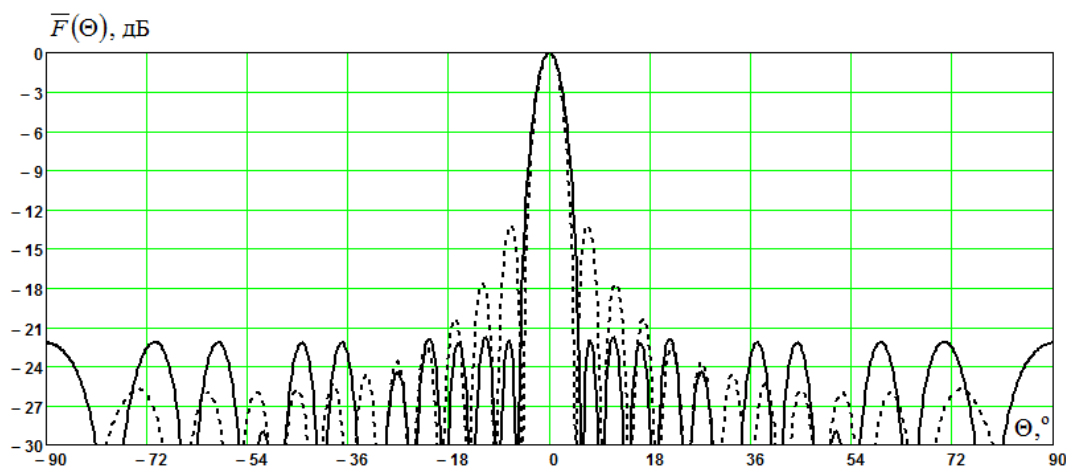


Рис. 4. Нормированная амплитудная ДН в логарифмическом масштабе для оптимизированной (сплошная линия) и исходной (штриховая линия) решеток

Заключение

Для разных значений коэффициента разреженности решетки и числа излучателей найдены величины расстояний между излучателями, обеспечивающие оптимальное соотношение УБЛ и степени расширения главного лепестка.

Литература

1. Хансен, Р. С. Фазированные антенные решётки / Р. С. Хансен; пер. с англ. под ред. А.И. Синани. – М.: Техносфера, 2012. – 558 с.
2. Устройства СВЧ и антенны: Проектирование фазированных антенных решёток: учеб. пособие для вузов / Д. И. Воскресенский, В. И. Степаненко, В. С. Филиппов и др.; под ред. Д. И. Воскресенского. – 4-е изд., перераб. и доп. – М.: Радиотехника, 2012. – 744 с.
3. Останков А. В. Минимаксный уровень бокового излучения равноамплитудной неэквидистантной антенной решетки / А. В. Останков, С. А. Антипов, Ю. С. Сахаров // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2013. – Т. 9. – № 6-3.
4. Останков А. В. Оптимизация направленных свойств линейных неэквидистантных антенных решеток / А. В. Останков, И. А. Кирпичева // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2013. – Т. 9. – №4. – С.8-11.
5. Сазонов Д. М. Антенны и устройства СВЧ: Учеб. Для радиотехнич. спец. вузов. – М.: Высш. шк., 1988. – 432 с.: ил.
6. Сабанин, В. Р. Модифицированный генетический алгоритм для задач оптимизации и управления / В. Р. Сабанин, Н. И. Смирнов, А. И. Репин // Exponenta Pro. Математика в приложениях. – 2004. – № 3-4. – С. 78-85.
7. URL: http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/Mathcad_12/3_31_genetic.mcd (дата обращения: 15.06.2013).
8. Constantine A. Balanis. Antenna Theory. Analysis and Design: ISBN: 0-471-66782-X.

DECREASE OF SIDE RADIATION LEVEL IN EQUALLY AMPLITUDE ANTENNA ARRAYS WITH SAVING DIRECTION CHARACTERISTICS

I. A. Kirpicheva

Voronezh State Technical University

The problem of decreasing of level of side radiation in linear equally amplitude antenna array at simultaneous retaining width main lobe is considered. By parameter optimization distances between radiators providing the necessary requires are found. Pattern of antenna array for the most optimal ratios between directional and selective properties is resulted.

Keywords: linear nonequidistant antenna array, optimization, genetic algorithm, the coefficient of expansion main lobe, side lobe level.

УРОВЕНЬ БОКОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ РАВНОАМПЛИТУДНОЙ НЕЭКВИДИСТАНТНОЙ АНТЕННОЙ РЕШЕТКИ С ФИКСИРОВАННЫМ ПО ШИРИНЕ ЛУЧОМ

И. А. Кирпичева, А. В. Останков

Воронежский государственный технический университет
kirpicheva89@mail.ru

Рассмотрена и решена задача численного расчёта предельно достижимого уровня бокового излучения линейной равноамплитудной неэквилистантной антенной решетки изотропных излучателей при фиксации ширины главного лепестка диаграммы направленности. С использованием численного алгоритма глобальной оптимизации найдены расстояния между излучателями решетки, удовлетворяющие поставленной задаче. Проведено сравнение с результатами параметрического синтеза неэквилистантной решетки по критерию минимума максимального уровня бокового излучения в отсутствие требований к ширине главного лепестка диаграммы направленности.

Ключевые слова: неэквилистантная антенная решетка, диаграмма направленности, уровень боковых лепестков, коэффициент расширения луча, оптимизация, генетический алгоритм.

Введение

Улучшение направленных свойств антенных решеток (АР) с типовой формой диаграммы направленности (ДН) является классической задачей теории антенн, решаемой как аналитически, так и численно. При этом задача может быть решена в двух направлениях, которые ведут к улучшению направленности, но одновременно являются противоборствующими. С одной стороны, повышение направленности – снижение уровня боковых лепестков (УБЛ) ДН, с другой – уменьшение ширины главного лепестка ДН. Из теории антенн [1] хорошо известно, что снижение одного показателя приводит к неизбежному росту другого. Какому показателю отдать предпочтение, а какому уделить меньшее внимание – зависит от конкретного применения антенной системы. Так, в радиосвязи, улучшение пропускной способности достигается за счет повышения отношения сигнал/шум в канале при использовании пространственно-временной фильтрации сигнала – приема сигнала одного направления и подавления помех в оставшихся. Очевидно, что критичным параметром в этом случае будет максимальный УБЛ, в то время, как расширение главного лепестка ДН является, по крайней мере, вторичным. В радиолокации ситуация прямо противоположна – уменьшение (фиксация) ширины главного лепестка – первостепенная задача, так как непосредственно влияет на разрешающую способность системы.

В работе [2] решена задача поиска минимаксного УБЛ в равноамплитудной синфазной неэквилистантной АР. Авторами найдены величины расстояний между изотропными излучателями, обеспечивающие минимальную величину максимального УБЛ. Однако при этом снижение УБЛ сопровождалось расши-

рением главного лепестка, что является нежелательным, а в некоторых случаях и вовсе недопустимым.

Цель работы – исследовать численно влияние фиксации ширины главного лепестка ДН на минимально достижимый уровень бокового излучения в линейной неэквидистантной равноамплитудной АР.

Постановка задачи и методы решения

Для решения поставленной цели достаточно каким-либо образом – аналитически или численно – отыскать такие расстояния между элементами равноамплитудной АР, при которых обеспечивается максимальное подавление бокового излучения при неизменной (фиксированной) ширине главного лепестка ДН.

На рис. 1 изображена геометрия исследуемой идеализированной модели АР, в которой каждый элемент обладает изотропной ДН.

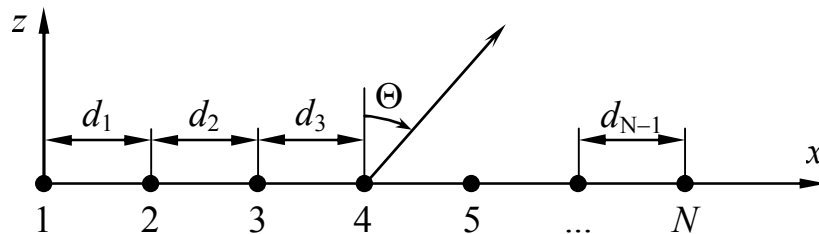


Рис. 1. Геометрия исследуемой АР изотропных излучателей

Общее число излучателей в составе решетки равно N . Длина волны излучения λ считается заданной и определяет волновое число свободного пространства $k_0 = 2\pi/\lambda$. Угол направления Θ на точку наблюдения будем отсчитывать от вертикальной оси z , совпадающей с нормалью к раскрытию решётки. Положительное значение угла Θ соответствует движению от нормали по часовой стрелке (рис. 1).

Если d_k – расстояние между k -м и $(k+1)$ -м излучателями, то координата k -го элемента АР будет определяться как

$$x_k = \sum_{i=1}^{k-1} d_i, \quad k = [1, \dots, N]. \quad (1)$$

При условии симметрии АР относительно её центра расстояния d_k между излучателями с номерами $k = [\frac{1}{2}N+1, \dots, N-1]$, расположенными справа от центра АР, равны расстояниям d_k , где $k = [1, \dots, \frac{1}{2}N-1]$, расположенным слева от центра

$$d_k = d_{N-k}, \quad k = [1, \dots, \frac{1}{2}N-1]. \quad (2)$$

Минимально допустимое расстояние между излучателями фиксировано и принято равным d_{\min} .

Длина АР определялась в соответствии с выражением

$$L = \chi \cdot \lambda \cdot (N - 1), \quad (3)$$

где χ – предварительно заданный коэффициент разреженности АР, определяемый для аналогичной длины эквидистантной АР отношением ее неизменного шага d к длине волны излучения λ .

В рамках представленного исследования амплитудное и фазовое распределения на АР предполагались строго равномерными – амплитуды A_k и начальные фазы Φ_k токов (полей) на любом k -м элементе АР одинаковы.

Для расчета ДН решетки изотропных излучателей использовалась известная формула [1]:

$$F(\Theta) = \left| \sum_{k=1}^N A_k \cdot \exp(j\Phi_k) \cdot \exp(-jk_0 \cdot x_k \cdot \sin\Theta) \right|. \quad (4)$$

Ширина главного лепестка $2\Theta_{0.5}$ оценивалась по уровню «минус» 3 дБ нормированной ДН решетки в логарифмическом масштабе. Коэффициент расширения луча (КРЛ) – главного лепестка ДН – определялся как:

$$K_p = 100\% \cdot (2\Theta_{0.5} - 2\Theta'_{0.5}) / 2\Theta'_{0.5}, \quad (5)$$

где $2\Theta'_{0.5}$ – ширина главного лепестка ДН АР эквидистантного типа (длиной L с равными расстояниями между элементами) по уровню половинной мощности.

Поиск оптимальных значений расстояний между элементами АР производился с использованием генетического алгоритма [3].

В качестве целевой функции, минимум которой должен быть достигнут в ходе численной оптимизации, взята зависимость нормированного максимального уровня бокового излучения в дБ от расстояний между элементами d_k . При вычислении текущего значения целевой функции сначала рассчитывались координаты излучателей x_k в соответствии с (1), затем по формуле (4) – амплитудная ДН решетки, а затем и максимальный УБЛ в дБ. Чтобы в процессе поиска оптимальных d_k , обеспечивающих минимаксный УБЛ ДН, текущие координаты элементов x_k не выходили за рамки физически реализуемых значений (положительных и не превышающих $1/2L$), вводилась барьерная экспоненциальная функция, значительно возрастающая при увеличении отклонения x_k от области физических значений. Аналогично накладывалось ограничение на минимальную величину расстояний d_k , так чтобы $d_k \leq d_{\min} = 1/4\lambda$, и коэффициент расширения луча – $K_p \leq \delta K_p\%$, где $\delta K_p\%$ – малая пороговая величина КРЛ, составляющая менее десятой доли процента.

Результаты параметрического синтеза и их обсуждение

Для следующих значений коэффициента разреженности решетки $\chi = 0.5, 0.6, 0.7$ и числа излучателей $N = 8, 10, 12, 14, 16, 18$ и 20 были найдены величины расстояний d_k равноамплитудной синфазной неэквидистантной АР, обеспечивающие максимальное снижение УБЛ при сохранении неизменной ширины

главного лепестка ДН. На рис. 2 сплошными линиями показаны зависимости найденных минимаксных значений УБЛ от числа элементов. Штриховыми линиями приведены соответствующие указанным коэффициентам разреженности χ минимаксные значения УБЛ из работы [2], полученные в отсутствие требований к ширине главного лепестка ДН. Пунктиром показаны значения УБЛ ДН решетки эквидистантного типа. В табл. 1 продублированы численно графические зависимости минимаксных УБЛ от числа элементов АР, представленные на рис. 2, где ξ_0 – минимаксные УБЛ из [2], ξ – УБЛ для АР, синтезированных с учетом ограничения, накладываемого на величину КРЛ.

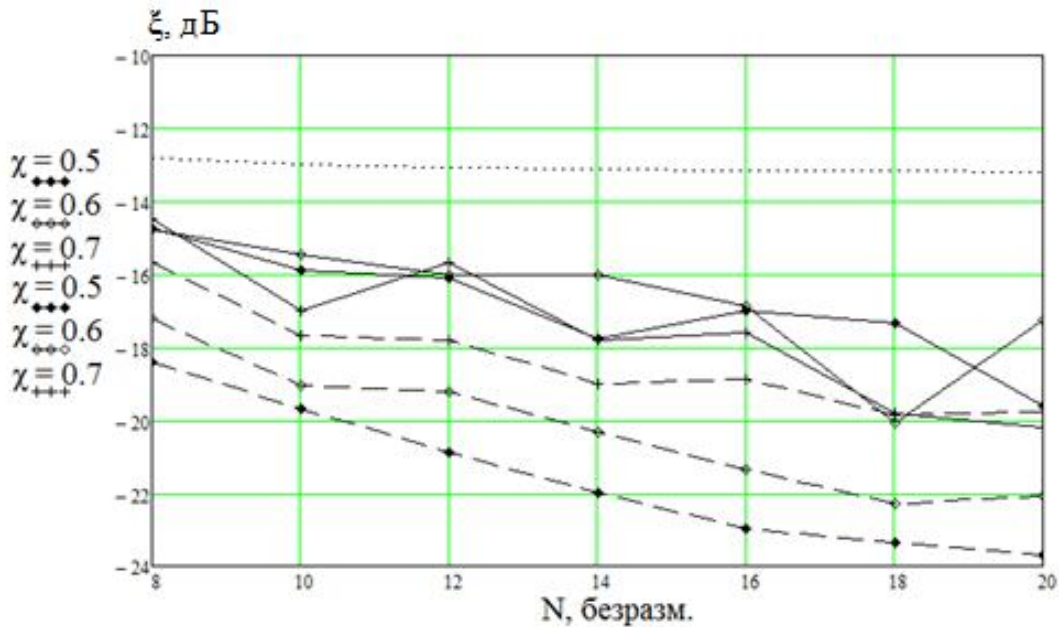


Рис. 2. Минимаксный УБЛ как функция числа элементов неэквидистантной равноамплитудной АР для разных значений степени разреженности χ

Таблица 1

Минимаксные УБЛ ДН равноамплитудной неэквидистантной АР

| N | $\chi = 0.5$ | | $\chi = 0.6$ | | $\chi = 0.7$ | |
|-----|--------------|------------|--------------|------------|--------------|------------|
| | ξ_0 , дБ | ξ , дБ | ξ_0 , дБ | ξ , дБ | ξ_0 , дБ | ξ , дБ |
| 8 | -18.39 | -14.745 | -17.22 | -14.794 | -15.362 | -14.483 |
| 10 | -19.71 | -15.884 | -19.04 | -15.457 | -15.528 | -16.988 |
| 12 | -20.90 | -16.116 | -19.24 | -16.019 | -17.687 | -15.683 |
| 14 | -21.99 | -17.749 | -20.31 | -16.025 | -16.456 | -17.79 |
| 16 | -22.98 | -17.015 | -21.37 | -16.854 | -18.954 | -17.594 |
| 18 | -23.37 | -17.356 | -22.28 | -20.07 | -17.981 | -19.837 |
| 20 | -23.69 | -19.602 | -22.10 | -17.257 | -19.645 | -20.197 |

В табл. 2 приведены значения КРЛ для АР, синтезированных в работе [1] (K_{p0}), а также относительные величины ухудшения максимального УБЛ ДН ($\Delta\xi_{\%}$) синтезированных неэквидистантных решеток по отношению к решеткам с минимаксными УБЛ, синтезированными в отсутствие требований к ширине главного лепестка ДН [1].

На рис. 3, 5 и 7 для антенной решетки с $N=20$ для трех значений коэффициента разреженности $\chi = 0.5, 0.6, 0.7$ соответственно, приведены нормированные амплитудные ДН синтезированной решетки (сплошной), решетки в отсутствие требований к ширине главного лепестка ДН [1] (штрихом) и эквидистантной решетки-прототипа (пунктиром). Геометрии решеток для указанных χ показаны на рис. 4, 6 и 8 соответственно.

ДН решеток, полученных при параметрическом синтезе, приведенные на рис. 3, 5 и 7, показывают, что снижение максимального УБЛ происходит за счет отбора мощности от боковых лепестков, ближайших к главному лепестку, и ее последующего перераспределения по периферийным лепесткам. В результате наблюдается выравнивание УБЛ. При этом имеет место смещение элементов решетки от периферии решетки к ее центру – уплотнение центральной части решетки (рис. 4, 6, 8, полые окружности). Наложение ограничения на ширину главного лепестка ДН приводит к некоторому, преимущественно незначительному, обратному сдвигу излучателей – от центра к периферии (4, 6, 8, заливные окружности), так как с увеличением расстояния между центральными элементами главный лепесток ДН становится уже. Это, в свою очередь, сопровождается ростом среднего уровня значений УБЛ, а при $\chi = 0.5$ приводит к заметному увеличению периферийных боковых лепестков.

Таблица 2

КРЛ для АР с минимаксными УБЛ [1]
и относительная величина ухудшения УБЛ при фиксации КРЛ

| N | $\chi = 0.5$ | | $\chi = 0.6$ | | $\chi = 0.7$ | |
|----|--------------|----------------------|--------------|----------------------|--------------|----------------------|
| | $K_{p0}, \%$ | $\Delta\xi_{\%}, \%$ | $K_{p0}, \%$ | $\Delta\xi_{\%}, \%$ | $K_{p0}, \%$ | $\Delta\xi_{\%}, \%$ |
| 8 | 5.75 | 22.8 | 4.10 | 14.1 | 2.85 | 7.52 |
| 10 | 6.95 | 19.3 | 6.60 | 18.8 | 4.95 | 3.97 |
| 12 | 8.96 | 26.0 | 6.30 | 16.7 | 5.00 | 11.8 |
| 14 | 10.2 | 25.7 | 7.65 | 21.1 | 6.90 | 6.42 |
| 16 | 11.0 | 17.3 | 9.50 | 21.1 | 7.90 | 6.71 |
| 18 | 11.6 | 19.8 | 10.8 | 9.92 | 7.40 | 0.02 |
| 20 | 12.8 | 19.4 | 10.8 | 21.9 | 8.35 | -2.16 |

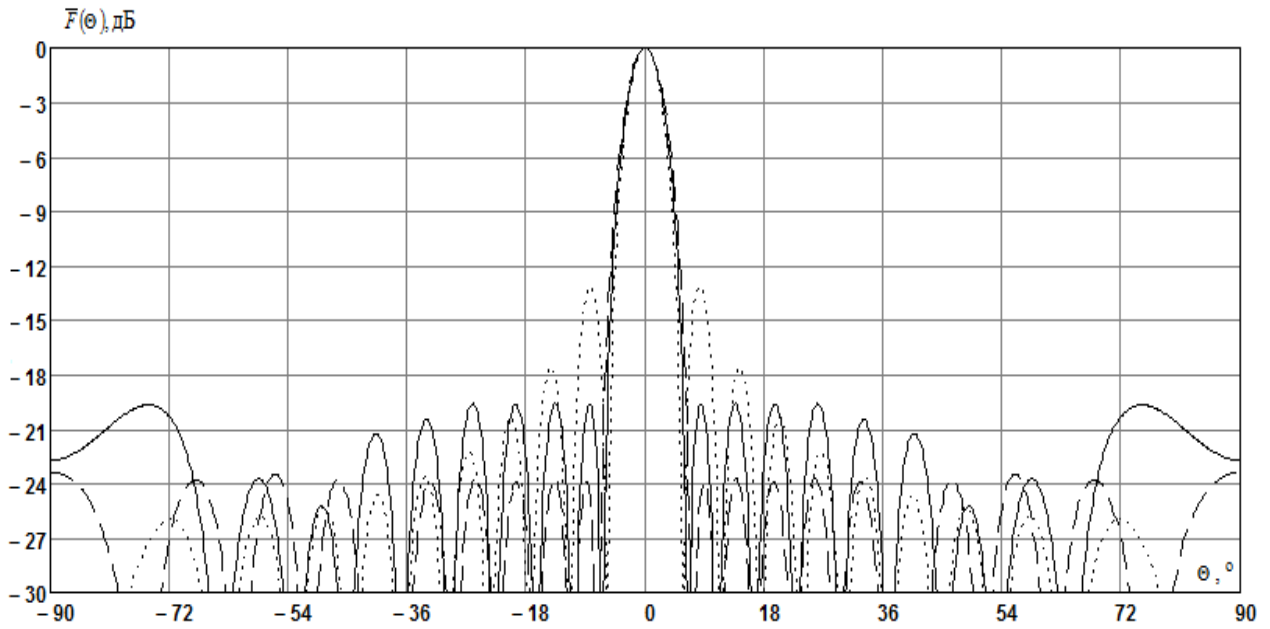


Рис. 3. Нормированные амплитудные ДН решеток при $\chi = 0.5$

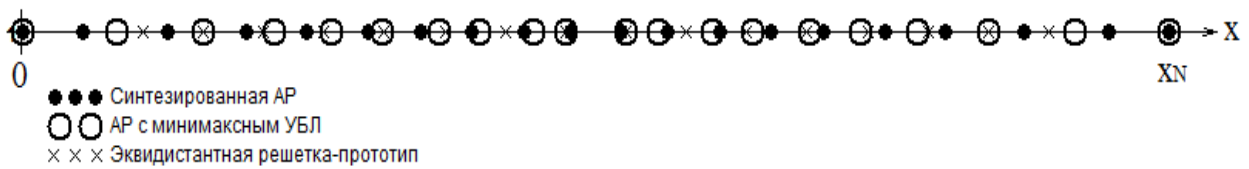


Рис. 4. Геометрии равноамплитудных решеток при $\chi = 0.5$

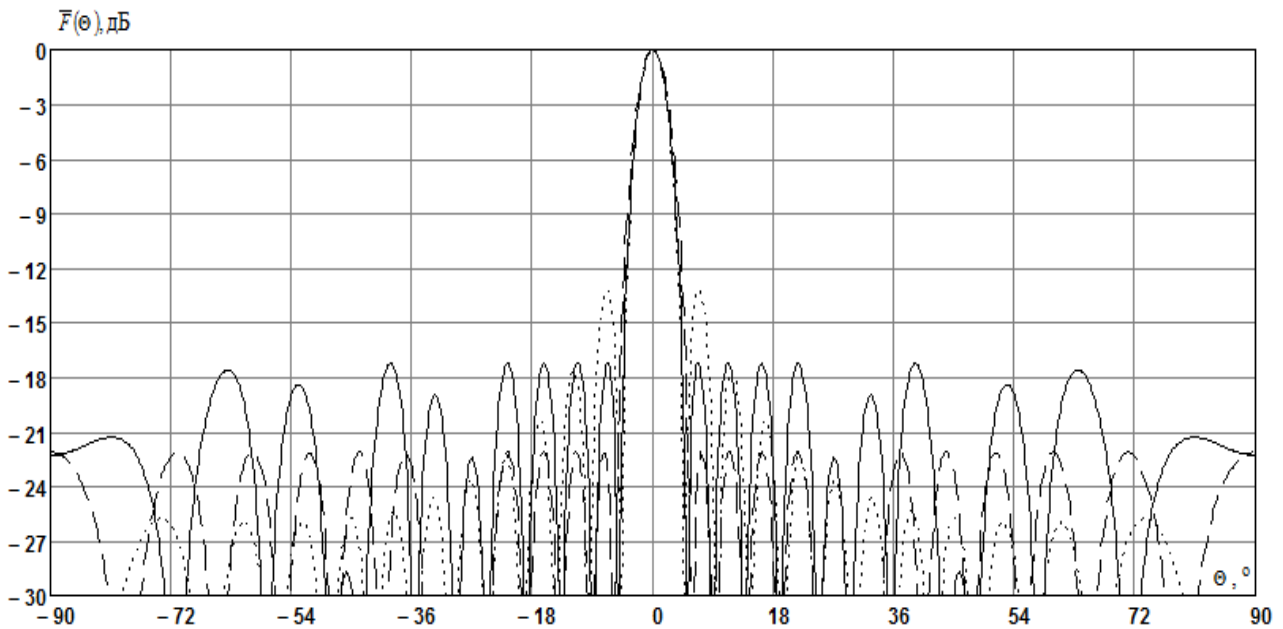


Рис. 5. Нормированные амплитудные ДН решеток при $\chi = 0.6$

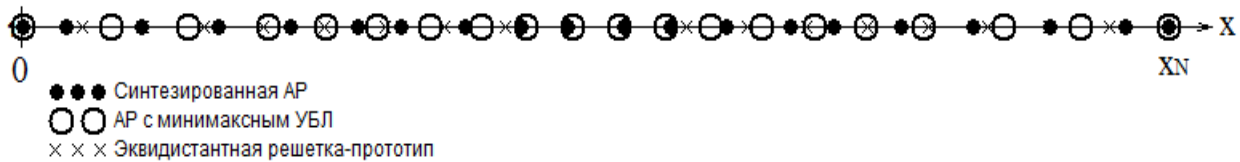


Рис. 6. Геометрии равноамплитудных решеток при $\chi = 0.6$

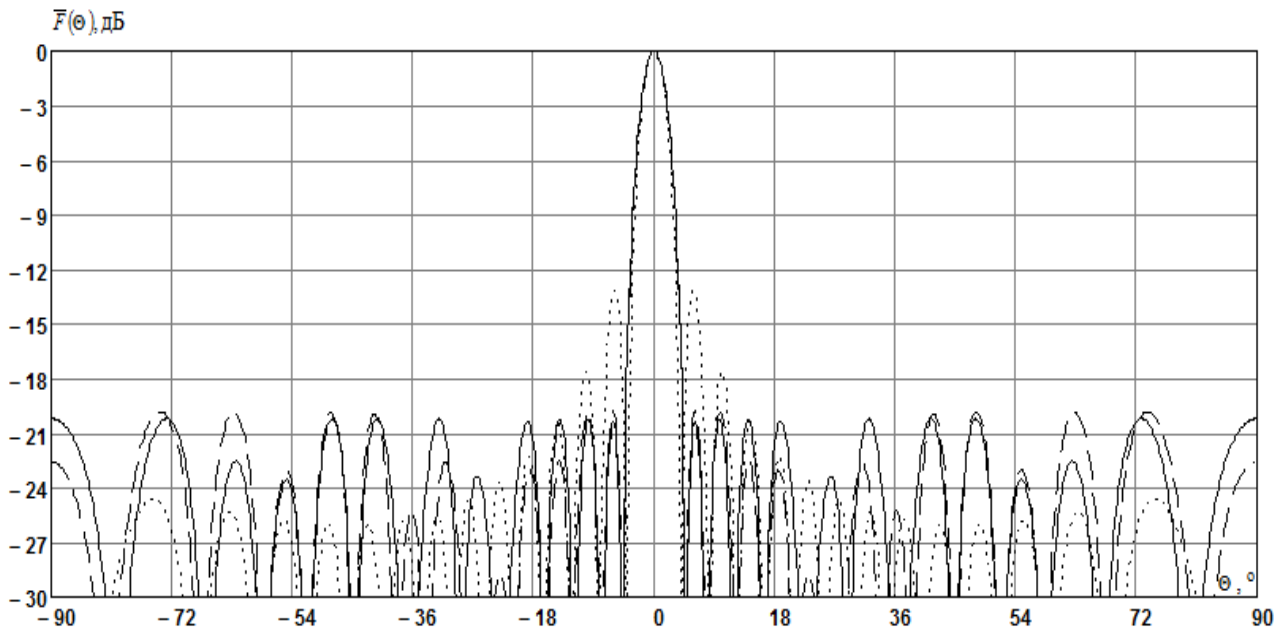


Рис. 7. Нормированные амплитудные ДН решеток при $\chi = 0.7$

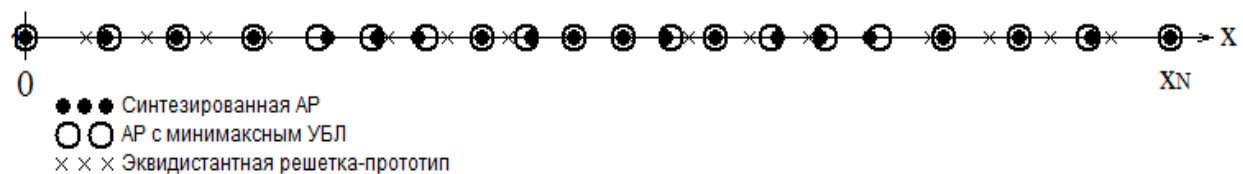


Рис. 8. Геометрии равноамплитудных решеток при $\chi = 0.7$

Влияние на рост максимального УБЛ перераспределения мощности на раскрые решетки за счет смещения центральных излучателей к периферии (относительно исходного значения, найденного в отсутствие ограничения величины КРЛ) проявляется тем сильнее, чем меньше χ (чем сильнее электродинамическая связь между элементами АР). Этот тезис подтверждается численными данными табл. 2, наглядно демонстрирующими то, что с уменьшением χ имеет место рост относительных величин ухудшения максимального УБЛ ($\Delta\xi\%$). Согласно данным табл. 2, заимствованным из [1], с увеличением коэффициента разреженности АР χ уменьшаются относительные значения КРЛ для АР с одинаковым числом элементов N . В таких решетках слабее проявляется противоречивая связь между максимальным УБЛ и КРЛ, именно, поэтому фиксация при

синтезе ширины главного лепестка сопровождается меньшим проигрышем по УБЛ. Однако в целом в решетках с большими χ максимальный УБЛ больше. Это следует учитывать в практических задачах приема сигнала при стремлении обеспечить рост пропускной способности радиосистемы.

Заключение

С использованием алгоритма численной оптимизации для разных значений коэффициента разреженности и числа элементов линейной равноамплитудной АР найдены близкие к оптимальным расстояния между элементами, обеспечивающие экстремальные значения максимального УБЛ ДН при фиксации ширины главного лепестка. Полученные данные могут быть использованы при выборе стратегии повышения направленных свойств АР в зависимости от приоритетов решаемой задачи.

Литература

1. Хансен, Р. С. Фазированные антенные решётки / Р. С. Хансен; пер. с англ. под ред. А. И. Синани. – М.: Техносфера, 2012. – 558 с.
2. Останков, А. В. Минимаксный уровень бокового излучения равноамплитудной неэквидистантной антенной решетки / А. В. Останков, С. А. Антипов, Ю. С. Сахаров // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2013. – Т. 9, № 6-3. – С. 10-12.
3. Сабанин, В. Р. Модифицированный генетический алгоритм для задач оптимизации и управления / В. Р. Сабанин, Н. И. Смирнов, А. И. Репин // Exponenta Pro. Математика в приложениях. – 2004. – № 3-4. – С. 78-85.

SIDE RADIATION LEVEL OF UNIFORM NONEQUIDISTANT ANTENNA ARRAY WITH FIXED BEAM WIDTH

I. A. Kirpicheva, A. V. Ostankov

Voronezh State Technical University

The task of numerical calculation of the maximum achievable side radiation level of linear uniform nonequidistant antenna array of isotropic radiators at retention of main lobe beamwidth is considered and solved. Dimensions between radiators which satisfying assigned task are found with utilization numerical technique of global optimization. Comparison with results of parametric synthesis of nonequidistant array at minimum of the maximum side radiation level in the absence of main lobe beamwidth requirements criterion is done.

Keywords: nonequidistant antenna array, radiation pattern, side lobes level, the coefficient of expansion beam, optimization, genetic algorithm.

СТРУКТУРНЫЕ ПОВЕРХНОСТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

В. Н. Нечаев, А. В. Шуба

ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
shandvit@rambler.ru

Исходя из теории Ландау, исследованы особенности влияния энергии поверхности на параметр порядка, теплоемкость, обобщенную восприимчивость ферроиков вблизи температуры структурного фазового перехода. Показано влияние свойств поверхности тонкой пластины ферроиков на смещение температуры фазового перехода, параметр порядка, теплоемкость. Рассмотрено действие поверхности на спин-переориентационные переходы в гексагональных ферромагнетиках. Показано, что фазовый переход в неоднородное состояние на поверхности материала при учете стрикционной связи будет происходить при более высокой температуре, чем в объеме материала.

Ключевые слова: параметр порядка, поверхностная энергия, длина экстраполяциии, структурный фазовый переход, свободная энергия, теория Ландау, спин-переориентационный фазовый переход.

Поверхность представляет собой двумерный дефект трехмерной структуры кристалла. Обрыв химических связей на поверхности кристалла приводит: 1) к возникновению локализованных поверхностных состояний; 2) к изменению эффективных зарядов поверхностных атомов и межатомных расстояний; 3) к изменению фононного спектра; 4) к появлению поверхностных деформаций и т.д. Эти изменения сохраняются в некоторой конечной области, которая и представляет собой поверхностную фазу (или просто поверхность) с физическими свойствами отличными от свойств объемной фазы. Все отмеченные особенности относятся в полной мере и к межфазным границам, разделяющим соприкасающиеся фазы твердых тел. Чрезвычайно важное значение физики поверхности в современных технологиях делает весьма актуальной задачу изучения поверхности и процессов происходящих на ней.

Влияние поверхности на магнитные фазовые переходы в полупространстве и в пластине детально изучено в работах Каганова М. И. с сотрудниками [1-5]. В работах [6-10] исследовалось влияние поверхности на фазовые переходы в тонких пленках сегнетоэлектриков и сегнетоэластиков. В [11] изучалось влияние далекодействующих упругих сил на фазовые переходы на поверхности. Определены условия образования на поверхности сверхструктур. Цель настоящей статьи дать обзор этих результатов и привести новые по данной тематике.

Следует отметить, что выбранное направление исследований представляет собой лишь малую часть проблемы влияния поверхности на физические свойства материалов. Так, например, в последнее десятилетие были обнаружены так называемые фазовые переходы на границах зерен и начато их подробное исследование [12, 13]. В частности, впервые показано, что фазовые переходы на границах зерен (смачивания, расплавления и предсмачивания) приводят к резкому изменению таких свойств границ зерен, как диффузионная проницае-

мость, энергия и адсорбция, удельное электросопротивление, прочность и подвижность, склонность к недиффузионному проникновению второй фазы. Наиболее резко фазовые переходы на внутренних границах раздела меняют свойства поликристаллов в области размеров зерен от 1 до 1000 нм. В результате фазовых переходов на границах зерен на традиционных объемных фазовых диаграммах появляются новые линии, описывающие свойства поликристалла с границами раздела. Зная, где расположены линии зернограничных фазовых переходов на объемных фазовых диаграммах, можно разрабатывать режимы термической обработки материалов с микро- и нанокристаллическим размером зерен, целенаправленно изменяя и задавая их свойства.

1. Полупространство

Поверхностная энергия оказывает значительное влияние на фазовые переходы в частицах ограниченных размеров [1, 3, 4]. Перестройка поверхности под влиянием каких-либо внешних воздействий, безусловно, влияет на состояние вещества в объеме частицы. Исследование этого вопроса возможно в рамках феноменологического подхода к описанию фазовых переходов. При этом неважно какова природа перехода и физический смысл параметра порядка. Применимость такого подхода к описанию магнитных фазовых переходов обсуждается в приведенных выше работах. Будем считать, что плотность свободной энергии F_s пропорциональна квадрату параметра порядка η

$$F_s = \frac{1}{2} \alpha_s \eta^2,$$

где α_s – коэффициент при квадратичном слагаемом разложения свободной энергии поверхности в ряд по степеням параметра порядка. С целью предотвращения неоправданно громоздких выкладок, ограничимся рассмотрением случая полупространства. Действительно, предположим, что вещество занимает полупространство $z \geq 0$. Уравнения равновесия для параметра порядка η и граничные условия к нему пусть имеют вид

$$-\kappa \frac{d^2 \eta}{dz^2} - \alpha \eta + \beta \eta^3 = 0; \quad (1)$$

$$\frac{d\eta}{dz} (+\infty) = 0; \quad (2)$$

$$\kappa \frac{d\eta}{dz} (0) = \alpha_s \eta(0). \quad (3)$$

Здесь введены обозначения: $\alpha = \alpha_0(T_C - T)$; β – константы разложения свободной энергии, где T_C – температура Кюри в объёме образца; κ – корреляционная постоянная. Первый интеграл уравнения (1) находится тривиально

$$\frac{1}{2} \kappa \left(\frac{d\eta}{dz} \right)^2 = -\frac{1}{2} \alpha \eta^2 + \frac{1}{4} \beta \eta^4 + C.$$

Произвольная постоянная C в этом выражении находится из граничного условия (2):

$$C = \frac{1}{2} \alpha \eta_{\infty}^2 - \frac{1}{4} \beta \eta_{\infty}^4.$$

Здесь введено обозначение: $\eta_{\infty} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}}$.

В результате первый интеграл принимает вид

$$\delta^2 \left(\frac{d\eta}{dz} \right)^2 = \frac{(\eta_{\infty}^2 - \eta^2)^2}{\eta_{\infty}^2}.$$

Здесь введено обозначение: $\delta^2 = \frac{2\kappa}{\alpha}$. Далее после несложных вычислений, находим

$$\eta(z) = -\eta_{\infty} \frac{1 - C_1 e^{2z/\delta}}{1 + C_1 e^{2z/\delta}}.$$

Согласно, этому выражению

$$\eta(0) = \eta_0 = -\eta_{\infty} \frac{1 - C_1}{1 + C_1}.$$

Из этого равенства определяется произвольная постоянная C_1 через параметры материала η_{∞} , η_0

$$C_1 = \frac{\eta_{\infty} + \eta_0}{\eta_{\infty} - \eta_0}.$$

Искомая зависимость $\eta(z)$ принимает вид:

$$\eta(z) = \eta_{\infty} \frac{(\eta_{\infty} + \eta_0) e^{z/\delta} - (\eta_{\infty} - \eta_0) e^{-z/\delta}}{(\eta_{\infty} + \eta_0) e^{z/\delta} + (\eta_{\infty} - \eta_0) e^{-z/\delta}}. \quad (4)$$

Согласно (4), значение параметра порядка $\eta(z)$ изменяется от η_{∞} в объеме материала до значения η_0 на границе. Для решения вопроса о поверхностном фазовом переходе представляет наибольший интерес температурная зависимость параметра порядка на поверхности η_0 . Выразим соответствующую величину через известные параметры материала, используя граничное условие (3):

$$\eta_0 = \eta_{\infty} \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{2\kappa\alpha}} - \frac{\alpha_s}{\sqrt{2\kappa\alpha}} \right). \quad (5)$$

Температурное поведение η_0 существенно различается в зависимости от того, каков знак коэффициента α_s . Рассмотрим два случая. Пусть $\alpha_s > 0$ (рис. 1). При $T \rightarrow T_C$, раскладывая выражение (5) в ряд, получаем

$$\eta_0 \rightarrow \eta_{\infty} \frac{\kappa\alpha}{\alpha_s^2}. \quad (6)$$

Согласно выражению (6), значение параметра порядка на поверхности η_0 обращается в нуль при $T = T_C$. Стремление η_0 к нулю происходит по закону более быстрому $|T - T_C|^{3/2}$, чем в объеме материала изменяется с температурой спонтанное значение параметра порядка $\eta_\infty \sim |T - T_C|^{1/2}$.

Заметим, что отношение $\frac{\eta_0}{\eta_\infty}$ в этом случае меньше единицы как вблизи T_C (см. формулу (6)), так и вдали от T_C , где $\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \cong 1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha_s \delta}{\kappa}$.

Для исследования поведения параметра порядка в качестве примера возьмем сегнетоэлектрический кристалл триглицинсульфата (ТГС) с параметрами $T_C = 322$ К, $\alpha_0 = 3.92 \cdot 10^{-3}$ К $^{-1}$, $\kappa = 10^{-15}$ см 2 , $\alpha_s = 0.75 \cdot 10^{-8}$ см.

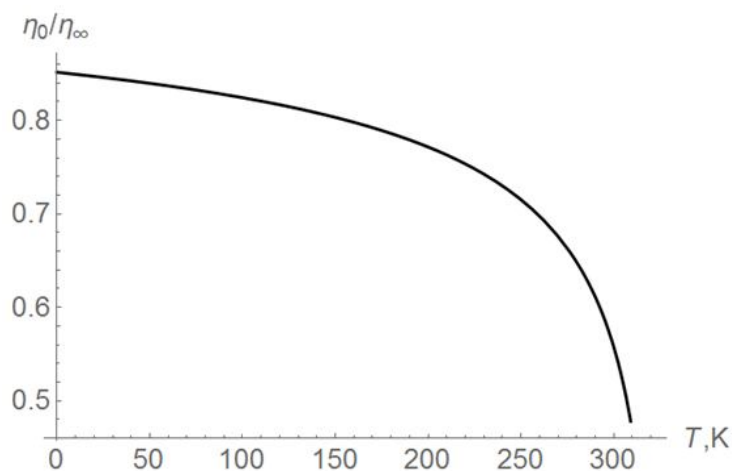


Рис. 1. Зависимость нормированного значения параметра порядка на поверхности образца $\frac{\eta_0}{\eta_\infty}$ от температуры, $\alpha_s > 0$

Если коэффициент $\alpha_s < 0$, то температурное поведение η_0 меняется кардинальным образом. Действительно, если $T = T_C$, то из общего выражения (5), получаем в этом случае конечное независящее от температуры значение

$$\eta_0 = \sqrt{\frac{2}{\kappa\beta}} |\alpha_s|. \quad (7)$$

Для детального анализа этой ситуации необходимо решить уравнение равновесия (1) с граничным условием (3) и дополнительным условием

$$\eta(\infty) = 0 \quad (8)$$

для температурной области $T > T_C$. Первый интеграл уравнения (1), после определения постоянной интегрирования ($C = 0$) из граничного условия (8), принимает вид:

$$\frac{1}{2} \kappa \left(\frac{d\eta}{dz} \right)^2 = -\frac{1}{2} \alpha \eta^2 + \frac{1}{4} \beta \eta^4. \quad (9)$$

Это уравнение несложно привести к виду:

$$\frac{d\eta}{\eta\sqrt{(\eta^*)^2 + \eta^2}} = \frac{dz}{\eta^*\delta^*}, \quad (10)$$

где введены обозначения: $\eta^* = \sqrt{\frac{2|\alpha|}{\beta}}$, $\delta^* = \sqrt{\frac{\kappa}{|\alpha|}}$.

В результате интегрирования уравнения (10), имеем

$$\frac{\eta}{\sqrt{(\eta^*)^2 + \eta^2} + \eta^*} = C_2 e^{z/\delta^*}, \quad C_2 > 0.$$

Постоянную интегрирования C_2 можно выразить через значение параметра порядка на поверхности η_0 :

$$C_2 = \frac{\eta_0}{\sqrt{(\eta^*)^2 + \eta_0^2} + \eta^*}.$$

Тогда получим

$$\frac{\eta}{\sqrt{(\eta^*)^2 + \eta^2} + \eta^*} = \frac{\eta_0}{\sqrt{(\eta^*)^2 + \eta_0^2} + \eta^*} e^{z/\delta^*}.$$

В этом выражении параметр η_0 не определен и может принимать любые значения. Для его определения нужно получить явное выражение для функции $\eta(z)$:

$$\eta(z) = 2\eta^* \frac{C_2 \cdot e^{z/\delta^*}}{1 - C_2^2 e^{2z/\delta^*}}; \quad \eta_0 = \eta(0) = 2\eta^* \frac{C_2}{1 - C_2^2}. \quad (11)$$

Воспользовавшись граничным условием (3), находим C_2 и температурную зависимость параметра порядка на поверхности η_0 (рис. 2):

$$C_2 = \sqrt{\frac{\frac{\delta^*|\alpha_s|}{\kappa} - 1}{\frac{\delta^*|\alpha_s|}{\kappa} + 1}};$$

$$\eta_0 = \eta^* \sqrt{\left(\frac{\delta^*|\alpha_s|}{\kappa}\right)^2 - 1}. \quad (12)$$

Приравнявая η_0 к нулю, находим температуру поверхностного фазового перехода T_s :

$$T_s = T_c + \frac{\alpha_s^2}{\kappa\alpha_0}. \quad (13)$$

При температуре объемного фазового перехода T_c значение параметра порядка на поверхности η_0 , согласно формулам (5), (12), возрастает на величину

$$\Delta\eta_0 = \sqrt{\frac{2}{\kappa\beta}} |\alpha_s|.$$

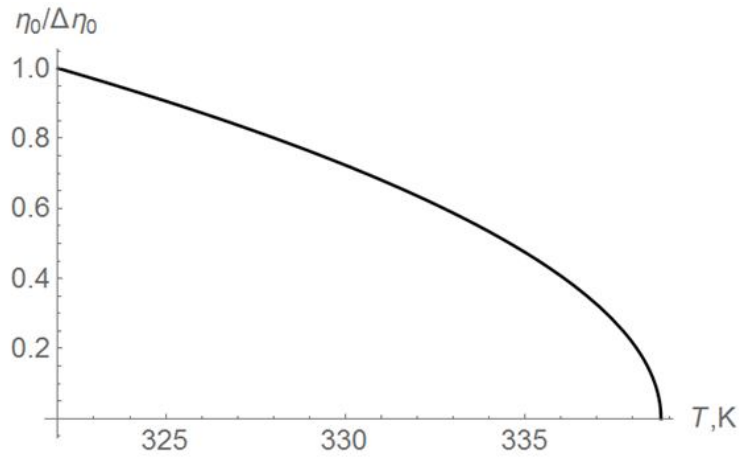


Рис. 2. Зависимость нормированного значения параметра порядка на поверхности образца $\frac{\eta_0}{\Delta\eta_0}$ от температуры, $\alpha_s < 0$

Таким образом, фазовый переход в этом случае начинается на поверхности материала при температуре T_s (рис. 2). С удалением от поверхности значение параметра порядка η падает, согласно формуле (11), по экспоненциальному закону. Глубина проникновения параметра порядка внутрь материала характеризуется параметром $\delta^* = \sqrt{\frac{2\kappa}{\alpha}}$, который растет с приближением температуры T к T_c по закону $\delta^* \sim (T - T_c)^{-1/2}$ и при $T = T_c$ захватывает весь объем вещества – фазовый переход происходит во всем материале. Предельный случай $T = T_c$ представляет интерес изучить аналитически отдельно. Решение уравнения (1) в этом случае имеет вид

$$\eta(z) = \frac{1}{\sqrt{\frac{\beta}{2\kappa}z + C_3}}. \quad (14)$$

Постоянная C_3 определяется из граничного условия (3)

$$C_3 = \sqrt{\frac{\kappa\beta}{2} \frac{1}{|\alpha_s|}}.$$

Подставляя в (14), находим окончательно $\eta(z)$

$$\eta(z) = \frac{1}{\sqrt{\frac{\kappa\beta}{2} \left(\frac{z}{\kappa} + \frac{1}{|\alpha_s|} \right)}} = \frac{\eta_0}{1 + \frac{|\alpha_s|z}{\kappa}}. \quad (15)$$

Согласно (15), изменение $\eta(z)$ с расстоянием происходит по степенному закону, причем характерное расстояние, на котором меняется $\eta(z)$ равно $\frac{\kappa}{|\alpha_s|}$. По-видимому, по этой причине величина $s = \frac{\kappa}{|\alpha_s|}$ называется иногда длиной экстраполяции.

Получим эти результаты другим способом с целью отработать методику, которая будет использоваться для тонких пластин, где провести полностью аналитическое исследование проблематично. После нахождения первого интеграла системы (1) – (3), перейдем к вычислению свободной энергии F , которая представляет собой сумму поверхностной F_s и объемной F_V частей:

$$F = F_s + F_V = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{2} \kappa \left(\frac{d\eta}{dz} \right)^2 - \frac{1}{2} \alpha \eta^2 + \frac{1}{4} \beta \eta^4 \right) dz. \quad (16)$$

Для исключения физически тривиальных расходимостей в этом выражении, вычтем из него свободную энергию полностью упорядоченного образца того же объема

$$F_{\infty} = \int_0^{\infty} \left(-\frac{1}{2} \alpha \eta_{\infty}^2 + \frac{1}{4} \beta \eta_{\infty}^4 \right) dz.$$

Другими словами, будем работать только с добавкой к свободной энергии ΔF , связанной с появлением поверхности, которую можно рассматривать как вклад поверхности в свободную энергию системы

$$\Delta F = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{2} \kappa \left(\frac{d\eta}{dz} \right)^2 - \frac{1}{2} \alpha \eta^2 + \frac{1}{4} \beta \eta^4 + \frac{1}{2} \alpha \eta_{\infty}^2 - \frac{1}{4} \beta \eta_{\infty}^4 \right) dz. \quad (17)$$

Подставляя сюда первый интеграл уравнения (1), получаем

$$\Delta F = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \int_0^{\infty} \left(-\alpha \eta^2 + \frac{1}{2} \beta \eta^4 + \frac{1}{2} \alpha \eta_{\infty}^2 \right) dz.$$

Далее, переходя к новой переменной $\eta(z)$

$$dz = \frac{\delta \eta_{\infty} d\eta}{\eta_{\infty}^2 - \eta^2}$$

и вводя затем безразмерную переменную $x = \eta/\eta_{\infty}$, приводим выражение для ΔF к виду

$$\Delta F = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \frac{1}{2} \alpha \eta_{\infty}^2 \delta \int_{\frac{\eta_0}{\eta_{\infty}}}^1 (1 - x^2) dx = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \frac{1}{2} \alpha \eta_{\infty}^2 \delta \left(\frac{2}{3} - \frac{\eta_0}{\eta_{\infty}} + \frac{\eta_0^3}{3\eta_{\infty}^3} \right). \quad (18)$$

Как видно из формулы (18), добавка к свободной энергии ΔF , связанная с наличием свободной поверхности, есть функция одной переменной η_0 . В условиях термодинамического равновесия ΔF должна иметь минимальное значение, поэтому переменная η_0 будет определяться из условия $\frac{d(\Delta F)}{d\eta_0} = 0$. Легко видеть, что для η_0 в этом случае получается выражение (5), поскольку в обоих методах разными способами находился минимум ΔF . Условие термодинамической ус-

тойчивости $\frac{d^2(\Delta F)}{d(\eta_0)^2}(\eta_0) > 0$ выполняется при любом знаке коэффициента α_s во всей температурной области, где имеет место система (1) – (3) и справедливо полученное решение.

Используя выражения (5), (18), исследуем равновесные термодинамические свойства системы. Вклад поверхности в свободную энергию

$$\Delta F = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_\infty^2 \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{2\kappa\alpha}} - \frac{\alpha_s}{\sqrt{2\kappa\alpha}} \right)^2 + \frac{1}{3} \alpha \eta_\infty^2 \delta - \\ - \frac{1}{2} \alpha \eta_\infty^2 \delta \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{2\kappa\alpha}} - \frac{\alpha_s}{\sqrt{2\kappa\alpha}} \right) + \frac{1}{6} \alpha \eta_\infty^2 \delta \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{2\kappa\alpha}} - \frac{\alpha_s}{\sqrt{2\kappa\alpha}} \right)^3. \quad (19)$$

Вклад от поверхности в обобщенную восприимчивость материала $\chi(T)$

$$\chi(T) = \left(\frac{d^2(\Delta F)}{d(\eta_\infty)^2} \right)^{-1} = \frac{\sqrt{\kappa}}{\sqrt{2\alpha}} + \frac{1}{3} \frac{\sqrt{2\kappa}}{\sqrt{\alpha}} \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha_s^2}{2\kappa\alpha}} - \frac{\alpha_s}{\sqrt{2\kappa\alpha}} \right)^3$$

имеет расходимость при $T = T_c$, но закон Кюри-Вейса для вклада от поверхности не выполняется – для материалов без поверхностного фазового перехода ($\alpha_s > 0$) расходимость более слабая: $\chi(T) \sim (T - T_c)^{-1/2}$; чем для материалов с поверхностным фазовым переходом: $\chi(T) \sim (T - T_c)^{-2}$. Вклад поверхности в восприимчивость в последнем случае в принципе может быть экспериментально замечен для достаточно тонких образцов.

Вклад поверхности в энтропию системы S определяется как

$$S = -\frac{\partial \Delta F}{\partial T} = \frac{1}{2} \frac{\alpha_0 \alpha_s}{\beta} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right)^2 - \frac{\alpha_s \alpha}{\beta} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) + \\ + \frac{3}{4} \frac{\alpha_0 \sqrt{\kappa\alpha}}{\beta} \left(\frac{2}{3} - \frac{\eta_0}{\eta_\infty} + \frac{1}{3} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right)^3 \right) + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\kappa\alpha^3}}{\beta} \left(1 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right)^2 \right) \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right). \quad (20)$$

Используя (20), находим вклад поверхности в теплоемкость системы C_p

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = \frac{2\alpha_0 T}{\beta} \left[\alpha_s \frac{\eta_0}{\eta_\infty} - \frac{3}{4} \sqrt{\kappa\alpha} \left(1 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) - \\ - \frac{\alpha T}{\beta} \left[\alpha_s \frac{\eta_0}{\eta_\infty} - \frac{1}{2} \sqrt{\kappa\alpha} \left(1 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) - \\ - \frac{\alpha T}{\beta} \left[\alpha_s + \sqrt{\kappa\alpha} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) \right] \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) \right]^2 - \frac{3 T \alpha_0^2 \sqrt{\kappa}}{8 \beta \sqrt{\alpha}} \left(\frac{2}{3} - \frac{\eta_0}{\eta_\infty} + \frac{1}{3} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right)^3 \right). \quad (21)$$

В формулах (20), (21) использованы обозначения:

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) = \frac{\alpha_0 \alpha_s}{2\sqrt{2\kappa}} \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{2\kappa}} \frac{1}{\sqrt{\alpha^4 + \frac{\alpha_s^2}{2\kappa} \alpha^3}} - \frac{1}{(\sqrt{\alpha})^3} \right);$$

$$\frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(\frac{\eta_0}{\eta_\infty} \right) = \frac{\alpha_0^2 \alpha_s}{4\sqrt{2\kappa}} \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{2\kappa}} \frac{4\alpha^3 + \frac{3}{2} \frac{\alpha_s^2 \alpha^2}{\kappa}}{\sqrt{\left(\alpha^4 + \frac{\alpha_s^2}{2\kappa} \alpha^3 \right)^3}} - \frac{3}{(\sqrt{\alpha})^5} \right).$$

Наиболее быстро меняющиеся с температурой слагаемые в формуле (21) пропорциональны $\sim |T - T_C|^{-4}$. Вследствие этого следует ожидать, что вблизи температуры фазового перехода T_C вклад поверхности в теплоемкость может превысить скачок теплоемкости $\Delta C = \frac{\alpha_0^2 T_C}{2\beta}$, связанный с фазовым переходом в объеме материала. Если считать, что линейный размер материала в направлении, перпендикулярном поверхности образца, равен L , то это произойдет при температурах $|T - T_C| < \approx \frac{\alpha_s^2}{\sqrt{\kappa L \alpha_0^2}}$. Температурная зависимость теплоемкости C_p на примере кристалла ТГС показана на рис. 3, откуда видно, что уже при температурах $|T - T_C| < 20$ К вклад поверхности в теплоемкость начинает превышать скачок теплоемкости ΔC , связанный с фазовым переходом в объемном материале.

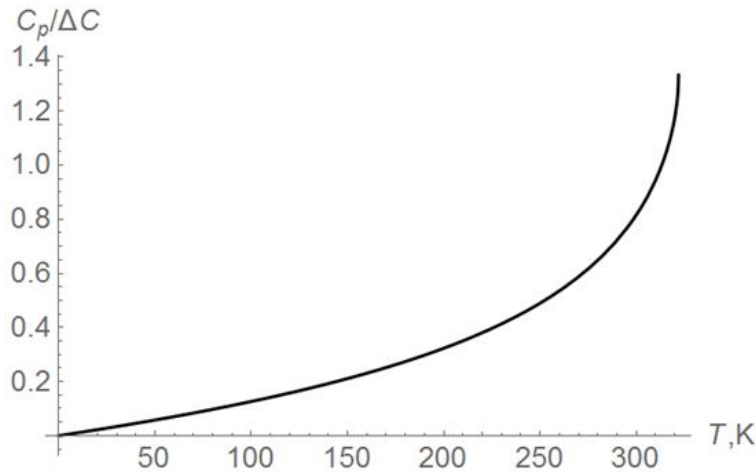


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости кристалла ТГС, $\alpha_s > 0$

Выражения (20), (21) справедливы в температурной области $T < T_C$ для любых знаков коэффициента α_s . В случае отрицательного знака α_s температурозависимый вклад поверхности в термодинамические характеристики материала сохраняется также в области $T > T_C$ вплоть до температуры поверхностного фазового перехода T_s . Однако поведение параметра порядка $\eta(z)$ в этой области описывается другими аналитическими выражениями и поэтому требуется отдельный расчет соответствующих величин.

Используя полученное ранее выражение (9) для первого интеграла уравнения (1), вычислим свободную энергию (16) полупространства для случая $\alpha_s < 0$:

$$F = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \int_0^{\infty} \left(-\alpha \eta^2 + \frac{1}{2} \beta \eta^4 \right) dz.$$

Учитывая дифференциальное равенство (10), поменяв пределы интегрирования, перейдем в интеграле к новой переменной η

$$F = \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \int_0^{\eta_0} \left(-\alpha \eta^2 + \frac{1}{2} \beta \eta^4 \right) \frac{\eta^* \delta^* d\eta}{\eta \sqrt{(\eta^*)^2 + \eta^2}}$$

Вычисление полученного интеграла удобно проводить в безразмерных переменных

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + |\alpha| (\eta^*)^2 \delta^* \int_0^{\eta_0/\eta^*} \frac{(x + x^3)}{\sqrt{1 + x^2}} dx = \\ &= \frac{1}{2} \alpha_s \eta_0^2 + \frac{1}{3} |\alpha| (\eta^*)^2 \delta^* \left\{ \left[1 + \left(\frac{\eta_0}{\eta^*} \right)^2 \right]^{3/2} - 1 \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Равновесное значение параметра η_0 определяется из условия минимума $\frac{dF}{d\eta_0} = 0$ свободной энергии (22):

$$\alpha_s \eta_0 + |\alpha| \eta_0 \delta^* \sqrt{1 + \left(\frac{\eta_0}{\eta^*} \right)^2} = 0,$$

откуда

$$\eta_0 = \eta^* \sqrt{\left(\frac{\alpha_s}{|\alpha| \delta^*} \right)^2 - 1}.$$

Полученное выражение для η_0 совпадает с формулой (12), полученной ранее. Условие термодинамической устойчивости $\frac{d^2(\Delta F)}{d(\eta_0)^2}(\eta_0) > 0$ выполняется вплоть до температуры T_s . Обобщенная восприимчивость $\chi(T)$ системы по отношению к внешнему полю, сопряженному параметру η_0 ,

$$\chi(T) = \frac{\alpha_s}{\eta_0 \sqrt{\kappa} (T_s - T)}$$

при $T = T_s$ расходится по закону Кюри-Вейса, как того требует теория фазовых переходов Ландау.

Поставляя выражение η_0 в свободную энергию (22), находим ее значение в состоянии равновесия

$$F = \frac{1}{2} \alpha_s (\eta^*)^2 \left(\left(\frac{\alpha_s}{|\alpha| \delta^*} \right)^2 - 1 \right) + \frac{1}{3} \frac{\alpha_s^3}{(|\alpha| \delta^*)^2} (\eta^*)^2 - \frac{1}{3} |\alpha| (\eta^*)^2 \delta^*. \quad (23)$$

Вклад поверхности в энтропию системы S определяется, как известно, путем дифференцирования свободной энергии F по температуре:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\alpha_s}{\beta} + \frac{\alpha_0 \sqrt{2\alpha_0 \kappa}}{\beta} (T - T_C)^{\frac{1}{2}}. \quad (24)$$

Используя выражение (24), находим вклад поверхности в теплоемкость системы C_p :

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{2} \frac{T \alpha_0 \sqrt{2\alpha_0 \kappa}}{\beta} (T - T_C)^{-\frac{1}{2}}. \quad (25)$$

Обращает на себя внимание независимость C_p от параметров поверхности, что говорит об универсальном поведении теплоемкости вблизи поверхностного фазового перехода. В самой точке поверхностного фазового перехода T_s теплоемкость испытывает скачок ΔC_p

$$|\Delta C_p| = \frac{1}{2} \frac{T_s \alpha_0 \sqrt{\alpha_0 \kappa}}{\beta} (T_s - T_C)^{-\frac{1}{2}}.$$

Таким образом, при наличии в системе поверхностного фазового перехода (коэффициент $\alpha_s < 0$) температурные аномалии в поведении теплоемкости начинают проявляться уже при температурах $T > T_C$ (рис. 4). Экспериментально, по-видимому, существование поверхностного фазового перехода будет проявляться как размытие объемного фазового перехода, зависящее от свойств поверхности. Заметим, что в непосредственной близости к T_C полученные температурные зависимости восприимчивости, теплоемкости несправедливы из-за флуктуационных эффектов. Однако эта температурная область в случае сегнетоэлектрических, сегнетоэластических и других структурных фазовых переходов, как показал А.П. Леванюк, очень мала (см., например, [14]).

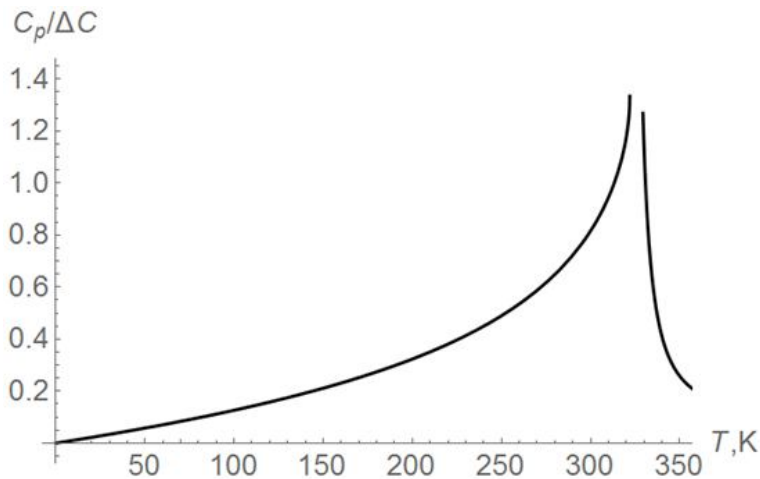


Рис. 4. Зависимость нормированной теплоемкости кристалла ТГС от температуры, $\alpha_s < 0$

Итак, влияние поверхности на фазовые переходы в полупространстве заключается в изменении температурных зависимостей термодинамических характеристик в случае $\alpha_s > 0$, и возникновении поверхностного упорядочения в случае $\alpha_s < 0$, сопровождающегося температурным размытием их. Смещения температуры фазового перехода T_C в объеме материала ни в том, ни в другом случае не происходит. В заключение этого параграфа, используя выражение (13), построим фазовую диаграмму (рис. 5).

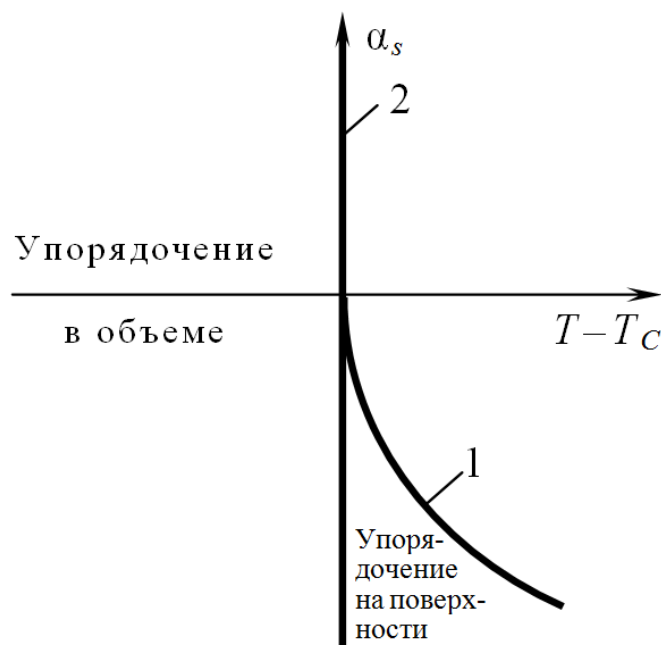


Рис. 5. Фазовая диаграмма полуограниченного образца: 1 – линия поверхностных фазовых переходов; 2 – линия объемных фазовых переходов

2. Тонкая пластина

В тонкой пластине, в отличие от полупространства, температура фазового перехода будет отличаться от температуры фазового перехода в объемном материале. Влияние на смещение температуры фазового перехода в первую очередь оказывают свойства поверхности пластины. Нахождение этих зависимостей – цель данного раздела. Для ферромагнитных материалов такая задача рассматривалась в работах [1-5], для сегнетоэлектриков, сегнетоэластиков в работах [6-10, 15].

Решение уравнения (1) для пластины представляется через эллиптические функции, по этой причине решение граничных задач сопряжено со значительными трудностями. Во избежание неоправданно громоздких расчетов будем находить температуру фазового перехода в пластине как точку потери устойчивости однородного решения соответствующего линейного уравнения. Ясно, что качественная картина фазового перехода в пластине будет такой же, как в полупространстве. Поэтому рассмотрим отдельно случаи разных знаков α_s . Предположим, что $\alpha_s > 0$. Полная система соотношений для определения температуры фазового перехода в этом случае имеет вид

$$\kappa \frac{d^2\eta}{dz^2} + \alpha\eta = 0; \quad (26)$$

$$\kappa \frac{d\eta}{dz}(0) = \alpha_s\eta(0); \quad (27)$$

$$\kappa \frac{d\eta}{dz}(l) = -\alpha_s\eta(l), \quad (28)$$

где l – толщина пластины. Задача (26) – (28) есть задача на собственные значения Штурма-Лиувилля относительно параметра $\lambda = \alpha/\kappa$. Уравнение на собственные значения для данной задачи имеет вид

$$\operatorname{tg} \sqrt{\lambda}l = \frac{2\sqrt{\lambda}\alpha_s/\kappa}{\lambda - (\alpha_s/\kappa)^2}.$$

Наименьшее собственное значение $\lambda = \lambda_1$ определяет температуру фазового перехода T_0 в пластине (рис. 6):

$$T_0 = T_C - \Delta T = T_C - \frac{\lambda_1\kappa}{\alpha_0}. \quad (29)$$

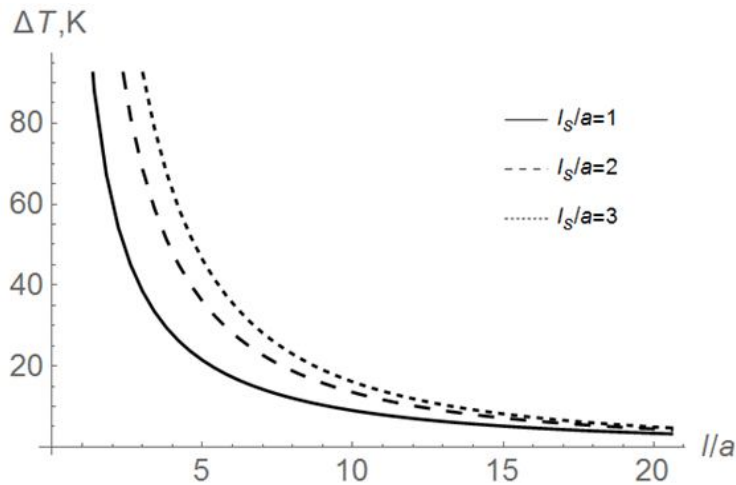


Рис. 6. Зависимость смещения ΔT температуры фазового перехода кристалла ТГС от приведенной толщины l/a пластины и нормированной толщины поверхностного слоя l_s/a , $\alpha_s > 0$

Как видно из выражения (29), температура фазового перехода смещается в сторону более низких температур, а величина смещения ΔT зависит от толщины пластины l , от длины экстраполяции $s = \frac{\kappa}{\alpha_s}$ – параметра, характеризующего расстояние изменения поляризации «вне образца» (рис. 7). Длина экстраполяции s впервые введена в теории жидких кристаллов [16]. Затем в [10] и других она использовалась как величина, альтернативная α_s , характеризующая закрепление параметра порядка на поверхности – чем больше длина экстраполяции, тем слабее закрепление параметра порядка на поверхности.

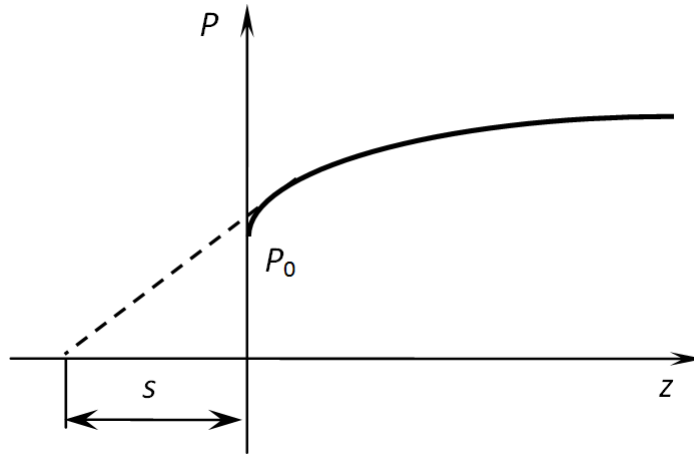


Рис. 7. Длина экстраполяции тонкой пленки

Из рис. 7 видно, что с ростом длины экстраполяции s толщина l_s неоднородного слоя, прилегающего к поверхности, уменьшается, следовательно, l_s пропорциональна α_s . Толщину l_s поверхностного слоя в случае сегнетоэлектриков можно оценить, например, из выражения для диэлектрической проницаемости неупорядоченной фазы:

$$\varepsilon = \frac{4\pi l_s}{\alpha_s} + 1.$$

Распределение параметра порядка по толщине пластины $\eta(z)$ в точке фазового перехода дается выражением

$$\frac{\eta(z)}{\eta_0} = \frac{\alpha_s}{\kappa\sqrt{\lambda_1}} \sin\sqrt{\lambda_1}z + \cos\sqrt{\lambda_1}z.$$

Для исследования второго случая $\alpha_s < 0$, когда предрасположенность поверхности к фазовому переходу затягивает фазовый переход в объеме в высокотемпературную область, используем линейное уравнение

$$-\kappa \frac{d^2\eta}{dz^2} + |\alpha|\eta = 0 \quad (30)$$

с граничными условиями (27), (28). Учитывая, что решение уравнения (30) имеет вид

$$\eta(z) = Ae^{z/\delta^*} + Be^{-z/\delta^*},$$

из граничных условий (27), (28) получаем следующую систему соотношений для определения коэффициентов A и B

$$\begin{cases} A - B = \frac{|\alpha_s|\delta^*}{\kappa}(A + B), \\ -Ae^{l/\delta^*} + Be^{-l/\delta^*} = \frac{|\alpha_s|\delta^*}{\kappa}(Ae^{l/\delta^*} + Be^{-l/\delta^*}). \end{cases}$$

Условие разрешимости этой системы уравнений

$$e^{2l/\delta^*} = \left(\frac{\kappa - |\alpha_s| \delta^*}{\kappa + |\alpha_s| \delta^*} \right)^2 \quad (31)$$

определяет температуру фазового перехода в пластине.

Если корень δ^* уравнения (31) обозначить как ξ , то температура фазового перехода T_0 в пластине

$$T_0 = T_c + \Delta T = T_c + \frac{\kappa}{\alpha_0 \xi^2}. \quad (32)$$

Смещение ΔT температуры фазового перехода в высокотемпературную область зависит от толщины пластины l , от свойств поверхности, представляемых параметром α_s (рис. 8).

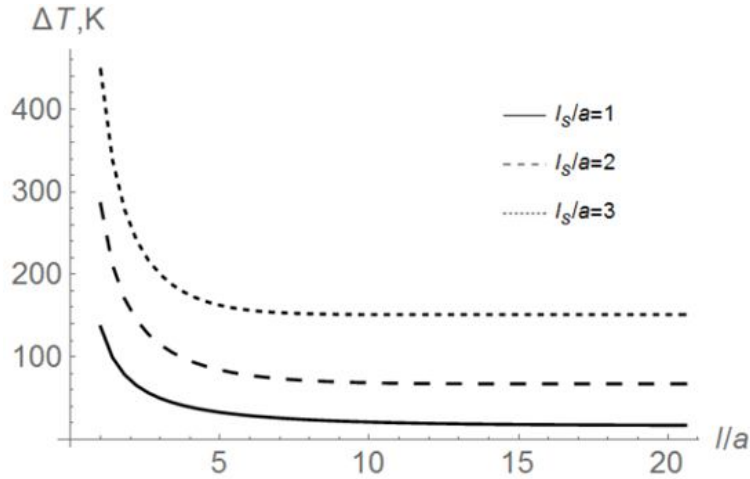


Рис. 8. Зависимость смещения ΔT температуры фазового перехода кристалла ТГС от приведенной толщины l/a пластины и нормированной длины экстраполяции l_s , $\alpha_s < 0$

Распределение параметра порядка по толщине пластины $\eta(z)$ в точке фазового перехода T_0 дается выражением

$$\frac{\eta(z)}{\eta_0} = \frac{1 + |\alpha_s| \xi / \kappa}{2} e^{z/\xi} + \frac{1 - |\alpha_s| \xi / \kappa}{2} e^{-z/\xi}.$$

Температурные зависимости некоторых параметров, характеризующих решение, таких, как η_0 , значение параметра порядка η_m в середине пластины, некоторых термодинамических характеристик можно получить из анализа точного выражения для свободной энергии F пластины аналогично тому, как это сделано в предыдущем разделе. Покажем это.

Естественно предположить, что распределение параметра порядка $\eta(z)$ симметрично относительно середины пластины $z = l/2$. Тогда должно выполняться условие

$$\frac{d\eta}{dz} \left(\frac{l}{2} \right) = 0, \quad (33)$$

согласно которому функция $\eta(z)$ в точке $z = l/2$ имеет максимум $\eta(l/2) = \eta_m$ ($\alpha_s > 0$). Первый интеграл уравнения (1) с граничным условием (33) имеет вид

$$\frac{1}{2}\kappa\left(\frac{d\eta}{dz}\right)^2 = -\frac{1}{2}\alpha\eta^2 + \frac{1}{4}\beta\eta^4 + \frac{1}{2}\alpha\eta_m^2 - \frac{1}{4}\beta\eta_m^4. \quad (34)$$

Учитывая это выражение, а также наличие у пластины двух свободных поверхностей, запишем её свободную энергию F :

$$F = \alpha_s\eta_0^2 + 2 \int_0^l \left(-\alpha\eta^2 + \frac{1}{2}\beta\eta^4 + \frac{1}{2}\alpha\eta_m^2 - \frac{1}{4}\beta\eta_m^4\right) dz,$$

которую можно записать в более удобном виде

$$F = \alpha_s\eta_0^2 + 2 \int_0^{l/2} \left(-\alpha\eta^2 + \frac{1}{2}\beta\eta^4 + \alpha\eta_m^2 - \frac{1}{2}\beta\eta_m^4\right) dz - \left(\frac{1}{2}\alpha\eta_m^2 - \frac{1}{4}\beta\eta_m^4\right)l. \quad (35)$$

Определяя dz из формулы (34) и подставляя в (35), находим

$$F = \alpha_s\eta_0^2 + \left(-\frac{1}{2}\alpha\eta_m^2 + \frac{1}{4}\beta\eta_m^4\right)l + \frac{\alpha\eta_m^3\delta}{\eta_\infty} \int_{\frac{\eta_0}{\eta_m}}^1 \left(\sqrt{(1-x^2)(b^2-x^2)}\right) dx. \quad (36)$$

$$\text{Здесь } x = \frac{\eta}{\eta_m}; \quad b^2 = 2\left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1.$$

Интеграл в формуле (36) выражается через эллиптические интегралы первого $F(\varphi, k)$ и второго $E(\varphi, k)$ рода (при записи соответствующих им полных эллиптических интегралов $K(k)$ и $E(k)$ аргумент φ опускается):

$$\begin{aligned} F = & \alpha_s\eta_0^2 + \left(-\frac{1}{2}\alpha\eta_m^2 + \frac{1}{4}\beta\eta_m^4\right)l + \frac{2\alpha\eta_m^3\delta}{3\eta_\infty} \sqrt{2\left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1} \times \\ & \times \left\{ \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 \left[E\left(\frac{1}{\sqrt{2\left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}}\right) - E\left(\arcsin\left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right), \frac{1}{\sqrt{2\left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}}\right)\right] - \right. \\ & \left. - \left[\left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1\right] \left[K\left(\frac{1}{\sqrt{2\left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}}\right) - F\left(\arcsin\left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right), \frac{1}{\sqrt{2\left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}}\right)\right] \right\}. \quad (37) \end{aligned}$$

Функция $F = F(\eta_0, \eta_m)$ как функция двух переменных η_0 и η_m в условиях термодинамического равновесия должна принимать минимальное значение (рис. 9).

Необходимые условия минимума

$$\frac{\partial F}{\partial \eta_0} = 0; \quad \frac{\partial F}{\partial \eta_m} = 0$$

представляют собой систему уравнений для определения равновесных значений переменных η_0 и η_m . Получить эту систему проще, дифференцируя выражение (36) по правилу Лейбница:

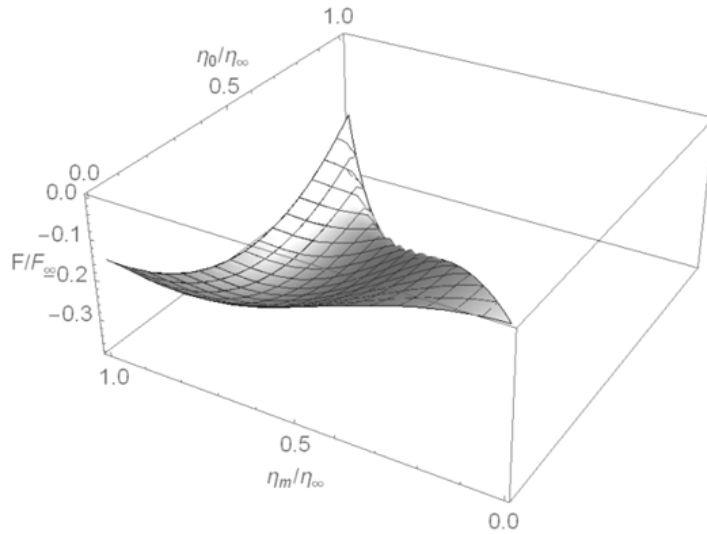


Рис. 9. График функции $F = F(\eta_0, \eta_m)$

$$\begin{aligned}
& 2\alpha_s \eta_0 - \alpha \frac{\eta_m^2}{\eta_\infty} \delta \sqrt{\left(1 - \frac{\eta_0^2}{\eta_m^2}\right) \left(2 \frac{\eta_\infty^2}{\eta_m^2} - \frac{\eta_0^2}{\eta_m^2} - 1\right)} = 0; \\
& -\alpha \eta_m l + \beta \eta_m^3 l + \alpha \frac{\eta_0 \eta_m}{\eta_\infty} \delta \sqrt{\left(1 - \frac{\eta_0^2}{\eta_m^2}\right) \left(2 \frac{\eta_\infty^2}{\eta_m^2} - \frac{\eta_0^2}{\eta_m^2} - 1\right)} + \\
& + \alpha \frac{\eta_m^2}{\eta_\infty} \delta \int_{\frac{\eta_0}{\eta_m}}^1 \left(3\sqrt{(1-x^2)(b^2-x^2)} + x^2 \sqrt{\frac{b^2-x^2}{1-x^2}} + (x^2-b^2-1) \sqrt{\frac{1-x^2}{b^2-x^2}} \right) dx = 0.
\end{aligned}$$

После преобразований данная система примет вид

$$\begin{aligned}
& 2 \frac{\alpha_s}{\delta} \eta_0 - \alpha \frac{\eta_m^2}{\eta_\infty} \sqrt{\left(1 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right)^2\right) \left(2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right)^2 - 1\right)} = 0; \quad (38) \\
& -\alpha \eta_m \frac{l}{\delta} + \beta \eta_m^3 \frac{l}{\delta} + \alpha \frac{\eta_0 \eta_m}{\eta_\infty} \sqrt{\left(1 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right)^2\right) \left(2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right)^2 - 1\right)} + \\
& + \frac{\alpha}{3} \left(\frac{\eta_m}{\eta_\infty}\right)^2 \sqrt{2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1} \times \left\{ \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 \left[E \left(\frac{1}{\sqrt{2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}} \right) - \right. \right. \\
& \left. \left. - E \left(\arcsin \left(\frac{\eta_0}{\eta_m} \right), \frac{1}{\sqrt{2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}} \right) \right] - \left[5 - 2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - \frac{3}{2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1} \right] \times \right. \\
& \left. \times \left[K \left(\frac{1}{\sqrt{2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}} \right) - F \left(\arcsin \left(\frac{\eta_0}{\eta_m} \right), \frac{1}{\sqrt{2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1}} \right) \right] - \right.
\end{aligned}$$

$$-\frac{\eta_0}{\eta_m} \sqrt{\left(1 - \left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right)^2\right) \left(1 - \frac{1}{2 \left(\frac{\eta_\infty}{\eta_m}\right)^2 - 1} \left(\frac{\eta_0}{\eta_m}\right)^2\right)} = 0. \quad (39)$$

Численное решение данной системы позволяет построить нормированные зависимости параметра порядка на поверхности η_0/η_∞ и в середине η_m/η_∞ пленки от ее толщины (рис. 10а), коэффициента α_s (рис. 10б), температуры (рис. 10в).

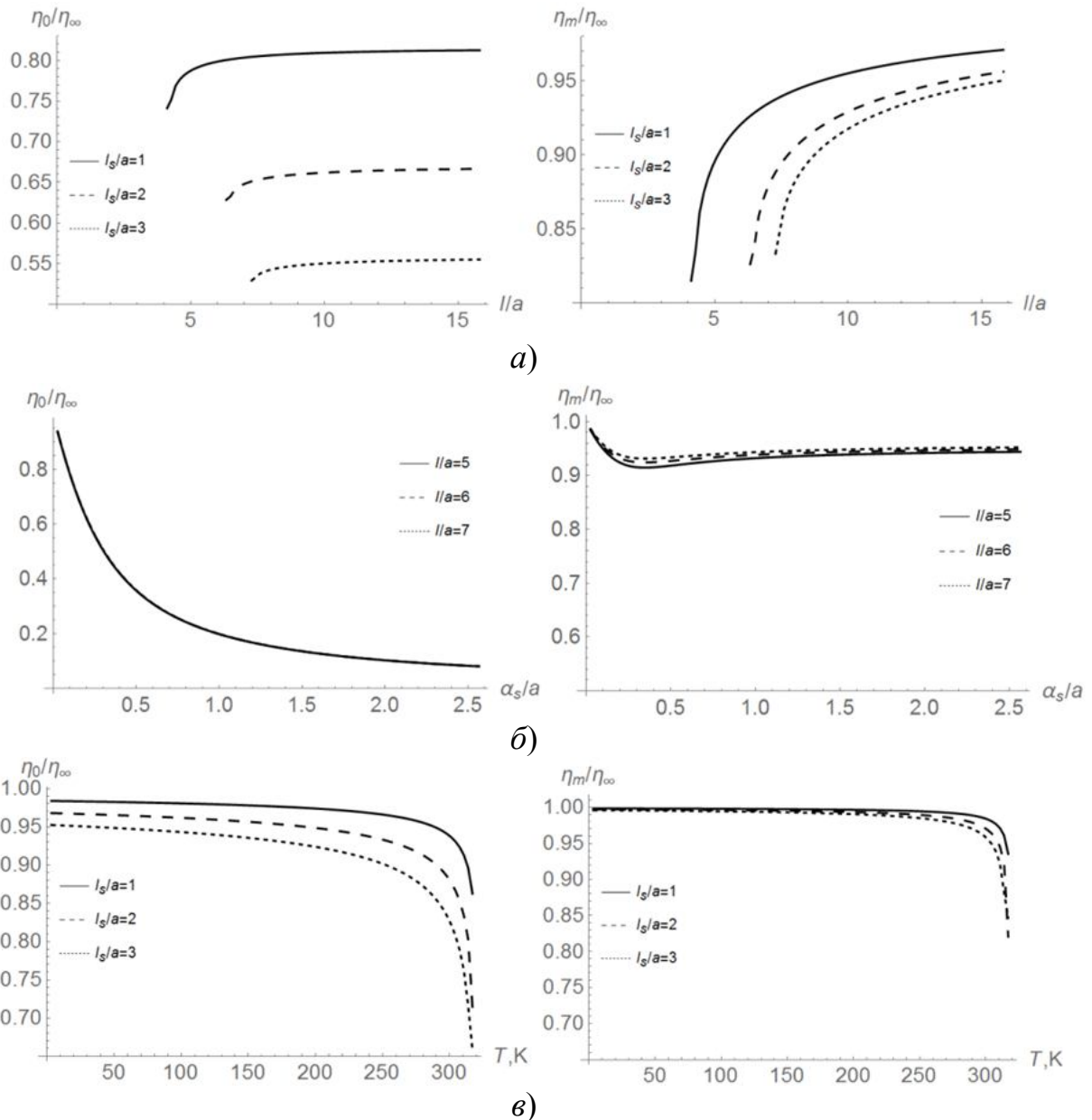


Рис. 10. Нормированные зависимости параметра порядка на поверхности η_0/η_∞ и в середине η_m/η_∞ пленки от ее толщины (а), коэффициента α_s (б) и температуры (в)

Аналогичные зависимости можно построить для нормированной свободной энергии, подставив найденные равновесные значения параметра порядка в выражение (37) (рис. 11).

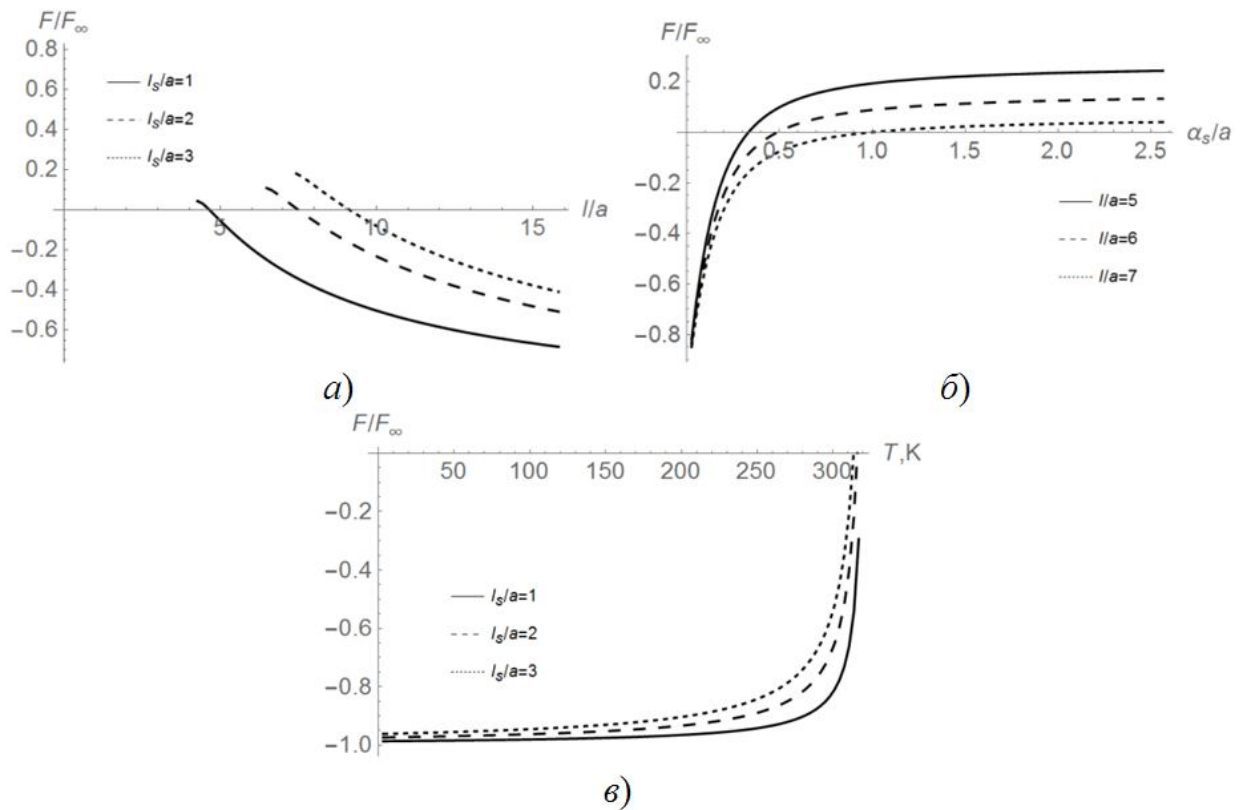


Рис. 11. Нормированные зависимости равновесной свободной энергии F/F_∞ пленки от ее толщины (а), коэффициента α_s (б) и температуры (в)

С помощью выражения для свободной энергии (37) легко найти температурные зависимости теплоемкости пленки (рис. 12).

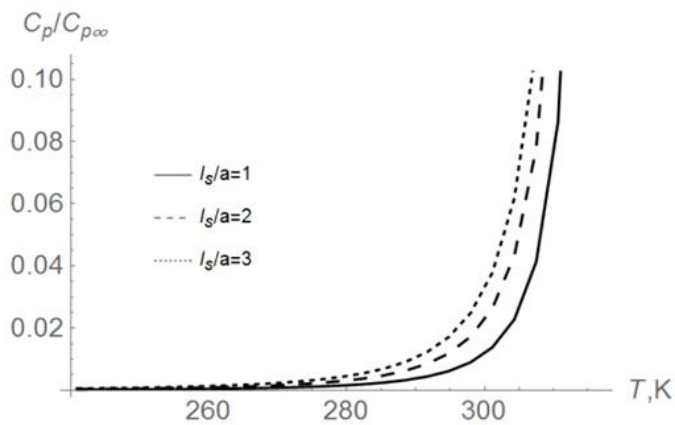


Рис. 12. Температурные зависимости нормированной теплоемкости $C_p/C_{p\infty}$ пленки

3. Ориентационные поверхностные магнитные фазовые переходы

Спин-переориентационные переходы в магнетиках могут происходить как вследствие температурной зависимости констант магнитной анизотропии, так под влиянием внешних воздействий, например, магнитными и механиче-

скими полями [1, 17, 18]. Рассмотрим в качестве примера гексагональный ферромагнетик, энергия анизотропии которого имеет вид

$$F_{\text{ан}} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta.$$

Будем считать, что константа анизотропии K_1 при переходе через некоторую температуру T_1 меняет знак. Предполагая сначала, что $K_2 > 0$, проанализируем возможные равновесные состояния ферромагнетика. Минимуму $F_{\text{ан}}$ отвечают следующие равновесные фазы:

$$\text{I) } \theta = 0, \pi; \quad \text{II) } \sin^2 \theta = -\frac{K_1}{2K_2}; \quad \text{III) } \theta = \frac{\pi}{2}.$$

Условия устойчивости этих фаз $\frac{\partial^2 F_{\text{ан}}}{\partial \theta^2} > 0$, соответственно, имеют вид:

$$\text{I) } K_1 > 0; \quad \text{II) } K_1 < 0, K_1 + 2K_2 > 0; \quad \text{III) } K_1 + 2K_2 < 0.$$

Фазы I, III в соответствии с терминологией, сложившейся в магнетиках, называют «легкоосной» и «легкоплоскостной». Фаза II, где вектор намагниченности изменяет направление с температурой непрерывным образом, называют угловой. Переходы между фазами I и II и между фазами II и III есть переходы второго рода, происходящие по механизму потери устойчивости при температурах T_1 и T_2 , которые определяются из условий

$$K_1(T_1) = 0; \quad K_1(T_2) + 2K_2(T_2) = 0.$$

Переход между фазами I и II описывается параметром порядка $\eta = \theta \approx \sin \theta$.

При переходе между фазами II и III роль параметра порядка η играет угол $\eta = \pi/2 - \theta$.

Если $K_2 < 0$, то угловая фаза II будет неустойчива при любых температурах, а переход между фазами I и III будет происходить по механизму фазового перехода первого рода, температура которого T^* определяется из условия равенства термодинамических потенциалов контактирующих фаз

$$K_1(T^*) + K_2(T^*) = 0.$$

Результаты анализа показаны на рис. 13.

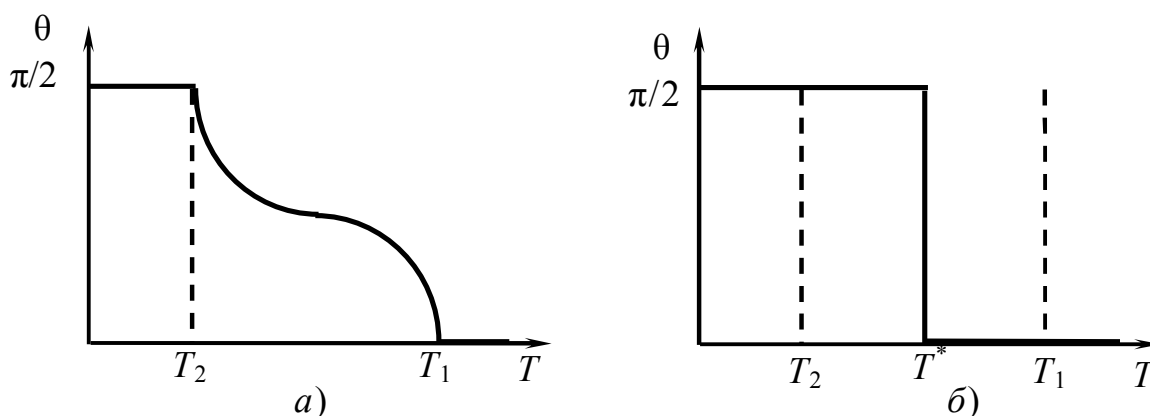


Рис. 13. Температурная зависимость угла θ , определяющего равновесную ориентацию вектора намагниченности \vec{M} : а) $K_2 > 0$; б) $K_2 < 0$

В силу показанного выше различного поведения намагниченности в объеме материала, поверхностные переходы в этом случае тоже отличаются разнообразием. Анализ возможных перестроек и фазовых переходов на поверхности может быть выполнен также как и ранее, поскольку в этом случае работает теория фазовых переходов Ландау [1, 17]. В принципе по этой причине можно воспользоваться уже выше полученными формулами, выполняя в них необходимые переобозначения. С другой стороны, используя известное выражение для свободной энергии неоднородного ферромагнетика,

$$F = \int_V \left(\frac{1}{2} \alpha M_0^2 (\vec{\nabla} \theta)^2 + \beta_1 M_0^2 \sin^2 \theta + \beta_2 M_0^2 \sin^4 \theta \right) dV, \quad (40)$$

где M_0 – величина спонтанной намагниченности, $\beta_1 M_0^2 = K_1$, $\beta_2 M_0^2 = K_2$, $\beta_1 = \beta_{10}(T - T_1)$, $T < T_1$, можно получить все необходимые результаты непосредственно. Действительно, предполагая, что поверхностная энергия образца имеет вид

$$F_s = K_s \sin^2 \theta, \quad (41)$$

и, варьируя сумму выражений (40), (41) по θ , получаем уравнения равновесия намагниченности для полупространства $x \geq 0$ и граничные условия к нему

$$-\alpha \frac{d^2 \theta}{dx^2} + 2\beta_1 \sin \theta \cos \theta + 4\beta_2 \sin^3 \theta \cos \theta = 0; \quad (42)$$

$$\theta(\infty) = \theta_\infty; \quad (43)$$

$$\alpha \frac{d\theta}{dx} \Big|_{x=0} = 2\beta_s \sin \theta \cos \theta \Big|_{x=0}, \quad (44)$$

где $\theta_\infty = \arcsin \sqrt{-\frac{K_1}{2K_2}}$, $\beta_s = \frac{K_s}{M_0^2}$.

При записи системы (42) – (44) также предположено, что вектор намагниченности \vec{M} и в глубине материала и на поверхности параллелен этой поверхности. В противном случае необходимо было бы учитывать размагничивающие магнитные поля и, как следствие этого, разбиение образца на домены. После вычисления первого интеграла уравнения (42) и учета граничного условия (43), получаем

$$\frac{\alpha}{2\beta_2} \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 = (\sin^2 \theta_\infty - \sin^2 \theta)^2. \quad (45)$$

Разделяя переменные в уравнении (45), находим общее решение

$$\operatorname{tg} \theta = \operatorname{tg} \theta_\infty \frac{C e^{\sin 2\theta_\infty \frac{x}{l_m}} + 1}{C e^{\sin 2\theta_\infty \frac{x}{l_m}} - 1}. \quad (46)$$

Здесь $C > 0$ произвольная постоянная и введено обозначение l_m для характерной длины изменения ориентации намагниченности

$$l_m = \sqrt{\frac{\alpha}{2\beta_2}}$$

Определяя из граничного условия (44) постоянную C и подставляя результат в (46), находим окончательное выражение для искомой функции $\theta = \theta(x)$, дающей ориентацию вектора спонтанной намагниченности \vec{M} в материале

$$\operatorname{tg}\theta = \operatorname{tg}\theta_\infty \frac{\left(\sqrt{1 + \frac{\alpha}{4\beta_s^2 l_m^2}} - \frac{\alpha}{2\beta_s l_m}\right) e^{\frac{x}{l_m}} + 1}{\left(\sqrt{1 + \frac{\alpha}{4\beta_s^2 l_m^2}} - \frac{\alpha}{2\beta_s l_m}\right) e^{\frac{x}{l_m}} - 1}. \quad (47)$$

Ориентация вектора намагниченности на поверхности магнетика \vec{M} определяется углом θ_0 , который находится из выражения (47), если в нем положить $x = 0$:

$$\operatorname{tg}\theta_0 = \operatorname{tg}\theta_\infty \frac{\sqrt{1 + \frac{\alpha}{4\beta_s^2 l_m^2}} - \frac{\alpha}{2\beta_s l_m} + 1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha}{4\beta_s^2 l_m^2}} - \frac{\alpha}{2\beta_s l_m} - 1}. \quad (48)$$

Поведение угла θ_0 , как это следует из формулы (48), различное в зависимости от знака β_s . Если $\beta_s > 0$, то поверхность препятствует фазовому переходу в материале: $\theta_0 \rightarrow 0$ при $T \rightarrow T_1$, причем по закону, более быстрому, чем в объеме материала: $\theta_0 \sim (T - T_1)^{3/2}$ (рис. 14а). Если $\beta_s < 0$, то поверхность расположена к фазовому переходу в материале: $\theta_0 \rightarrow \text{const}$ при $T \rightarrow T_1$ (рис. 14б). При построении использовались параметры C_0 : $\alpha = 1.46 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2$, $\beta_{10} = 2$, $\beta_2 = 20$, $T_1 = 300 \text{ К}$.

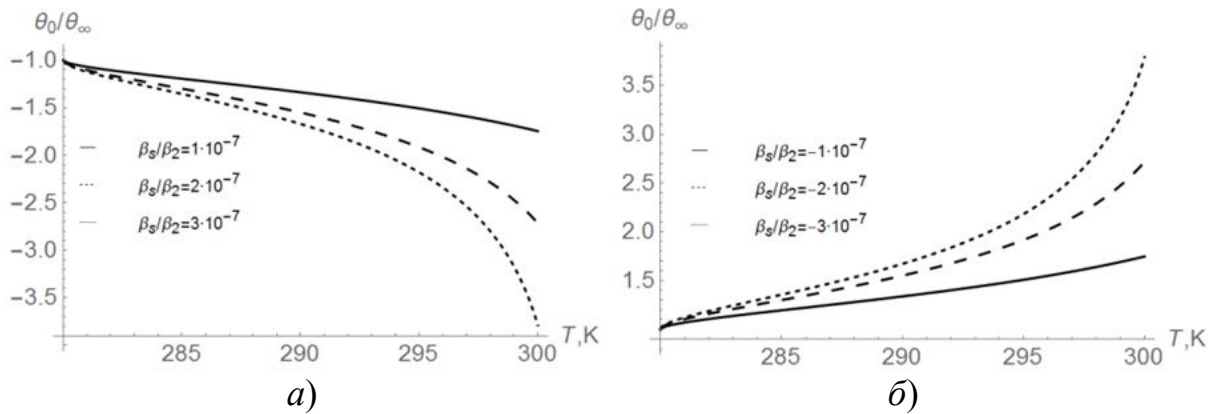


Рис. 14. Зависимость нормированного угла поворота вектора намагниченности на поверхности образца от температуры в случае положительной (а) и отрицательной (б) энергии анизотропии

Заметим, что переходу между фазами II и III поверхность благоприятствует, если значение $\beta_s > 0$, и препятствует, если $\beta_s < 0$, в отличие от рассмотренного случая.

4. Поверхностный фазовый переход второго рода в неоднородное состояние

Как показано в работе [11], на поверхности возможен фазовый переход в неоднородное состояние с образованием сверхструктуры, обусловленный наличием стрикционной связи параметра порядка с упругими деформациями. Неоднородное пространственно-модулированное распределение параметра порядка на поверхности приводит к возникновению неоднородной структуры – неоднородному распределению упругих напряжений – в приповерхностном слое, исчезающее с удалением от поверхности.

Пусть поверхностная свободная энергия F_s имеет вид

$$F_s = F_{s0} + \frac{1}{2} \int_{(S)} (\kappa_s (\vec{\nabla} \eta)^2 + \alpha_s \eta^2) dS, \quad (49)$$

где F_{s0} – часть свободной энергии поверхности, не связанная с фазовым переходом, $\alpha_s = \alpha_{s0}(T - T_s)$, T_s – температура поверхностного фазового перехода. Далее рассматриваем полупространство $z \geq 0$.

Возникновение параметра порядка η на поверхности обязательно сопровождается ее деформацией, которая описывается тензором деформаций u_{ik} . Предполагая, что деформации u_{ik} малы, запишем вариацию свободной энергии в виде $\delta F_s = \xi_{ik} u_{ik}$. Тензор коэффициентов пропорциональности ξ_{ik} в этом выражении подчиняется очевидному условию $\xi_{ii} = 0$ [20] отсутствия расширения поверхности и условию симметрии по индексам i и k : $\xi_{ik} = \xi_{ki}$.

Учет упругого деформирования поверхности при фазовом переходе с необходимостью влечет за собой включение дополнительных слагаемых в свободную энергию (49)

$$\Delta F = \frac{1}{2} \int_{(V)} \sigma_{ik} u_{ik} dV + \int_{(S)} \xi_{ik} u_{ik} dS, \quad (50)$$

где σ_{ik} – тензор упругих напряжений. Условие упругого равновесия в объеме материала $\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0$ позволяет интеграл по объему свести к интегралу по поверхности, и записать (50) в виде

$$\Delta F = \frac{1}{2} \int_{(S)} \left(\sigma_{ik} u_i n_k + \xi_{ik} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) dS. \quad (51)$$

Здесь $\vec{u} = \{u_x, u_y, u_z\}$ – вектор упругого смещения точек среды, $\vec{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ – вектор нормали к поверхности в данной точке. Компоненты вектора \vec{u} , равно как и производные от них $\frac{\partial u_i}{\partial x_k}$, на поверхности должны удовлетворять определенным граничным условиям. Если к единице площади поверхности приложена внешняя сила \vec{F} , то эти условия будут иметь вид [20]:

$$\sigma_{ik} n_k = F_i,$$

или через компоненты вектора смещений \vec{u}

$$\begin{aligned} F_x &= 2\mu \left\{ \frac{\nu}{1-2\nu} u_{ll} n_x + \frac{\partial u_x}{\partial n} + \frac{1}{2} \left[n_y \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) + n_z \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \right] \right\}; \\ F_y &= 2\mu \left\{ \frac{\nu}{1-2\nu} u_{ll} n_y + \frac{\partial u_y}{\partial n} + \frac{1}{2} \left[n_z \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) + n_x \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \right] \right\}; \\ F_z &= 2\mu \left\{ \frac{\nu}{1-2\nu} u_{ll} n_z + \frac{\partial u_z}{\partial n} + \frac{1}{2} \left[n_x \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + n_y \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (52)$$

Здесь $u_{ll} = u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$, ν – коэффициент Пуассона, μ – модуль сдвига.

Далее рассматриваем полупространство $z \geq 0$. Представляя тензор ξ_{ik} в виде

$$\xi_{ik} = \gamma_{ik} \eta, \quad (\gamma_{ii} = 0),$$

записываем свободную энергию (51):

$$\Delta F = \int_{(S)} \left(\frac{1}{2} F_i u_i + \gamma_{ia} \eta \frac{\partial u_i}{\partial x_a} + \gamma_{iz} \eta \frac{\partial u_i}{\partial x_z} \right) dx dy \quad (a = 1, 2; \sigma_{iz} = F_i), \quad (53)$$

где компоненты F_i определяются выражениями

$$\begin{aligned} F_x &= 2\mu \left[\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \right]; \\ F_y &= 2\mu \left[\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) \right]; \\ F_z &= 2\mu \left[\frac{\nu}{1-2\nu} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + \frac{1-\nu}{1-2\nu} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right]. \end{aligned} \quad (54)$$

в форме, содержащей только смещения u_i и их производные на плоскости $z = 0$. Однако минимизировать свободную энергию по этим переменным нельзя в силу наличия между ними зависимости, обусловленной тем, что вектор смещения точек среды \vec{u} удовлетворяет уравнениям упругого равновесия как в объеме материала так и на плоскости $z = 0$. Исключить эту зависимость можно, только решив эти уравнения с неоднородными граничными условиями

$$\begin{cases} u_x(x, y, 0) = g_x(x, y); \\ u_y(x, y, 0) = g_y(x, y); \\ u_z(x, y, 0) = g_z(x, y), \end{cases}$$

где $g_i(x, y)$ – перемещения точек плоскости $z = 0$. Такая задача была решена Треффцом [19]:

$$\begin{aligned} u_x(x, y, z) &= \iint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \tilde{u}_x(\vec{k}) - \frac{1}{3-4\nu} \left(ik_x \tilde{u}_x(\vec{k}) + ik_y \tilde{u}_y(\vec{k}) - s \tilde{u}_z(\vec{k}) \right) \right\} \times \\ &\quad \times e^{ik_x x + ik_y y - sz} dk_x dk_y, \end{aligned} \quad (55)$$

$$u_y(x, y, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \tilde{u}_y(\vec{k}) - \frac{1}{3-4\nu} \left(ik_x \tilde{u}_x(\vec{k}) + ik_y \tilde{u}_y(\vec{k}) - s \tilde{u}_z(\vec{k}) \right) \right\} \times \\ \times e^{ik_x x + ik_y y - sz} dk_x dk_y, \quad (56)$$

$$u_z(x, y, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \tilde{u}_z(\vec{k}) - \frac{1}{3-4\nu} \left(ik_x \tilde{u}_x(\vec{k}) + ik_y \tilde{u}_y(\vec{k}) - s \tilde{u}_z(\vec{k}) \right) \right\} \times \\ \times e^{ik_x x + ik_y y - sz} dk_x dk_y; \quad (57)$$

$$\vec{k} = \{k_x, k_y\}, \quad s = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = k_{\perp}.$$

Здесь использованы обозначения: $\tilde{u}_i(\vec{k})$ – Фурье-образы величин $u_i(x, y, 0)$. Формулы (55)-(57) позволяют выразить производные от вектора смещения точек среды через сами эти смещения. Для выяснения возможности перехода на поверхности в состояние с неоднородным распределением параметра порядка η , перейдем к Фурье-образам $\tilde{u}_i(\vec{k})$, $\tilde{\eta}(\vec{k})$, $\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial z}(\vec{k})$, ... по переменным x, y также в выражении для свободной энергии

$$\Delta F = \iint_{-\infty}^{\infty} \left(ik_a \gamma_{ai} \tilde{\eta}^*(\vec{k}) \tilde{u}_i(\vec{k}) + \gamma_{iz} \tilde{\eta}^*(\vec{k}) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_z}(\vec{k}) + \frac{1}{2} \mu \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial z}(\vec{k}) \tilde{u}_x^*(\vec{k}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \mu \frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial z}(\vec{k}) \tilde{u}_y^*(\vec{k}) + \frac{1}{2} \mu \frac{\partial \tilde{u}_z}{\partial z}(\vec{k}) \tilde{u}_z^*(\vec{k}) + \frac{ik_x \mu}{1-2\nu} \tilde{u}_z(\vec{k}) \tilde{u}_x^*(\vec{k}) + \right. \\ \left. + \frac{ik_y \mu}{1-2\nu} \tilde{u}_z(\vec{k}) \tilde{u}_y^*(\vec{k}) \right) dk_x dk_y. \quad (58)$$

Производные $\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_z}(\vec{k})$ в этом выражении можно исключить, используя формулы (55)-(57):

$$\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial z}(\vec{k}) = -k_{\perp} \tilde{u}_x(\vec{k}) + \frac{1}{3-4\nu} \frac{1}{k_{\perp}} [k_x^2 \tilde{u}_x(\vec{k}) + k_x k_y \tilde{u}_y(\vec{k}) + ik_x k_{\perp} \tilde{u}_z(\vec{k})]; \\ \frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial z}(\vec{k}) = -k_{\perp} \tilde{u}_y(\vec{k}) + \frac{1}{3-4\nu} \frac{1}{k_{\perp}} [k_x k_y \tilde{u}_x(\vec{k}) + k_y^2 \tilde{u}_y(\vec{k}) + ik_y k_{\perp} \tilde{u}_z(\vec{k})]; \\ \frac{\partial \tilde{u}_z}{\partial z}(\vec{k}) = -\frac{2(1-\nu)}{3-4\nu} k_{\perp} \tilde{u}_z(\vec{k}) - \frac{1}{3-4\nu} \frac{1}{k_{\perp}} [ik_x k_{\perp} \tilde{u}_x(\vec{k}) + ik_y k_{\perp} \tilde{u}_y(\vec{k})], \\ \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial z}(\vec{k}) = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial z}(\vec{k}, 0).$$

Подставляя эти соотношения в выражение (58) и варьируя по $\tilde{u}_i(\vec{k})$ при фиксированных $\tilde{\eta}(\vec{k})$ и прибавляя результаты к (49), получим

$$F_s = F_{s0} + \iint_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \kappa_s \tilde{\eta}(\vec{k}) \tilde{\eta}^*(\vec{k}) + \frac{1}{2} \alpha_s \tilde{\eta}(\vec{k}) \tilde{\eta}^*(\vec{k}) - f(\vec{k}) k_{\perp} \tilde{\eta}(\vec{k}) \tilde{\eta}^*(\vec{k}) \right) dk_x dk_y, \quad (59)$$

где $f(\vec{k})$ – положительная однородная функция нулевого порядка от компонент волнового вектора:

$$f(\vec{k}) = \frac{1-\nu}{E k_{\perp}^2} \left\{ \frac{(1-2\nu)^2}{(3-4\nu)(1-\nu)} k_{\perp}^2 \gamma_{aa}^2 + \frac{32\nu^2 - 52\nu + 21}{(3-4\nu)^2} (\gamma_{za} k_a)^2 + \left[\left(\delta_{ab} - \frac{k_a k_b}{k_{\perp}^2} \right) \gamma_{bc} k_c \right]^2 + (1-\nu) \left[\frac{1}{k_{\perp}} \gamma_{ab} k_a k_b - \frac{\nu}{1-\nu} k_{\perp} \gamma_{aa} \right]^2 + \left[\left(\delta_{ab} - \frac{k_a k_b}{k_{\perp}^2} \right) \gamma_{zb} \right]^2 k_{\perp}^2 \right\}, \quad (60)$$

где E – модуль Юнга материала.

Из выражения (59) с учетом (60) следует, что фазовый переход на поверхности материала при учете стрикционной связи будет происходить при более высокой температуре $T = T_C + \frac{f^2}{4\alpha_0 \kappa_s}$ в пространственно-модулированное

состояние, характеризуемое конечным волновым вектором $k_{0\perp} \sim \frac{f}{\kappa_s} \sim \frac{\gamma^2}{E \kappa_s}$. По-

скольку в слабо деформированных кристаллах $E \gg \frac{\gamma^2}{a \kappa_s}$, где a – межатомное расстояние, то период сверхструктуры $1/k_{0\perp}$, возникающей на поверхности образца, будет велик по сравнению с межатомным расстоянием.

Заметим, что приведенные выше результаты работы [19] переложены для сегнетоэластиков. В работе [21] рассматривалась задача о сегнетоэластическом фазовом переходе в пластине, показано, что при выполнении определенных условий влияние поверхности приводит к появлению в объеме неоднородной модулированной структуры. Изучались поверхностные явления при ферроэластическом фазовом переходе в полугораниченном кристалле тетрагональной симметрии. Показано, что стрикционная связь параметра порядка с деформацией решетки приводит к появлению в точке поверхностного фазового перехода пространственно-модулированной структуры с конечным значением волнового вектора. Поверхностный фазовый переход происходит всегда раньше, чем ферроэластический фазовый переход в объеме. Подробный анализ этих работ не приводится по причине невозможности воспроизведения нами их результатов из-за непонятного характера используемых в них приближений.

Литература

1. Каганов М. И., Чубуков А. В. Магнитные фазовые переходы на поверхности // Магнитные свойства кристаллических и аморфных материалов (Сборник научных трудов). Новосибирск: Наука, 1989, 252 с. Каганов М. И., Омельянчук А. М. К феноменологической теории фазового перехода тонкой ферромагнитной пластины // ЖЭТФ. 1971. Т.61. №4. С.1679-1685.

2. Каганов М. И. О поверхностном магнетизме // ЖЭТФ. 1972. Т.62. №3. С.1196-1200.
3. Каганов М. И., Карпинская Н. С. Роль поверхностной энергии при фазовом переходе из парамагнитного состояния в ферромагнитное // ЖЭТФ. 1979. Т.76. №6. С. 2143-2157.
4. Каганов М. И., Чубуков А. В. Теория поверхностных переходов в пластине // ЖЭТФ. 1982. Т.82. №5. С.1617-1627.
5. Junquera J. and Ghosez Ph. Critical thickness for ferroelectricity in perovskite ultrathin films. // Letters to nature. 2003. V.422. P. 506-508.
6. Nechaev V. N. and Shuba A. V. Nonuniform states of ferroelastic film near the Curie temperature // Ferroelectrics. 2007. V. 359. P. 35-40.
7. Нечаев В. Н., Шуба А. В. О фазовом переходе в тонкой сегнетоэластической пленке // Известия РАН. Серия физическая. 2007. Т. 71. №. 10. С. 1403-1405.
8. Kuzel P., Dugautier C., Moch P., Le Marrec F., and Karkut M. G. Phase transition in lead titanate thin films: a Brillouin study // Journal of physics: Condensed matter. 2002. V. 14. P. 12287-12300.
9. Фридкин В. М. Критический размер в сегнетоэлектрических наноструктурах // УФНю Т. 176. №2. С. 203-212.
10. Андреев А. Ф. Стрикционные сверхструктуры в двумерном фазовом переходе // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 32. №11. С. 654-656.
11. Страумал Б. Б. Фазовые переходы на границах зерен. – М.: Наука. 2003.– 327 с.
12. Гладких Н. Т., Дукарев С. В., Крышталь А. П., Ларин В. И., Сухов В. Н., Богатыренко С. И. Поверхностные явления и фазовые превращения в конденсированных пленках.– Харьков: ХНУ имени В. Н. Каразина. 2004. – 276с.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т.5. Статистическая физика. Ч. 1.– М.: Физматлит, 2002. – 616 с.
14. Lookman A., Bowman R. N., Gregg J. M., Kut J., Rios S., Dawber M., Ruediger A., and Scott J. F. // Thickness independence of true phase transition temperatures in barium strontium titanate films. Journal of applied physics. 2004. V. 96. № 1. P. 556-562.
15. П. де Жен. Физика жидких кристаллов. – М.: Мир, 1977 – 400 с.
16. Каганов М. И. Поверхностные переориентационные переходы // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. №4. С.1544-1554.
17. Белов К. П., Звездин А. К., Кадомцева А. М., Левитин А. В. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. – М.: Наука, 1979.–320 с.
18. Треффц Е. Математическая теория упругости. М.: ОНТИ. 1934. –172 с.
19. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т.7. Теория упругости.– М.: Физматлит, 2007. – 259 с.
20. Лавриненко Н. М. Исследование явлений на поверхности при ферроэластическом фазовом переходе в полугораниченном кристалле // Физика низких температур. 1997. Т. 23. № 8. С. 880-883.

STRUCTURAL SURFACE PHASE TRANSITIONS

V. N. Nechaev, A. V. Shuba

MERC of the Air Force N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin Air Force Academy, Voronezh

Based on Landau theory the features of the effect of surface energy on the order parameter, the specific heat, the generalized susceptibility of ferroics near the temperature of the structural phase transition are investigated. The influence of surface properties of a thin ferroic plate on the displacement of the phase transition temperature, order parameter, heat capacity has been shown. The surface effect on spin-reorientation transitions in hexagonal ferromagnets has been considered. The phase transition to the inhomogeneous state on the surface of the material when considering the striction coupling will occur at a higher temperature than in the volume of the material has been shown.

Keywords: order parameter, surface energy, extrapolation length, structural phase transition, free energy, Landau theory, spin-reorientation phase transition.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА ЖЕЛЕЗА В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОГО СЖАТИЯ

В. В. Ожерельев, А. Т. Косилов, О. Н. Аксенова, Р. Б. Калинин

Воронежский государственный технический университет
ozher@mail.ru

В работе методом молекулярной динамики проведено моделирование деформации металлического стекла железа в условиях одноосного сжатия. Установлено, что пластическое течение сопровождается формированием и распространением полосы сдвига. Анализ перестройки атомной структуры выявил резкое уменьшение доли икосаэдров в области полосы.

Ключевые слова: металлическое стекло, молекулярная динамика, пластичность, деформация, полоса сдвига, многогранник Вороного, икосаэдр.

Уникальные физические свойства металлических стекол (МС) во многом обусловлены особенностями организации их атомной структуры. В последние годы активно изучаются механизмы пластической деформации МС на атомном уровне. Поскольку отсутствие трансляционной симметрии существенно затрудняет изучение эволюции атомной структуры этих материалов в процессе пластической деформации, широкое применение в этой области исследований находят методы атомистического компьютерного моделирования [1, 2].

В настоящей работе методом молекулярной динамики было проведено моделирование пластической деформации МС железа в условиях одноосного сжатия.

Модель исходного расплава содержала 500000 атомов железа, расположенных в расчетной ячейке размерами $L_x = 62.67 \text{ \AA}$, $L_y = 250.68 \text{ \AA}$, $L_z = 501.36 \text{ \AA}$ с периодическими граничными условиями. Взаимодействие между атомами железа описывалось при помощи парного потенциала Пака-Доямы [3]. Модель МС железа была получена путем закалки от 2300 К до 0 К со скоростью $2.2 \times 10^{12} \text{ К/с}$. Данная скорость закалки является минимально возможной: ее уменьшение приводит к формированию поликристаллической или аморфно-кристаллической структуры (рис. 1).

Далее была выполнена деформация модели со скоростью $6.67 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$ при поддержании постоянной температуры 50 К. Исходные размеры образца составили 57.6, 230.5 и 461.1 \AA по осям x , y и z соответственно. Чтобы обеспечить возможность сдвига одной части образца относительно другой, периодические граничные условия вдоль оси y были убраны.

Полученная кривая напряжение σ – деформация ε , а также зависимость потенциальной энергии E_p от деформации показана на рис. 2. На начальной упругой стадии, до значений деформации $\varepsilon \sim 5\%$ напряжение σ возрастает прямо пропорционально величине деформации, потенциальная энергия системы E_p

монотонно увеличивается. При $\varepsilon > 5\%$ происходит отклонение от линейной зависимости $\sigma(\varepsilon)$, что указывает на возрастание числа локальных неупругих атомных перестановок в образце.

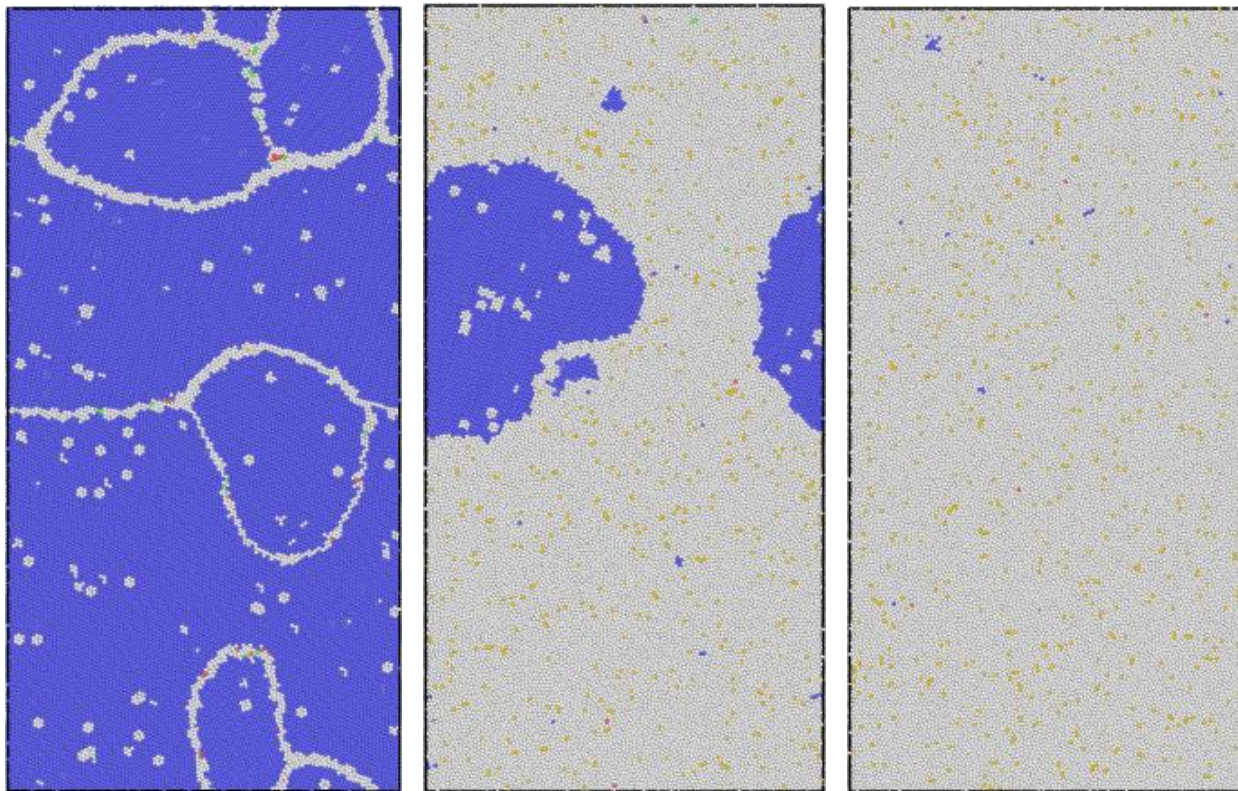


Рис. 1. Изображение модели при различных скоростях закалки. Темный цвет соответствует решетке ОЦК, светлый – аморфной структуре

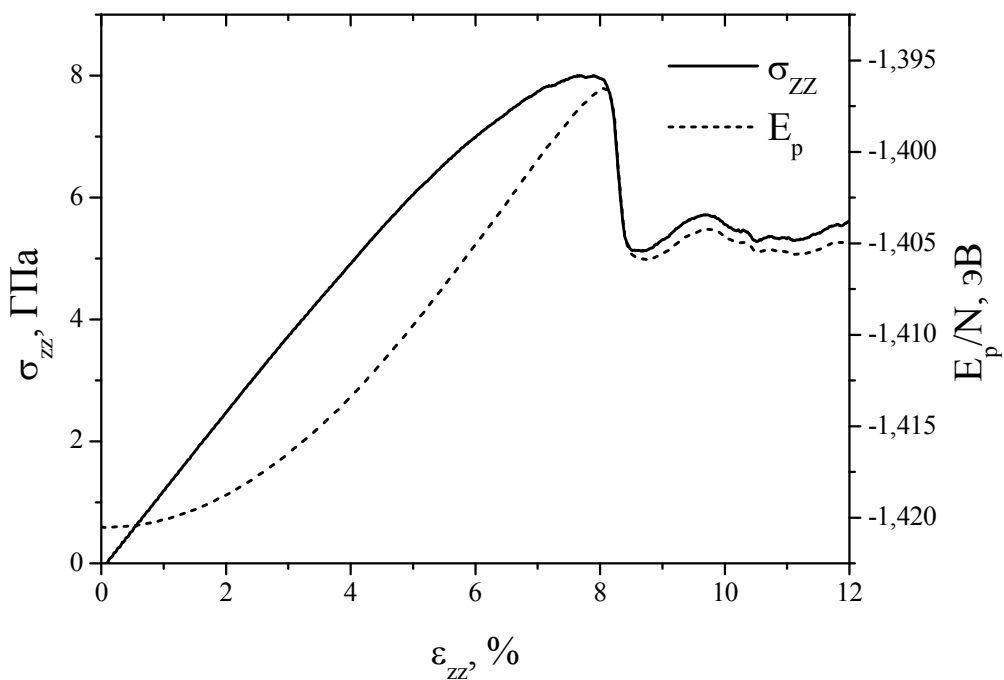


Рис. 2. Зависимости напряжения и потенциальной энергии от степени деформации

При достижении величины деформации $\varepsilon = 8 \%$ происходит уменьшение величины напряжения σ от максимального значения 7.95 ГПа до 5.1 ГПа при $\varepsilon = 8.5 \%$, на деформационной кривой наблюдается зуб текучести. Практически синхронно с падением σ начинается спад значений потенциальной энергии E_p . При $\varepsilon > 8.5 \%$ кривая носит немонотонный характер без деформационного упрочнения.

Процесс локализации неупругой деформации контролировался с помощью квадратичных неаффинных смещений D_{\min}^2 [4], которые произошли с момента начала нагружения. На рис. 3 показаны изображения модели при различной величине деформации, на которых цвет атома указывает величину D_{\min}^2 (светлее – больше). Области, имеющие высокие значения D_{\min}^2 , претерпевают большие неупругие сдвиговые перестройки.

Как видно из рис. 3, при $\varepsilon > 8 \%$ происходит локализация пластической деформации в узкую полосу сдвига, направленную под углом 45° к оси нагружения. Начало формирования полосы совпадает по времени с резким спадом величины напряжения и потенциальной энергии. После формирования полосы сдвига дальнейшее пластическое течение происходит путем скольжения одной части образца как целого относительно другой части вдоль полосы. Распространение полосы с момента зарождения и до достижения противоположной грани образца происходит в интервале деформации $\Delta\varepsilon = 0.1\%$ за время 15 пс.

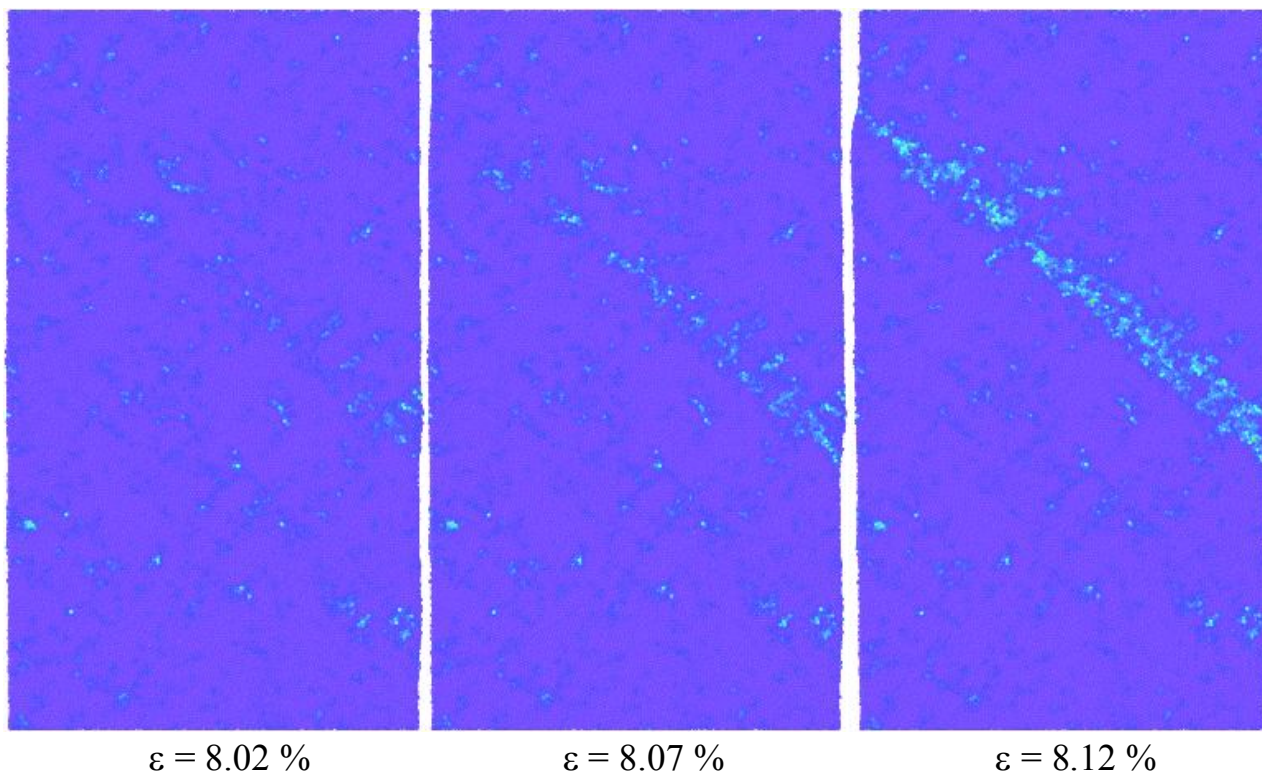


Рис. 3. Изображения модели на различных стадиях распространения полосы сдвига

Для анализа закономерностей перестройки атомной структуры в процессе сжатия модели после каждого шага деформации определялось количество МВ различного типа.

На рис. 4 показаны зависимости доли пяти наиболее часто встречающихся многогранников (0-1-10-2), (0-0-12), (0-2-8-4), (0-3-6-4) и (0-1-10-3) для выделенной области шириной 40 Å, в которой распространяется полоса сдвига. С ростом деформации происходит постепенное снижение доли МВ с индексами (0-0-12) и (0-1-10-3) и рост доли многогранников (0-3-6-4). При этом темпы уменьшения количества икосаэдров (МВ (0-0-12)) в области полосы сдвига существенно выше, чем в остальной части образца.

При деформации 8 % доля икосаэдров в области полосы скачкообразно (в течение времени распространения полосы) уменьшается от 8.2 % до 7 %, и в дальнейшем существенно не изменяется (см. рис. 4). В остальной части образца после завершения распространения полосы сдвига доля икосаэдров скачком увеличивается до значения 9.2 % и в дальнейшем остается неизменной.

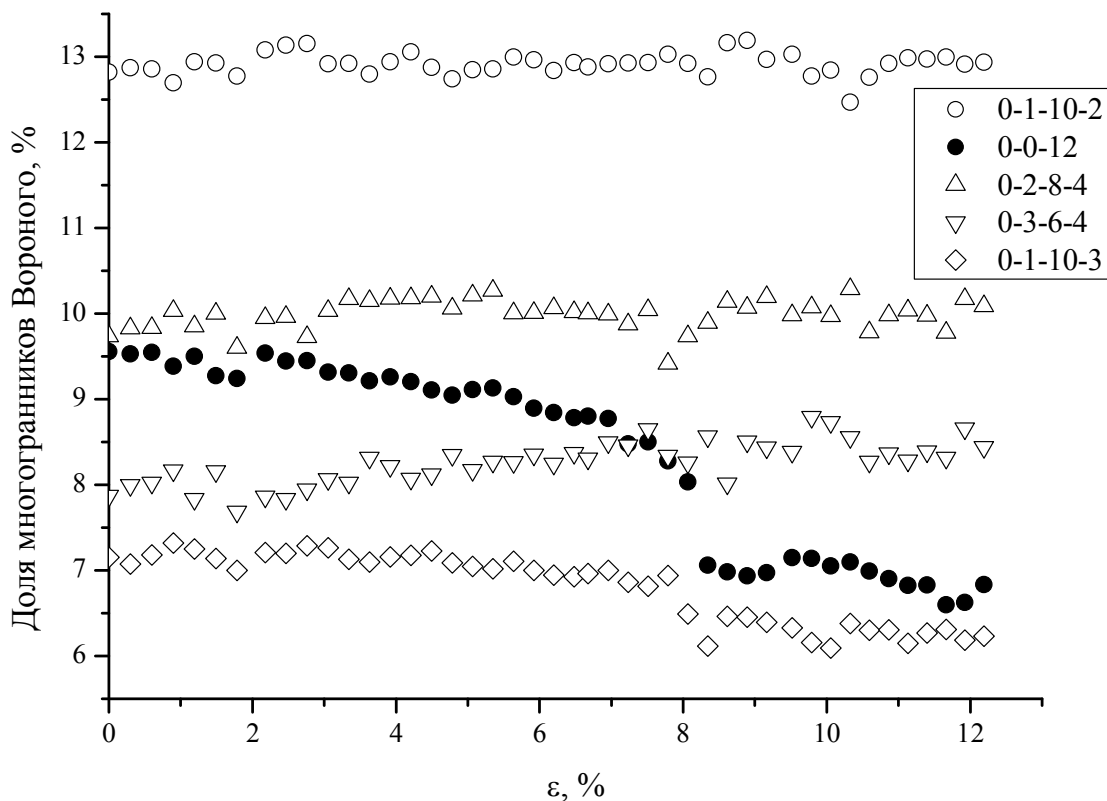


Рис. 4. Зависимость доли многогранников Вороного (0-1-10-2), (0-0-12), (0-2-8-4), (0-3-6-4) и (0-1-10-3) от величины деформации в области распространения полосы сдвига

Характер рассмотренных зависимостей количества МВ различного типа от степени сжатия модели свидетельствует об определяющей роли икосаэдров в процессе образования полосы сдвига. Неупругая деформация локализуется преимущественно в тех «рыхлых» областях, в которых доминируют МВ с

большим количеством граней (атомные конфигурации с большими координационными числами), а количество икосаэдров невелика [1]. Когда внешнее напряжение достигает некоторого критического значения, в той части образца, структура которой характеризуется малой долей икосаэдров, начинает формироваться полоса сдвига. Процесс ее распространения сопровождается разрушением значительного количества икосаэдров в соответствующей области модели.

Литература

1. Takeuchi S., Edagawa K. // *Progress in Materials Science*. – 2011. – V. 56. – № 6. – P. 785-816.
2. Greer A. L., Cheng Y. Q. // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 2013. – V. 74. – № 2. – P. 71-132.
3. Torrens I. M. *Interatomic potentials*. New York: Academic Press, 1972. – 247 p.
4. Falk M. L., Langer J. S. // *Phys. Rev. E*. – 1998. – V. 57. – № 6. – P. 7192-7205.

SIMULATION OF DEFORMATION OF THE IRON METALLIC GLASS UNDER CONDITIONS OF THE UNIAXIAL COMPRESSION

A. T. Kosilov, V. V. Ozherelyev, R. B. Kalinin, O. N. Aksenova

Voronezh State Technical University

In the paper, using the molecular dynamics method, the simulation of deformation of the iron metallic glass under conditions of the uniaxial compression was conducted. It was established that the plastic flow is accompanied by formation and proliferation of the shear band. Analysis of reconstruction of the atomic structure revealed the sharp decrease of the fraction of icosahedra in the area of the band.

Keywords: metallic glass, molecular dynamics, plasticity, deformation, shear band, Voronoi polyhedron, icosahedrons.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОДСИСТЕМЫ ПРИНЯТИЯ ОПЕРАТИВНЫХ УПРАВЛЕНЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ В РАБОТЕ ЦЕНТРА ДОРОЖНО-ПАТРУЛЬНОЙ СЛУЖБЫ

И. М. Пашуева, А. В. Бондарев, С. М. Пасмурнов

Воронежский государственный технический университет
vapushka@ya.ru

Рассмотрена математическая модель принятия оперативных управленческих решений в подсистеме управления дорожно-патрульной службой. Модель основана на построении обобщенных оценок вариантов решений. Описан набор критериев, по которым оценивается каждое решение. В качестве оптимального варианта выбирается тот, на котором достигнут максимум функции агрегирования. Отмечается особенность подхода, заключающаяся в том, что оценки постоянно изменяются, но в каждый момент времени могут быть вычислены.

Ключевые слова: математическая модель, функция агрегирования, система управления.

С ростом количества автотранспорта в крупных городах остается актуальной проблема эффективного управления центром дорожно-патрульной службы. К сожалению, каждый день мы сталкиваемся с наличием пробок и заторов на дорогах, причины которых могут быть различные: дорожно-транспортные происшествия с занятием одной или нескольких полос движения, проведение ремонтных работ, технические причины, повлекшие отказ светофоров, фонарей, периоды повышенной интенсивности движения, так называемые «часы пик» и т.д. Работа системы управления дорожно-патрульной службой заключается в регулировании транспортных потоков, направлении и перераспределении, оперативном устранении заторов, оформлении ДТП и обеспечении безопасности движения. Одной из актуальных на сегодняшний день задачей является задача оптимального управления потоком поступающих на диспетчерский пункт вызовов о ДТП и заторах по имеющимся нарядам. Для принятия оперативных управленческих решений предлагается подсистема, позволяющая оперативно проанализировать загруженность городских районов и предложить оптимальный вариант решения о перераспределении нарядами между участками. [1, 2]

Для принятия оперативных управленческих решений при перераспределении экипажей между районами при возникновении ситуации, характеризующейся значительным увеличением поступающих вызовов на одном из участков дорог, возможно применить метод, основанный на построении обобщенных оценок вариантов решений. Каждое решение оценивается по каждому из критериев: количество ожидающих обслуживания вызовов, количество свободных экипажей, удаленность районного поста от места вызова, предполагаемое коли-

чество свободных экипажей в ближайшие t_1 и t_2 минут. В предлагаемой модели в качестве V_i выбирается количество ожидающих вызовов, K_i – количество свободных экипажей в настоящий момент времени, KT_i – ожидаемое количество свободных экипажей через промежуток времени t_1 , KTT_i – ожидаемое количество свободных экипажей через промежуток времени t_2 минут, P_i – общее количество экипажей дорожно-партульной службы на i -м посту, где $i=1..n$ – индекс поста, n – количество постов, входящих в состав данного городского центра управления дорожным движением, L_i – расстояние от i -го поста до места вызова, L_{max} – максимальное значение из множества расстояний от i -го поста до места вызова.

Приоритеты критериев задаются весовыми коэффициентами, которые отражают значимость каждого критерия для принятия управленческого решения. Формируются весовые коэффициенты D [3, 4, 5].

Для сравнения вариантов решений используется несколько функций агрегирования. В качестве оптимального варианта выбирается тот, на котором достигнут максимум функции агрегирования следующего вида

$$\text{а) } \alpha_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (d_i \cdot v(A_i, S_j)), \quad (1)$$

$$\text{б) } \beta_i = \varphi \cdot \min(d_i \cdot v(A_i, S_j)) + (1 - \varphi) \cdot \max(d_i \cdot v(A_i, S_j)), \quad (2)$$

где d_i – вес критерия, $v(A_i, S_j)$ – оценка критерия S_j для района A_i , m – количество критериев, φ – изменяемый параметр, i – индекс района.

Особенность подхода заключается в том, что оценки $v(A_i, S_j)$ постоянно изменяются, поэтому и оценки α_i и β_i с течением времени меняются, но в каждый момент времени могут быть вычислены. В случае б) с помощью параметра φ учитываются различные стратегии при выборе оптимального решения. Если $\varphi=1$, то функция агрегирования будет представлять собой самый пессимистичный вариант [6, 7]. При $\varphi=0$ максимум функции агрегирования будет отражать наиболее оптимистичный вариант принятия управленческого решения. Во всех остальных случаях функция агрегирования будет выявлять решения, отражающие в различных соотношениях пессимистические и оптимистические решения.

Экономический эффект от внедрения подсистемы принятия оперативных управленческих решений центром дорожно-патрульной службы может достигаться, благодаря снижению затрат на горючее, а, следовательно, и износ запчастей автопарка, а также минимизацию переработок сотрудников, за счет перераспределения задач. Социальный эффект от применения подсистемы помощи в принятии оперативных управленческих решений достигается в сокращении времени реагирования на поступающие вызовы, а, следовательно, и обеспечение максимально быстрого устранения помех с полос движения, что улучшит пропускную способность транспортной сети.

Литература

1. Пашуева И. М. Моделирование и анализ подсистемы управления центрами быстрого реагирования с помощью сетей Петри / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2011. – Т. 7. – № 9. – С. 106-109.
2. Пашуева И. М. Применение сетей Петри в моделировании подсистемы управления центрами быстрого реагирования / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов // Системы управления и информационные технологии. – 2011. – №4.1(46). – С. 162-166.
3. Пашуева И. М. Моделирование работы распределенной сети служб скорой помощи с использованием функции агрегирования / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 65-68.
4. Пашуева И. М. Моделирование процессов принятия оперативных управленческих решений в системе управления центрами служб скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 69-73.
5. Пашуева И. М. Имитационное моделирование системы управления центрами служб скорой медицинской помощи с использованием многокритериальных оценок / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 74-78.
6. Пашуева И. М. Моделирование процесса перераспределения транспортного ресурса распределенной сети центров скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 79-83.
7. Пашуева И. М. Моделирование функционирования распределенной сети центров оказания скорой медицинской помощи с использованием санавиации / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIV междунар. семинара. Воронеж, 2016. Ч. 2. С. 124-130.
8. Пашуева И. М. Практическое применение сетей Петри в процессе моделирования распределенной сети районных центров службы скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Оптимизация и моделирование в автоматизированных системах: межвуз. сб. науч. тр. Воронеж, 2016. С. 61-68.
9. Пашуева И. М. Особенности разработки программного комплекса управления центром догоспитальной медицинской помощи / И. М. Пашуева // Математическое и компьютерное моделирование, информационные технологии управления: сб. тр. Школы для студентов, аспирантов и молодых ученых «МКМИТУ-2016». Воронеж, 2016. С. 144-147.

THE MATHEMATICAL MODEL OF THE SUBSYSTEM OF OPERATIONAL DECISIONS MAKING IN THE CENTRE OF THE ROAD PATROL SERVICE

I. M. Pashueva, A. V. Bondarev, S. M. Pasmurnov

Voronezh State Technical University

The mathematical model of the adoption of managerial decisions in the control subsystem of the road patrol service. The model is based on the construction of generalized estimates of solutions. Described a set of criteria by which to assess each solution. As the optimal option selects Xia one which achieved the maximum of aggregation functions. It is noted waghodia feature consists in the fact that estimates are constantly changing, but each time can be calculated.

Keywords: mathematical model, criterion of evaluation, aggregation function, control system.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОДСИСТЕМЫ ПРИНЯТИЯ
ОПЕРАТИВНЫХ УПРАВЛЕНЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ
В РАБОТЕ ЦЕНТРА ДОРОЖНО-ПАТРУЛЬНОЙ СЛУЖБЫ
С ПРИМЕНЕНИЕМ ФУНКЦИИ АГРЕГИРОВАНИЯ

И. М. Пашуева, А. В. Бондарев, С. М. Пасмурнов

Воронежский государственный технический университет
vapushka@ya.ru

Рассмотрена математическая модель принятия оперативных управленческих решений в подсистеме управления дорожно-патрульной службы на основе функции агрегирования. Описывается работа дорожно-патрульной службы, приводятся результаты имитационного моделирования подсистемы принятия оперативных управленческих решений в условиях недостатка транспортного ресурса в среде GPSS. Результаты моделирования анализируются.

Ключевые слова: имитационное моделирование, система управления, GPSS.

С ростом количества автотранспорта в крупных городах остается актуальной проблема эффективного управления центром дорожно-патрульной службы. К сожалению, каждый день мы сталкиваемся с наличием пробок и заторов на дорогах, причины которых могут быть различные: дорожно-транспортные происшествия с занятием одной или нескольких полос движения, проведение ремонтных работ, технические причины, повлекшие отказ светофоров, фонарей, периоды повышенной интенсивности движения, так называемые «часы пик» и т.д. Работа системы управления дорожно-патрульной службой заключается в регулировании транспортных потоков, направлении и перераспределении, оперативном устранении заторов, оформлении ДТП и обеспечении безопасности движения. Одной из актуальных на сегодняшний день задачей является задача оптимального управления потоком поступающих на диспетчерский пункт вызовов о ДТП и заторах по имеющимся нарядам. Для принятия оперативных управленческих решений предлагается подсистема, позволяющая оперативно проанализировать загруженность городских районов и предложить оптимальный вариант решения о перераспределении нарядом между участками [1, 2].

Работа дорожно-патрульной службы основана на оптимальном управлении транспортными ресурсами, оперативном обслуживании поступающих вызовов и эффективном устранении или минимизации заторов на дорогах города. Принятие управленческих решений происходит в условиях ограниченности транспортного ресурса службы. Для принятия оперативных управленческих решений при перераспределении экипажей между районами при возникновении ситуации, характеризующейся значительным увеличением поступающих вызовов на одном из участков дорог, возможно применить метод, основанный на вычислении функции агрегирования. Для сравнения вариантов решений ис-

пользуется несколько функций агрегирования. В качестве оптимального варианта выбирается тот, на котором достигнут максимум функции агрегирования следующего вида (1)

$$\gamma_i = \varphi \cdot \min(m_i \cdot v(A_i, S_j)) + (1 - \varphi) \cdot \max(m_i \cdot v(A_i, S_j)), \quad (1)$$

где m_i – вес критерия, $v(A_i, S_j)$ – оценка критерия S_j для района A_i , φ – изменяемый параметр, i – индекс района. Для каждой задачи может быть найден некоторый набор решений, который определяется параметром φ . Каждое решение может быть определено из соотношения оптимистичного и пессимистичного вариантов. Одним из решений является решение, при котором $\varphi = 1$, что характеризует, что функция агрегирования будет представлять собой самый пессимистичный вариант. Аналогично, при $\varphi = 0$ максимум функции агрегирования будет отражать наиболее оптимистичный вариант принятия управленческого решения. В остальных случаях функция агрегирования будет вычисляться со значениями φ от 0 до 1, т.е. дробными значениями φ .

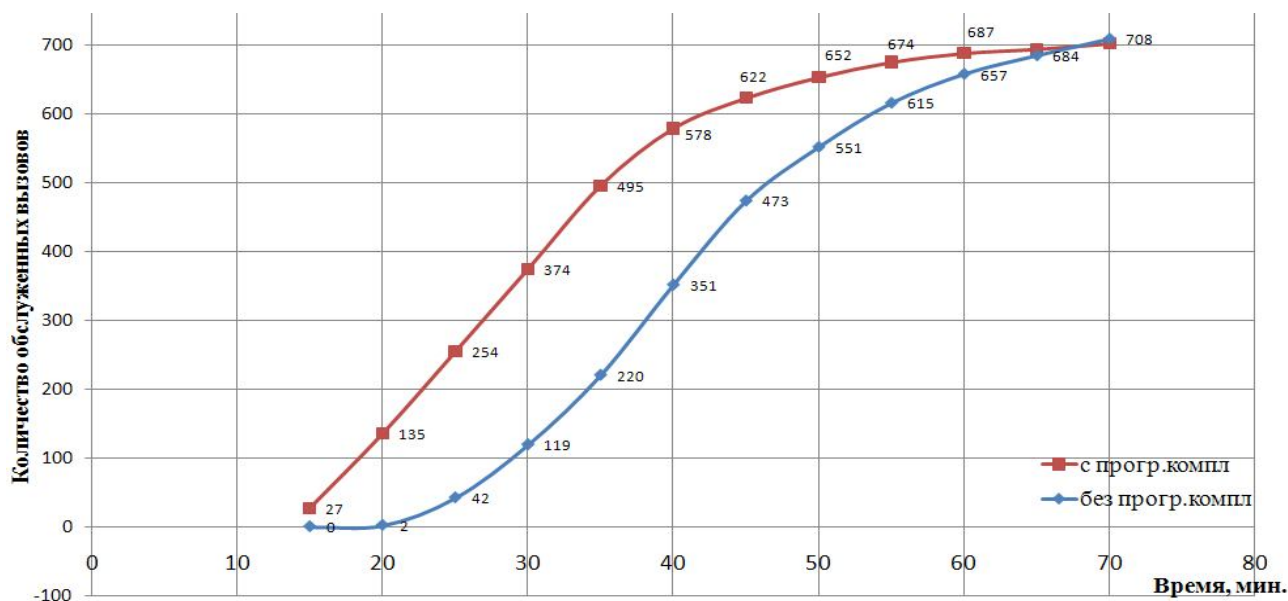
Имитационное моделирование предлагается проводить в среде GPSS, которая уже много лет широко применяется для моделирования систем различной сложности. В процессе моделирования возникала необходимость оптимизации отдельных элементов системы, поскольку возможности не коммерческой версии GPSS ограничены определенным максимальным числом строк имитационной модели. В результате многократных запусков имитационной модели получены количественные показатели среднего времени обслуживания и зависимости количества вызовов от времени обслуживания. По результатам имитационного моделирования сформирована усредненная зависимость количества обслуживаемых вызовов от времени обслуживания.

По статистическим данным работы центра дорожно-патрульной службы сформирована вторая зависимость – зависимость количества обслуживаемых вызовов от времени обслуживания.

Обе зависимости для наглядности изображены на одном графике, представленном на рисунке.

По результатам имитационного моделирования можно сделать вывод о том, что использование подсистемы поддержки принятия оперативных управленческих решений повышает эффективность работы центра управления дорожно-патрульной службой, упрощает работу диспетчеров, принимающих вызовы. Благодаря алгоритму помощи при выборе управленческого решения достигается оптимальное распределение ресурсов. [8, 9]

В работе дорожно – патрульной задача службы распределения вызовов по экипажам решается сотрудниками диспетчерской службы, которые анализируя ситуацию в городском центре могут принять решение о необходимости перераспределения вызовов между обслуживаемыми отдельными участками экипажами дорожно-патрульной службы. Зачастую, непросто оперативно выбрать оптимальное решение.



Сравнение скорости обслуживания вызовов с применения подсистемы принятия оперативных управленческих решений (верхняя кривая) и по данным статистики (нижняя кривая)

Подсистема принятия оперативных управленческих решений поомгает проанализировать все возможные варианты перераспределения вызово и предложет оптимальный вариант решения. За счет оптимизации движения экипажей, а значит уменьшению расхода горючего может достигаться экономический эффект. За счет решения задачи перерапсределения можно добиться уменьшения переработок сотрудников службы. Стоит отметить социальный эффект от применения подсистемы помощи в принятии оперативных упарвленческих решений, который достигается благодаря сокращению времени реагирования на поступающие вызовы, а следовательно и обеспечения максимально быстрого устранения помех с полос движения. Применение подсистемы принятия оперативных управленческих решений поможет улучшить пропускную способность транспортной сети.

Литература

1. Пашуева И. М. Моделирование и анализ подсистемы управле-ния центрами быстрого реагирования с помощью сетей Петри / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2011. – Т. 7. – № 9. – С. 106-109.
2. Пашуева И. М. Применение сетей Петри в моделировании подсистемы управления центрами быстрого реагирования / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов // Системы управления и ин-формационные технологии: научно-технический журнал. – 2011. – №4.1(46). – С. 162-166.
3. Пашуева И. М. Моделирование работы распределенной сети служб скорой помощи с использованием функции агрегирования / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 65-68.
4. Пашуева И. М. Моделирование процессов принятия оперативных управленческих решений в системе управления центрами служб скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 69-73.

5. Пашуева И. М. Имитационное моделирование системы управления центрами служб скорой медицинской помощи с использованием многокритериальных оценок / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 74-78.

6. Пашуева И. М. Моделирование процесса перераспределения транспортного ресурса распределенной сети центров скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 79-83.

7. Пашуева И. М. Моделирование функционирования распределенной сети центров оказания скорой медицинской помощи с использованием санавиации / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIV междунар. семинара. Воронеж, 2016. Ч. 2. С. 124-130.

8. Пашуева И. М. Практическое применение сетей Петри в процессе моделирования распределенной сети районных центров службы скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Оптимизация и моделирование в автоматизированных системах: межвуз. сб. науч. тр. Воронеж, 2016. С. 61-68.

9. Пашуева И. М. Особенности разработки программного комплекса управления центром догоспитальной медицинской помощи / И. М. Пашуева // Математическое и компьютерное моделирование, информационные технологии управления: сб. тр. Школы для студентов, аспирантов и молодых ученых «МКМИТУ-2016». Воронеж, 2016. С. 144-147.

10. Пашуева И. М. Моделирование процессов управления центром скорой помощи в GPSS / И. М. Пашуева // Математическое и компьютерное моделирование, информационные технологии управления: сб. тр. Школы для студентов, аспирантов и молодых ученых «МКМИТУ-2016». Воронеж, 2016. С. 147-152.

MODELING OF A SUBSYSTEM OF OPERATIONAL DECISIONS MAKING IN THE CENTRE OF THE ROAD PATROL SERVICE WITH APPLICATION OF THE AGGREGATION FUNCTION

I. M. Pashueva, A. V. Bondarev, S. M. Pasmurnov

Voronezh State Technical University

The mathematical model of the adoption of managerial decisions in the control subsystem of the road patrol service on the basis of an aggregation function. Built simulation model of the center's work patrol in catches of transport lack of resource in the environment of GPSS. The simulation results are analyzed.

Keywords: simulation, control system, GPSS.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ НОЛЬМЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ

Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, Е. И. Максимова

Воронежский государственный технический университет
nsper@ya.ru

Описаны возможные способы определения пространственной структуры нольмерных объектов (атомных кластеров) путем комбинирования данных фотоэлектронной спектроскопии и компьютерного эксперимента по оптимизации атомной структуры и расчеты электронных свойств.

Ключевые слова: атомные кластеры, теория функционала плотности, фотоэлектронные спектры.

В поисках способа производства более эффективных и мощных чипов современные технологии идут по пути миниатюризации схем преимущественно на основе кремния. Для перехода от микро- к нанотехнологиям требуются большие мощности, которые достигаются за счет уменьшения линейных размеров изделий, что приводит к огромным плотностям тока. Возникающий при этом разогрев контактов вызывает появление различных локальных дефектов, а иногда и разрушение контакта. Кроме того, неизбежным следствием уменьшения линейных размеров интегральных схем является уменьшение глубины залегания р-п-переходов, что существенно затрудняет создание контактов. Потенциальные возможности применения наноразмерных систем в этой области открывают широкие перспективы развития современных технологий и, как следствие, производства.

В 1985 году, когда был получен первый углеродный фуллерен [1], появились предположения, что и другие элементы IV группы (Si, Ge, Sn) могут образовывать похожие структуры. Попытки получить фуллереноподобные кластеры из атомов элемента IV группы увенчались успехом только в 2001 году, когда японскими учеными были получены кремниевые кластеры с замкнутой структурой [2]. Стабильность кремниевой подсистемы обеспечивает инкапсулированный атом металла. Оказалось, что сорт атома металла влияет и на свойства кластера, определяя особенности атомной структуры и электронно-энергетического спектра. Если учесть, что атомная структура и электронные свойства кластера зависят также и от количества атомов в нем, то появляются широкие возможности влиять на свойства кремниевых кластеров, изменяя количество атомов и/или подбирая сорт инкапсулированного атома. Благодаря своей структуре, замкнутые полупроводниковые кластеры могут служить строительными единицами для построения более крупных нанообъектов (например, нанотрубок и нанокристаллов) с заранее заданными свойствами. Так, например, кластеры со структурой призмы, могут рассматриваться как элемен-

тарные единицы трубчатых нанокластеров, а кластеры, имеющие фуллереноподобную структуру, являются элементарными единицами при построении кристаллической решетки наноклеточных клатратных кристаллов.

На данный момент нет однозначных данных об атомной структуре и электронном строении кремниевых нанокластеров. Экспериментальное исследование атомной структуры кластеров в настоящее время крайне сложная задача, которая до сих пор не решена, а в известных теоретических работах представлены противоречивые результаты [3-5]. Экспериментальное исследование электронной структуры, а именно фотоэлектронная спектроскопия, активно используется для получения информации об электронном спектре кластера [6-8], но позволяет получить информацию о распределении электронных состояний только в узком энергетическом интервале у потолка валентной полосы (не более 3 эВ), что, конечно же, недостаточно для детального анализа электронно-энергетического спектра. Доступен единственный способ получить данные об атомной структуре кластеров – оптимизация атомной структуры теоретическими методами, затем расчет фотоэлектронных спектров оптимизированных структур и сравнение рассчитанных спектров с экспериментальными. Даже небольшие отличия в атомной структуре отражаются на форме фотоэлектронных спектров, поэтому такой метод позволяет с большой долей вероятности установить фактическую атомную структуру кластеров.

В одной из первых работ [9], где было использовано комбинирование экспериментального метода фотоэлектронной спектроскопии с компьютерным экспериментом по моделированию пространственной и электронной структуры кластеров, представлены результаты оптимизации геометрической структуры кластеров Si_{16} , Si_{16} и MoSi_{16} , а также расчета их электронной структуры. Для расчетов использован полуэмпирический параметризованный метод PM3 (3-я модификация метода AM1) [10]. Получены устойчивые геометрические конфигурации этих кластеров, а в качестве характеристик электронной структуры полные и парциальные плотности электронных состояний. Для кластера Si_{16} проведено также сопоставление результатов расчета с экспериментальными фотоэлектронными спектрами, показавшее хорошее согласие теории и эксперимента.

В работе [11] представлены результаты оптимизации пространственной структуры ряда германий-танталовых анионных кластеров TaGe_n^- ($n = 8 - 17$) и расчета их электронно-энергетического спектра. Расчеты проводились методом функционала плотности (B3LYP [12, 13]) в базисе SDD [14] с использованием пакета программ Gaussian 03 [15]. Визуализация пространственных структур выполнена в программе GaussView [15]. Для каждого кластера описаны три качественно различные структуры в основном состоянии, а также построены их электронные спектры. Показано, что профиль полной плотности электронных состояний радикальным образом зависит от пространственной структуры кластера, а это значит, что сопоставление рассчитанной полной плотности состояний с экспериментальным фотоэлектронным спектром может дать достоверную информацию о пространственной структуре детектируемых в эксперименте

кластеров. Расчет показал, что для всех представленных структур согласие рассчитанного электронного спектра с экспериментальным фотоэлектронным наблюдается именно для основного изомера, что свидетельствует об адекватности результатов моделирования. Кластеры TaGe_{12}^- и TaGe_{16}^- имеют правильные эндоэдральные структуры и могут служить элементарными блоками для строительства одномерных, двумерных и трехмерных наноструктурированных материалов.

В работе [16] описаны стабильные структуры анионных кластеров YSi_n^- ($n = 6 - 17$). Расчеты проводились методом функционала плотности (B3LYP [16]) в полноэлектронном базисе DGDZVP [17, 18] с использованием пакета программ Gaussian 03 [15]. Визуализация пространственных структур выполнена в программе GaussView [15]. Комбинирование результатов компьютерного моделирования пространственной структуры и электронного спектра кластеров с известными экспериментальными данными фотоэлектронной спектроскопии [6] позволило установить структуру кластеров, детектируемых экспериментально. Образование стабильных эндоэдральных кластеров YSi_n^- возможно для $n \geq 15$. Для кластеров с меньшим числом атомов кремния предпочтительными являются экзоэдральные ($n = 6 - 9$) или продольные структуры ($n = 10 - 14$). Продольные структуры являются промежуточной стадией перехода от экзоэдральных кластеров к эндоэдральным с ростом числа атомов в кластере. Кластеры YSi_9^- и YSi_{16}^- имеют повышенную стабильность в ряду YSi_n^- ($n = 6 - 17$), которая объясняется в рамках модели свободного электронного газа наличием закрытой кластерной электронной оболочки.

В работе [19] описаны стабильные изомеры анионных кластеров ScSi_n^- ($n = 6 - 20$). Комбинирование результатов компьютерного моделирования пространственной структуры кластеров с известными экспериментальными данными по фотоэлектронной спектроскопии [6] позволило установить, какие изомеры детектируются экспериментально. Образование стабильных эндоэдральных кластеров ScSi_n^- возможно для $n \geq 14$. Для кластеров с меньшим числом атомов кремния предпочтительными являются экзоэдральные ($n = 6 - 9$) или продольные структуры ($n = 10 - 13$). Продольные структуры являются промежуточной стадией перехода от экзоэдральных кластеров к эндоэдральным с ростом числа атомов в кластере. Кластеры ScSi_9^- и ScSi_{16}^- имеют повышенную стабильность в ряду ScSi_n^- ($n = 6 - 20$), которая объясняется в рамках модели свободного электронного газа наличием закрытой кластерной электронной оболочки. Фуллереноподобный изомер кластера ScSi_{16}^- является базовым при формировании кластеров с большим числом атомов ($n = 17 - 20$).

Литература

1. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley. Nature 318, 162 (1985).
2. H. Hiura, T. Miyazaki, T. Kanayama. Phys. Rev. Lett. 86, 1733 (2001)
3. К.-М. Но, А. А. Shvartsburg, В. Pan, Z.-Y. Lu, C.-Z. Wang, J. G. Wacker, J. L. Fye, M. F. Jarrold. Nature 392, 582 (1998).

4. B. Li, P. Cao. *J. Phys.: Condens. Matter.* 13, 10865 (2001).
5. S. Nigam, C. Majumder, S. K. Kulshreshtha *J. Chem. Phys.* 125, 074303 (2006).
6. K. Koyasu, J. Atobe, S. Furuse, A. Nakajima. *J. Chem. Phys.* 129, 214301 (2008).
7. A. Grubisic, Yeon Jae Ko, Haopeng Wang, Kit H. Bowen. *J. A. Chem. Soc.* 131, 10783 (2009).
8. J. Atobe, K. Koyasu, S. Furuse, A. Nakajima. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 9403 (2012).
9. A. D. Becke *J. Chem. Phys.* 98, 5648 (1993).
10. Н. А. Борщ, С. И. Курганский. *Известия Российской Академии наук. Серия физическая.* Т. 68, №1, 1023 (2004).
11. М. J. S. Dewar, E. G. Zoebisch, E. F. Healy, and J. J. P. Stewart. *J. Am. Chem. Soc.* 107, 3902 (1985).
12. Н. А. Борщ, К. С. Берестнев, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика твердого тела.* Т. 56, №11, 2259 (2014).
13. A. D. Becke *J. Chem. Phys.* 98, 5648 (1993).
14. C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, *Phys. Rev. B* 27, 785 (1988).
15. W. Küchle, M. Dolg, H. Stoll, H. Preuss. *Molecular Physics.* 74, № 6, 1245 (1991).
16. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, T. Keith, G. A. Petersson, J. A. Montgomery, K. Raghavachari, M. A. Al-Laham, V. Zakrzewski, J. V. Ortiz, J. B. Foresman, J. Closowski, B. B. Stefanov, A. Nanayakkara, M. Challacombe, C. Y. Peng, P. Y. Ayala, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andress, E. S. Replogle, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, J. S. Binkley, D. J. Defress, J. Baker, J. P. Stewart, M. Head-Gordon, C. Gonzales, J. A. Pople. *Gaussian 03, Revision B03*; Gaussian, Inc: Pittsburg, PA, 2003.
17. Н. А. Борщ, К. С. Берестнев, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика твердого тела.* Т. 56, №6, 1227 (2014).
18. N. Godbout, D. R. Salahub, J. Andzelm, E. Wimmer. *Canad. J. Chem.* 70, 560 (1992).
19. S. M. Godfrey, A. Hinchliffe. *J. Mol. Struct. Theochem.* 761, 1 (2006).
20. N. A. Borshch, S. I. Kurganskii. *J. Appl. Phys.* 116, 124302 (2014).

COMPUTER EXPERIMENT FOR DETERMINATION OF THE SPATIAL STRUCTURE OF NON-DIMENSIONAL OBJECTS

N. A. Borshch, N. S. Pereslavl'tseva, E. I. Maksimova

Voronezh State Technical University

Possible ways of determining the spatial structure of zero-dimensional objects (atomic clusters) are described by combining the data of photoelectron spectroscopy and computer experiment on optimization of the atomic structure and calculations of electronic properties.

Keywords: atomic clusters, density functional theory, photoelectron spectra.

РОЛЬ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА В ПРОГНОСТИЧЕСКОМ КОНСТРУИРОВАНИИ НОВЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИКОВ

Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, Е. И. Максимова

Воронежский государственный технический университет
nsper@ya.ru

Рассмотрены результаты теоретического исследования электронно-энергетического спектра замещенных клатратов систем Ва-Ме-Si(Ge) с различным содержанием атомов Ме. Расчеты проводились методом линейаризованных присоединенных плоских волн. В результате расчетов были получены зонные картины, полные и парциальные плотности электронных состояний.

Ключевые слова: клатраты, электронная структура, термоэлектрики.

Термоэлектрические материалы используются для преобразования электрической энергии в тепловую и наоборот. Традиционно в качестве термоэлектриков используют теллуриды висмута и свинца. Однако эти материалы дороги и малоэффективны, поэтому не нашли массового применения. Если бы удалось получить термоэлектрик с более высокой эффективностью, то это позволило бы совершить прорыв во многих областях промышленности. Например, появилась бы возможность создавать экологически безопасные холодильники без хладагентов, стало бы реальным промышленное и бытовое применение сверхпроводников. Поэтому проблема поиска новых материалов с оптимальными термоэлектрическими характеристиками – одна из актуальнейших проблем современной науки.

Основная проблема заключается в том, что способы оптимизации термоэлектрических свойств клатратов не разработаны. В частности, коэффициент Зеебека, от которого зависит фактор добротности, значительно меняется при переходе от одного клатрата к другому. Факторы, которые влияют на его значение, до сих пор не ясны. Величина коэффициента Зеебека связана с особенностями электронного строения кристалла, его зонной структурой, а именно с плотностью состояний вблизи уровня Ферми. Поэтому очевидно, что изучение электронного строения термоэлектрических клатратов является необходимым шагом на пути получения новых материалов с наилучшими термоэлектрическими характеристиками.

В 90-х годах прошлого века появилась гипотеза о том, что термоэлектрические материалы с уникальными свойствами могут быть получены на основе соединений, которые были названы «фононное стекло – электронный кристалл» [1]. Особенностью этих соединений является высокая электропроводность (электронный кристалл) при низкой теплопроводности (фононное стекло). Оказалось, что такие соединения известны еще с 1965 года. В 1965 году были синтезированы силициды натрия с необычной структурой [2]. Кристалли-

ческая ячейка этих кристаллов строилась из сфероидальных (позже их стали называть фуллереноподобными) кластеров кремния из 20 или 24 атомов (структура I типа) или из 20 и 28 атомов (структура II типа). Внутри этих кластеров помещался атом Na, стабилизирующий кремниевый сфероид. Эти силициды имели формулы $\text{Na}_8\text{Si}_{46}$ и $\text{Na}_{24}\text{Si}_{136}$, соответственно. Из-за сходства своей кристаллической структуры со структурой органических клатратов эти соединения получили название кремниевых клатратов или клатратных силицидов. Позднее были синтезированы германиды и станниды с клатратной структурой [3, 4].

Благодаря особенностям кристаллической структуры полупроводниковых клатратов имеются широкие возможности для моделирования их свойств. Во-первых, это подбор сорта интеркалированного атома. Сорт интеркалированного атома влияет на свойства клатратного кристалла. Например, частичная замена атомов Na на атомы Ba в клатрате $\text{Na}_8\text{Si}_{46}$ приводит к появлению сверхпроводящих свойств [5]. Недавние расчеты изолированных кластеров кремния и германия с замкнутой структурой показали также возможность инкапсулирования в кремниевый или германиевый сфероид атомов переходных металлов [6-11].

Во-вторых, часть атомов клатратной полупроводниковой подрешетки может заменяться атомами другого сорта, что радикальным образом может изменять свойства кристалла, в частности, характер электрической проводимости [12]. На свойства клатрата в таком случае влияют как сорт замещающих атомов, так и их количество [12]. Таким образом, появляются два пути получения полупроводниковых клатратов с оптимальными термоэлектрическими характеристиками: подбор интеркалированного атома и замещение атомов клатратной подрешетки. Эти два способа могут комбинироваться, что открывает широкие возможности для получения новых материалов.

Основная проблема заключается в том, что способы оптимизации термоэлектрических свойств клатратов не разработаны. В частности, коэффициент Зеебека, от которого зависит фактор добротности, значительно меняется при переходе от одного клатрата к другому. Факторы, которые влияют на его значение, до сих пор не ясны. Величина коэффициента Зеебека связана с особенностями электронного строения кристалла, его зонной структурой, а именно с плотностью состояний вблизи уровня Ферми. Поэтому очевидно, что изучение электронного строения термоэлектрических клатратов является необходимым шагом на пути получения новых материалов с наилучшими термоэлектрическими характеристиками.

Методами компьютерного моделирования была проведена серия расчетов электронного строения клатратов серий Ba-Me-Si и Ba-Me-Ge [13-17]. В результате расчетов были получены полные зонные картины в клатратах, проанализирована структура энергетических зон около уровня Ферми, рассчитаны полные, парциальные и локальные парциальные плотности электронных состояний. Такое полное и детальное исследование электронно-энергетического спектра перспективных клатратных термоэлектриков позволило отследить влияние специфических особенностей их кристаллической структуры на особенности электронного строения, а тех, в свою очередь, на электрофизические

характеристики, такие как электропроводность и теплопроводность. Главная задача, которая впервые была решена с помощью использования методов компьютерного моделирования – установление зависимости: стехиометрический состав клатратного кристалла, особенности его кристаллической структуры – особенности электронно-энергетического спектра – электропроводность и теплопроводность.

Расчет электронной структуры клатратов проводился методом линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) [18] в рамках локального приближении функционала плотности с использованием обменно-корреляционного потенциала в аппроксимации [19] и скалярно-релятивистского приближения [20]. В этом приближении учитываются все релятивистские эффекты, кроме спин-орбитального расщепления. Для расчетов электронной структуры использовался базис из 2500 ЛППВ. В разложении базисной функции по сферическим гармоникам учитывались вклады до $l_{\max} = 7$.

Структура валентной зоны в клатратах $Ba_8Zn_xGe_{46-x}$ ($x = 4, 6, 8$) идентична: в области низких энергий доминирует вклад Ge 4s- и Zn 3d-состояний, а в высокоэнергетической области преобладают Ge 4p-состояния с заметным вкладом Zn 4s- и Zn 4p-состояний [13]. Области разделены щелью. Около уровня Ферми в структуре зон имеются существенные отличия. В клатрате $Ba_8Zn_6Ge_{40}$ имеется энергетическая щель под уровнем Ферми, тогда как в клатратах $Ba_8Zn_4Ge_{40}$ и $Ba_8Zn_8Ge_{38}$ соответствующая щель отсутствует. В Zn4-замещенном клатрате закрытие щели обусловлено влиянием 4p-состояний атомов Ge, соседствующих с вакансиями, в Zn8-замещенном клатрате – влиянием 4p-состояний атомов Zn из 16i-позиции. Zn6-замещенный клатрат является металлом, а Zn4- и Zn8-замещенные клатраты – полуметаллами.

Строение валентной зоны в Cd-замещенных германиевых клатратах идентично: в области низких энергий доминирует вклад Ge 4s- и Cd 4d-состояний, а в высокоэнергетической области преобладают Ge 4p-состояния с заметным вкладом Cd 5s- и Cd 5p-состояний [14]. Области разделены энергетической щелью. Структура энергетических зон на уровне Ферми указывает на то, что Cd2- и Cd4-замещенные клатраты являются полуметаллами, а Cd6- и Cd8-замещенные имеют металлический характер проводимости. В прифермиевской области доминирует вклад p-состояний тех атомов германия, которые имеют в своем ближайшем окружении атомы кадмия или вакансии.

В низкоэнергетической части валентной зоны Zn-замещенных клатратных силицидов доминирует вклад Si 3s-состояний, в области высоких энергий – вклад Si 3p-состояний [15]. Замещающие атомы цинка являются акцепторами электронов в элементарной ячейке клатрата и стремятся образовать валентную конфигурацию, необходимую для создания ковалентных тетраэдрических связей с атомами кремния. Энергетическая щель в валентной зоне, свойственная незамещенным кремниевым клатратам, в Zn-замещенных клатратах закрывается. Количество замещающих атомов цинка влияет на электронно-энергетический спектр в прифермиевской области клатрата и определяет характер проводимости кристалла. Кристаллографическая позиция замещающих

атомов определяет ширину энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости клатрата.

В зонной картине Pd-замещенных кремниевых клатратов выделяются три группы энергетических зон, характерные для зонных картин кремниевых клатратов [16]. Группы разделяются энергетическими щелями, ширина которых зависит от количества замещающих атомов Pd в элементарной ячейке. Структура энергетических зон около уровня Ферми, а значит и тип проводимости кристалла, определяется числом замещающих атомов. Клатрат $\text{Ba}_8\text{Pd}_2\text{Si}_{44}$ имеет металлический характер проводимости, клатрат $\text{Ba}_8\text{Pd}_4\text{Si}_{42}$ – полупроводник, а в клатрате $\text{Ba}_8\text{Pd}_6\text{Si}_{40}$ структура зон около уровня Ферми характеризует его как сильнолегированный дырочный полупроводник.

В низкоэнергетической части валентной зоны Pt-замещенных клатратных силицидов доминирует вклад Si 3s-состояний, в области высоких энергий – вклад Si 3p-состояний [17]. Замещающие атомы платины являются акцепторами электронов в элементарной ячейке клатрата и стремятся образовать валентную конфигурацию, необходимую для создания ковалентных тетраэдрических связей с атомами кремния. Энергетическая щель в валентной зоне, свойственная незамещенным кремниевым клатратам, в Pt-замещенных клатратах закрывается. Количество замещающих атомов платины влияет на электронно-энергетический спектр в прифермиевской области клатрата и определяет характер проводимости кристалла. Кристаллографическая позиция замещающих атомов определяет ширину энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости клатрата.

Зонная картина в наноклеточных твердых растворах системы Ba-Zn-Si-Ge имеет особенности, общие для всех рассмотренных кристаллов. У дна валентной зоны доминирует вклад валентных s-состояний германия и кремния, в высокоэнергетической части валентной зоны основной вклад вносят Si 3p- и Ge 4p-состояния [21]. Плотность электронных состояний около уровня Ферми формируют состояния атомов цинка и тех атомов кремния и германия, которые имеют в ближайшем окружении атомы цинка. Характер проводимости и ширина энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости в твердых растворах Ba-Zn-Si-Ge зависит от кристаллографической позиции атомов цинка, которая в свою очередь, определяется соотношением числа атомов кремния и германия в элементарной ячейке кристалла. Наличие атомов цинка в 24k-позиции приводит к возникновению эффекта отщепленных энергетических зон, в следствие которого ширина запрещенной зоны уменьшается. Клатраты $\text{Ba}_8\text{Zn}_8\text{Si}_{28}\text{Ge}_{10}$ и $\text{Ba}_8\text{Zn}_8\text{Si}_{19}\text{Ge}_{19}$ являются полуметаллами, а клатрат $\text{Ba}_8\text{Zn}_8\text{Si}_{10}\text{Ge}_{28}$ – сильнолегированный полупроводник.

Литература

1. G. A. Slack, Mater. Res. Symp. Proc., **478**, 47 (1997).
2. J. S. Kasper, P. Hagemuller, M. Pouchard, C. Cros. Science **150**, 1713 (1965).
3. G. S. Nolas, T. J. Weakley, J. L. Cohn, and R. Sharma. Phys. Rev. B **61**, 3845 (2000).

4. I. Ishii, H. Higaki, T. Sakata, D. Huo, T. Takabatake, T. Suzuki. *Physica B: Condensed Matter* **359**, 1210 (2005).
5. H. Kawaji, H. Horie, S. Yamanaka, M. Ishikawa. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1427 (1995).
6. N. A. Borshch, S. I. Kurganskii. *Journal of Applied Physics.* **116**, 124302 (2014).
7. Н. А. Борщ, К. С. Берестнев, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика твердого тела.* Т. **56**, №6, 1227 (2014).
8. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика твердого тела.* Т. **56**, №11, 2259 (2014).
9. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Журнал физической химии.* Т. **88**, № 10, 1523 (2014).
10. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Химическая физика.* Т. **34**, № 1, 11 (2015).
11. Н. А. Борщ, С. И. Курганский. *Неорганические материалы.* Т. **51**, № 9, 946 (2015).
12. N. Melnychenko-Koblyuk, A. Grytsiv, L. Fornasari. *J. Phys.: Condens. Matter.* **19**, 046203 (2007).
13. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика и техника полупроводников.* Т. **43**, № 5, 590 (2009).
14. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика и техника полупроводников.* Т. **44**, № 8, 1021 (2010).
15. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика и техника полупроводников.* Т. **45**, № 6, 729 (2011).
16. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика твердого тела.* Т. **54**, № 2, 241 (2012).
17. Н. А. Борщ. *Физика и техника полупроводников.* 2016. Т. **50**. № 4. С. 433-437.
18. S. N. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, *Can. J. Phys.*, **58**, 1200 (1980).
19. D. D. Koelling, G. O. Arbman, *J. Phys. F*, **5**, 2041 (1975).
20. A. H. MacDonald, W. E. Pickett, D. D. Koelling, *J. Phys. C*, **13**, 2675 (1980).
21. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский. *Физика и техника полупроводников.* 2018. (в печати).

THE ROLE OF COMPUTER EXPERIMENT IN PROGNOSTIC DESIGN OF NEW THERMOELECTRICS

N. A. Borshch, N. S. Pereslavl'tseva, E. I. Maksimova

Voronezh State Technical University

The results of a theoretical study of the electron-energy spectrum of substituted clathrates of Ba-Me-Si (Ge) systems with different contents of Me atoms are considered. The calculations were carried out by the method of linearized attached plane waves. As a result of the calculations, band images were obtained, the total and partial densities of the electronic states.

Keywords: clathrates, electronic structure, thermoelectrics.

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ПРОГРАММНОМ ПАКЕТЕ WIEN2K НА ПРИМЕРЕ ГЦК-НИКЕЛЯГ. П. Потуданский¹, Н. С. Переславцева², Е. И. Максимова²¹Воронежский государственный университет²Воронежский государственный технический университет
potudanskiy@phys.vsu.ru

В настоящей работе приведено краткое описание принципа работы программного пакета WIEN2k, который может быть использован для проведения расчетов электронных структур различного рода материалов в том числе для проведения *ab initio* расчетов в физике конденсированного состояния. Продемонстрировано применение данного программного пакета на примере расчетов зонной структуры и плотностей электронных состояний ГЦК-никеля.

Ключевые слова: WIEN2k, PBE-GGA, зонная структура, метод LAPW, никель, плотность электронных состояний.

Численное моделирование различных физических явлений и проведение различных расчетов в тех или иных программных пакетах уже давно стали важной и нужной областью исследований. Для физики конденсированного состояния особо точные расчеты электронных структур материалов могут дать программные пакеты, в основе которых лежит теория функционала плотности (DFT) и метод линеаризованных присоединенных плоских волн (LAPW). Ранее с помощью этого метода было исследовано большое разнообразие соединений, в том числе дисилицидов никеля [1], рения [2] и молибдена [3], клатратных кристаллов на основе кремния [4] и германия [5]. Рассматриваемый программный пакет WIEN2k [6], в котором реализован полнопотенциальный метод LAPW, разработан в Венском техническом университете научной группой под руководством профессоров П. Блахи и К. Шварца. Знание оптимальных значений всех параметров, необходимых для выполнения расчета, позволяет выполнить высокоточное моделирование свойств различных систем. С помощью этого пакета можно определять фундаментальные характеристики электронной структуры материалов, в том числе зонную структуру, плотность электронных состояний (DOS), спектры рентгеновского излучения (XES) и поглощения (XAS), оптические спектры и др. Пакет WIEN2k написан на высокопроизводительном языке программирования Fortran, и предназначен для работы на компьютерах с предустановленной операционной системой Linux. WIEN2k, как и другие программные пакеты, позволяющие выполнить первопринципное моделирование, имеют ряд наиболее значимых параметров, среди которых можно выделить тип обменно-корреляционного потенциала, количество k -точек, которое определяет разбиение обратного пространства, граница обрыва плоских волн, которая определяется величиной K_{max} и присутствует в произведении $R_{mt} \times K_{max}$ которое определяет количество базисных функций. В зависимости от того, как будут выбраны данные параметры, зависит точность получаемых результатов, скорость сходимости и время расчётов.

Процесс работы WIEN2k условно можно разделить на несколько этапов, среди которых основными являются моделирование кристаллической структуры исследуемого материала (рис. 1), проведение предварительных вычислений (рис. 2), расчет электронной плотности в цикле самосогласования (SCF) и расчет характеристик электронной структуры материала.

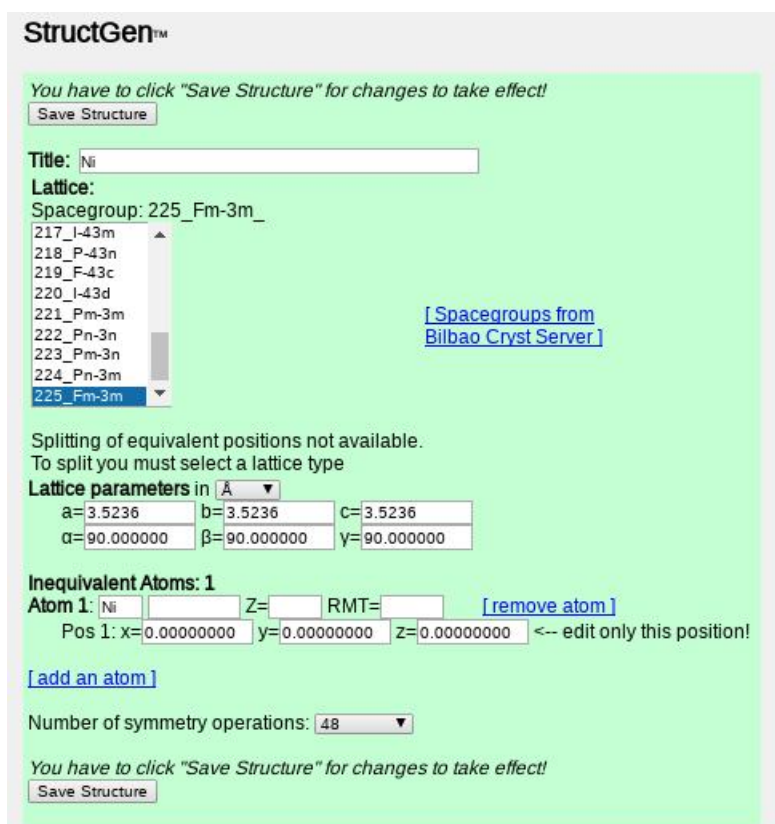


Рис. 1. Окно программы моделирования кристаллической структуры

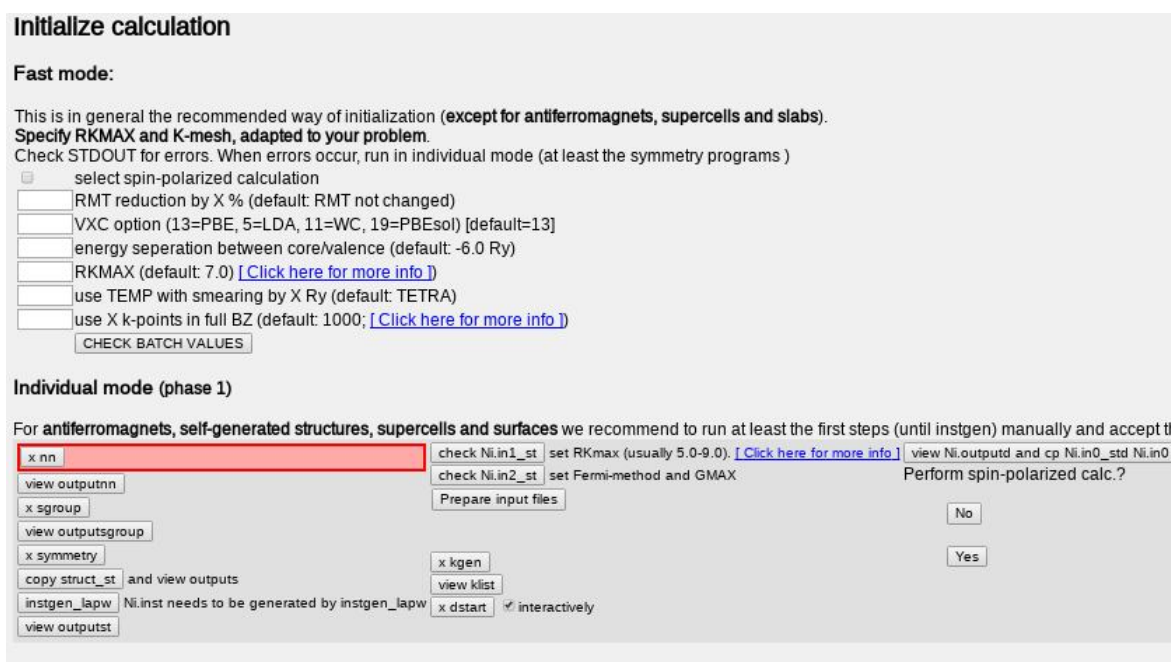


Рис. 2. Окно программы предварительных вычислений

После того, как исследуемая структура смоделирована, требуется выполнить линейную последовательность программ, которые образуют этап предварительных вычислений, подготавливающих непосредственный расчет электронной структуры. Они нужны для того, чтобы подготовить входные данные для SCF-цикла. На этапе инициализации программа уточняет кристаллическую структуру материала, определяет его точечную и пространственную группы симметрии, рассчитывает атомную и начальную кристаллическую электронные плотности. Именно на этапе инициализации производится выбор метода, которым будет проводиться расчет (APW или LAPW), функционал, аппроксимирующий обменно-корреляционную энергию электронов в кристалле (LDA, GGA, mBJ и др.), сетку точек зоны Бриллюэна, в которых будет производиться расчет, и другие необходимые входные параметры.

Следующим важным этапом является цикл самосогласования электронной плотности. На этом этапе программа решает уравнение Шредингера-Кона-Шэма для исследуемой системы. Согласно теории функционала плотности, существует взаимно однозначное соответствие между волновой функцией многоэлектронной системы и электронной плотностью основного состояния $\rho(\mathbf{r})$. Отсюда следует, что полная энергия основного состояния системы является функционалом плотности $\rho(\mathbf{r})$. Электронная плотность, соответствующая основному состоянию системы, должна минимизировать полную энергию. Из этого условия вытекает система самосогласованных одноэлектронных уравнений для описания основного состояния многоэлектронной системы. В цикле самосогласования решается уравнение Шредингера-Кона-Шэма, которое в случае кристалла имеет вид

$$\hat{H}\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

где гамильтониан $\hat{H} = -\nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r})$, n – номер энергетической зоны, \mathbf{k} – волновой вектор, $V_{eff}(\mathbf{r})$ – эффективный одноэлектронный кристаллический потенциал, обладающий периодичностью решетки Бравэ рассматриваемого кристалла. Для того, чтобы решить это уравнение в кристалле, необходимо знать кристаллический потенциал $V_{eff}(\mathbf{r})$, для чего в свою очередь нам необходима электронная плотность $\rho(\mathbf{r})$. Последнюю мы можем получить, зная волновые функции $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Но сами волновые функции не известны, пока не решено уравнение Шредингера. Эта проблема решается следующим образом.

По завершении этапа инициализации в цикл самосогласования передается некоторое начальное значение электронной плотности ρ , сгенерированное ранее как суперпозиция электронных плотностей отдельных атомов. Затем на первом этапе цикла самосогласования решается уравнение Пуассона

$$\nabla^2 V_c = -8\pi\rho,$$

из которого находится кулоновская часть V_c кристаллического потенциала. Обменно-корреляционный потенциал V_{xc} определяется по одной из предлагаемых аппроксимаций в рамках приближения LDA или GGA. Полный потенциал

$V_{eff}(\mathbf{r})$ вычисляется как сумма кулоновского V_c и обменно-корреляционного V_{xc} вкладов. Далее определяются собственные значения и собственные функции для валентных состояний, для чего решается уравнение Шредингера-Кона-Шэма с полученным значением $V_{eff}(\mathbf{r})$. Из найденных волновых функций вычисляется валентная электронная плотность, а после этого вычисляются остовные состояния и остовная электронная плотность. На завершающем этапе полученные электронные плотности остовных, полуостовных и валентных состояний складываются в новую полную электронную плотность, значение которой сравнивается со значением входной плотности. Если разница в значениях плотностей больше, чем некоторая предварительно заданная величина, определяющая точность расчета, то новая плотность передается на первый этап и цикл повторяется вновь. В качестве критерия сходимости также можно использовать величину полной энергии, приходящейся на элементарную ячейку. Итерации цикла будут повторяться до тех пор, пока не будет достигнуто требуемое значение точности. Затем происходит выход из цикла и можно проводить расчеты интересующих свойств исследуемого материала.

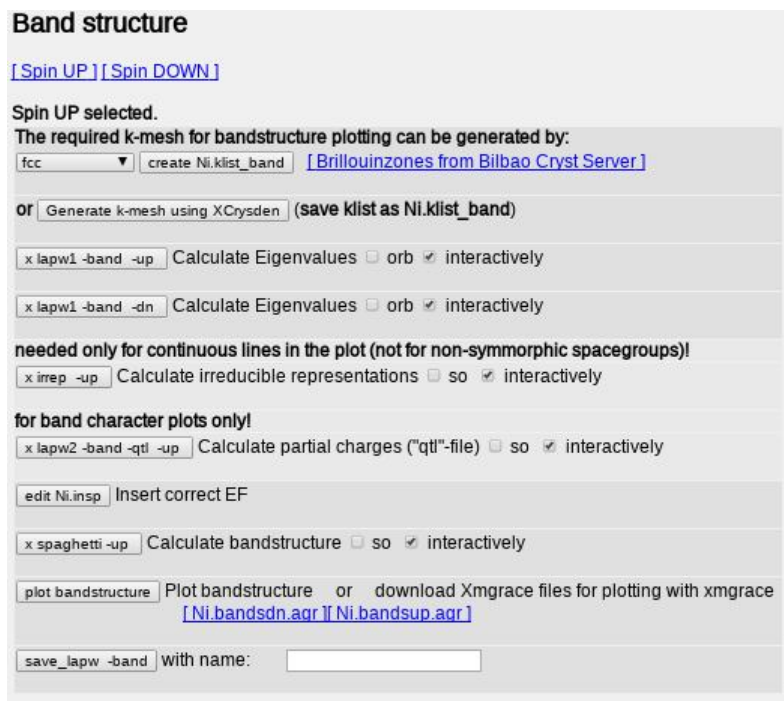


Рис. 3. Окно программы расчета зонной структуры

В качестве примера работы программного пакета рассмотрим расчет зонной структуры (рис. 3) и плотностей электронных состояний (рис. 4) ГЦК-никеля, который содержит одну формульную единицу и имеет пространственную группу симметрии $Fm\bar{3}m$ с параметром ячейки $a = 3.5236 \text{ \AA}$ [7].

Исходя из проведенных нами расчетов в пакете WIEN2k, мы заключили, что приближение обобщенного градиента плотности даёт наиболее точные результаты по сравнению с приближением локальной спиновой плотности, поэтому для моделирования нами был выбран обменно-корреляционный функ-

ционал PBE-GGA. Этот же функционал использовался в недавних работах по исследованию различных структур на основе ОЦК-железа [8] и продемонстрировал отличные результаты.

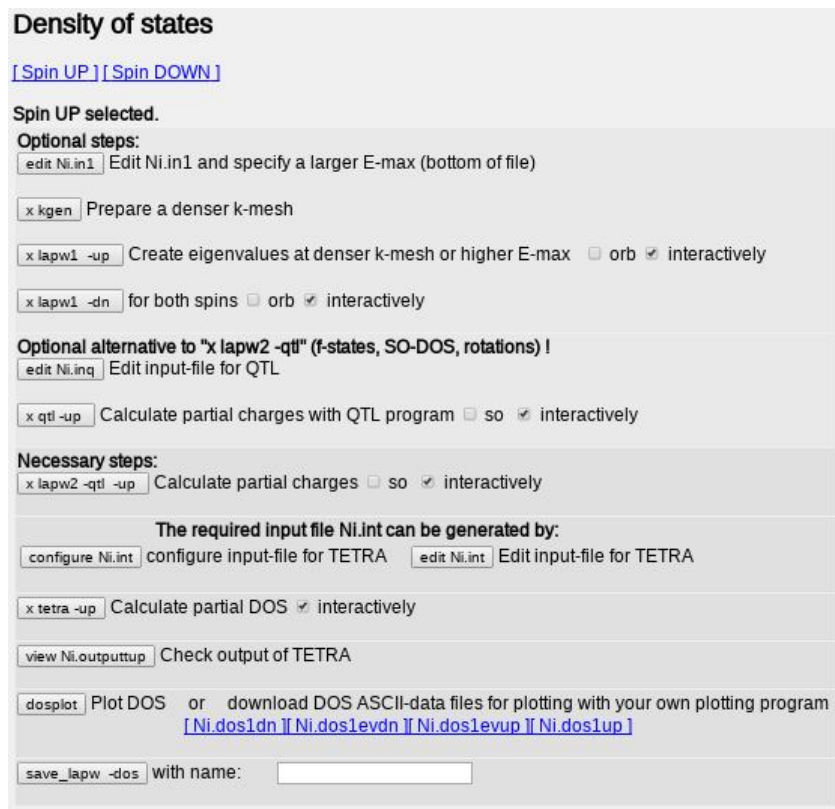


Рис. 4. Окно программы расчета плотностей электронных состояний

Из документации к программному пакету WIEN2k известно, что количество \mathbf{k} -точек нужно уменьшать с увеличением размера моделируемой системы. Исходя из того, что элементарная ячейка рассчитываемой структуры имеет относительно малые размеры, нами было выбрано 10000 \mathbf{k} -точек, что позволило получить результаты высокой точности при минимальных временных затратах.

Что касается количества базисных функций, оно должно выбираться из условия, что $R_{mt} \times K_{max}$ должно находиться в пределах от 3 до 10. Значение $R_{mt} \times K_{max}$ выбирается исходя из длины связи, чем меньше длина связи – тем меньшее значение нужно брать. Так, например, для водорода отлично подойдет значение $R_{mt} \times K_{max}$, равное 3. Для никеля наиболее подходящее значение – 8.

На рис. 5 представлена рассчитанная зонная структура ГЦК-никеля как для спина вверх, так и для спина вниз. На рис. 6. приведена полная плотность состояний для атомов железа (со спином вверх и со спином вниз). Во всех случаях уровень Ферми принят за начало отсчета. Анализ парциальных плотностей состояний показывает, что основной вклад дают d -состояния, что соответствует экспериментальным данным. Также было получено значение магнитного момента ($0.63 \mu_B$), которое достаточно точно совпадает с литературным ($0.60 \mu_B$) и свидетельствует о качестве выполненных расчетов.

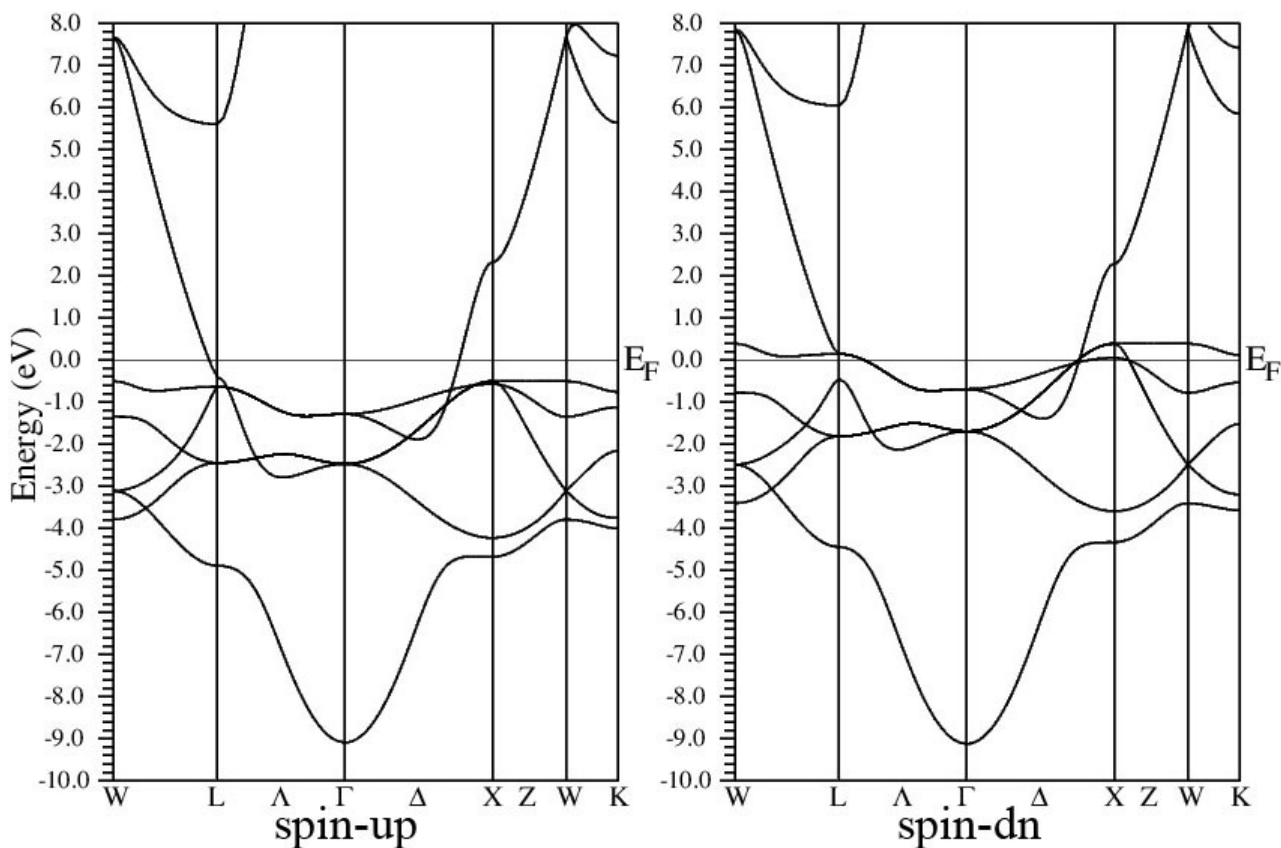


Рис. 5. Зонная структура ГЦК-никеля, рассчитанная в WIEN2k

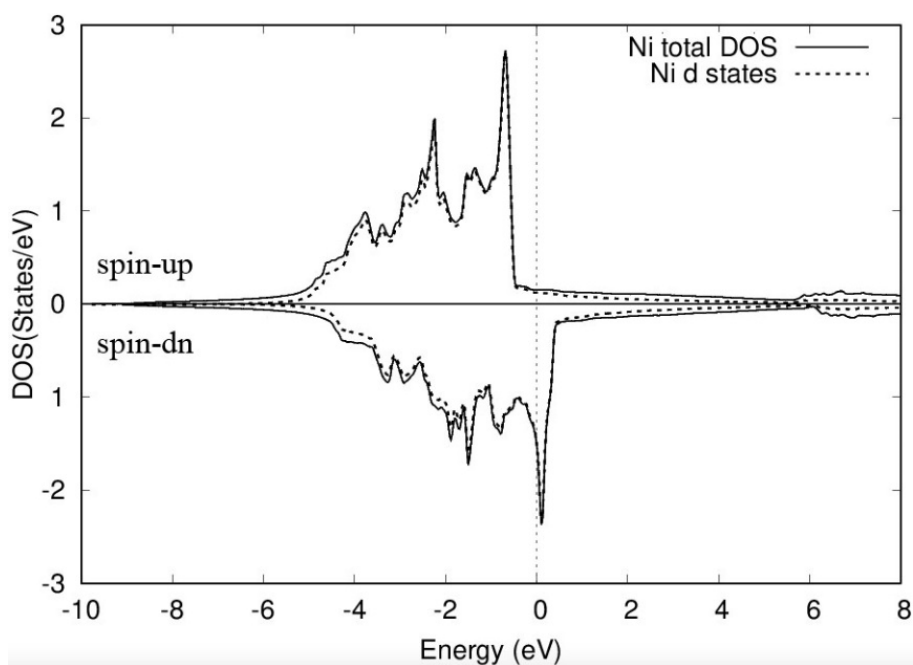


Рис. 6. Полная и парциальная DOS, рассчитанные в WIEN2k

Таким образом, можно заметить отличное согласие результатов расчетов с данными, полученными экспериментальным путем. Материалы, полученные в данной работе, могут быть использованы для анализа электронного строения структур на основе никеля.

Литература

1. Kurganskii S. I., Pereslavl'tseva N. S. Valence-band structure features of nickel disilicide films // *Physica status solidi (b)*. – 2000. – V. 218. – № 2. – P. 431-439.
2. Kurganskii S. I., Pereslavl'tseva N. S., Levitskaya E. V., Yurakov Yu. A., Rudneva I. G., Domashevskaya E. P. Electronic structure of rhenium disilicides // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2002. – V. 14. – № 27. – P. 6833- 6839.
3. Kurganskii S. I., Pereslavl'tseva N. S., Levitskaya E. V., Yurakov Yu. A. Electronic structure of molybdenum disilicide // *Physica status solidi (b)*. – 2002. – V. 233. – № 2. – P. 306-311.
4. Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Курганский С. И. Электронная структура и спектральные характеристики Zn-замещенных клатратных силицидов // *Физика и техника полупроводников*. – 2011. – Т. 45. – № 6. – С. 729-739.
5. Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Курганский С. И. Электронная структура Zn-замещенных германиевых клатратов // *Физика и техника полупроводников*. – 2009. – Т. 43, № 5. – С. 590-594.
6. Schwarz K., Blaha P., Madsen G. K. H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences // *Computer Physics Communications*. – 2002. – Т. 147. – № 1-2. – P. 71-76.
7. Kaneko T., Kanomata T. 2.5 Ni // *Magnetic Properties of d-Elements, Alloys and Compounds Under Pressure*. – Springer Berlin Heidelberg. – 2014. – P. 18-21.
8. Потуданский Г. П., Курганский С. И. Компьютерное моделирование электронной структуры и рентгеноспектральных характеристик α -железа // *ИНФОС-2017*. – 2017. – С. 121-127.

FIRST-PRINCIPAL COMPUTER SIMULATION IN THE WIEN2K SOFTWARE ON THE EXAMPLE OF FCC-NICKEL

G. P. Potudansky¹, N. S. Pereslavl'tseva², E. I. Maksimova²

¹Voronezh State University

²Voronezh State Technical University

In this paper, we give a brief description of the operation principle of the WIEN2k software package, which can be used to perform calculations of electronic structures of various types of materials, including for carrying out *ab initio* calculations in condensed matter physics. The application of this software package is demonstrated using the example of calculations of the band structure and densities of electronic states of fcc nickel.

Keywords: WIEN2k, PBE-GGA, band structure, FP-LAPW method, nickel, density of electronic states.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО ЗНАЧЕНИЯ АДГЕЗИИ РЕМОНТНЫХ СОСТАВОВ ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ АЭРОДРОМНЫХ ПОКРЫТИЙ

В. А. Кочетков, Е. В. Макаров, А. Ю. Пузаков

ВУНЦ ВВС «ВВА имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж
puzakow@list.ru

Рассматривается напряженно-деформированное состояние отремонтированных композитными ремонтными составами аэродромных плит на упругом основании под воздействием колесных нагрузок. Моделирование проводится численным методом с помощью прикладных программ, основанных на методе конечных элементов. Сцепление между ремонтным составом и бетоном плиты реализуется с помощью предложенной дискретной модели адгезии.

Ключевые слова: отремонтированная аэродромная плита, ремонтный состав, адгезия.

При эксплуатации жестких аэродромных покрытий под воздействием эксплуатационных нагрузок и природно-климатических факторов аэродромные плиты получают различные повреждения. Одним из распространенных типов повреждений являются выбоины. Причиной образования выбоин может быть недостаточная прочность поверхностного слоя на отдельных участках покрытия, а также дальнейшее развитие уже имеющихся поверхностных разрушений в результате воздействия часто повторяющихся динамических (ударных) нагрузок от колес воздушных судов [1]. В ходе ремонтных мероприятий эти повреждения устраняются с помощью применения различных ремонтных смесей.

На практике используются ремонтные составы с различными физическими характеристиками. Одной из важнейших характеристик является адгезия материала к бетону. При недостаточной адгезии в процессе эксплуатации ремонтный состав отслаивается и образуется трещина на границе материалов. Таким образом, адгезия ремонтного состава напрямую влияет на жизнеспособность отремонтированной конструкции. Для определения минимально требуемой величины адгезии и динамики изменения напряженно-деформированного состояния отремонтированной конструкции была проведена серия численных экспериментов в программном комплексе Лира [2], реализующем метод конечных элементов.

Для моделирования сцепления между двумя материалами была реализована дискретная модель адгезии с предельным усилием (рис. 1).

В ней адгезия моделируется с помощью двухузловых конечных элементов односторонних связей с предельным усилием, жесткость и предельное усилие в которых определяется только свойствами ремонтного состава. Предельное усилие вычисляется по заданному пределу прочности сцепления и размерам конечного элемента:

$$N = c \cdot A, \quad (1)$$

где c – прочность сцепления с бетоном, МПа; A – "грузовая" площадь, приходящаяся на одну связь.

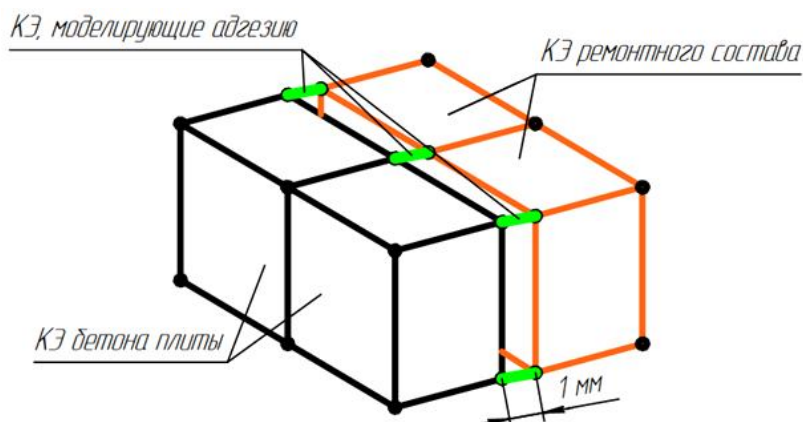


Рис. 1. Дискретная модель адгезии с предельным усилием

Прочность сцепления с бетоном принимается по заявленным физико-механическим характеристикам используемого ремонтного материала. "Грузовая" площадь зависит от размера конечного элемента бетона (ремонтного состава) и количества связей (рис. 2).

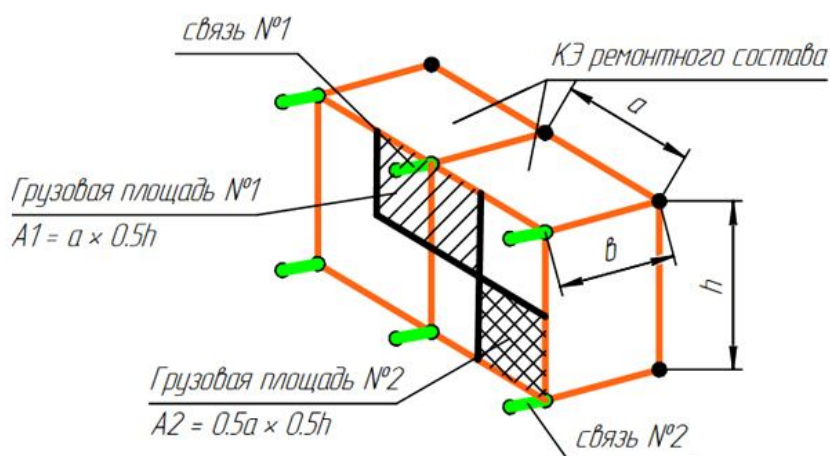


Рис. 2. Определение "грузовой" площади для связи с предельным усилием

Расчетная схема представляет собой отремонтированную монолитную аэродромную плиту с фиксированными геометрическими параметрами (рис. 3) из бетона класса В25. Плита расположена на упругом основании с коэффициентом постели 80 МН/м^3 . От горизонтальных перемещений плита шарнирно закреплена по контуру. Отремонтированный участок расположен по центру плиты. Его геометрические размеры приняты постоянными для всех численных экспериментов и составляют $60 \times 60 \times 4 \text{ см}$. Предел сцепления (адгезии) варьируется от $0,5 \text{ МПа}$ до 3 МПа с шагом $0,5 \text{ МПа}$. В качестве нагрузок приняты собственный вес конструкции, который вычисляется автоматически на основании данных о геометрии и объемных весах материалов, и статические нагрузки от колеса ос-

новой опоры самолета. Вертикальная составляющая равномерно распределенной по площади отпечатка радиусом 0,195 м полезной нагрузки составила 1 МН/м², горизонтальная составляющая – 0,5 МН/м².

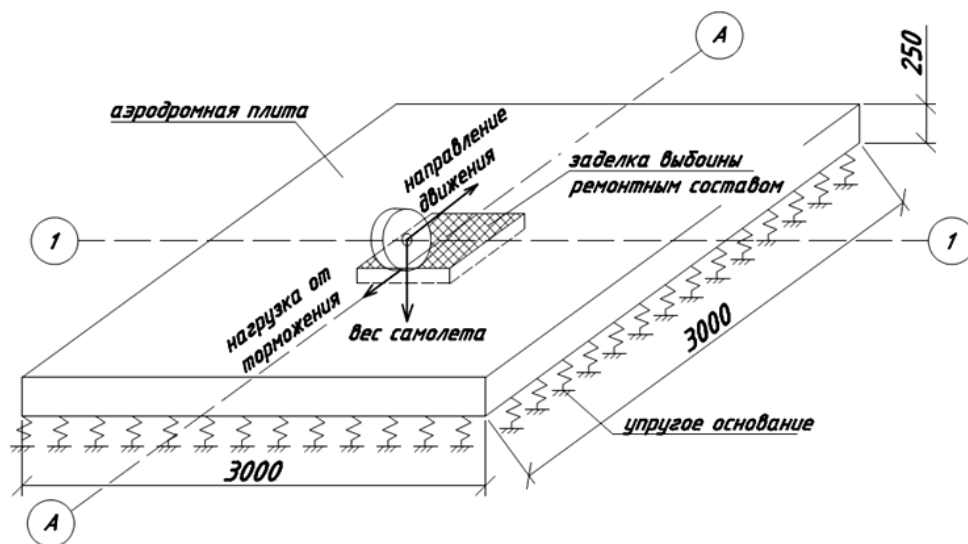


Рис. 3. Расчетная схема

Физико-механические характеристики используемых материалов представлены в таблице.

Физико-механические свойства материалов

| Материал | Модуль упругости E , ГПа | Коэффициент Пуассона, ν | Объемный вес γ , т/м ³ | Предельное сцепление c , МПа |
|------------------|----------------------------|-----------------------------|--|--------------------------------|
| Бетон В25 | 30 | 0,2 | 2,5 | – |
| Ремонтный состав | 20 | 0,2 | 2,5 | 0,5 ÷ 3 |

В результате расчетов были получены поля перемещений и напряжений элементов конструкции, главные и максимальные касательные напряжения (рис. 4).

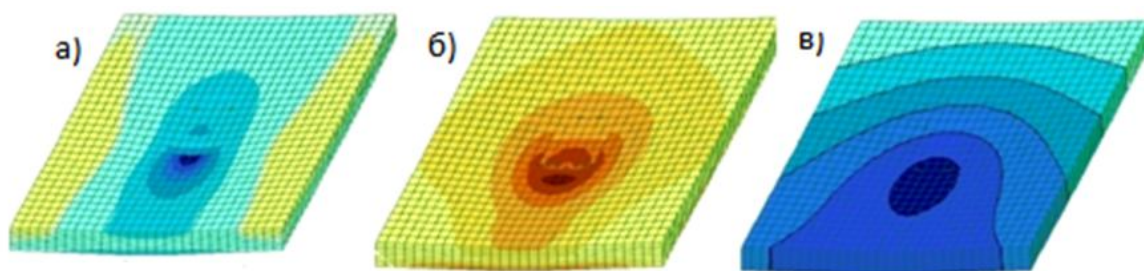


Рис. 4. Изополя: а – нормальных напряжений σ_x ; б – наибольших касательных напряжений τ_{xy} ; в – вертикальных перемещений

По результатам проведенных экспериментов построены графики зависимостей рассматриваемых величин от силы сцепления, варьируемой в пределах от 0,5 МПа до 3 МПа (рис. 5-7).

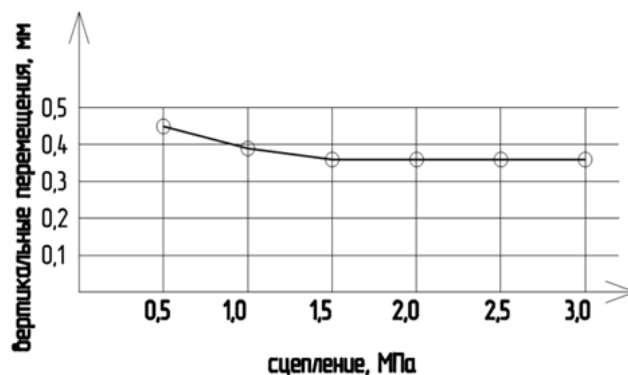


Рис. 5. Зависимость максимальных прогибов от адгезии ремонтного состава к бетону

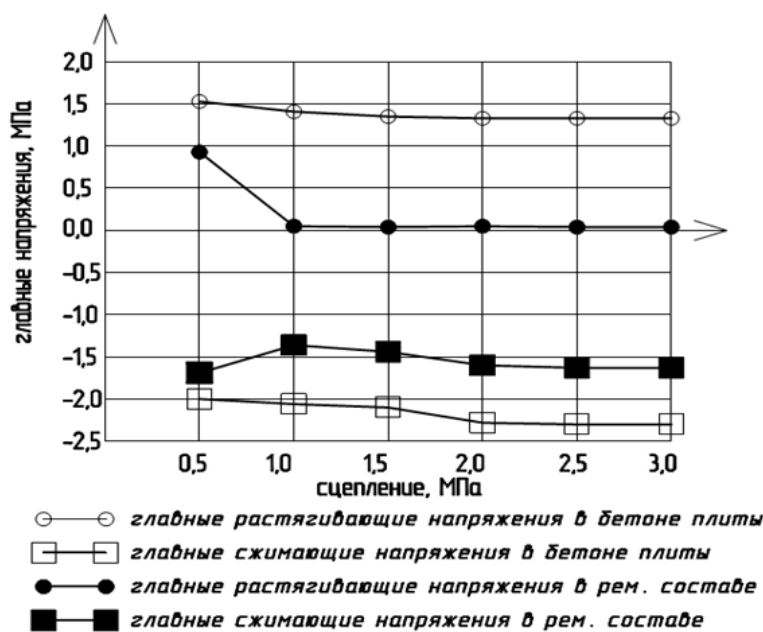


Рис. 6. Зависимости главных напряжений и максимальных касательных напряжений в бетоне плиты от адгезии ремонтного состава к бетону

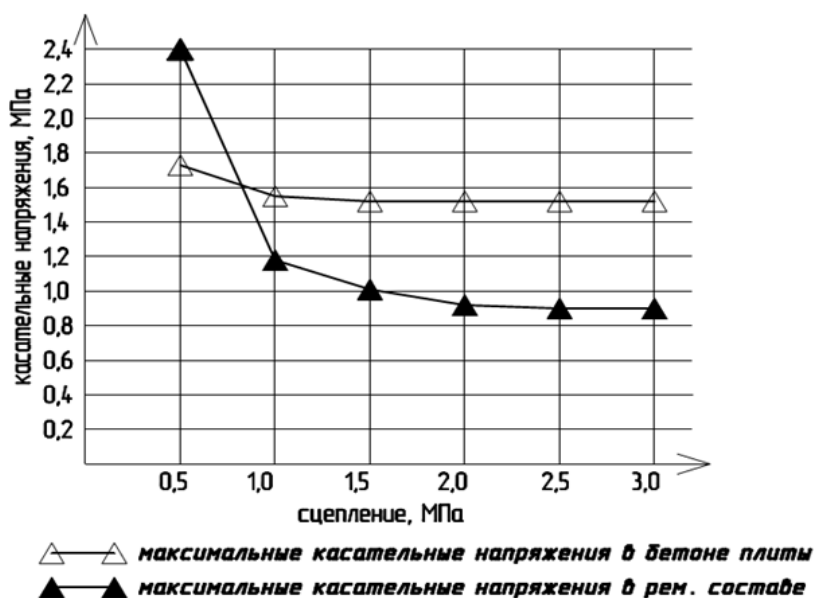


Рис. 7. Зависимость главных напряжений и максимальных касательных напряжений в ремонтном составе от адгезии ремонтного состава к бетону

На представленных графиках можно выделить два характерных участка: работа плиты с образованием трещины на границе материалов и работы плиты как монолитной конструкции. При низком значении предельного сцепления (до 1,5 МПа включительно) резко возрастают максимальные главные (растягивающие) и касательные напряжения и прогибы в плите. Изменения в напряженном состоянии бетона плиты незначительные, так как ремонтный состав и бетон работают несовместно.

При значении предельного сцепления более 1,5 МПа все параметры стабилизируются; в ремонтном составе растягивающие напряжения стремятся к нулю, так как он находится в сжатой зоне плиты.

Анализируя полученные данные можно сделать следующие выводы для заданного положения повреждения аэродромной плиты и нагрузках не более 120 кН на колесо основной опоры:

- предложенная методика моделирования отремонтированной плиты в программном комплексе "Лира" позволяет проанализировать поведение конструкции в упругой стадии и стадии трещинообразования;
- предел сцепления ремонтного состава для совместной работы с материалом конструкции должен быть не ниже 2 МПа;
- напряженно-деформированное состояние бетона плиты изменяется незначительно;
- материал ремонтного состава работает преимущественно на сжатие;
- после достижения достаточного сцепления (при котором не образуются трещины) дальнейшее его увеличение не приводит к изменению НДС.

Литература

1. Горецкий Л. И. Эксплуатация аэродромов: Учебник для вузов. – 2-е издание, перераб. и доп. – М.: Транспорт, 1986. – 280 с.
2. Программный комплекс для расчета и проектирования конструкций ЛИРА версия 9.0. Руководство пользователя. Книга 1. Основные теоретические положения. Некоторые рекомендации. – Киев, 2002. – 147 с.
3. Перельмутер А. В., Сливкер В. И. Расчетные модели сооружений и возможность их анализа. – Киев: Изд-во «Сталь», 2002. – 600 с.

DETERMINATION OF OPTIMAL VALUE OF ADHESION OF REPAIR COMPONENTS FOR RESTORATION OF THE AIRFIELD COATINGS

V. A. Kochetkov, E. V. Makarov, A. Yu. Puzakov

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

In the present paper, the stress-strain state of airfield plates on an elastic foundation repaired by composite repair structures under the influence of the wheel loads is considered. Simulation is carried out numerically with the help of application programs based on the finite element method. The cohesion between the repair composite and the concrete of the slab is realized by using the proposed discrete adhesion model.

Keywords: repaired airfield plate, repair composition, adhesion.

ОБОБЩЕННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПИСАНИЯ ВХОДНОГО ОБЪЕКТА ДЛЯ ЗАДАЧ РАЗМЕЩЕНИЯ

И. С. Кущева¹, Т. И. Сушко², Е. С. Хухрянская²

¹Воронежский государственный лесотехнический университет им. Г. Ф. Морозова

²ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
tane2020102010@mail.ru

В рассматриваемой статье предлагается математическая модель входного объекта, соответствующего проектируемому помещению, учитывающая все особенности современных планировок. Этот подход позволяет автоматически сгенерировать окно видимости проектируемого помещения для последующего заполнения его объектами.

Ключевые слова: геометрическое моделирование, оптимизация, укладка, размещение объектов.

В настоящее время в различных сферах производства существуют проблемы ресурсосбережения, связанные с задачами раскроя и упаковки. К таким задачам относятся задачи оптимального раскроя материала на заготовки, решаемые во многих отраслях промышленности; задачи компоновки грузов в контейнеры разнообразного вида; задачи распределения и т.д.

При сформулированном общем подходе [1] к решению каждая отрасль оперирует частными моделями, отражающими специфику предметной области. При автоматизированном проектировании интерьера в целом и напольного покрытия, в частности, необходимо описание входного объекта для размещения орнамента [2] различного типа (штучный паркет, плитка и т.п.).

Формально как задачу математического моделирования, процесс создания покрытия можно сформулировать следующим образом. Необходимо заполнить окно видимости сложной формы [3], соответствующее проектируемому помещению, двумерными геометрическими объектами, в общем случае, любой конфигурации, т.е. единичным раппортом регулярной укладки.

Задача формирования регулярного рисунка относится к классу задач так называемых упаковок/укладок, которые сводятся к плотному заполнению полосы фиксированной ширины бесконечной (полубесконечной) длины геометрически сложными элементами.

Современный интерьер отличается многообразием геометрических форм, и математическая модель входного объекта должна отражать множество возможных планировок. Анализируя все допустимые варианты конфигурации помещения как геометрического объекта, выделим три типа: выпуклый односвязный n -угольник; невыпуклый односвязный n -угольник; многосвязный n -угольник.

Рассмотрим математическое описание объекта первого типа, являющееся базовым для описания остальных двух видов. Частный случай – представляется изотетичным объектом. Выпуклый односвязный n -угольник можно записать в виде векторного множества входящих в него ребер [4]:

$$\bar{S} = \{\bar{R}_{in_j}\}_{j=1..n_{R_{in}}(\bar{S})},$$

где \bar{S} – входной объект для построения окна видимости заполнения орнаментом паркетной укладки, в рассматриваемом случае являющийся выпуклым односвязным n -угольником; $n_{R_{in}}(\bar{S})$ – количество углов/ребер в проектируемом помещении.

В свою очередь, любое ребро \bar{R}_{in} геометрического объекта \bar{S} представляется множеством точек \bar{P}

$$\begin{aligned} \bar{R}_{in} &= [\bar{p}_1, \bar{p}_2], \quad \bar{p}_1 \in \bar{P}, \quad \bar{p}_2 \in \bar{P}, \quad \bar{p}_1 \neq \bar{p}_2, \quad \{\bar{p}_1 + (\bar{p}_2 - \bar{p}_1)t, t \in [0,1]\}, \\ \bar{p} &= (x, y), x \in Z, y \in Z: \quad \bar{p} \in \bar{P}, \quad x = x(\bar{p}), \quad y = y(\bar{p}), \end{aligned}$$

где Z – множество целых чисел; t – параметр, задающий границы \bar{R}_{in} (вершины p_1, p_2).

Будем считать, что стороны этого n -угольника являются отрезками прямых. Это справедливо следующими соображениями: включения дуговых сегментов, как правило, имеют большой радиус кривизны и по технологии производства, например, паркетных работ такие сегменты можно аппроксимировать и заменить кусочно-линейной моделью.

Поскольку в рамках контура входного объекта \bar{S} данного типа не должно существовать двух идентичных ребер \bar{R}_{in_j} , ($j = 1, n_{R_{in}}(\bar{S})$), но возможно совпадение представлений входящих в их состав точек $\bar{p}_i(x_i, y_i)$ (в вершинах стыковки ребер), введем следующие отношения совпадения объектов:

$$\begin{aligned} \bar{p}_1 \equiv \bar{p}_2, \quad \bar{p}_1 \in \bar{P}, \quad \bar{p}_2 \in \bar{P} &\Leftrightarrow (x(\bar{p}_1) \equiv x(\bar{p}_2)) \wedge (y(\bar{p}_1) \equiv y(\bar{p}_2)), \\ \bar{R}_{in_1} \equiv \bar{R}_{in_2} &\Leftrightarrow (n_p(\bar{R}_{in_1}) = n_p(\bar{R}_{in_2})) \wedge (\forall i = \overline{1, n_{R_{in}}} : p_i(\bar{R}_{in_1}) \equiv p_i(\bar{R}_{in_2})). \end{aligned}$$

Для однозначного определения местоположения рассматриваемого объекта на плоскости необходимо задать базовую точку $p_0(x_{\min}, y_{\min})$, определяющую начальное положение внутренней системы координат. В качестве координат p_0 , по умолчанию выберем наименьшие значения по вертикали и горизонтали в рамках \bar{S} , т.е.

$$x_{\min} = \min_{i=1}^{n_{R_{in}}(\bar{S})} x_i, \quad y_{\min} = \min_{i=1}^{n_{R_{in}}(\bar{S})} y_i, \quad (1)$$

где x_i, y_i – координаты входящих в объект вершин p_i .

Для упрощения позиционирования контура проектируемого помещения сделаем следующее допущение. Пусть многоугольник, представляющий общий контур входного объекта, находится в верхней полуплоскости относительно базовой линии объекта. В качестве данной линии, которая указывает положение оси абсцисс внутренней системы координат, принимается ребро \bar{R}_{in_1} входного объекта \bar{S} .

Совмещение объекта с центром внутренней системы координат и базовой линией достигается применением стандартных аффинных преобразований (сдвиг, поворот и т.д.).

Окончательно, общий контур \bar{S}_{in} , соответствующий объекту рассматриваемого вида, можно описать следующим образом:

$$\bar{S}_{in} = \langle (\bar{S}), p_0 \rangle = \langle (\bar{R}_{in_j}, j = 1, n_{R_{in}}(\bar{S})), p_0 \rangle.$$

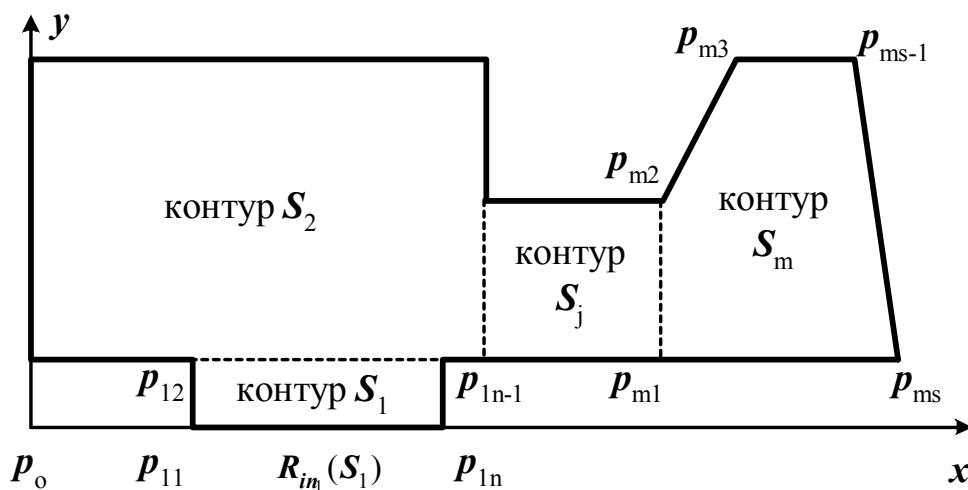
Окно видимости, являющееся уменьшенной копией общего контура входного объекта первого типа, сдвинутой относительно начала внутренней системы координат пропорционально величине фриза и/или линейки, представляется кортежем следующих элементов:

$$\bar{W}_{vis} = \langle (\bar{R}_{in_j}, j = 1, n_{R_{in}}(\bar{S})), p_0, \Delta p, (k_j, j = 1, n_{R_{in}}(\bar{S})) \rangle,$$

где \bar{W}_{vis} – окно видимости для объекта \bar{S} , рассматриваемого типа; p_0 – базовая точка, определяющая начальное положение собственной системы координат; Δp – сдвиг окна видимости относительно базовой точки, равный по абсолютной величине фриза и/или линейки; $k_j, (j = 1, n_{R_{in}}(\bar{S}))$ – поправочные коэффициенты, однозначно определяющие размеры ребер \bar{R}_{in_j} окна видимости \bar{W}_{vis} выпуклого n -угольника \bar{S} и зависящие от величины фриза или/и линейки (Δp):

$$k_j = 1 - \frac{2\Delta p}{R_{in_j}}, \quad j = 1, n_{R_{in}}(\bar{S}).$$

Входной объект второго типа (см. рис.) геометрически соответствует невыпуклому односвязному n -угольнику, и представляется в виде совокупности векторных множеств, входящих в него объектов первого типа, т.е. $\bar{S}_{in} = \bar{S}_1 \cup \bar{S}_2 \dots \cup \bar{S}_j \dots \cup \bar{S}_m$, где $\bar{S}_j, (j = \overline{1, m})$ – входной объект первого типа (выпуклый односвязный n -угольник).



Входной объект второго типа

Пусть для определенности многоугольник, представляющий общий контур входного объекта второго типа, находится в верхней полуплоскости относительно базовой линии объекта, под которой понимается ребро \overline{R}_{in_1} контура \overline{S}_1 . Начало относительной системы координат p_0 выбирается аналогично (1).

Таким образом, общий контур \overline{S}_{in} объекта рассматриваемого вида можно описать как

$$\overline{S}_{in} = \left\langle \left\{ \overline{S}_j \right\}_{j=1..m}, p_0 \right\rangle,$$

где $\left\{ \overline{S}_j \right\}_{j=1..m}$ – множество объектов первого типа; p_0 – базовая точка, определяющая начальное положение внутренней системы координат.

Окно видимости заполнения орнаментом паркетной укладки для контура второго типа, как и в предыдущем случае, зависит от наличия фриза и/или линейки и представляется следующим коротежем:

$$\overline{W}_{vis} = \left\langle (\overline{S}_j, j = 1, m), p_0, \Delta p, (k_{ji}, j = 1, m, i = 1, n_{R_m}(\overline{S}_j)) \right\rangle,$$

где \overline{W}_{vis} – окно видимости для объекта, рассматриваемого типа; p_0 – базовая точка, определяющая начальное положение относительной системы координат; Δp – сдвиг относительно базовой точки на величину фриза и/или линейки; $k_{ji}, j = 1, m, i = 1, n_{R_m}(\overline{S}_j)$ – матрица поправочных коэффициентов, корректирующих размеры ребер $\overline{R}_{in_{ji}}$ окна видимости \overline{W}_{vis} в зависимости от величины фриза или/и линейки Δp :

$$k_{ji} = 1 - \frac{2\Delta p}{R_{in_{ji}}}, j = 1, m, i = 1, n_{R_m}(\overline{S}_j).$$

Поскольку в рамках общего контура входного объекта \overline{S}_{in} данного типа и, соответственно, окна видимости не должно существовать двух идентичных объектов $\overline{S}_j, (j = 1, m)$ и ребер общего контура $\overline{R}_{in_i}(\overline{S}_j), (j = 1, m), (i = 1, n_{R_m}(\overline{S}_j))$, но возможно совпадение представлений входящих в их состав точек $\overline{p}_{ji}, (j = 1, m), (i = 1, n_{R_m}(\overline{S}_j))$ в вершинах общего контура, справедливы следующие отношения совпадения объектов:

$$\begin{aligned} \overline{S}_1 \equiv \overline{S}_2, \overline{S}_1 \subset \overline{S}_{in}, \overline{S}_2 \subset \overline{S}_{in} &\Leftrightarrow (n_{R_m}(\overline{S}_1) = n_{R_m}(\overline{S}_2)) \wedge \\ &(\forall i = 1, n_{R_m}(\overline{S}) : R_{in_i}(\overline{S}_1) \equiv R_{in_i}(\overline{S}_2)), \\ \overline{R}_{in_1} \equiv \overline{R}_{in_2} &\Leftrightarrow (n_p(\overline{R}_{in_1}) = n_p(\overline{R}_{in_2})) \wedge \\ &(\forall i = 1, n_{R_m} : p_i(\overline{R}_{in_1}) \equiv p_i(\overline{R}_{in_2})), \\ \overline{p}_1 \equiv \overline{p}_2, \overline{p}_1 \in \overline{P}, \overline{p}_2 \in \overline{P} &\Leftrightarrow (x(\overline{p}_1) \equiv x(\overline{p}_2)) \wedge (y(\overline{p}_1) \equiv y(\overline{p}_2)). \end{aligned} \quad (2)$$

Объект проектирования третьего типа определен как несвязный n -угольник, стороны которого являются прямыми.

Поскольку входной объект рассматривается с точки зрения заполнения его регулярной укладкой одного типа, в качестве несвязанных областей можно понимать все замкнутые контуры, отличные от основного орнамента, т. е. колонны, арки, включения элементов художественного паркета или области, заполненные другим типом укладки.

Предположим для определенности, что входной объект находится только в верхней полуплоскости относительно базовой линии, а его ребра не пересекаются. В качестве базовой линии объекта, также как и в предыдущем случае, выбирается ребро \bar{R}_{in_1} контура \bar{S}_1 .

Общий контур входного объекта данного типа соответствует одному из рассмотренных выше типов объектов (выпуклый или невыпуклый односвязный n -угольник) и будет описываться следующим образом:

$$\bar{S}_{in} = \left\langle \left\{ \bar{S}_i \right\}_{i=1..m}, p_0 \right\rangle, \quad \bar{S} = (\bar{R}_{in_j}, j = 1, \overline{n_{R_{in}}(\bar{S})}),$$

где m – количество объектов, являющихся выпуклыми односвязными n -угольниками ($m = 1$ для объекта первого типа).

Орнамент паркетной укладки будет генерироваться внутри общего контура объекта, исключая совокупность несвязных областей, объединяющихся во внутренний контур окна видимости

$$\bar{S}_{not} = \bar{S}_{out_1} \cup \bar{S}_{out_2} \dots \cup \bar{S}_{out_l} \dots \cup \bar{S}_{out_s} : \bar{S}_{out_l} \in S_{in}, l = \overline{1..m_{out}},$$

где \bar{S}_{not} – внутренний контур окна видимости, являющийся совокупностью несвязных контуров; m_{out} – число несвязных областей; $\bar{S}_{out_l}, l = \overline{1..m_{out}}$ – объект, являющийся исключением из общего контура входного объекта.

В свою очередь, любой \bar{S}_{out_l} состоит из множества характеризующих его контур ребер

$$\bar{R}_{out_i}(\bar{S}_{out_l}), l = \overline{1..m_{out}}, i = \overline{1..n_{R_{out}}(\bar{S}_{out_l})},$$

где $n_{R_{out}}(\bar{S}_{out_l})$ – число вершин контура \bar{S}_{out_l} .

Таким образом, окно видимости для входного объекта третьего типа можно представить в виде разности следующих множеств

$$\bar{W}_{vis} = \bar{S}_{in} \setminus \bar{S}_{not},$$

Окончательно, учитывая положение внутренней системы координат и наличие фриза и/или линейки, окно видимости можно представить следующим образом:

$$\bar{W}_{vis} = \left\langle (\bar{S}_{in} \setminus \bar{S}_{not}, p_0, \Delta p, (k_{ji}, j = 1, m, i = 1, n_{R_m}(\bar{S}_j))) \right\rangle. \quad (3)$$

Проанализировав полученные модели описания окна видимости, можно сделать следующий вывод, что математическая модель (3) является общей для всех рассматриваемых конфигураций проектируемого помещения. Действительно, при отсутствии \bar{S}_{not} , т.е. $m_{out} = 0$, вышеприведенная зависимость автома-

тически будет соответствовать окну видимости входного объекта второго типа. Если при этом $m = 1$, т.е. существует единственный выпуклый контур \bar{S} , то математическому описанию окна видимости входного объекта первого типа.

В рамках общего контура входного объекта \bar{S}_{in} и окна видимости этого типа так же не должно существовать двух идентичных объектов $\bar{S}_j, j = \overline{1, m}$ и ребер общего контура $\bar{R}_{in_i}(\bar{S}_j), j = \overline{1, m}, i = \overline{1, n_{R_{in}}}(\bar{S}_j)$, но возможно совпадение представлений входящих в их состав точек $\bar{p}_{ji}, j = \overline{1, m}, i = \overline{1, n_{R_{in}}}(\bar{S}_j)$ (в вершинах общего контура), для которых справедливы отношения совпадения объектов (2).

Описания исключений $\bar{S}_{out_l}, l = \overline{1..m_{out}}$, составляющих внутренний контур окна видимости также не должны дублироваться в пределах внутреннего контура, но возможно их частичное совпадение с объектами внешнего контура $\bar{S}_j, j = \overline{1, m}$ вдоль ломаной стыковки, поэтому отношения совпадения (2) справедливы и для них.

Общая математическая модель входного объекта (3) учитывает все возможные особенности современных планировок и позволяет сгенерировать окно видимости для заполнения объектами регулярной укладки.

Литература

1. Канторович Л. В., Горстко А. Б. Математическое оптимальное программирование. – М: Экономика, 1968. – 96 с.
2. Кущева И. С., Хухрянская Е. С. Проблемы комплексного проектирования паркетных работ // Математическое моделирование, компьютерная оптимизация технологий, параметров оборудования и систем управления: сб. науч. тр. – Воронежская гос. лесотех. академия. – Воронеж, 2005. – Вып.10. – С. 193-196.
3. Хухрянская Е. С., Харин В. Н., Кущева И. С. Унифицированное описание модели входного объекта для САПР паркетных работ // Системы управления и информационные технологии. – 2006. – №3 – С. 92-96.
4. Верещагин Н. К. Начала теории множеств. – М.: МЦНМО, 1999. – 128 с.

SUMMARIZED MATHEMATICAL MODEL OF DESCRIPTION OF THE INPUT OBJECT FOR PLACEMENT TASKS

I. S. Kuscheva¹, T. I. Sushko², E. S. Khukhryanskaya²

¹Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G. F. Morozov

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

A mathematical model of the input object is proposed in this article. It fully adjusts to the projected space and takes into account all the features of modern design. This approach allows automatic generation of a window of visibility of the projected room for subsequent objects placement.

Keywords: geometric modeling, optimization, layout, object placement.

ОПТИМИЗАЦИЯ ЛИТНИКОВО-ПИТАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ В ПРОГРАММЕ LVMFlow

Т. И. Сушко, И. И. Чернышев, Т. В. Пашнева, С. В. Попов

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

Работа посвящена повышению технологического выхода годного за счет внесения изменений в конструкции литниково-питающей системы в наиболее затратном с точки зрения литья технологическом процессе – литье по выплавляемым моделям.

Ключевые слова: технологический выход годного, литниково-питающая система, микропористость.

Одним из важных и проблемных вопросов в литейной практике является анализ факторов и причин, приводящих к некачественным отливкам с дефектной структурой, поэтому на предприятиях нужны совмещенные знания опытного технолога и экспертной оценки, которую можно провести, используя САД/САЕ-системы. Данные технологии позволяют предприятиям как снизить себестоимость выпускаемых изделий, так и избежать системных ошибок производства [1]. Причина этого – специфическая сложность процессов формирования отливки в случае метода литья по выплавляемым моделям (ЛВМ) и отсутствие универсального метода проектирования питания.

Цель данной работы – повышение технологического выхода годного (ТВГ) за счет внесения изменений в конструкции литниково-питающей системы (ЛПС) в наиболее затратном с точки зрения литья технологическом процессе – ЛВМ. Результаты по наличию дефектов (их уменьшению или соответствие допустимым) можно проверить путем компьютерного моделирования в среде СКМ LVMFlow. Применение специализированных объектно-ориентированных пакетов в литейном производстве позволяет:

- снизить роль и затраты натурального эксперимента;
- изготавливать отливки высокого качества, сложной конфигурации;
- использовать большую номенклатуру сплавов;
- повышать профессиональный уровень технолога-литейщика.

Наиболее характерным представителем систем анализа ЛТ являются системы для имитационного моделирования происходящих в отливках физических процессов, с помощью которых на ЭВМ воспроизводятся тепловые, гидродинамические, усадочные, фильтрационные, деформационные и т.п. процессы. Как показывает опыт, универсальные моделирующие пакеты, использующие постановки тепловых, деформационных задач в общем виде, как правило, для решения литейных задач не являются пригодными, поскольку ЛП обладают рядом специфических особенностей, без учета которых решение будет неадекватно или слишком затруднено. Например, на границе «отливка-форма» в началь-

ный момент времени всегда имеются очень большие градиенты температур, что приводит к тому факту, что численное решение в универсальных пакетах либо начинает расходиться, либо требует очень большой длительности по времени за счет уменьшения шага расчета.

Объект исследования или разработки – отливка «Крышка» массой 3,4 кг, изготовленная из стали 10X18H11БЛ ГОСТ 977-88 и предназначенная для куттера пищевой промышленности. На рис. 1 представлена 3D модель отливки «крышка». Масса детали 3,2 кг, габаритные размеры 270×170×35 мм.

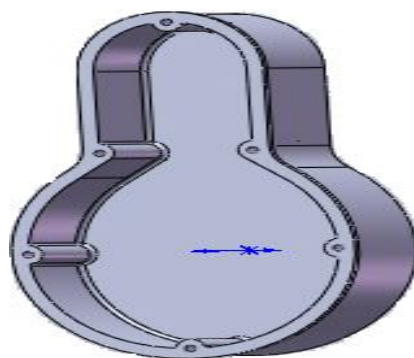


Рис. 1. 3D модель отливки «крышка»

Полученная модель, а также 3D модель отливки с ЛПС, необходима для расчетов в СКМ LVMFlow. ЛПС при литье по выплавляемым моделям строят из традиционных элементов: литниковых воронок, стояков, зумпфов и литниковых ходов, прибылей и коллекторов. Благодаря характерной для литья по выплавляемым моделям неразъемной форме данные конструктивные элементы располагают наиболее таким образом, чтобы максимально использовать объем формы.

Заводской вариант модельного блока с двумя отливками показан на рис. 2.

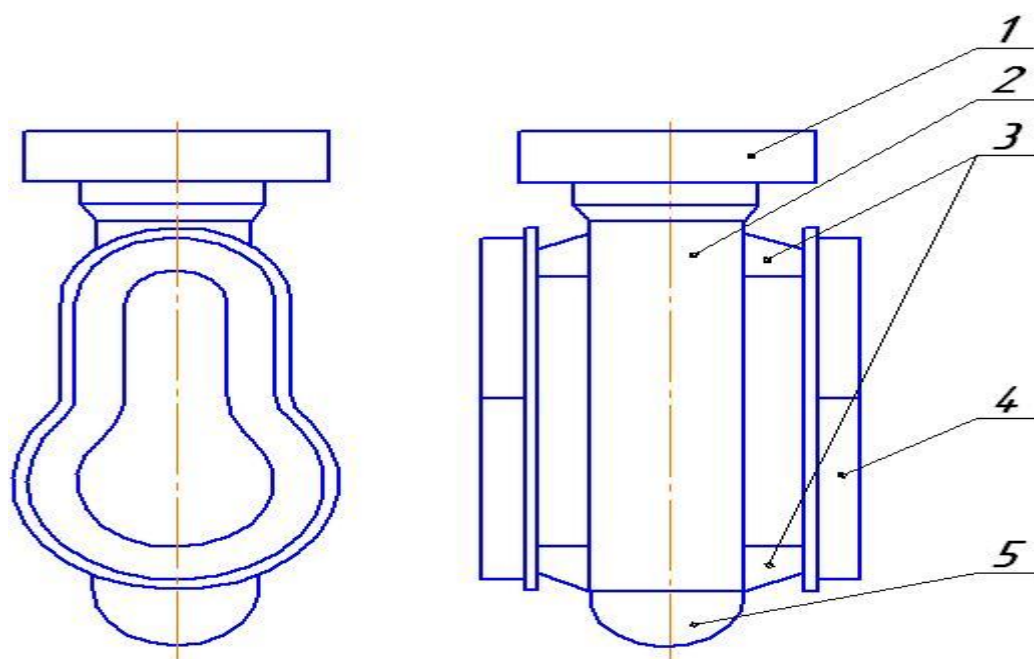


Рис. 2. Заводской вариант модельного блока с двумя отливками: 1 – литниковая чаша, 2 – стояк, 3 – питатель, 4 – отливка, 5 – зумпф

Модельный блок с результатами расчета по методу приведенных толщин представлен на рис. 3.

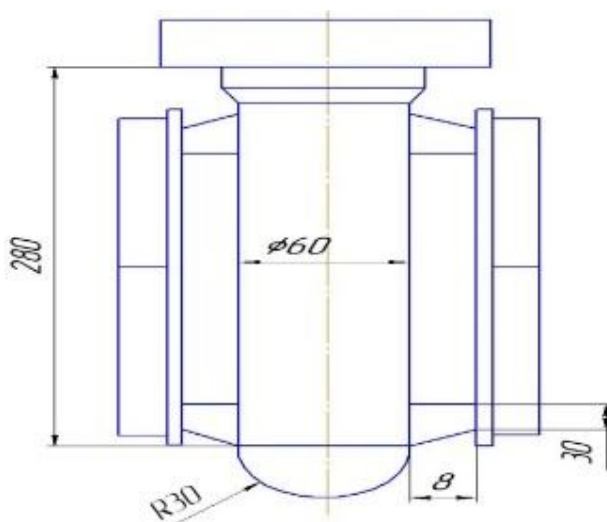


Рис. 3. Модельный блок базового варианта с результатами расчета по методу приведенных толщин

Модельный блок выбранного варианта с результатами расчета по методу приведенных толщин представлен на рис. 4.

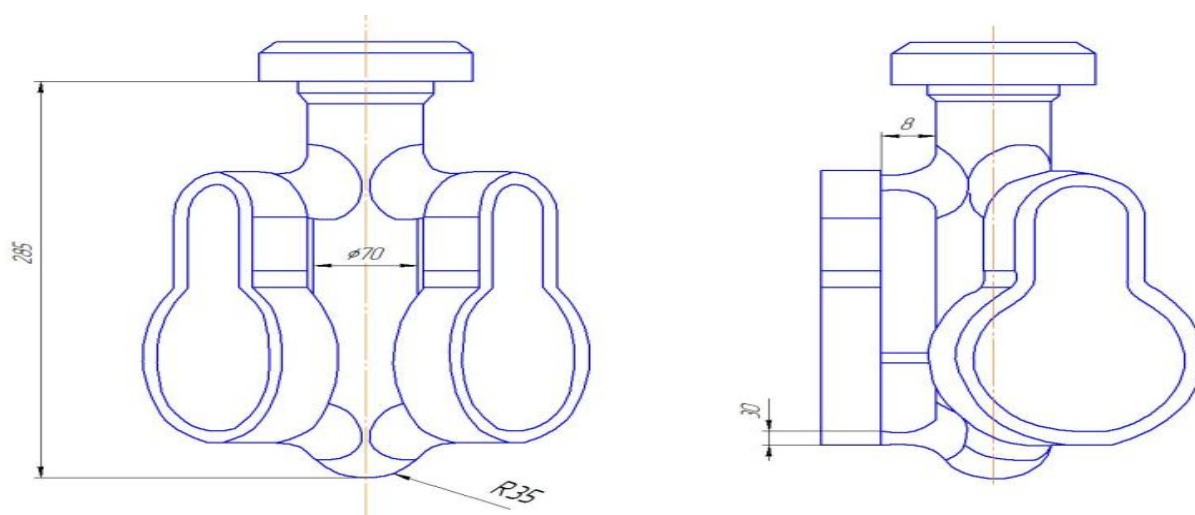


Рис. 4. Модельный блок выбранного варианта с результатами расчета по методу приведенных толщин

С помощью программы автоматизированного проектирования SolidWorks определена масса литниковой системы базового варианта, составляющая 17,7 кг. Технологический выход годного определяется по формуле

$$ТВГ = \frac{M_{отл}}{M_{отл} + M_{лс}} \cdot 100\%, \quad (1)$$

Рассчитан технологический выход годного при использовании заводского варианта и для выбранного с тремя отливками, масса ЛПС составляет 21,3 кг:

$$ТВГ = \frac{3,4}{8,85} \cdot 100 \% = 38 \%,$$

$$ТВГ = \frac{3,4}{7,1} \cdot 100 \% = 47 \%.$$

ТВГ находится в допустимых пределах для ЛВМ. 3D модель отливки заводского варианта с питанием и принятого для расчетов показан на рис. 5.

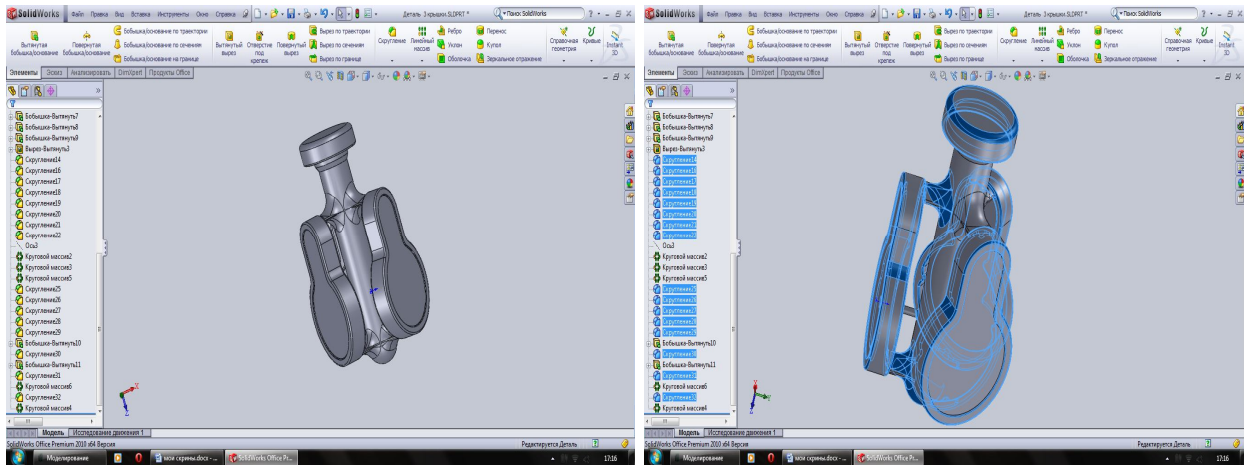


Рис. 5. 3D модели заводского и базового вариантов

Процесс заливки и кристаллизации в системе LVMFlow показан на рис. 6.

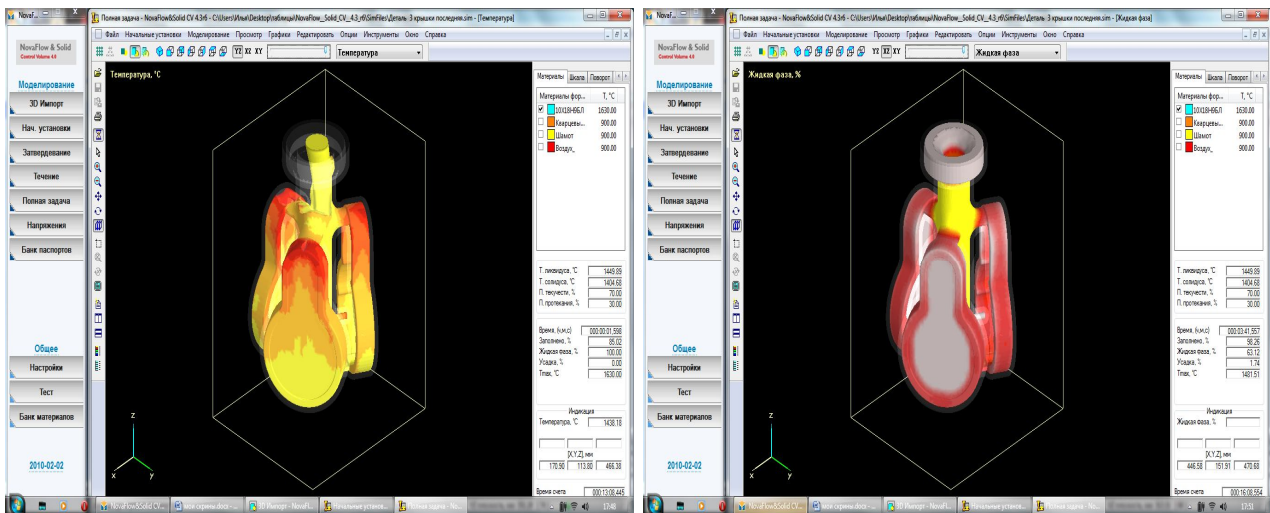


Рис. 6. Процесс заливки и затвердевания отливки

Для моделирования по заводскому варианту задавались граничные условия:

- способ заливки металла – отсутствие шамотной крошки;
- количество слоев – 9;
- температура металла перед заливкой – 1630 °С;
- температура формы перед заливкой – 900 °С;
- температура оболочки – 900 °С;
- время заливки – 6 секунд.

Моделирование в данном пакете показало наличие небольших дефектов (рис. 7).

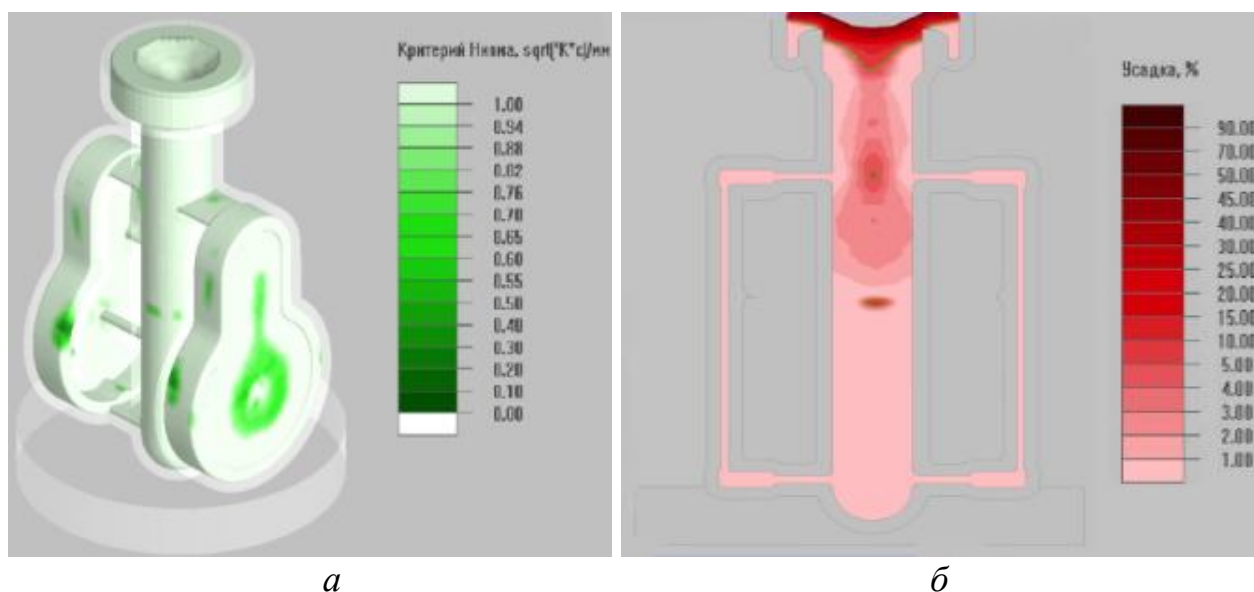


Рис. 7. Дефекты в отливке: *а* – критерий Нияма, *б* – усадка 2,0%

Такие же граничные условия задавались и при выбранном варианте, но с учетом повышенного ТВГ (рис. 8).

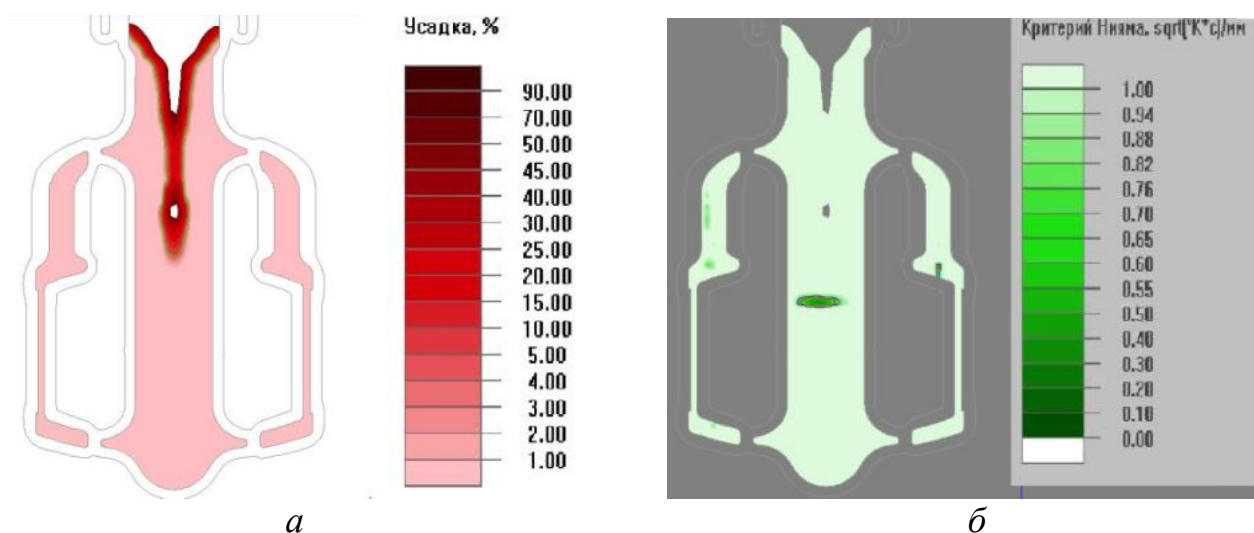


Рис. 8. Дефекты отливки: *а* – усадка 2,2%, *б* – критерий Нияма

Сравнивая результаты компьютерного моделирования при стандартных условиях технологического процесса, заметили уменьшение микропористости на внешней поверхности тонкой стенки отливки, при этом количество микропористости на внутренней стороне осталось практически неизменным, максимальный критерий Нияма составил 0,55 К·с/мм. Количество и процент дефектов усадочного происхождения увеличился, но весь выведен из тела отливки в систему ее питания. Таким образом, данный тип питания является наиболее эффективным с точки зрения ресурсосбережения.

Литература

1. Тихомиров М. Д. Обоснование выбора литейной моделирующей программы / М. Д. Тихомиров, С. В. Ермакова // *Материалы научно-практического семинара «Новые подходы к подготовке производства в современной литейной промышленности»*. – СПб: Фокад, 2004. – С. 37-41.
2. Козлов Л. Я. Производство стальных отливок: учебник для вузов / Л. Я. Козлов, В. М. Колокольцев, К. Н. Вдовин и др.; под ред. Л. Я. Козлова. – М.: МИСИС, 2003. – 352 с.
3. Турищев В. В. Моделирование литейных процессов: что выбрать? / В. В. Турищев // *CADmaster*. – 2005. – № 2. – С. 33-35.
4. Тихомиров М. Д. Обзор рынка прикладных пакетов для моделирования литейных процессов. Критерии выбора моделирующей системы / М. Д. Тихомиров, С. В. Ермакова // *Материалы научно-практического семинара «Новые подходы к подготовке производства в современной литейной промышленности»*. – СПб: СПбПУ, 2005. – С. 10-14.
5. Кропотин В. LVMFlow – интеллектуальный инструмент литейщика // *Литейное производство*, 2002. – № 9. – С. 29-30.
6. Баландин Г. Ф. Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердевание и охлаждение отливки / Г. Ф. Баландин. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1998. – 36 с.
7. Макаренко К. В. Использование критерия Ниямы для прогнозирования мест образования трещин в отливках / К. В. Макаренко, С. С. Кузовов // *Литейщик России*. – 2015. – № 1. – С. 18-22.
8. 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 техн. университета им. Г. И. Носова*. 2018. – Т. 16. – № 1. – С. 45-53.
9. 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 техн. университета им. Г. И. Носова*. – 2012. – № 1(37). – С. 26-29.

OPTIMIZATION OF THE GATHERING SYSTEM IN THE LVMFlow PROGRAM

T. I. Sushko, I. I. Chernyshev, T. V. Pashneva, S. V. Popov

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

The purpose of this work is to increase the technological yield of a suitable due to changes in the design of FSC in the most expensive process from the point of view of casting - LVM.

Keywords: technological yield, gating system, microporosity.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЙ ИЗМЕНЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРНО-ФАЗОВЫХ ПОЛЕЙ НА ОБРАЗОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ СТАЛЬНОЙ ОТЛИВКИ ПОСРЕДСТВОМ LVMFlow

Т. И. Сушко, И. И. Чернышев, Р. Ш. Караев, Т. В. Пашнева

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

В данной работе проводилось изучение влияния распределения температурно-фазовых полей в отливке на этапе затвердевания, моделирование образования усадочных дефектов в теле отливки, установление закономерностей образования дефектов, влияющих на качество и долговечность работы детали, посредством LVMFlow.

Ключевые слова: литейные дефекты, литье в песчано-глинистые формы, тело отливки.

Устранение литейных дефектов невозможно без анализа влияющих на их образование факторов [1]. Этими факторами (при литье в песчано-глинистые формы) могут быть состояние литейной формы, составы формовочных и стержневых смесей, конструкция отливки, марка выплавляемого сплава и условия его плавки, температура заливки металла и условия охлаждения отливки в форме.

Для того, чтобы не нарушить производственный цикл, необходимо оперативно выяснять причины образования литейных дефектов и вносить необходимые технологические коррективы. Современный подход технологического процесса получения качественных отливок базируется на использовании компьютерной техники и программ компьютерного моделирования, например, LVMFlow, позволяющей провести анализ влияния множества технологических факторов на качество литья за короткий промежуток времени и выявить некоторые механизмы их образования [2]. Моделирование процессов затвердевания отливок показывает, к чему приведет использование заданных или измененных технологических параметров того или иного способа литья. Так, например, в сплавах, охлаждающихся в интервале температур, растущие от поверхности отливки кристаллы вкрапляются в жидкий металл, формируя промежуточную двухфазную твердо-жидкую зону. Пока кристаллы растут, верхние слои жидкого металла и прибыли компенсируют усадку металла. По окончании роста и срастания кристаллов объемы жидкого сплава удаляются друг от друга, подвод с питанием металла прекращается. При затвердевании жидкого сплава в условиях мест изоляции образуются мелкие усадочные раковины-поры. Скопление мелких усадочных раковин называют усадочной пористостью [4]. Для их ликвидации в традиционной технологии изучают причины возникновения на натурном эксперименте, что занимает значительную часть времени отработки технологического процесса, а только затем разрабатывают эффективные меры по их уничтожению. Важной особенностью моделирующих систем является то, что все параметры моделируемой технологии пользователь-технолог в качестве входных

данных определяет самостоятельно. Моделируя разные варианты технологии, можно подобрать параметры, которые обеспечивают бездефектную и оптимальную технологию. Моделирующие системы дают возможность минимизировать затраты на стадии подготовки производства и освоения новой номенклатуры отливок за счет перебора возможных технологических решений в ходе имитационного эксперимента, без проведения затратных натурных экспериментов.

Цель данной работы – изучение влияния распределения температурно-фазовых полей в отливке на этапе затвердевания, моделирование образований усадочных дефектов в теле отливки, установление закономерностей образования дефектов, влияющих на качество и долговечность работы детали, посредством LVMFlow.

Для достижения цели установлены задачи: 1) построение в САД-системе 3D модели отливки для литья в ПГФ; 2) влияния динамики затвердевания в соответствии с распределением температурно-фазовых полей на скопление дефектов усадочной природы посредством моделирования.

Анализ процессов затвердевания с учетом изменения распределения температурно-фазовых полей детали «корпус» (рис. 1), материал изготовления детали – 35ХМЛ ГОСТ 977-88, выпускается в серийном производстве в филиале ФГУП «ГКНПЦ им. М.В. Хруничева» массой 36 кг, осуществляли посредством LVMFlow.

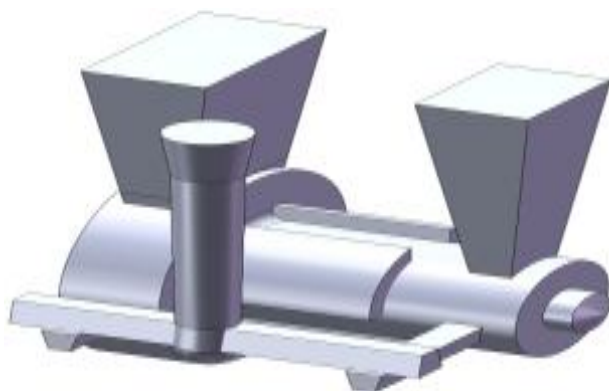


Рис. 1. 3D модель отливки с ЛПС

Отливку выбрали для исследований в связи с тем, что во время механической обработки проявляется брак в виде усадочной пористости. Сформировалась 3D модель отливки вместе с ЛПС в SolidWorks 2015, 3D модели литниковой системы, прибылей и стержня. Затем они были конвертированы в необходимый формат LVMFlow.

Граничные условия задавались следующие:

- температура заливки – 1620 °С;
- формовочная и стержневой – жидкостекольная смесь ФС ПСС с начальной температурой 20 °С;
- формовка – ручная, в двух горизонтальных полуформах по разьему, расчет велся при размере ячейки 7,00 мм, излучение в среду с температурой 20 °С кроме верхней плоскости формы;

– вид литья – гравитационное (заливка из ковша или печи), время заливки расплава в форму – 12 с.

Моделирование показало наличие тепловых узлов с вероятным местоположением дефектов усадочного происхождения в виде закрытой, открытых усадочных раковин и микропористости, свидетельствующей о недопустимом браке. Закрытая усадочная раковина располагается над стержнем, под прибылью. Значение усадки для данного расчетного узла достигает 35 %, что является недопустимым, так как в этом месте происходит соединение узлов детали, следовательно, возникают дополнительные напряжения (рис. 2). На рис. 3 представлено протекание затвердевания отливки за промежутки времени, учитываемые в программе.

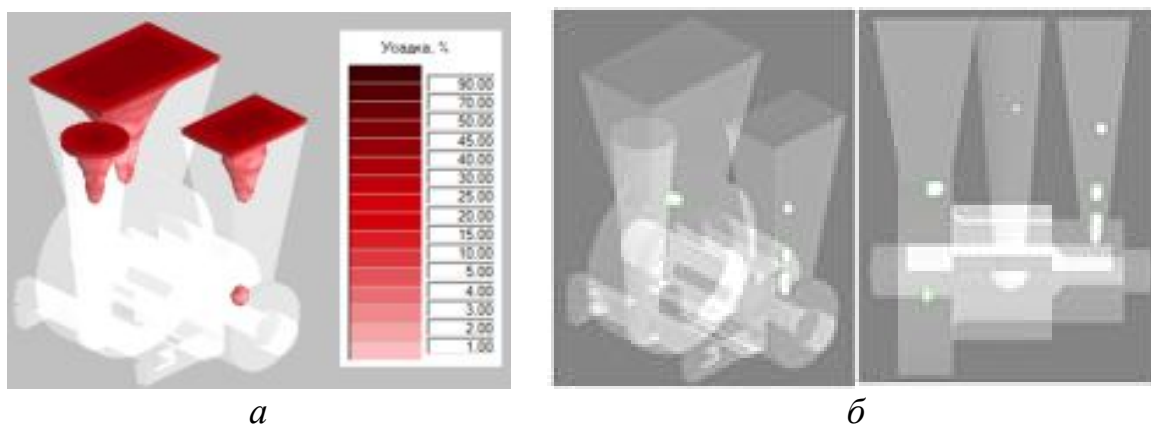


Рис. 2. Распределение усадки (а) и пористости (б) в теле отливки

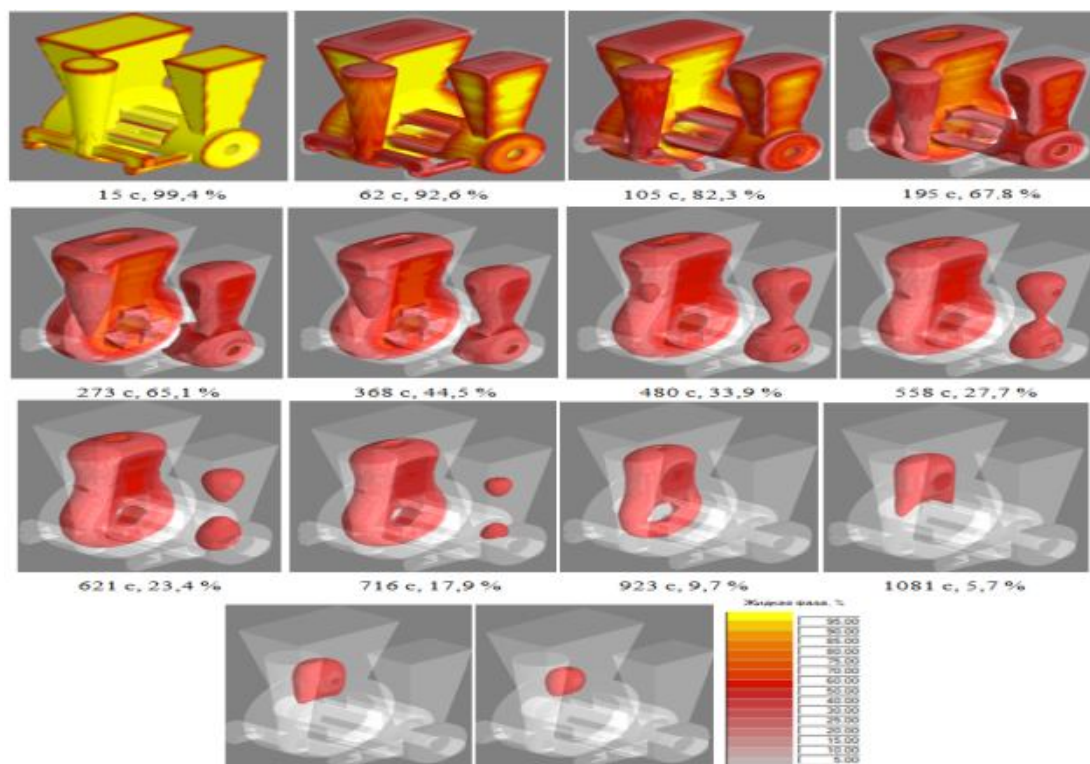


Рис. 3. Этапы затвердевания отливки, для каждого этапа приведено время затвердевания и количество жидкой фазы, %

О характере развития процесса затвердевания металла в отливке (считается, что гидродинамические процессы к этому моменту полностью завершены) судят по цветовой шкале рис. 3.

На основе результатов численного моделирования процесса затвердевания и распределения жидкого металла в сечении отливки (где были установлены виртуальные температурные датчики) построены кинетические зависимости жидкого, двухфазного и твердого металла от времени в прибыли, отливке и на границе прибыль-отливка (рис. 4).

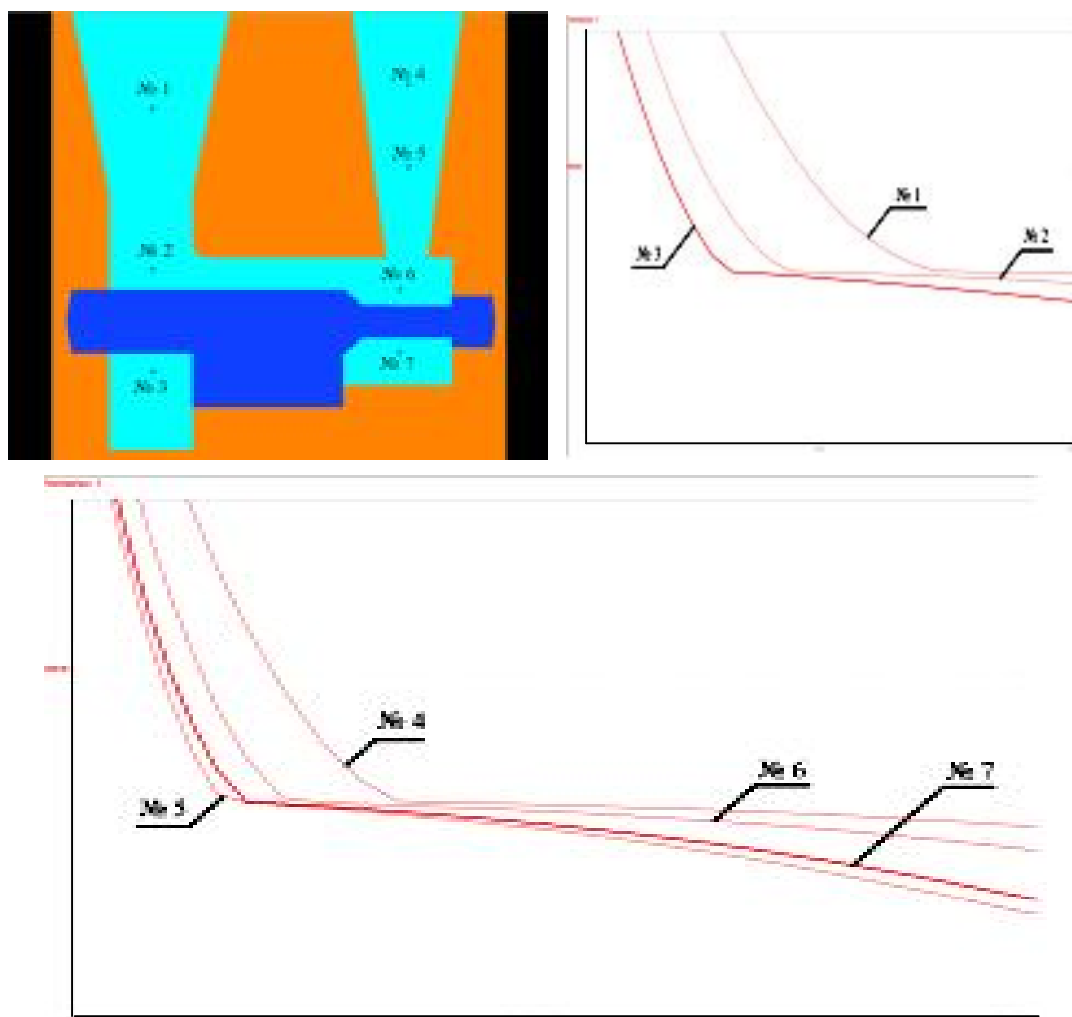


Рис. 4. Изменение доли жидкого, двухфазного и твердого металла в отливке

Анализируя графики для датчиков № 1, 2, 4, видно, что металл в точке 3, соответствующей месту под стержнем затвердевает быстрее, чем в точках 1 и 2, а расплав в точке 1, находящейся в прибыли затвердевает наиболее медленно.

Для данного теплового узла соблюдается принцип направленного затвердевания, то есть затвердевание происходит снизу вверх, что соответствует условию получения плотной структуры. Анализ кривых охлаждения для точек 4, 5, 6 и 7 (рис. 4) показывает нарушение принципа направленности затвердевания вследствие того, что металл в точке 5 охлаждается быстрее, нежели чем во всех точках данного термоузла (точки 4, 6 и 7). Имитационное распределение тем-

пературно-фазовых полей указывает на разрыв питания в подприбыльной области отливки во время кристаллизации расплава, поэтому сплав в нижней части прибыли затвердевает быстрее, чем под прибылью и в ее верхней части, т.е. прибыли. В результате прекращения питания на одном из этапов затвердевания под прибылью образуется закрытая усадочная раковина. Таким образом, возможной причиной образования усадочных дефектов в отливке является нарушение принципа направленного затвердевания из-за преждевременного затвердевания металла в прибыли, что приводит к неравномерному питанию металлом отливки.

Литература

1. Воронин Ю. Ф. Атлас литейных дефектов. Черные сплавы / Ю. Ф. Воронин, В. А. Камаев. – М.: Машиностроение – 1, – 2005. – 328 с.
2. Сушко Т. И. Исследование влияния технологических факторов на получение качественных отливок с экзотермическим обогревом посредством СКМ LVMFlow / Т. И. Сушко, И. Н. Петров, И. Г. Руднева, Т. В. Пашнева // Материалы IX Международной конференции “Achievement of high school-2013”, 17-25 November 2013, том 44, “Технологии”, София, “БялГрад-БГ”, ООД 2013, с. 12-17.
3. Сушко Т. И. Диагностика литейных дефектов, возникающих при использовании ХТС, посредством СКМ LVMFlow / Т. И. Сушко, Е. А. Щербаков, Т. В. Пашнева, И. Г. Руднева // Вестник ВГТУ. – 2011. – Т. 7. – № 9. – С. 134-136.
4. 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 техн. университета им. Г. И. Носова. 2018. – Т. 16. – № 1. – С. 45-53.
5. 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 техн. университета им. Г. И. Носова. – 2012. – № 1(37). – С. 26-29.

MODELING OF EFFECTS OF CHANGES OF TEMPERATURE-PHASE FIELDS ON FORMATION OF DEFECTS STEEL CASTING BY LVMFlow

T. I. Sushko, I. I. Chernyshev, 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

In this work, we studied the effect of the distribution of temperature-phase fields in the casting at the stage of solidification, simulated the formation of shrinkage defects in the casting body, and established the patterns of formation of defects affecting the quality and durability of the part using LVMFlow program.

Keywords: casting defects, sand-clay mold casting, casting body.

АНАЛИЗ СТАБИЛИЗАЦИИ ДИНАМИЧЕСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ И ИХ ДИСКРЕТНЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ СИСТЕМ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ

А. А. Катрахова, В. С. Купцов

Воронежский государственный технический университет
Vskuptsov@rambler.ru

В данной работе для систем массового обслуживания (СМО) с перегрузками в критическом и некритическом случаях доказана покоординатная сходимость распределения к нулю по норме пространства l_2 и равномерная сходимость по норме l_∞^0 . Такие же топологии применимы и в СМО без перегрузок.

Ключевые слова: системы массового обслуживания, характеристическая функция распределения, стабилизация, асимптотика.

В работе рассматриваются системы массового обслуживания (СМО) с конечным накопителем. На вход системы поступает пуассоновский случайный поток заявок с интенсивностью входящего потока $\lambda > 0$, распределенного по экспоненциальному закону. При этом интенсивность выходящего потока обслуживания $\mu > 0$. Выходной поток также является пуассоновским. Известно, что поведение динамического распределения зависит от взаимодействия между λ и μ . Если в СМО $\lambda \geq \mu$, то она называется системой массового обслуживания с перегрузками, в противном случае – без перегрузок.

Рассмотрим СМО с перегрузками. В этом случае вероятности $p_k(t)$ можно определить через сдвинутую косинус-характеристическую функцию [1]

$$\chi^t(\varphi) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k(t) \cos(k + 1/2)\varphi$$

динамического распределения $p(t)$ по формуле

$$p_k(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \chi^t(\varphi) \cos(k + 1/2)\varphi d\varphi.$$

Поэтому по равенству Парсеваля

$$\|p_k(t)\|_{l_2} = \sqrt{\frac{2}{\pi} \int_0^\pi (\chi^t(\varphi))^2 d\varphi}.$$

Пусть функция $\chi^0(\varphi)$ определена формулой

$$\chi^0(\varphi) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k^0 \cos(k + 1/2)\varphi.$$

Она представляет собой сдвинутую на $\frac{1}{2}$ косинус-характеристическую функцию начального распределения p^0 . Функция χ^0 непрерывна, четна и 2π -периодична. Рассмотрим стабилизацию СМО с перегрузками в критическом случае.

Теорема 1. Если $\lambda = \mu > 0$ ($\varrho = 1$, где $\varrho = \sqrt{\mu/\lambda}$), то для любого начального распределения p^0 :

1⁰. Имеет место следующая формула для l_2 -нормы динамического распределения

$$\|p(t)\|_{l_2} = \sqrt{\frac{2e^{-4\lambda t}}{\pi} \int_0^\pi e^{4\lambda t \cos \varphi} (\chi^0(\varphi))^2 d\varphi}.$$

2⁰. Имеет место следующая асимптотика l_2 -нормы динамического распределения

$$\|p(t)\|_{l_2} \sim (2\pi t)^{-1/4}, \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Результаты предыдущей теоремы позволяют говорить о стабилизации к нулю функции $\chi^t(\varphi)$. Более быстрая стабилизация имеет место в более слабых топологиях.

Теорема 2. Если $\lambda = \mu > 0$ ($\varrho = 1$), то:

1⁰. Для любого начального распределения p^0 справедлива следующая оценка стабилизации динамического распределения к нулю при $t \rightarrow \infty$.

$$\|p(t)\|_{l_\infty} = \max_{k=0,1,\dots} p_k(t) \leq \frac{4}{\sqrt{2\pi\lambda}} \frac{1}{\sqrt{t}} = O\left(\frac{1}{\sqrt{t}}\right).$$

2⁰. Эта оценка асимптотически не улучшаема.

3⁰. Каждая вероятность $p_k(t)$ имеет асимптотику

$$p_k(t) \sim \frac{4}{\sqrt{\lambda\pi t}} \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Полученный результат может быть использован для оценки дискретной функции распределения (ДРФ) [3] следующим образом.

Так как при $k > 0$ имеем формулу

$$1 - q_k(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n(t) - \sum_{n=k}^{\infty} p_n(t) = \sum_{n=0}^{k-1} p_n(t),$$

отсюда вытекает

Теорема 3.

1⁰. Для любого начального распределения p^0 имеет место следующая покоординатная оценка стабилизации ДРФ к единице при $t \rightarrow \infty$.

$$1 - q_k(t) \leq \frac{4k}{\sqrt{2\lambda\pi}} \frac{1}{\sqrt{t}}, \quad k = 0, 1, \dots$$

2⁰. При фиксированном k полученная оценка асимптотически не улучшаема при $t \rightarrow \infty$, так как справедлива асимптотическая формула

$$1 - q_k(t) \sim \frac{k}{\sqrt{\lambda \pi t}}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Далее рассмотрим стабилизацию СМО с перегрузками в некритическом случае, когда $\lambda > \mu$ ($\rho < 1$).

Доказана следующая

Теорема 4. Если $\lambda > \mu > 0$, то

1⁰. Для любого начального распределения p^0 имеет место следующая асимптотика l_2 -нормы динамического распределения

$$p_k(t) \sim 2(2\pi t(\lambda + \mu))^{-1/4} \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

2⁰. Для любого фиксированного k имеет место асимптотическая формула

$$p_k(t) \sim c_k \frac{\rho^{-k} e^{-(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2 t}}{2\sqrt{\pi} (t\sqrt{\lambda\mu})^{3/2}} \text{ при } t \rightarrow \infty,$$

в которой

$$c_k = \frac{k(1 - \rho) + 1}{(1 - \rho)^2} \sum_{j=0}^{\infty} p_j^0 \rho^j (j(1 - \rho) + 1).$$

3⁰. Справедлива равномерная оценка сходимости распределения к нулю.

$$\|p\|_{l_{\infty}^0} = \max_{k=0,1,\dots} p_k(t) \leq \frac{4}{\sqrt{\pi t(\lambda + \mu)}}.$$

Из предыдущей теоремы следует, что для ДРФ при любом $k = 0, 1, \dots$ справедлива асимптотическая формула

$$1 - q_k(t) \sim c'_k \frac{\rho^{-k} e^{-(\sqrt{\lambda} - \sqrt{\mu})^2 t}}{2\sqrt{\pi} (t\sqrt{\lambda\mu})^{3/2}}, \text{ при } t \rightarrow \infty,$$

где

$$c'_k = \frac{1 - (k - 1)\rho - k\rho^2 - \rho^k - \rho^{k+1}}{\rho^k(1 - \rho)^3} \sum_{j=0}^{\infty} p_j^0 \rho^j (j(1 - \rho) + 1).$$

Отметим, что использование l_2 -норм является в этом случае вполне естественным, так как применяемые при этом в доказательствах модифицированные функции Бесселя [2] с целыми индексами являются с точностью до постоянного множителя косинус-коэффициентами в ряде Фурье, что делает эффективным применение средств Фурье-анализа в естественном для него пространстве l_2 . Можно показать, что такие же топологии применимы и для СМО без перегрузок.

Литература

1. Прудников А. П. Интегралы и ряды. Специальные функции // А. П. Прудников, Ю. А. Бричков, О. И. Маричев. – М.: Наука, 1983. – 750 с.
2. Катрахова А. А. Об использовании модифицированных функций Бесселя при исследовании математических моделей систем массового обслуживания / А. А. Катрахова, В. С. Купцов // Материалы XXVIII Международной конференции «Современные методы теории краевых задач». – Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2017. – С. 88-90.
3. Катрахова А. А. Метод производящих функций для нестационарных марковских систем массового обслуживания / А. А. Катрахова, В. С. Купцов // Физико-математическое моделирование систем: материалы X междунар. семинара. – Воронеж, ВГТУ, 2014. Ч. 3. С. 83-86.

THE ANALYSIS OF STABILIZATION OF DYNAMIC DISTRIBUTION AND THEIR DISCRETE FUNCTIONS FOR SYSTEMS OF MASS SERVING

A. A. Katrachowa, W. S. Kuptsov

Voronezh State Technical University

In this paper for mass serving systems (MSS) with overloading in critical and non-critical cases was proved the coordinate wise convergence to zero by norm space l_2 and uniform convergence by norm l_∞^0 . The same topologies can be applied in mass serving systems (MSS) without overloading.

Keywords: mass serving systems (MSS), characteristic function of distribution, stabilization, asymptotic.

ГРАФО-АНАЛИТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СИГНАЛОВ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЧЕСКОГО УПРАВЛЕНИЯ С НЕЛИНЕЙНОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ МЕТОДОМ ФУРЬЕ

А. А. Катрахова, В. С. Купцов, В. А. Малиновкин

Воронежский государственный технический университет
malinovkin@mail.ru

В работе произведён графо-аналитический анализ сигнала на выходе нелинейного звена, на вход которого подаётся гармонический сигнал типа «люфт» с ограничением.

Ключевые слова: сигнал, гармонический анализ, «люфт» с ограничением, ряды Фурье.

Системы управления, которые имеют ту или иную степень точности, можно описать линейными дифференциальными уравнениями. Для непрерывных стационарных систем эти уравнения имеют постоянные коэффициенты, а для импульсных систем коэффициенты уравнений, описывающих импульсные элементы, предоставляют собой дискретные функции времени.

Такое описание процессов в системах управления применимо далеко не ко всем системам. Существует множество систем, процессы в которых принципиально не могут быть описаны линейными дифференциальными уравнениями.

Переход к нелинейным дифференциальным уравнениям определяется как учётом нелинейностей реальных характеристик элементов системы, так и дополнительных введений в систему элементов с существенно нелинейными характеристиками. Обычно в первом случае нелинейность учитывают для рассмотрения изменения качества процесса управления за счёт влияния нелинейностей, присущих реальной системе, и исправления нежелательного эффекта, возникающего под влиянием этих нелинейностей. Во втором случае речь идёт о повышении качества процессов или о получении принципиально новых алгоритмов управления за счёт введения дополнительных нелинейных элементов. При этом удаётся повысить быстродействие и точность систем, уменьшить перерегулирование или компенсировать нежелательные действия имеющихся нелинейностей.

Таким образом, многие объекты систем регулирования, например, генераторы, двигатели, летательные аппараты и др., описываются нелинейными дифференциальными уравнениями и только при небольших отклонениях исследуемых величин от номинальных значений для исследования этих отклонений систему можно приближённо рассматривать как линейную. Кроме того, во всех механических системах не учитывались такие принципиально нелинейные явления, как сухое трение и явления зазора. Однако при значительных возмущающихся воздействиях и более детальном изучении процессов, происходящих в этих системах, учёт нелинейных характеристик становится необходимым.

Звено типа «люфт» – одна из нелинейностей, наиболее часто встречающихся в механических системах, связана с наличием зазоров в системе передачи. Сравним с моделью нелинейности типа «зона нечувствительности». В ме-

ханической модели «люфт» отсутствует пружина, которая стремится возвратить ведомый вал в нулевое положение (рис. 1а).

Зависимость между положением ведущего x и ведомого z валов неоднозначна. Характеристика, выражающая зависимость между положениями ведущего и ведомого валов, показана на рис. 1б. Каждому положению ведущего вала x соответствует множество положений ведомого вала z , лежащее в пределах $k(x - x_a) \leq z \leq k(x + x_a)$. Выбор того или иного из возможных положений определяется максимальным отклонением z , предшествовавшим рассматриваемому моменту времени.

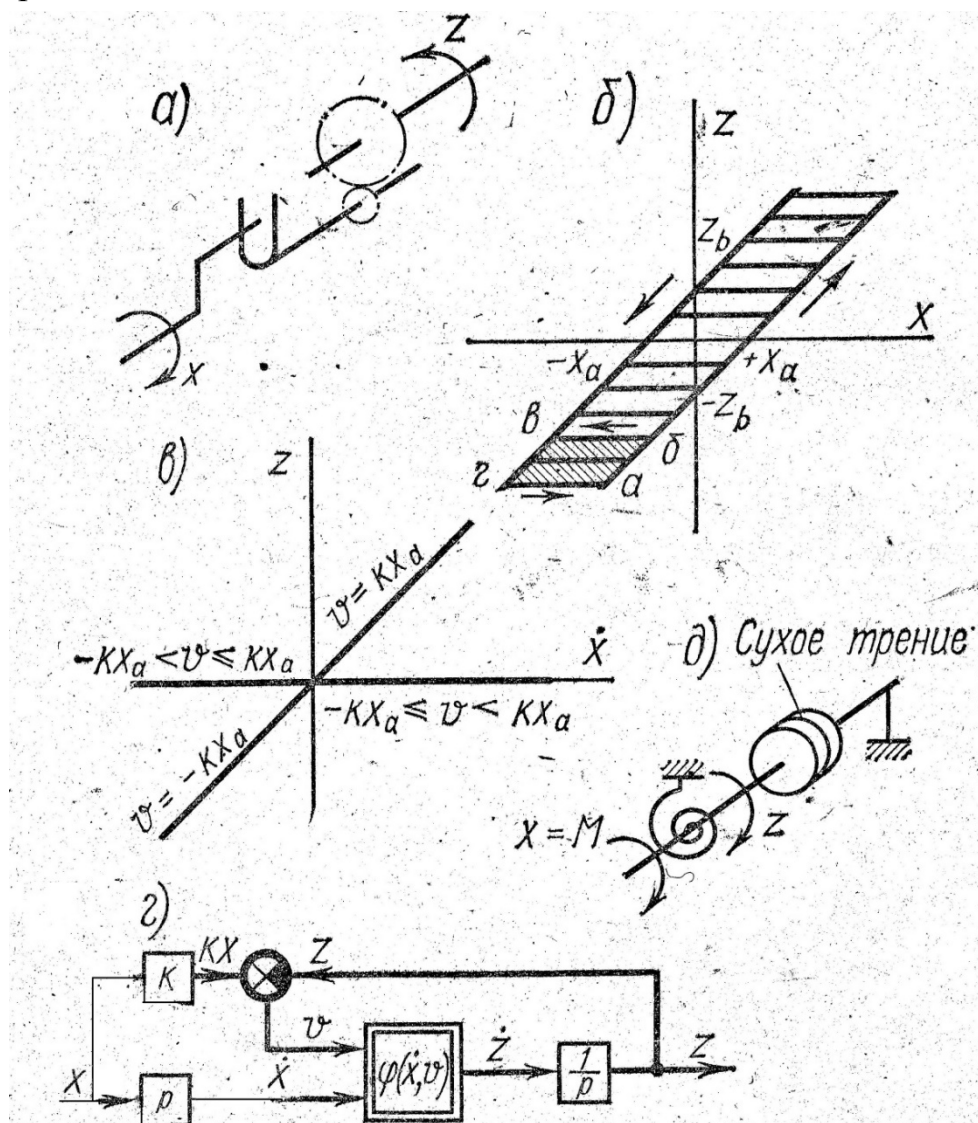


Рис. 1

Аналитически характеристика звена типа «люфт» выражается следующим образом:

$$\dot{z} = \begin{cases} kx & \text{при } \dot{x} > 0 \text{ и } v = kx_a, \\ kx & \text{при } \dot{x} < 0 \text{ и } v = -kx_a, \\ 0 & \text{при } \dot{x} > 0 \text{ и } -kx_a \leq v < kx_a, \\ 0 & \text{при } \dot{x} < 0 \text{ и } -kx_a < v \leq kx_a, \end{cases} \quad (1)$$

где $\dot{x} = dx/dt$ и $\dot{z} = dz/dt$, $v = kx - z$.

Зависимость \dot{z} от \dot{x} , выражаемая уравнением (1) для различных значений v , показана на рис. 1в.

Вводя обозначения $\varphi(x, v)$ для звена, преобразующего сигналы x и v в сигнал z , можно для звена получить структурную схему (рис. 1г).

Характеристики типа «люфт» обладают механические системы как с зазором, так и с сухим (кулоновским) трением. Схематически простейшая модель механической системы с сухим трением показана на рис. 1д.

Здесь вращающий момент M уравнивается моментом пружины αz (α – коэффициент пропорциональности) и момент сухого трения $\pm xa$, знак которого зависит от знака z . В этой системе входным воздействием является момент $x = M$, а входной величиной – угол поворота вала $z = k(x \pm xa)$, что соответствует графику на рис. 1б и уравнению (1). При этом $dz/dt = 0$ при $|x - \alpha z| < xa$.

Если в модели кроме момента пружины учесть момент вязкого трения или момент, обусловленный инерцией, то уравнение, описывающее систему, принимает более сложный характер и модель не может быть сведена к звену типа «люфт». В этом случае влияние момента сухого трения должно быть выделено в виде нелинейного звена обратной связи, охватывающей линейное звено.

Одним из способов борьбы с отрицательным эффектом, производимым нелинейностью типа «люфт», служит наложение на сигнал на входе нелинейного звена периодической переменной составляющей и фильтрация этой составляющей на выходе звена. Так, если к постоянному или медленно изменяющемуся сигналу x_0 прибавить быстро изменяющуюся периодическую переменную составляющую x^* , то результирующий сигнал на входе $x = x_0 + x^*$ вызовет на выходе сигнал z , который в свою очередь, может быть представлен в виде суммы постоянной или медленно меняющейся составляющей z_0 и переменной составляющей z^* (рис. 2).

В случае эффекта линеаризации характеристики звена типа «люфт» наложение сигнала треугольной (или прямоугольной) формы обеспечивает линеаризацию при амплитуде сигнала, превышающей половину ширины зоны люфта. Построение, соответствующее этому случаю, показано на рис. 2а, характеристики $z_0(x_0)$ при различных значениях A – на рис. 2б.

Из построений видно, что наложение переменной составляющей уменьшает влияние нелинейности в характеристиках типа «люфт», а при определённых, достаточно больших значениях амплитуды A придаёт нелинейным звеньям свойство пропорциональных линейных звеньев. Такое придание нелинейному звену свойств линейного звена в результате наложения переменной составляющей носит название вибрационной линеаризации.

Рассмотрение вибрационной линеаризации приводит к выводу о пользе применения схем управления, в которых существуют малые автоколебания. Наличие малых устойчивых колебаний в системе может повысить качество переходных процессов и нейтрализовать нежелательное влияние некоторых нелинейностей.

«Люфт» применяется для стабилизации курса корабля, торпеды или летательного аппарата. Системы автоматического управления рулями обеспечивают поддержание неизменным заданного курса.

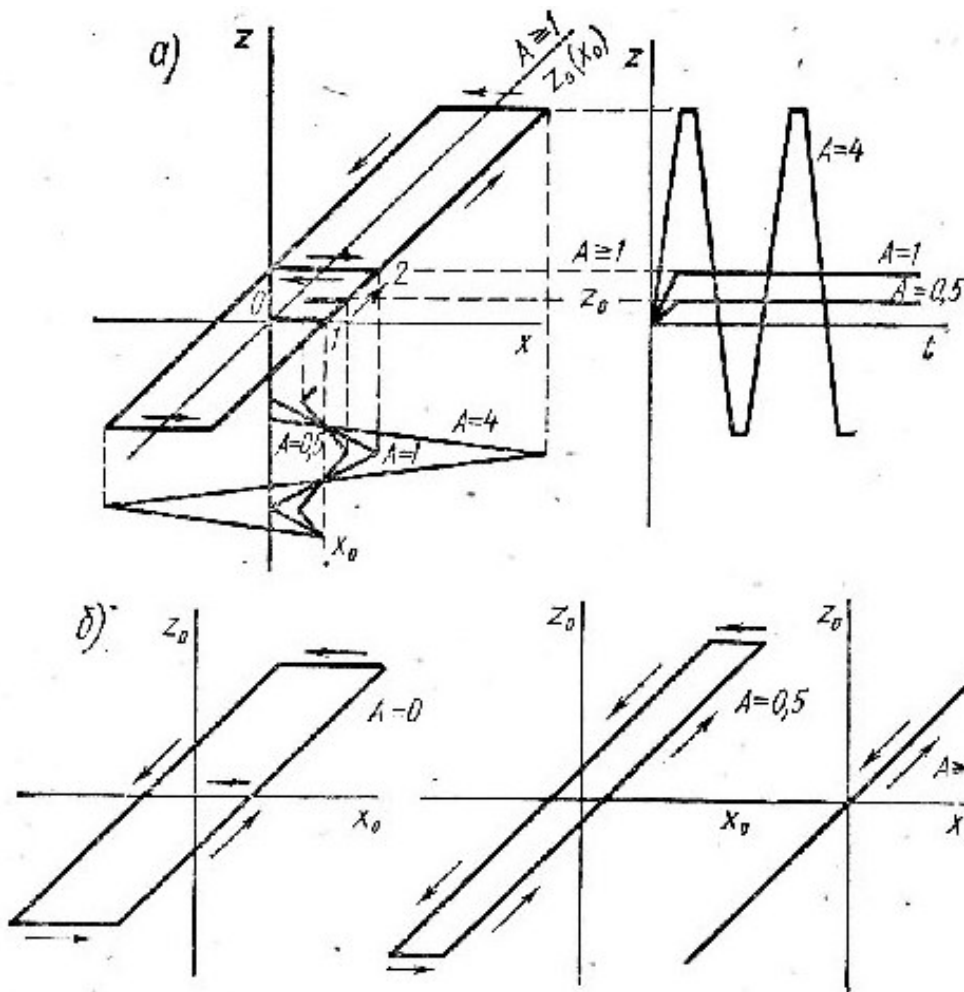


Рис. 2

Построим переходный процесс $X(t)$, возникающий в нелинейной системе автоматического регулирования при подаче на её вход ступенчатого воздействия $g(t) = 5$. Получим фазовый портрет системы $X(x)$. Структурная схема системы автоматического регулирования и характеристика нелинейного сигнала $F(X)$ показана на рис. 3.

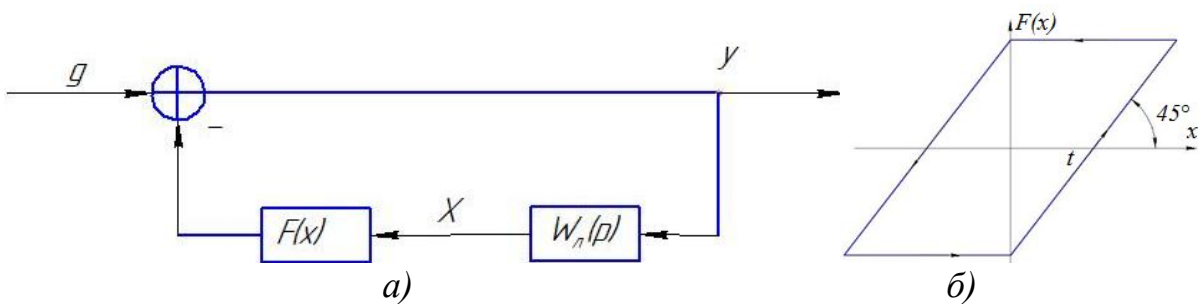


Рис. 3. Структурная схема системы автоматического регулирования (а) и характеристика нелинейного сигнала $F(X)$ (б)

Дан линейный сигнал W_n :

$$W_n = \frac{5(2p + 1)}{20p^2 + 9p + 1}$$

Составим дифференциальное уравнение, устанавливающее взаимосвязь сигнала $X(t)$ на входе нелинейного звена с параметрами системы и входным сигналом $g(t)$.

Для компактности вывода воспользуемся операторной формой записи, и в соответствии со структурной схемой запишем:

$$X = -g - W_n \cdot F(X),$$

$$X = -g - \frac{5(2p + 1)}{20p^2 + 9p + 1} \cdot F(X).$$

Приведя последнее уравнение к общему знаменателю, придём к выражению

$$20p^2X - 9pX + X + 5(2p + 1) \cdot F(X) = -20p^2g - 9pg - g,$$

перепишав которое в дифференциалах, получим искомое дифференциальное уравнение:

$$\frac{20d^2X(t)}{dt^2} + \frac{9dX(t)}{dt} + X(t) + \frac{10dF(X)}{dt} + 5F(X) = -\frac{20d^2g(t)}{dt^2} - \frac{9dg(t)}{dt} - g(t).$$

Перейдём к нормальной форме Коши. Введём переменные x_1 и x_2 :

$$0 = -20X'' - 9X' - X + 10F(X) - 20g' - 9g,$$

$$x_1 = -20X' - 9X + 10F(X) - 20g' - 9g,$$

$$x_2 = -20X - 20g,$$

и получим нормальную форму

$$\dot{x}_1 = \frac{-x_2}{20} - 5F(X),$$

$$\dot{x}_2 = x_1 - \frac{9}{20}x_2 + 10F(X),$$

$$X = \frac{-x_2}{20} - g.$$

Для численного решения полученной системы составим уравнения Эйлера с шагом h :

$$X_i = -\frac{x_{2,i}}{20} - g_i,$$

$$x_{1,i} = x_{1,i} + h \left(-\frac{x_{2,i}}{20} - 5F(X_i) \right),$$

$$x_{2,i} = x_{2,i} + h \left(x_{1,i} - \frac{9}{20}x_{2,i} + 10F(X_i) \right).$$

Функцию $F(X)$ зададим путём разбиения области её определения на интервалы, в которых она описывается элементарными функциями:

$$F(X) = \begin{cases} \operatorname{tg}(45)(X - 1); & X > 0 \\ -\operatorname{tg}(45)(X + 1); & X < 0 \end{cases}$$

Смоделированная нелинейная система имеет вид (рис. 4 и рис. 5а).

$h := 0.001$

$g0 := 5$

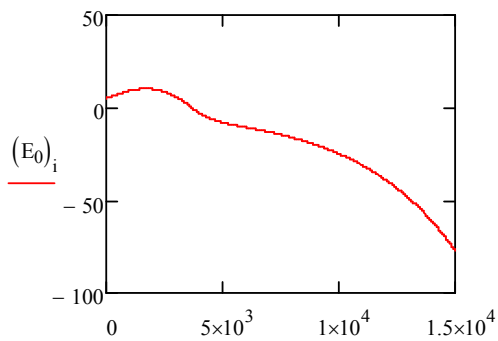
```

E :=
  y1 ← 0
  y2 ← 0
  x0 ← 0
  px0 ← 0
  z ← 0
  for i ∈ 0..15000
    x1 ←  $\frac{-y2}{20} + g0$ 
    z ←  $\begin{cases} \tan(45) \cdot (x_1 - 1) & \text{if } x_1 < 0 \\ \tan(45) \cdot (x_1 - 1 \cdot \operatorname{sign}(x_1)) & \text{if } x_1 \neq 0 \\ -\tan(45) \cdot (x_1 + 1) & \text{if } x_1 > 0 \end{cases}$ 
    p1 ←  $\frac{-y2}{20} - 5z$ 
    p2 ←  $y1 - \frac{9}{20}y2 + 10z$ 
    y1 ←  $y1 + h \cdot p1$ 
    y2 ←  $y2 + h \cdot p2$ 
    px1 ←  $\frac{p2}{20}$ 
  end for
   $\begin{pmatrix} x \\ px \end{pmatrix}$ 

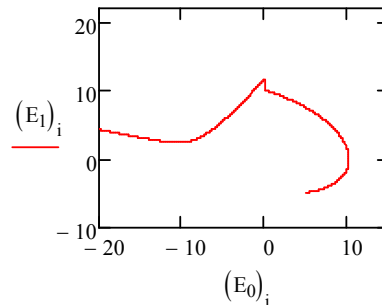
```

Рис. 4

$i := 0, 1..15000$



а)



б)

Рис. 5

На рис. 5б показан процесс изменения сигнала $X(t)$ при подаче на вход задающего сигнала $g(t) = 5$.

Для объяснения работы и гармонического анализа прибора, например, аналогово-цифрового преобразователя, производятся математические вычисления, такие как разложение периодической функции в ряд Фурье. Данный метод является удобным, так как он позволяет производить с членами ряда различные действия.

Пусть через АЦП проходит гармонический сигнал $y_1(t) = B_1 \sin(\omega t + \varphi_1)$. Найдем амплитуду B_1 и фазу φ_1 первой гармоники сигнала $y(t)$ на выходе нелинейности.

Выполним графо-аналитический анализ сигнала на выходе нелинейного звена (в данном случае имеем нелинейное звено типа Люфт с ограничением (рис.6)), когда на его вход поступает сигнал $x(t) = A \sin(\omega t)$. Полагаем, что в исследуемой системе автоматического управления возникли автоколебания (незатухающие колебания в системе с нелинейной обратной связью, поддерживающиеся за счёт энергии постоянного, то есть непериодического внешнего воздействия, являются периодическими решениями). Это соответствует тому, что на выходе системы возникает периодический сигнал. Так как рассматриваются установившиеся движения системы, то можно считать, что на вход нелинейного звена поступает также гармонический сигнал амплитуды A и частоты ω .

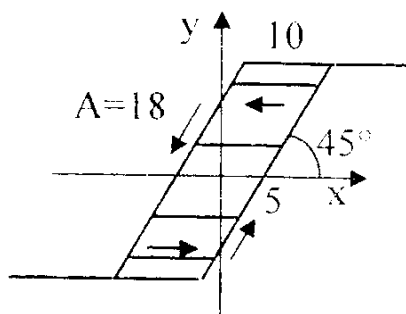


Рис. 6

Способ решения основан на аналитическом описании сигнала $y(t)$ на выходе нелинейного звена, с последующим разложением $y(t)$ в ряд Фурье и использование из этого ряда выражения для первой гармоники.

Из приведенных на рис. 7 графиков следует, что период сигнала на входе нелинейного звена совпадает с периодом сигнала на его выходе. Найдем интересные нас коэффициенты ряда Фурье для $y(t)$.

Функция $y(t)$ имеет вид разнополярных прямоугольных импульсов с амплитудой z и моментами переключения t_a и t_b , определяемыми решениями уравнений:

$$\begin{aligned} A \sin(\omega t_a) &= a, \\ A \sin(\omega t_b) &= b, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{или } \sin(\omega t_a) = \frac{a}{A}, \quad \sin(\omega t_b) = \frac{b}{A}.$$

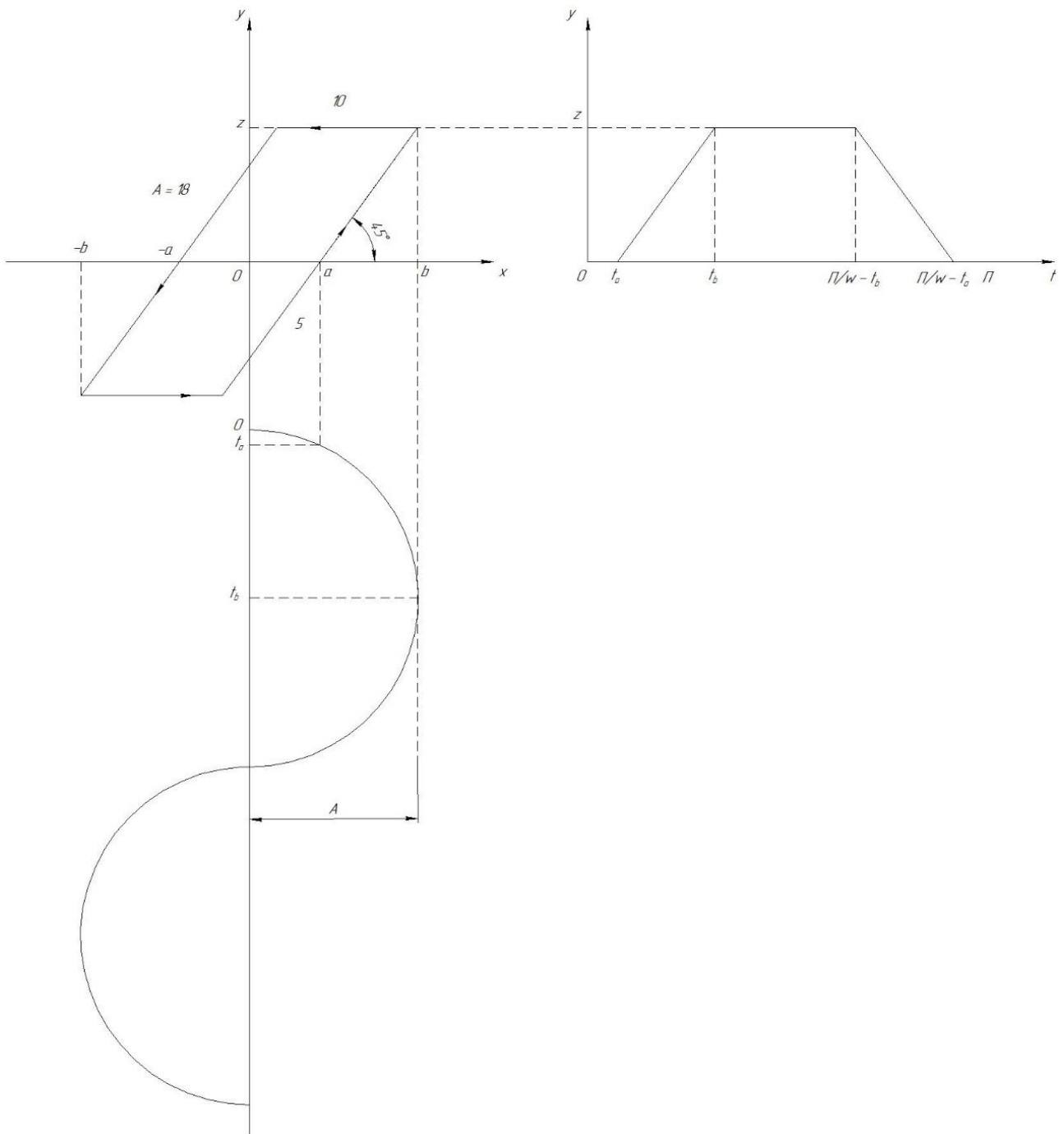


Рис. 7

Характеристика нелинейного звена является однозначной и симметричной относительно начала координат, т.е. $y(t)$ – нечетная. Поэтому коэффициент $a_1 = 0$. Определим вещественный коэффициент b_1 .

1. На интервале $[0; t_a] \cup (\frac{\pi}{\omega} - t_a; \frac{\pi}{\omega}]$ выходной сигнал равен нулю.
2. На интервале $[t_a; t_b]$ $y(x) = k(\sin(\omega t) - a)$.
3. На интервале $[t_b; \frac{\pi}{\omega} - t_b]$ $y(x) = z$.
4. На интервале $[\frac{\pi}{\omega} - t_b; \frac{\pi}{\omega} - t_a]$ $y(x) = -k(\sin(\omega t) + a)$.

Здесь $k = \text{tg}45^\circ$ – тангенс угла наклона характеристики на интервале $[a, b]$,

$$b_1 = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{\omega}} y(t) \sin(\omega t) dt.$$

Пусть $\omega t = x$, $dt = x/\omega$, где x принадлежит отрезку $[0; \pi]$, тогда

$$b_1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} y(x) \sin(x) dx = \frac{2}{\pi} \left[\int_{t_a}^{t_b} k(A \sin(x) - a) \sin(x) dx - \int_{\pi-t_b}^{\pi-t_a} k(A \sin(x) + a) \sin(x) dx \right].$$

Используя

$$\sin^2(x) = \frac{1 - \cos(2x)}{2},$$

получим:

$$b_1 = \frac{2}{\pi} \left\{ k \left[A \left(\frac{1}{2}x - \frac{1}{4} \sin(2x) \right) + a \cos(x) \right] \Big|_{t_a}^{t_b} - z \cos(x) \Big|_{t_b}^{\pi-t_b} - k \left[A \left(\frac{1}{2}x - \frac{1}{4} \sin(2x) \right) + a \cos(x) \right] \Big|_{\pi-t_b}^{\pi-t_a} \right\}.$$

С учетом соотношений

$$\sin(t_a) = a/A,$$

$$\sin(t_b) = b/A,$$

получим:

$$b_1 = \frac{2}{\pi} \left\{ 2 \operatorname{tg}(45^\circ) \left(\sqrt{1 - \frac{b^2}{A^2}} - \sqrt{1 - \frac{a^2}{A^2}} \right) + 2z \sqrt{1 - \frac{b^2}{A^2}} \right\}.$$

Используя значения $a = 5$, $A = 18$, $z = 10$, $\operatorname{tg}(45^\circ) = \frac{z}{b-a} \rightarrow b = 15$,

$$b_1 = \frac{2}{\pi} \left\{ 2 \left(\sqrt{1 - \frac{15^2}{18^2}} - \sqrt{1 - \frac{5^2}{18^2}} \right) + 20 \sqrt{1 - \frac{15^2}{18^2}} \right\} = 16,681;$$

$$B_1 = \sqrt{a_1^2 + b_1^2} = \sqrt{(0)^2 + (16,681)^2} = 16,681;$$

$$\varphi_1 = \operatorname{arctg} \left(\frac{0}{16,681} \right) = \operatorname{arctg}(0) = 0.$$

Получим: $y(t) = 16,681 \sin(\omega t)$ (рис. 8).

Амплитуда первой гармоники сигнала на выходе нелинейности $B_1 = 16,681$;
фаза $\varphi_1 = 0$ рад.

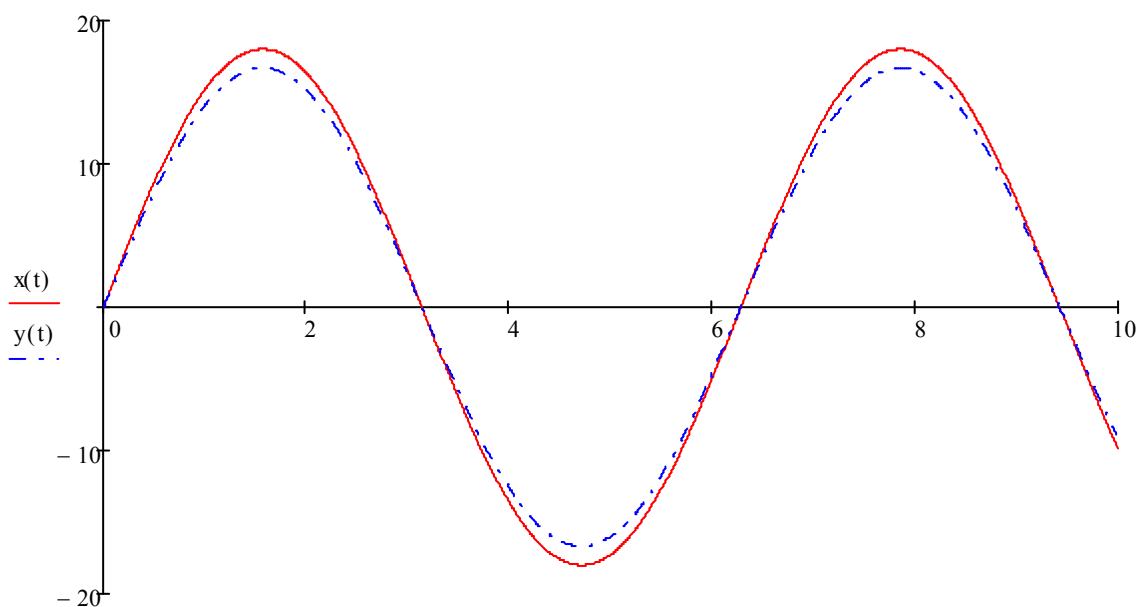


Рис. 8

В классе периодических функций перенос осей $t = t_0 + b$ не должен менять в представлении функции того, что не зависит от системы координат. Непосредственно видно, что коэффициенты Фурье a_k и b_k не обладают этими свойствами и меняются при сдвиге осей, то есть когда изменяется начало отсчёта времени.

Литература

1. Нетушила А. В. Теория автоматического управления / А. В. Нетушила. – М.: Высш. шк., 1972. Ч. 2. 432 с.
2. Толстов Г. П. Ряды Фурье / Г. П. Толстов. – М.: Наука, 1980. 328 с.
3. Никулин Е. А. Основы автоматического управления. Частотные методы анализа и синтеза систем: учебное пособие для вузов / Е. А. Никулин. – СПб.: Петербург, 2004. 604 с.

GRAPH-ANALYTICAL ANALYSIS OF SIGNALS OF AUTOMATIC CONTROL SYSTEM WITH NON-LINEAR FEEDBACK BY FOURIER METHOD

A. A. Katrachowa, W. S. Kuptsov, V. A. Malinovkin

Voronezh State Technical University

The graph-analytic analysis of the signal at the output of a non-linear link whose input is fed by a harmonic "backlash" type signal with a limitation was produced.

Keywords: signal, harmonic analysis, «backlash» with constraint, Fourier series.

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ О ПРОДОЛЬНОМ ИЗГИБЕ ТЯЖЁЛЫХ СТЕРЖНЕЙ

Н. Б. Ускова, А. Н. Шелковой

Воронежский государственный технический университет
nat-uskova@mail.ru, shelkovej.aleksandr@mail.ru

Изучается задача на собственные значения оператора, описывающего шарнирно опёртый с обоих концов, вертикально расположенный стержень постоянного сечения при учёте его собственного веса. Методом исследования служит метод подобных операторов.

Ключевые слова: спектр оператора, дифференциальный оператор второго порядка, метод подобных операторов.

Пусть $L_2[0,1]$ – гильбертово пространство комплексных измеримых (классов) функций, суммируемых с квадратом модуля со скалярным произведением вида $(x, y) = \int_0^1 x(\tau) \overline{y(\tau)} d\tau$. Через $W_2^2[0,1]$ обозначим пространство Соболева $\{x \in L_2[0,1]: x' \text{ абсолютно непрерывна, } x'' \in L_2[0,1]\}$.

В диссертации [1] рассматривались спектральные свойства интегро-дифференциального оператора $L: D(L) \subset L_2[0,1] \rightarrow L_2[0,1]$, порождаемого интегро-дифференциальным выражением вида

$$(Lx)(t) = -\ddot{x}(t) - [\dot{x}(0)a_0(t) - \dot{x}(1)a_1(t)] - \int_0^1 K(t,s)x(s)ds, \quad (1)$$

с вырожденным ядром $K(t,s) = \sum_{i=1}^n p_i(t)q_i(s)$, $p_i, q_i \in L_2[0,1]$, и краевыми условиями

$$x(0) = x(1) = 0. \quad (2)$$

Методом исследования является метод подобных операторов, развиваемый в работах Баскакова А. Г. [2-5] и используемый в спектральном анализе дифференциальных [6-10] операторов, разностных операторов [11] и смежных вопросах [12-15].

Приведём основные определения и теоремы метода подобных операторов.

Пусть H – бесконечномерное комплексное сепарабельное гильбертово пространство. Символом $End H$ обозначим банахову алгебру линейных ограниченных операторов, действующих в H , а через $\sigma_2(H)$ – двусторонний идеал операторов Гильберта-Шмидта из алгебры $End H$.

Определение 1 ([5]). Два оператора $A_i : D(A_i) \subset H \rightarrow H, i = 1, 2$, называются подобными, если существует непрерывно обратимый оператор $V \in \text{End } H$ (т.е. $V^{-1} \in \text{End } H$), такой, что $VD(A_2) = D(A_1)$ и выполняется равенство $A_1Vx = VA_2x, x \in D(A_2)$. Оператор V называется оператором преобразования подобия оператора A_1 в A_2 .

Определение 2 ([5]). Линейный оператор $C : D(C) \subset H \rightarrow H$ называется подчинённым оператору $A : D(A) \subset H \rightarrow H$, если выполнены следующие два условия:

- 1) $D(C) \supseteq D(A)$;

- 2) существует постоянная $M > 0$, такая, что

$$\|Cx\| \leq M(\|Ax\| + \|x\|) \quad \forall x \in D(A).$$

Операторы, действующие в пространстве линейных операторов, будем называть трансформаторами, согласно М. Г. Крейну ([16]). Для любого оператора X символом $\text{Im } \Gamma X$ обозначен его образ.

Определение 3 ([5]). Тройка (U, J, Γ) , $J : U \rightarrow U$, $\Gamma : U \rightarrow \text{End } H$, называется допустимой для оператора A , а U – допустимым пространством возмущений, если:

- 1) U – банахово пространство (со своей нормой $\|\cdot\|_*$), непрерывно вложенное в банахово пространство $L_A(H)$ линейных операторов, подчинённых оператору A , т.е. существует постоянная $M_0 > 0$, такая, что $\|B\|_A \leq M_0 \|B\|_* \quad \forall B \in U$.

- 2) J, Γ – непрерывные операторы, причём J – проектор, т.е. $J^2 = J$;

- 3) $(\Gamma X)x \in D(A) \quad \forall x \in D(A)$ и имеет место равенство:

$$A\Gamma X - (\Gamma X)A = X - JX, X \in U,$$

(равенство понимается как равенство элементов из U);

- 4) $X\Gamma Y, (\Gamma Y)X \in U, X, Y \in U$, и существуют постоянные $\gamma_1 > 0, \gamma_2 > 0$, такие, что $\|\Gamma\| \leq \gamma_1$ и $\max\{\|X\Gamma Y\|_*, \|(\Gamma Y)X\|_*\} \leq \gamma_2 \|X\|_* \|Y\|_*$;

- 5) выполнены условия:

- а) $\text{Im } \Gamma X \subset D(A)$ и $A\Gamma X \in \text{End } H$ или

- б) $\forall X \in U$ и $\forall \varepsilon > 0$ существует число $\nu_\varepsilon \in \rho(A)$ ($\rho(A)$ – резольвентное множество оператора A), такое, что $\|XR(\nu_\varepsilon, A)\|_\infty < \varepsilon$, где $\|X\|_\infty = \sup_{\|x\| \leq 1} \|Xx\|$ – норма оператора в $\text{End } H$;

$R(\nu_\varepsilon, A) = (A - \nu_\varepsilon I)^{-1}$ – резольвента оператора A в точке $\nu_\varepsilon \in \rho(A)$, I – тождественный оператор.

Пусть $A: D(A) \subset H \rightarrow H$ – нормальный оператор (см., например, [17]) (частный случай нормального – самосопряжённый оператор), т.е. $D(A) = D(A^*)$, $\|Ax\| = \|A^*x\|$, $x \in D(A)$, спектр которого представим в виде: $\sigma(A) = \bigcup_{j \geq 1} \sigma_j, 0 \in \overline{\sigma(A)}$, где $\sigma_j, j \geq 1$, – взаимно непересекающиеся конечные компактные множества, такие, что

$$\text{dist}(0, \sigma_1) < \text{dist}(0, \sigma_2) < \dots, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \text{dist}(0, \sigma_n) = \infty.$$

Пусть P_j – проектор Рисса, построенный по спектральному множеству σ_j , $A_j = AP_j$, $A_j \in \text{End } H$, $|\sigma_j| = \sup_{\lambda \in \sigma_j} |\lambda|$, $j \geq 1$. В качестве пространства возмущений U рассматриваются операторы $B: D(A) \subset H \rightarrow H$, допускающие представление $B = B_0A$, $B_0 \in \sigma_2(H)$, причём существуют две ненулевые последовательности $\{\alpha_j\}_1^\infty$, $\{\beta_j\}_1^\infty$, такие, что имеет место оценка: $\|P_j B_0 P_i\| \leq c \cdot \alpha_j \cdot \beta_i$, $i, j = 1, 2, \dots$, для некоторой постоянной $c > 0$. Наименьшая из констант, удовлетворяющих этому неравенству, определяет норму в U .

Пусть n – некоторое натуральное число, положим $\Delta_n = \bigcup_{k=1}^n \sigma_k$, $P(\Delta_n, A)$ – проектор Рисса, построенный по спектральному множеству Δ_n . Положим $Q_1 = Q_{1n} = P(\Delta_n, A) = P_1 + P_2 + \dots + P_n$, $Q_2 = Q_{2n} = I - Q_{1n}$. Трансформаторы $J_n: U \rightarrow U$, $\Gamma_n: U \rightarrow \sigma_2(H)$, $n \geq 1$, определяются следующим образом: $J_n X = Q_1 X Q_1 + Q_2 X Q_2$, $\Gamma_n X = \Gamma_n^{(1)} X + \Gamma_n^{(2)} X$, где

$$\Gamma_n^{(1)} X = \sum_{m \geq n+1} \sum_{k=1}^n \Gamma_n(P_m X_0 A P_k), \quad \Gamma_n^{(2)} X = \sum_{m=1}^n \sum_{k \geq 1} \Gamma_n(P_m X_0 A P_k).$$

На операторных блоках $P_m X_0 P_k A$ трансформатор Γ_n определяется как решение уравнения $AP_m Y_{0mk} - Y_{0mk} AP_k = P_m X_0 P_k$, удовлетворяющее условию $P_m Y_{0mk} P_k = Y_{0mk}$, где $k \geq n+1$, $m \leq n$ либо $k \leq n$, $m \geq n+1$. Для всех остальных значений m и k полагается $\Gamma_n(P_m X_0 P_k A) = 0$.

Теорема 1 ([6]). Пусть n – натуральное число, такое, что

$$\gamma_1(n) = \sum_{m=1}^n \sum_{k \geq n+1} \frac{|\sigma_k|^2 \beta_k^2 \alpha_m^2 + \beta_m^2 \alpha_k^2 |\sigma_m|^2}{(\text{dist}(\sigma_m, \sigma_k))^2},$$

$$\gamma_2(n) = \max \left\{ \max_{j \leq n} \left\{ \sum_{k \geq n+1} \frac{|\sigma_k| \alpha_k \beta_k}{\text{dist}(\sigma_j, \sigma_k)} \right\}, \sup_{j \geq n+1} \left\{ \sum_{k=1}^n \frac{|\sigma_k| \alpha_k \beta_k}{\text{dist}(\sigma_j, \sigma_k)} \right\} \right\}$$

конечны, причём выполнено условие

$$2 \max\{\gamma_1(n), \gamma_2(n)\} + \gamma_1(n) + \gamma_2(n) < 1.$$

Тогда оператор $A - B$ подобен оператору $A - J_n X^*(n)$, где $X^*(n) \in U$ имеет вид:

$$X^*(n) = X_{11}^*(n) + X_{12}^*(n) + X_{21}^*(n) + X_{22}^*(n), \quad (3)$$

где $X_{ij}^*(n) = Q_i X^*(n) Q_j$, $i, j = 1, 2$, есть решение системы уравнений

$$\begin{cases} X_{ii} = B_{ij} \Gamma X_{ji} + B_{ii}, & (i = 1, j = 2) \vee (i = 2, j = 1); \\ X_{ij} = F_{ij}(X_{ij}), \end{cases} \quad (4)$$

где оператор $F_{ij} : U_{ij} \rightarrow U_{ij}$ задаётся формулой

$$F_{ij}(X) = B_{ii} \Gamma X - (\Gamma X) B_{jj} - (\Gamma X)(B_{ji} \Gamma X) + B_{ij},$$

$B_{ij} = Q_i B Q_j$, $i, j = 1, 2$, – блоки оператора $B \in U$, являющегося возмущением оператора A , допустимое пространство возмущений U является прямой суммой четырёх замкнутых подпространств вида $U_{ij} = \{Q_i X Q_j, X \in U\}$, $i, j = 1, 2$. Оператор преобразования подобия имеет вид $I + \Gamma_n X^*(n)$.

Теорема 2 ([6]). Пусть операторы A и $B \in U$ таковы, что $\gamma_1(n) \rightarrow 0$, $\gamma_2(n) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Тогда, начиная с некоторого n_0 , оператор $A - B$ подобен оператору $A - J_n X^*(n)$, $n \geq n_0$, где $X^*(n)$ представим в виде (3),

и $\|P(\Delta_n, A) - P(\bar{\Delta}_n, A - B)\| \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, причём

$\bar{\Delta}_n = \sigma((A - J_n X^*(n))|P(\Delta_n, A)H) \subset \sigma(A - B)$, где $P(\bar{\Delta}_n, A - B)$ – проектор

Рисса, построенный по спектральному множеству $\bar{\Delta}_n$ оператора $A - B$.

Следствие. Пусть выполнены условия теоремы 2, тогда

$$\left\| \left(I - P(\bar{\Delta}_n, A - B) \right) x - \sum_{i \geq n+1} P_i X \right\| \rightarrow 0 \text{ при } n \rightarrow \infty$$

для любого фиксированного $x \in H$.

Одним из примеров, где возникают операторы типа (1), является задача о продольном изгибе тяжёлых стержней (см. [18]). Другие приложения метода подобных операторов к задачам механики см., например, в [15]. Определение критической нагрузки P при продольном изгибе шарнирно опёртого с обоих концов, вертикально расположенного стержня длины l постоянного сечения при учёте его собственного веса приводит к задаче на собственные значения:

$$\begin{cases} y^{IV} - \varepsilon(xy')' = -\lambda y'' \\ y(0) = y''(0) = y(l) = y''(l) = 0. \end{cases} \quad (5)$$

В пространстве $L_2[0, l]$ введём оператор $Ay = y''$ с областью определения $D(A)$, определяемой краевыми условиями $y(0) = y(l) = 0$, тогда $A^2y = y^{IV}$. Первое уравнение системы (5) приобретёт вид: $A^2y - \varepsilon(xy')' = -\lambda Ay$. Применив к обеим частям оператор A^{-1} , получим краевую задачу

$$\begin{cases} Ay - \varepsilon A^{-1}x Ay - \varepsilon A^{-1}y' = -\lambda y \\ y(0) = y(l) = 0. \end{cases}$$

Оператор A^{-1} имеет вид: $(A^{-1}y)(x) = \int_0^l K(x, s)y(s)ds$, где $K(x, s)$ – функция Грина для краевой задачи

$$\begin{cases} y'' = 0 \\ y(0) = y(l) = 0. \end{cases}$$

Известно, (см., например, [19]), что в данном случае

$$K(x, s) = G(x, s) = \begin{cases} \frac{x(s-l)}{l}, & 0 \leq s \leq x, \\ \frac{s(x-l)}{l}, & x \leq s \leq l. \end{cases}$$

Непосредственные вычисления приводят исходное дифференциальное уравнение системы (5) к операторному уравнению $Ly = -\lambda y$, где

$$(Ly)(x) = y''(x) + \varepsilon xy(x) - \varepsilon l(x-l)y'(l) + \frac{\varepsilon}{l} \left(\int_x^l y(s)ds - x \int_0^l y(s)ds \right).$$

К данному оператору применим рассматриваемый вариант метода подобных операторов, т.е. оператор L можно представить в виде $A - B$, где $(Ay)(x) = y''(x)$ – невозмущённый оператор, а

$$(By)(x) = \varepsilon \left(l(x-l)y'(l) - xy(x) - \frac{1}{l} \left(\int_x^l y(s)ds - x \int_0^l y(s)ds \right) \right)$$

– возмущение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-01-00197.

Литература

1. Шелковой А. Н. Спектральный анализ дифференциальных операторов с нелокальными краевыми условиями: дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Воронеж, 2004. 144 с.
2. Баскаков А. Г. Гармонический анализ линейных операторов. Воронеж: Изд-во ВГУ, 1987. – 165 с.
3. Баскаков А. Г., Кацаран Т. К. Спектральный анализ интегро-дифференциальных операторов с нелокальными краевыми условиями // Дифференциальные уравнения. – 1988. – Т. 24. – № 8. – С. 1424-1433.

4. Баскаков А. Г. Теорема о расщеплении оператора и некоторые смежные вопросы аналитической теории возмущений // Изв. АН СССР. Сер. Матем. – 1986. – Т. 50. – № 3. – С. 135-157.
5. Баскаков А. Г., Дербушев А. В., Щербаков А. О. Метод подобных операторов в векторном анализе несамосопряженного оператора Дирака с негладким потенциалом // Изв. РАН. Сер. Матем. – 2014. – Т. 75. – № 3. – С. 3-28.
6. Ульянова Е. Л., Шелковой А. Н. О некоторых спектральных свойствах одного класса дифференциальных операторов с нелокальными краевыми условиями // Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика. – 2002. – № 2. – С. 106-110.
7. Шелковой А. Н. Асимптотика собственных значений дифференциального оператора с нелокальными краевыми условиями // Научные ведомости БелГУ. Сер. Математика. Физика. – 2016. – Вып. 43. – № 13. – С. 72-80.
8. Шелковой А. Н. Метод подобных операторов в исследовании интегро-дифференциальных операторов с квадратично суммируемым ядром // Вопросы науки. – 2016. – Т. 2. – С. 68-80.
9. Шелковой А. Н. Спектральные свойства дифференциальных операторов, определяемых нелокальными краевыми условиями // Вопросы науки. – 2016. – Т. 3. – С. 83-90.
10. Шелковой А. Н. Спектральные свойства одного интегро-дифференциального оператора с интегрируемым с квадратом ядром // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий (ПМТУКТ-2016): сборник трудов IX международной конференции. Воронеж, 2016. С. 401-404.
11. Гаркавенко Г. В., Ускова Н. Б. Метод подобных операторов в исследовании спектральных свойств разностного оператора с растущим потенциалом // Сиб. электрон. матем. изв. – 2017. – Т. 14. – С. 673-689.
12. Ускова Н. Б. Определение критической нагрузки при продольном изгибе тяжёлого стержня методом подобных операторов // Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика. – 1997. – № 10. – С. 79-81.
13. Ускова Н. Б., Шелковой А. Н. К спектральным проекторам операторов с возмущениями // Физико-математическое моделирование систем: материалы XVII Междунар. семинара. 2017. Ч. 2. С. 139-143.
14. Ускова Н. Б. К одной проблеме Пирси и Шилдса // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2002. – № 2. – С. 106-110.
15. Ускова Н. Б. О спектре некоторых классов операторов с малым параметром, возникающих в механике // Системы управления и информационные технологии. – 2009. – Т. 38. – № 4.1. – С. 196-199.
16. Далецкий Ю. Л., Крейн М. Г. Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховом пространстве. М.: Наука, 1970. – 536 с.
17. Данфорд Н., Шварц Д. Т. Линейные операторы. Т. 2: Спектральная теория. Самосопряжённые операторы в гильбертовом пространстве. М.: Мир, 1966. – 1063 с.
18. Коллатц Л. Задачи на собственные значения (с техническими приложениями). М.: Наука, 1968. – 504 с.
19. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. СПб.: Лань, 2003. – 576 с.

A PROBLEM ON THE LONGITUDINAL BENDING OF HEAVY RODS

N. B. Uskova, A. N. Shelkovoy

Voronezh State Technical University

We study the task on eigenvalues of the operator describing pivotally supported at both ends, a vertically disposed rod of constant cross section in the light of its own weight. The research method is the method of similar operators.

Keywords: spectrum of the operator, second order differential operator, similar operator method.

КОНЦЕНТРАЦИЯ МАГНИТНОГО ПОТОКА В МЕЖГРАНУЛЬНОМ ПРОСТРАНСТВЕ ВТСП Y-Ba-Cu-O

И. М. Шушлебин

Воронежский государственный технический университет
shushlebin@mail.ru

Рассмотрена зависимость первого критического поля керамического ВТСП Y-Ba-Cu-O от его плотности.

Ключевые слова: сверхпроводник, керамика, вихрь Абрикосова, размагничивание, магнитный поток.

Возникновение смешанного состояния в керамических ВТСП происходит в условиях, отличающихся как от традиционных сверхпроводников, так и от монокристаллических ВТСП. В работе [1] была получена зависимость первого критического поля гранул от плотности иттриевых керамик. На первый взгляд эта зависимость парадоксальна.

На рис. 1 величина первого критического поля гранул представлена в зависимости от давления компактирования при получении керамик [1].

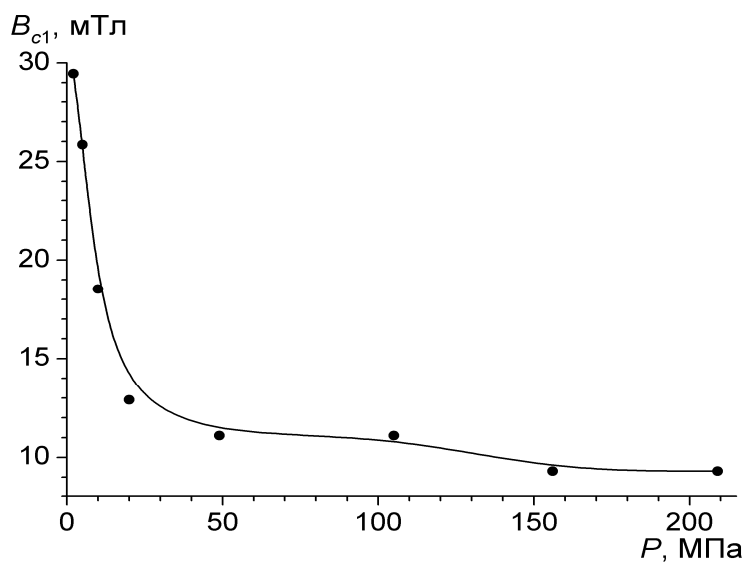


Рис. 1

Этот результат был перестроен в зависимость критического поля от плотности материалов – рис. 2. На вставке представлена плотность ВТСП, полученных с различным давлением компактирования.

С традиционной точки зрения уменьшение первого критического поля с ростом плотности сверхпроводника выглядит странно, но представленные данные были получены целенаправленным образом на основе анализа определенного массива измерений и модельных представлений.

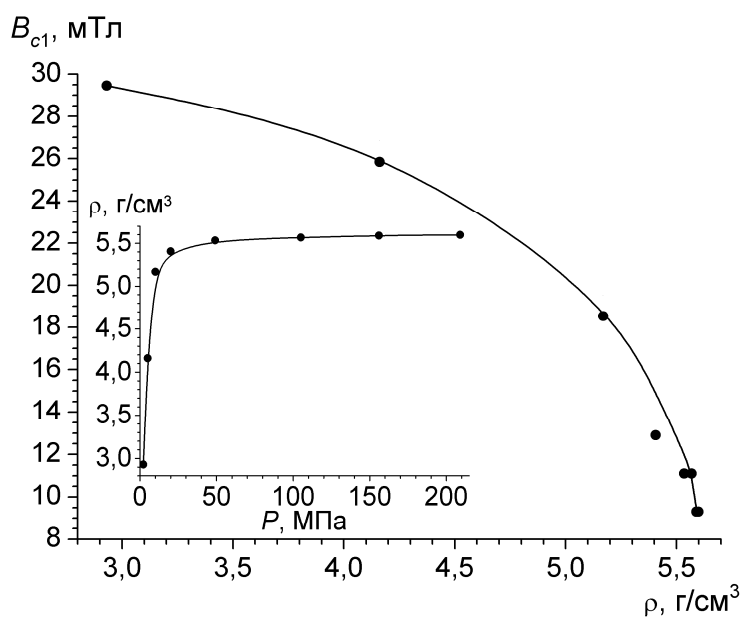


Рис. 2

Для дальнейших рассуждений существенен вывод об изменениях в строении керамик с ростом давления компактирования (М. А. Авдеев) – рис. 3. Сравнение поверхности керамик (слева полученная при давлении 2,1 МПа, справа $P = 209$ МПа) позволило утверждать, что увеличение давления приводит к перераспределению размещения гранул в объеме и увеличению коэффициента упаковки, что и проявляется в увеличении плотности.

Таким образом, представляется необходимым связать перераспределение гранул и увеличение плотности их упаковки с уменьшением *измеряемого* первого критического поля гранул.

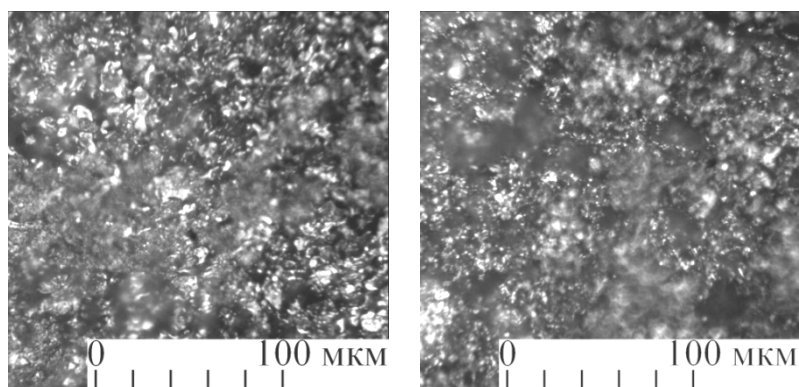


Рис. 3

Обсуждение полученных результатов проведём на основе представлений работ [2-4]. Суть интерпретации заключается в рассмотрении гранул ВТСП керамики как концентраторов магнитного потока.

Пусть, как и в работе [2], внешнее поле H_e направлено вдоль какого-либо ребра гранулы. Обозначим ее размеры a_x , a_y и a_z . Считаем, что все размеры гра-

нулы превышают глубину проникновения λ . Направление внешнего поля примем за ось z .

В межгранульном же пространстве величина магнитного поля H_0 способна значительно отличаться от внешнего поля.

Действительно, поля H_e и H_0 связаны условием сохранения магнитного потока

$$H_e(a_x + a_j)a_y = H_0 a_y a_j + \int H(x, y) ds,$$

где a_j – расстояние между гранулами. Определённая в [2] зависимость $H_0(H_e)$ представлена на рис. 4. Когда внешнее поле меньше поля проникновения H_s зависимость близка к линейной – поле между гранулами растёт быстрее внешнего (прямая 1). После начала проникновения (барьер преодолен) разность полей стремится к нулю (кривая 2). Отметим, что непосредственно в области поля перегрева H_s на зависимости плато – участок 3. Оно обусловлено отталкиванием входящего вихря от уже присутствующих в грануле. Прямая 4 характеризует процесс в уменьшающемся внешнем поле, свидетельствуя о наличии гистерезиса. Но в зависимости от ситуации возможно и быстрое уменьшение разницы – участки 5 и 6.

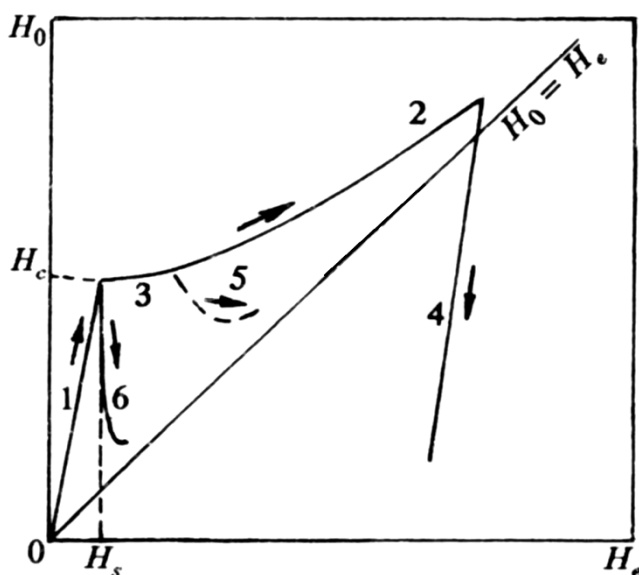


Рис. 4

В работе [3] эти результаты были привлечены к объяснению явления выдавливания вихрей Абрикосова, наблюдавшегося в некоторых ВТСП. Также там были сформулированы представления о возможности «внутреннего размагничивания», получившие уже экспериментальные подтверждения – работа [4], когда превышение межгранульным полем внешнего приводит к наблюдениям перехода гранул в смешанное состояние в уменьшающихся внешних полях.

Было показано [4], что эксперименту более адекватна модель цилиндрических гранул. Воспользуемся такими представлениями для объяснения обсуждаемых результатов эксперимента.

Допустим, что межгранульное поле остаётся ниже (или равно) первого критического поля гранул. Рассмотрим n рядов по n гранул, которые соприкасаются боковыми поверхностями – «кубическая» структура. Площадь элементарной ячейки составляет $4R^2$. Но площадь сверхпроводника πR^2 . Доступная магнитному потоку площадь составляет $(4-\pi)R^2$, а увеличение внешнего поля, соответственно, в $4/(4-\pi)$ раз.

Допустим также, что в результате увеличения давления компактирования такая структура из n^2 гранул испытала сдвиговую деформацию и преобразовалась в гексогональную. При этом доступная магнитному полю площадь уменьшится и разделится на две, каждая, из которых между тремя соприкасающимися кругами. Их общая площадь составит $(2\sqrt{3}-\pi)R^2$.

Уменьшение доступной полю площади составит $(4-\pi)/(2\sqrt{3}-\pi) = 2.7$ раз. Согласно сохранению магнитного потока, межгранульное поле увеличится пропорциональным образом.

Следовательно, для возникновения внутри ВТСП поля, величиной, равной первому критическому потребуются примерно в 3 раза меньшее внешнее поле, что и обнаружено экспериментально – см. рис. 1.

Литература

1. Милошенко В. Е., Шушлебин И. М., Авдеев М. А. // Альтернативная энергетика и экология, 7, 81 (2011).
2. Кугель К. И., Рахманов А. Л. // Сверхпроводимость: физика, химия, техника, 4,11, 2072 (1991).
3. Шушлебин И. М., Акимов А. И., Чернякова А. П. // Сверхпроводимость: физика, химия, техника, 6,11, 2067 (1993).
4. Шушлебин И. М., Калядин О. В. // Вестник ВГТУ, 3, 78 (2007).

CONCENTRATION OF THE MAGNETIC FLOW IN THE INTER-GRANULAR SPACE OF HTSC Y-Ba-Cu-O

I. M. Shushlebin

Voronezh State Technical University

The value of the first critical field of ceramic Y-Ba-Cu-O depending on its density was studied.

Keywords: superconductor, ceramics, Abrikosov vortex, demagnetization, magnetic flux.

ТЕПЛОВЫЕ РЕЖИМЫ ТРАНСПОРТНЫХ ХОЛОДИЛЬНЫХ УСТАНОВОК

И. М. Шушлебин

Воронежский государственный технический университет
shushlebin@mail.ru

Обсуждается модель процесса охлаждения транспортной холодильной установки, когда определяющую роль играет теплоприток через ограждения.

Ключевые слова: транспортная холодильная установка, тепловой режим, изменения наружной температуры.

Непрерывность холодильной цепи обеспечивается с помощью транспортных холодильных установок. В силу необходимости совершать перемещения холодильный транспорт подвергается воздействию переменных внешних условий. Климатические, сезонные и суточные колебания температуры окружающей среды, перемещение по тоннелям, высокогорным дорогам и т. д. обуславливают практическую потребность в изучении переходных процессов в малых холодильных установках, к числу которых относятся разнообразные холодильники на подвижном основании [1-3].

Актуальность и важность этого направления исследований определяется следующими обстоятельствами [4]. Значительное количество вагонов холодильного железнодорожного транспорта было разработано и изготовлено в 70-80-е годы прошлого века. В настоящее время нет возможности радикально изменить состав парка таких вагонов путём массовой закупки новых установок. Это ставит вопрос о необходимости модернизации имеющихся вагонов, что не может быть проведено без учёта переходных процессов в таких установках.

Рассмотрим процесс охлаждения аппарата от начальной температуры (наружного воздуха) до рабочей температуры

Скорость изменения температуры помещения (аппарата) $t_{\text{пм}}$ и здесь определяется разностью между теплопритоком $Q_{\text{п}}$ и теплоотводом $Q_{\text{о}}$:

$$d t_{\text{пм}}/d\tau = (Q_{\text{п}} - Q_{\text{о}})/C.$$

Теплоприток $Q_{\text{п}} = k_1 F_1(t_{\text{н}} - t_{\text{пм}})$, где k_1 – коэффициент теплопередачи ограждения, F_1 – площадь ограждения, $t_{\text{н}}$ – температура наружного воздуха (окружающей среды).

При включении системы охлаждения возникает теплоотвод $Q_{\text{о}} = k_2 F_2(t_{\text{пм}} - t_{\text{о}})$, где k_2 – коэффициент теплообмена системы охлаждения, F_2 – площадь испарителя системы охлаждения, $t_{\text{о}}$ – температура хладагента в испарителе.

Для температуры аппарата $t_{\text{пм}}$ получаем уравнение

$$C d t_{\text{пм}}/d\tau = k_1 F_1(t_{\text{н}} - t_{\text{пм}}) - k_2 F_2 (t_{\text{пм}} - t_{\text{о}}).$$

Приходим к уравнению

$$C d t_{\text{пм}}/d\tau = M_1 - M_2 t_{\text{пм}},$$

где $M_1 = k_1 F_1 t_n + k_2 F_2 t_0$; $M_2 = k_1 F_1 + k_2 F_2$.

Решение уравнения имеет вид

$$Y = A \exp\{-\tau/\tau_0\},$$

где $A = Y(0) = k_2 F_2 (t_n - t_0)$ – постоянная интегрирования, переменная $Y = M_2 t_{\text{пм}} - M_1$, постоянная времени $\tau_0 = C(k_1 F_1 + k_2 F_2)$.

Отсюда вытекает, что

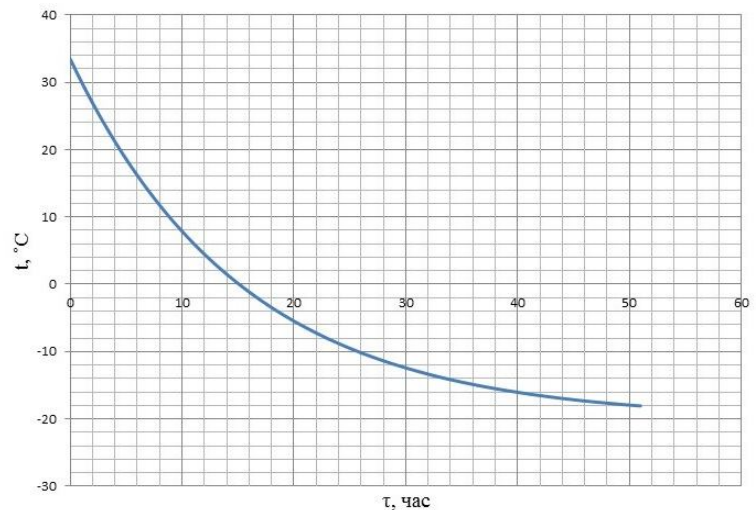
$$t_{\text{пм}}(\tau) = t_{\text{пм.рав.}} + B \exp\{-\tau/\tau_0\},$$

где равновесная температура охлаждаемого помещения определяется известной формулой $t_{\text{пм.рав.}} = M_1/M_2 = (k_1 F_1 t_n + k_2 F_2 t_0) / (k_1 F_1 + k_2 F_2)$, а $B = k_2 F_2 (t_n - t_0) / (k_1 F_1 + k_2 F_2)$.

На рисунке показана расчётная кривая полного охлаждения модели рефрижераторного вагона от температуры окружающей среды (35°C) до рабочей температуры.

При проведении расчёта считалось, что теплоизоляция вагона выполнена из пенополиуритана, коэффициент теплообмена принимался равным десяти.

Для дальнейшего уточнения модели необходимо сравнение с реальными характеристиками, теоретическая оценка необходимого времени работы холодильных машин во время рейса, которое на практике составляет обычно 4-6 часов.



Литература

1. Ягодин С. К., Саутенков В. А. Изотермический подвижной состав. – М.: Транспорт, 1986. – 192 с.
2. Курылёв Е. С. Холодильные установки. – СПб.: Политехника, 2002. – 576 с.
3. Постернак С. Ф., Зуев Ю. Ф. Холодильные машины и установки. – М.: Транспорт, 1982. – 335 с.
4. Ворон О. А., Фролов Р. А., Фодоркин Д. М., Украинцев М. Г. Модернизация холодильного оборудования вагона – ресторана // Холодильная техника. – 2005. – № 8. – С. 30-32.

THERMAL REGIMES OF TRANSPORT REFRIGERATION UNITS

I. M. Shushlebin

Voronezh State Technical University

A model of the cooling process of a transport refrigeration unit is discussed, when the heat input through thermal insulation protection plays a decisive role.

Keywords: transport refrigeration unit, thermal regime, changes in outside temperature.

ВЯЗКОЕ ТОРМОЖЕНИЕ В ДИССИПАТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ

И. Л. Батаронов, Т. А. Надеина

Воронежский государственный технический университет
nadtana@mail.ru

Получено выражение для обобщенной восприимчивости диссипативного кристалла с дислокациями. Проанализирован вид матрицы коэффициентов динамического торможения в предельных случаях.

Ключевые слова: дислокация, диссипация.

Учет диссипативных процессов, приводящих к затуханию колебаний в кристалле и вязкому торможению дислокаций, может быть выполнен введением в правую часть уравнения движения системы диссипативной силы, являющейся функцией обобщенных скоростей:

$$f_D = \frac{\delta R}{\delta \dot{w}}. \quad (1)$$

Здесь w – обобщенные координаты, а R – диссипативная функция, которую для малых скоростей можно записать в виде:

$$R = \frac{1}{2} \int \eta_{iklm}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\delta w_{ik}}{\delta t}(\vec{r}) \frac{\delta w_{lm}}{\delta t}(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}'. \quad (2)$$

Здесь тензор η_{iklm} – ядро интегрального оператора, описывающего пространственную дисперсию модулей упругости, обусловленную вязкостью кристалла.

Представим упругую дисторсию в виде разности градиента поля смещений среды и пластической дисторсии.

После преобразования диссипативной функции (2), выполнения вариационной процедуры получаем линейные уравнения относительно динамических переменных ξ_α и \vec{u} вида:

$$\begin{cases} \tilde{G}_{ik} u_k + \sum_{\beta} i q_k \tilde{\lambda}_{ik}^{\beta} \exp(-i \vec{q}_{\perp} \vec{r}^{\alpha\beta}) \xi_{\beta} = f_i, \\ K_{\alpha} \xi_{\alpha} - i \iint \tilde{\lambda}_{ik}^{\alpha} q_i u_k \frac{d\vec{q}_{\perp}}{(2\pi)^2} - i\omega \sum_{\beta} \iint \eta_{\alpha\beta} \exp(i \vec{q}_{\perp} \vec{r}^{\alpha\beta}) \frac{d\vec{q}_{\perp}}{(2\pi)^2} \xi_{\beta} = f_{\alpha}, \end{cases}$$

где $\tilde{G}_{ik} = \tilde{\lambda}_{iklm}(\vec{q}) q_l q_m - \rho \omega^2 \delta_{ik}$ – Фурье-образ динамического уравнения теории упругости диссипативной среды. Выразим переменные u_k из первого уравнения системы и подставим во второе уравнение, в итоге получим:

$$K_{\alpha} \xi_{\alpha} + \sum_{\beta} \left[\tilde{G}_{\alpha\beta} - i\omega \int \frac{d\vec{q}_{\perp}}{(2\pi)^2} \eta_{\alpha\beta} \exp(i \vec{r}^{\alpha\beta} \vec{q}_{\perp}) \right] \xi_{\beta} = f_{\alpha}. \quad (3)$$

Отметим, что величины K_α определяются для статических условий, поэтому не подвергаются перенормировке с тензором $\hat{\eta}$.

Выражение для $\tilde{G}_{\alpha\beta}$ аналогично соотношению для диссипативного кристалла имеет вид:

$$\tilde{G}_{\alpha\beta} = -\int \frac{d\vec{q}_\perp}{(2\pi)^2} q_i \tilde{\lambda}_{ik}^\alpha \tilde{G}_{kl} \tilde{\lambda}_{lm}^\beta q_m \exp(i\vec{r}^{\alpha\beta} \vec{q}_\perp). \quad (4)$$

Поскольку функции $\eta_{iklm}(\vec{q})$ в отсутствие магнитного поля зависят только от модуля вектора \vec{q} , то в (4) можно проинтегрировать по полярному углу ψ в результате имеем интегральное соотношение для $\tilde{G}_{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\alpha\beta}(q_z, \omega) = & -\frac{1}{4\pi} \int_0^{q_0} q_\perp dq_\perp \tilde{\mu} \left\{ b_s^\alpha b_s^\beta (J_0 + \cos 2\varphi J_2) + b_e^\alpha b_e^\beta \times \right. \\ & \times \left[J_0 + \left(\frac{s_t^2}{s_l^2} - 1 \right) (J_0 - \cos 4\varphi J_4) \right] + b_s^\alpha b_s^\beta \left[\frac{(P_{tz} + 2\omega^2) J_0 - \cos 2\varphi P_{tz} J_2}{P_t} + \right. \\ & + \frac{4s_t^2 q_z^2}{\omega^2} (J_0 + \cos 2\varphi J_2) \left(\frac{P_{tz}}{P_t} - \frac{P_{lz}}{P_l} \right) \left. \right] - b_e^\alpha b_e^\beta \left[2 \frac{P_{tz}}{P_t} J_0 - \frac{(J_0 - \cos 4\varphi J_4)}{\omega^2} \times \right. \\ & \times \left. \left(\frac{s_t^2 P_{tz}^2}{s_l^2 P_t} - \frac{P_{lz}^2}{P_l} \right) \right] + 2i (b_s^\alpha b_e^\beta + b_s^\beta b_e^\alpha) s_t^2 q_\perp \left[\frac{\cos \varphi J_1}{P_t} + \frac{\cos \varphi J_1 + \cos 3\varphi J_3}{\omega^2} \left(\frac{P_{tz}}{P_t} - \frac{P_{lz}}{P_l} \right) \right] \left. \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

где $s_v^2 = c_v^2 - 2i\omega\gamma_v(\vec{q})/q^2$, γ_v – коэффициенты затухания звука, $J_n(q_\perp r)$ – функция Бесселя первого рода порядка n , $P_v = s_v^2 q^2 - \omega^2$, $P_{vz} = s_v^2 q_z^2 - \omega^2$.

Дальнейшее интегрирование по $d\vec{q}_\perp$ не представляется возможным. Однако ввиду малости коэффициентов γ основной интерес представляет главная линейная по ω часть, которая характеризуется матрицей коэффициентов динамического торможения:

$$\begin{aligned} B_{\alpha\beta} = & -\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} \text{Im} \left(\tilde{G}_{\alpha\beta} - \frac{i\omega}{2\pi} \int \eta_{\alpha\beta} J_0(rq_\perp) q_\perp dq_\perp \right) = \\ = & \frac{\rho}{2\pi} \left\{ b_s^2 \int \frac{dq}{q} \gamma_t(q) (J_0 - \cos 2\varphi J_2) + b_e^2 \left[\left(1 - 2 \frac{c_t^2}{c_l^2} \right) \int \frac{dq}{q} \gamma_t(q) (J_0 - \cos 4\varphi J_4) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{c_t^2}{c_l^2} \int \frac{dq}{q} \gamma_t(q) (J_0 - \cos 4\varphi J_4) \right] \right\}, \quad (6) \end{aligned}$$

где $J_n = J_n(qr)$ и $\alpha \neq \beta$. Интеграл в (6) упрощается в предельных случаях $r \gg l$ и $r \ll l$, где l – длина свободного пробега квазичастиц, определяющих коэффициенты затухания звука γ_v . В первом случае в интеграле (6) существенна длинноволновая часть функции $\gamma_v(q)$, которая имеет общий вид $\gamma_v = \gamma_0 v l^2 q^2$ [1].

Интегралы в (6) имеют величину порядка $-\cos n\varphi \cdot \gamma_0 l^2 / r^2$. Ввиду малости отношения l/r можно сделать вывод, что недиагональные элементы $B_{\alpha\beta}$ в этом пределе пренебрежимо малы по сравнению с диагональными.

В другом предельном случае $r \ll l$ в интеграле (6) существенны значения $q_{\perp} \ll 1/l$ и для явного вида функций $\gamma_v(q)$ нужно использовать конкретный механизм затухания, имеем $\gamma_t \sim \gamma_{0t}$, $\gamma_l \sim \gamma_{0l} q l$. Тогда оценка с дает для интегралов, содержащих γ_t , величину $\sim \gamma_{0t} \ln(l/r)$, а для содержащих γ_l – величину $\sim \gamma_{0l} (l/r) \sin^2 2\varphi$. В этом пределе взаимодействие упругих полей дислокаций в скоплении может оказывать существенное влияние на их динамическое торможение. Отметим, что согласно приведенной оценке такое взаимодействие отсутствует для краевых дислокаций в стенке ($\varphi = \pi/2$) или плоском скоплении ($\varphi = 0, \varphi = \pi$).

Литература

1. Батаронов И. Л. Влияние центров пиннинга и рельефа Пайерлса на обобщенную восприимчивость дислокаций в реальных кристаллах / И. Л. Батаронов, В. В. Дежин, А. М. Рощупкин // Изв. АН. – 1993. – Т. 57. – № 11. – С. 97-105.

VISCOUS DECELERATION IN A DISSIPATIVE CRYSTAL

I. L. Bataronov, T. A. Nadeina

Voronezh State Technical University

An expression for the generalized susceptibility of a dissipative crystal with dislocations is obtained. The form of the matrix of dynamic drag coefficients is analyzed in the limiting cases.

Keywords: dislocation, dissipation.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ГИРОСКОПА

И. Л. Батаронов, Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков, В. В. Пешков, С. В. Писарев

Воронежский государственный технический университет
vmfmm@mail.ru

Исследовано влияния крышки датчика волнового твердотельного гироскопа на спектр собственных частот резонатора. Показано, что наличие крышки практически не изменяет основные собственные частоты резонатора.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, волновой твердотельный гироскоп, собственные частоты, резонатор.

Эффект инертности стоячей упругой волны во вращающихся осесимметричных твердотельных оболочках был теоретически установлен Г. Н. Вруан ещё в 1890 году [1]. Но только в 1965 году на его основе сотрудником компании General Motors Corporation (USA) D. D. Lynch была предложена и теоретически обоснована конструкция датчика угловой скорости, названного им полусферическим резонаторным гироскопом (в российской терминологии волновой твердотельный гироскоп (ВТГ)) [2]. Большой вклад в развитие теории ВТГ внесли В. Ф. Журавлёв, Д. В. Климов, В. А. Матвеев, М. А. Басараб и др. [3-19]. Реально работающие ВТГ появились в США в середине 80-х годов прошлого века. В последующем ВТГ различных модификаций стали производиться в других странах, в том числе и в России [12, 16]. Эти перспективные устройства обладают долговечностью работы, малыми массо-габаритными параметрами и энергопотреблением, слабой чувствительностью к вибрациям и перегрузкам. Их точность определяется оптимальным выбором конструкции чувствительного элемента, возможностями технологии его изготовления и электроникой. Оптимизация осуществляется путём натурального и математического моделирования. Важно отметить, что эффективность математического моделирования зависит от полноты математической модели ВТГ, выбранного численного метода и возможностей вычислительной техники. Математические модели ВТГ, построенные в работах [3-5] на основе теории упругости тонких осесимметричных оболочек, достаточно хорошо описывают поведение полусферического ВТГ и позволяют аналитическими методами исследовать влияние дефектов массы и формы на его параметры и характеристики, а также разработать алгоритмы его балансировки [6-15]. Однако в случае цилиндрического ВТГ с более сложной формой подвеса резонатора, использующего пьезоэлементы для раскачки и съёма сигнала, аналитические методы теряют свою эффективность. Необходимо использовать численные методы анализа математических моделей, описывающих физические процессы в чувствительных элементах ВТГ. Так, в работах [16-19] методом конечных элементов (МКЭ) были рассчитаны формы и часто-

ты собственных колебаний цилиндрических резонаторов ВТГ, а также термоупругие потери в них.

В Воронежском государственном техническом университете на кафедре высшей математики и физико-математического моделирования разрабатывается интегрированная система компьютерного моделирования криогенных гравиинерциальных датчиков (акселерометров, гироскопов, сейсмометров и гравиметров), и с её помощью осуществляется компьютерное моделирование их конструктивных элементов. При соответствующей адаптации и модификации, с её помощью можно проводить мультифизический конечно-элементный анализ чувствительных элементов ВТГ. Используемая программная среда состоит из конечно-элементной системы Comsol Multiphysics 4.2 [20] и конечно-элементного пакета программ Fempdесolver [21, 22].

Целью данной работы является исследование влияния крышки датчика ВТГ на спектр собственных частот резонатора.

В качестве прототипа для вычислительных экспериментов был взят один из вариантов ВТГ, выпускаемых фирмой Innalabs (Ireland) (рис. 1).

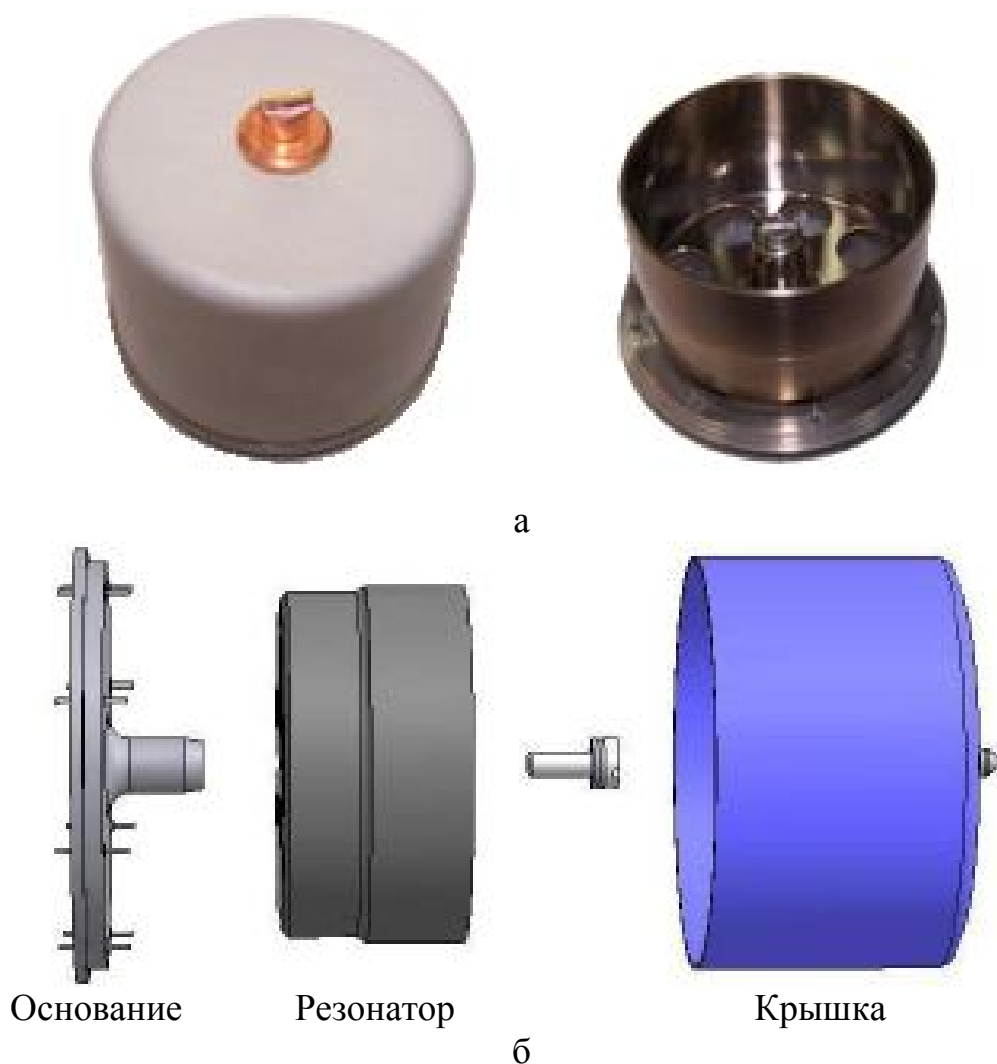


Рис. 1. Внешний вид (а) и конструктивная схема (б) ВТГ фирмы Innalabs [23]

Упрощённая геометрическая модель датчика ВТГ представлена на рис. 2-3.

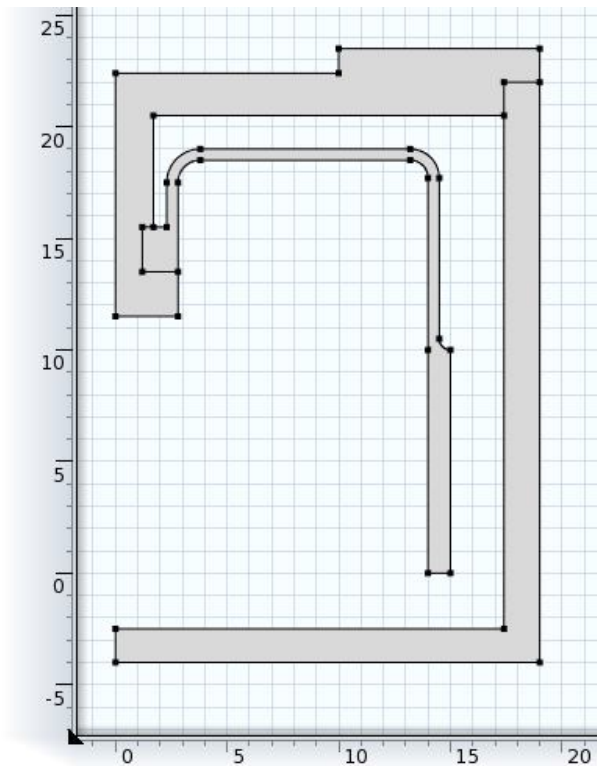


Рис. 2. Геометрия модели в сечении (размеры в мм)

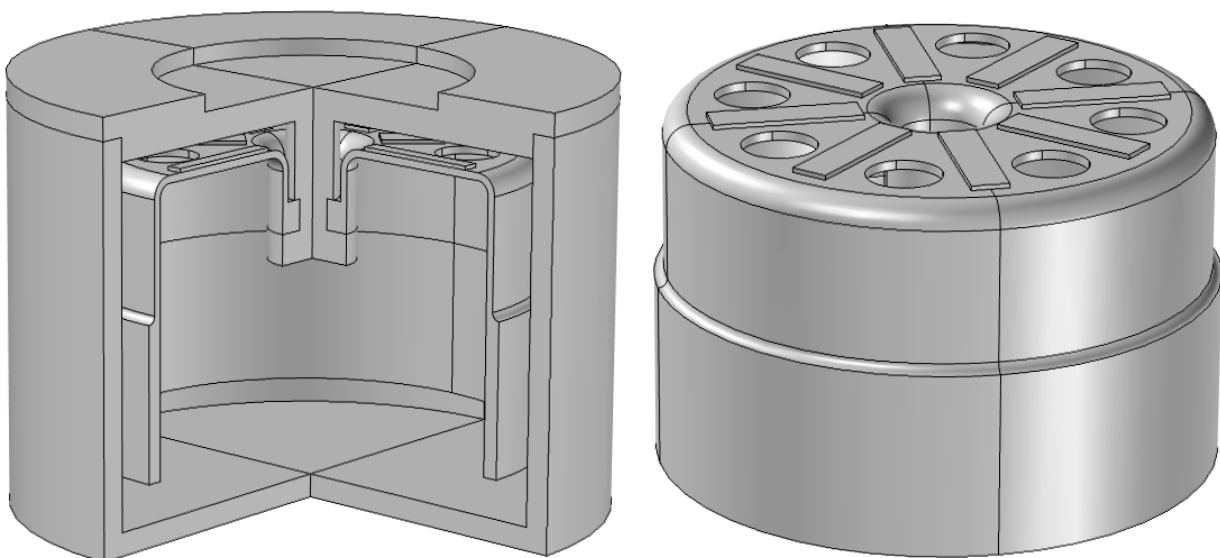


Рис. 3. Вид упрощенной геометрической модели датчика ВТГ с отверстиями в дне резонатора. Размеры пьезоэлементов 8×2×0.25 мм.

Для нахождения собственных частот и форм колебаний решается краевая задача в базовом модуле Comsol Multiphysics 4.2 для уравнения

$$-\rho\omega^2\mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0,$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : \mathbf{s},$$

с граничными условиями

$$\mathbf{u} = \mathbf{0},$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}.$$

Здесь ρ – плотность материала, $\omega = 2\pi f$, f – собственная частота, \mathbf{u} – векторное поле смещений, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений второго ранга, $\mathbf{s} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^*)$ – тензорное поле деформаций 2-го ранга, \mathbf{c} – тензор модулей упругости 4-го ранга, \mathbf{n} – единичный вектор нормали к границе области решения задачи.

Параметры используемых материалов представлены в табл. 1, 2.

Таблица 1

Материал резонатора, основания и крышки (сталь 12Х18Н10Т)

| Описание | Значение |
|----------------------|---------------------------------------|
| Модуль Юнга | $198 \cdot 10^9$ Па |
| Коэффициент Пуассона | 0.3 |
| Плотность | $7900 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$ |
| Модель материала | Изотропная |

Таблица 2

Материал пьезоэлементов (РІК-181)

| Описание | Значение |
|----------------------|---------------------------------------|
| Модуль Юнга | $166 \cdot 10^9$ Па |
| Коэффициент Пуассона | 0.34 |
| Плотность | $7800 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$ |
| Модель материала | Изотропная |

Используются тетраэдральные лагранжевы элементы 2-го порядка. Конкретное число конечных элементов (50 – 100 тысяч) и степеней свободы (350 – 500 тысяч) зависит от решаемой задачи. Среднее качество элементов равно 0.8.

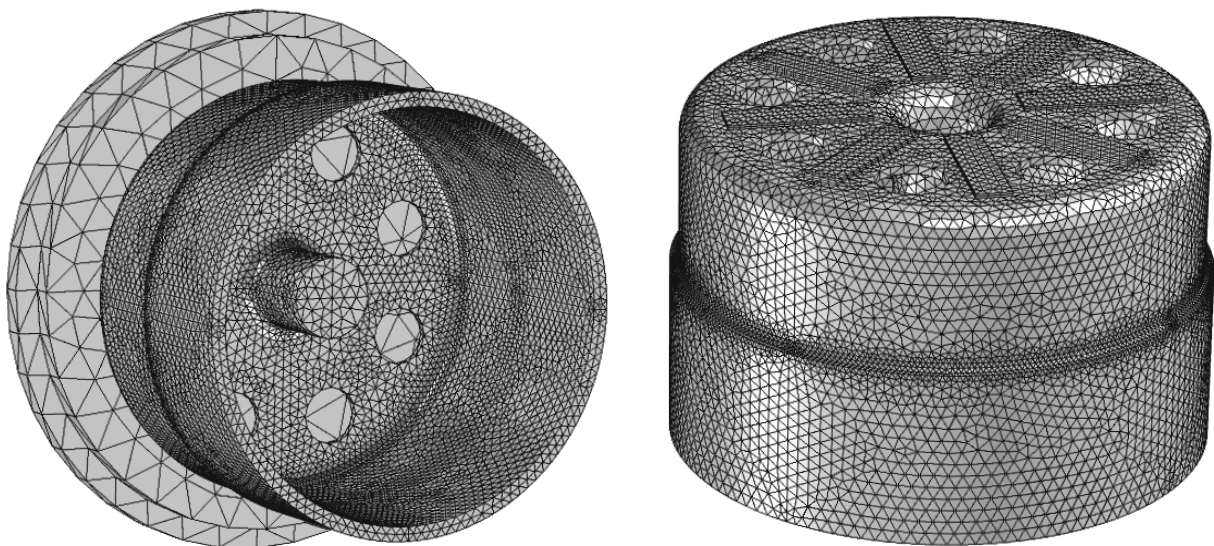


Рис. 4. Конечно-элементная сетка

В качестве примера показаны формы вырожденных собственных колебаний резонатора (рис. 5-10).

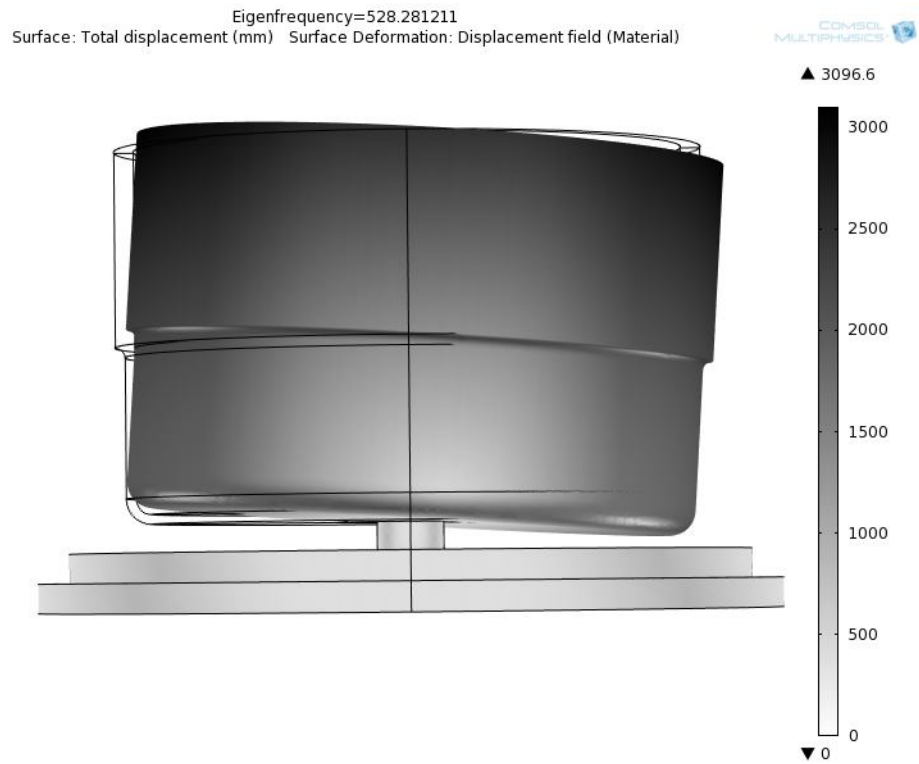


Рис. 5

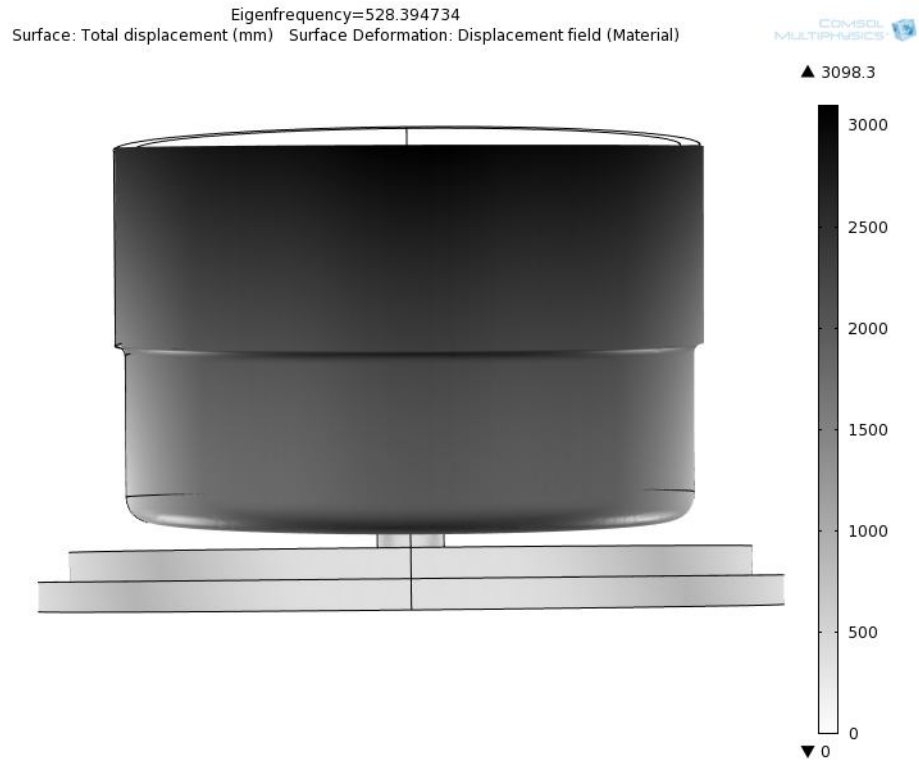


Рис. 6

Eigenfrequency=3421.438189
Surface: Total displacement (mm) Surface Deformation: Displacement field (Material)

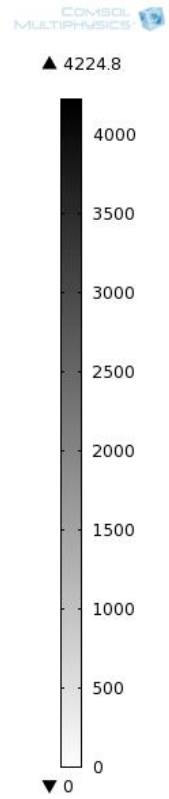
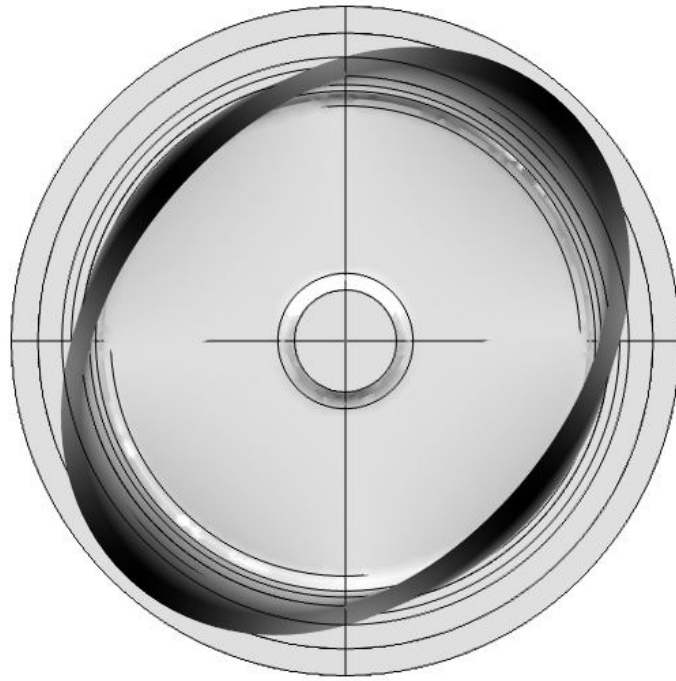


Рис. 7

Eigenfrequency=3421.510948
Surface: Total displacement (mm) Surface Deformation: Displacement field (Material)

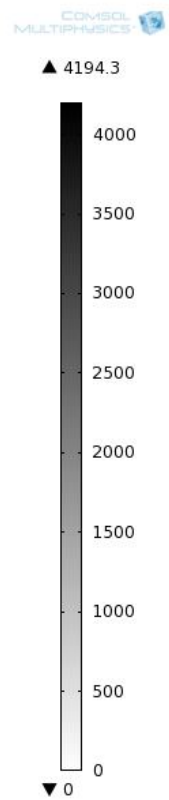
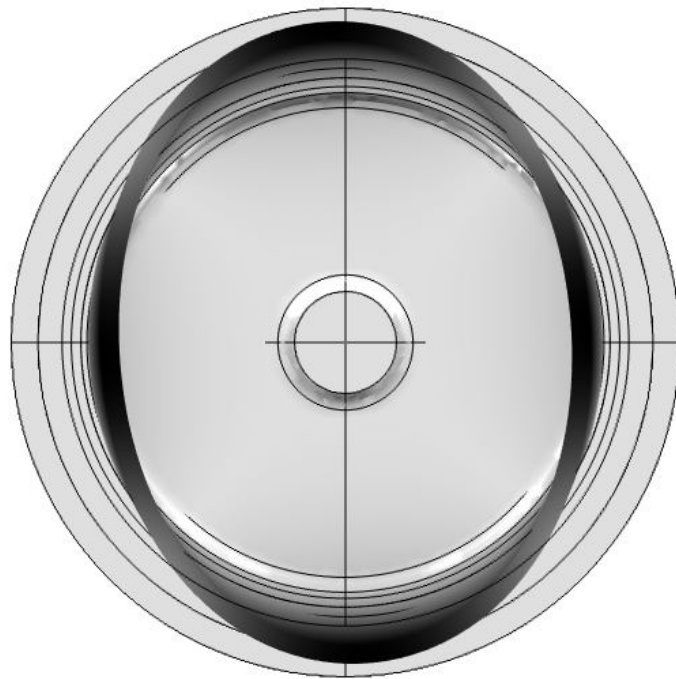


Рис. 8

Eigenfrequency=8976.404201
Surface: Total displacement (mm) Surface Deformation: Displacement field (Material)

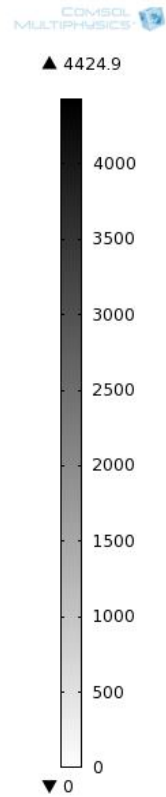
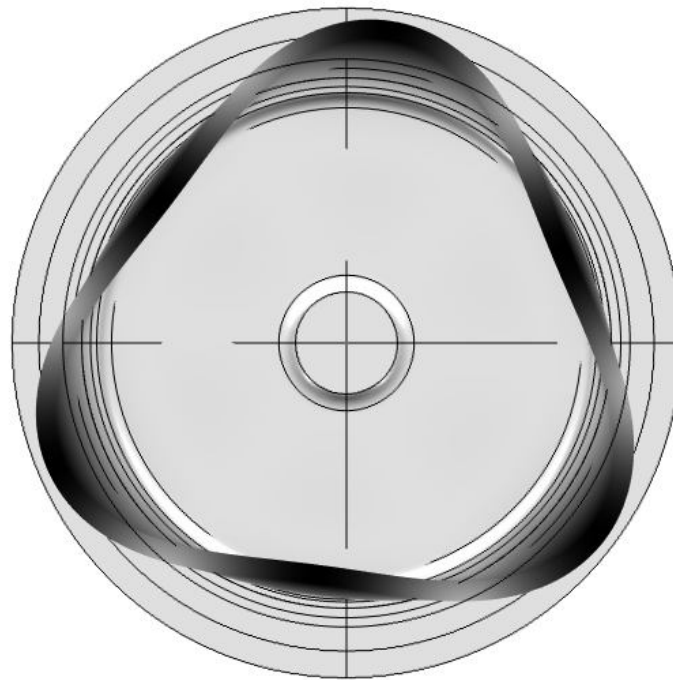


Рис. 9

Eigenfrequency=8976.461808
Surface: Total displacement (mm) Surface Deformation: Displacement field (Material)

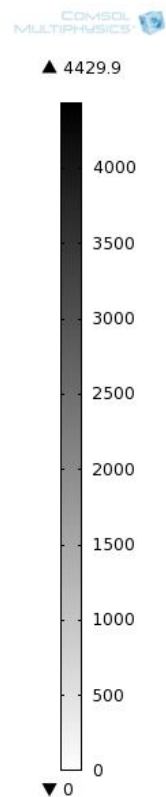
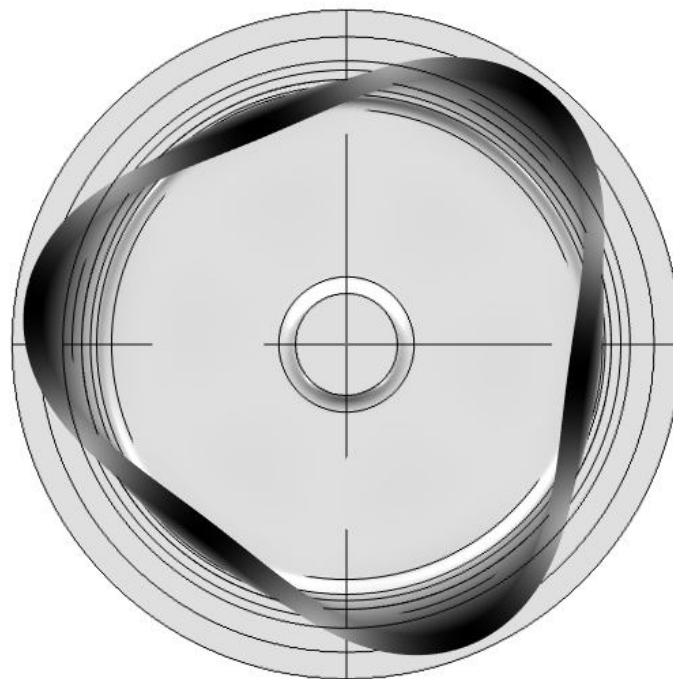


Рис. 10

В табл. 3, 4 приводятся результаты расчётов первых десяти собственных частот резонатора без отверстий и с отверстиями, с крышкой и без крышки.

Таблица 3

Влияние крышки на собственные частоты резонатора

| Без отверстий | | | С отверстиями | | |
|------------------|------------------|------------|------------------|------------------|------------|
| Без крышки | С крышкой | Δf | Без крышки | С крышкой | Δf |
| 528.2812 | 528.2835 | 0.0023 | 510.9136 | 510.9133 | 0.0003 |
| 528.3947 | 528.3975 | 0.0028 | 511.1511 | 511.1512 | 0.0001 |
| 1232.9441 | 1232.9466 | 0.0025 | 1239.9689 | 1239.9668 | 0.0021 |
| 1407.8903 | 1407.893 | 0.0027 | 1332.5558 | 1332.5557 | 0.0001 |
| 3421.4382 | 3421.4382 | 0 | 3412.053 | 3412.053 | 0 |
| 3421.5109 | 3421.5109 | 0 | 3412.1237 | 3412.1237 | 0 |
| 7202.7089 | 7202.8303 | 0.1214 | 7176.0804 | 7176.0539 | 0.0265 |
| 7208.3325 | 7208.4878 | 0.1553 | 7186.772 | 7186.7601 | 0.0119 |
| 8976.4042 | 8976.4042 | 0 | 8963.5989 | 8963.5989 | 0 |
| 8976.4618 | 8976.4618 | 0 | 8963.6138 | 8963.6138 | 0 |

Таблица 4

Влияние крышки на собственные частоты резонатора с пьезоэлементами

| Без отверстий | | | С отверстиями | | |
|---------------|-----------|------------|---------------|-----------|------------|
| Без крышки | С крышкой | Δf | Без крышки | С крышкой | Δf |
| 573.0489 | 573.0438 | 0,0051 | 557.9752 | 558.002 | 0,0268 |
| 573.1031 | 573.2381 | 0,135 | 558.1223 | 558.1458 | 0,0235 |
| 1229.3048 | 1229.3532 | 0,0484 | 1236.4151 | 1236.396 | 0,0191 |
| 1505.1692 | 1505.1862 | 0,017 | 1438.3493 | 1438.3532 | 0,0039 |
| 3426.7745 | 3426.7772 | 0,0027 | 3418.9154 | 3418.9154 | 0 |
| 3426.8456 | 3426.8404 | 0,0052 | 3418.9927 | 3418.9927 | 0 |
| 7115.2789 | 7115.7464 | 0,4675 | 7094.3977 | 7095.4474 | 1,0497 |
| 7118.7835 | 7122.7099 | 3,9264 | 7097.0712 | 7098.0181 | 0,9469 |
| 8978.9526 | 8978.9502 | 0,0024 | 8967.3536 | 8967.3536 | 0 |
| 8979.0123 | 8979.0186 | 0,0063 | 8967.4674 | 8967.4674 | 0 |

Из сравнения данных, представленных в табл. 3-4, видно, что наличие крышки заметно изменяет только 7-8 собственные частоты, тогда как основные рабочие собственные частоты практически не меняются. Это говорит о том, что установка крышки не должна приводить к нарушению балансировки резонатора.

Литература

1. Bryan G. H. On the Beats in the Vibrations of a Revolving Cylinder or Bell // Proc. Camb. Phil. Soc. Math. Phys. Sci. 1890. Vol. 7. P. 101 – 111.
2. Lynch D. D. Bell gyro and improved means for operating same. US Patent 3656354.
3. Журавлев В. Ф., Климов Д. М. Волновой твердотельный гироскоп. М.: Наука, 1985. 125 с.
4. Журавлёв В. Ф. Теоретические основы волнового твердотельного гироскопа (ВТГ) // Изв. РАН. МТТ. 1993. № 3. С. 15-26.
5. Журавлёв В. Ф., Линч Д. Д. Электрическая модель волнового твердотельного гироскопа // Изв. РАН. МТТ. 1995. № 5. С. 12 – 17.
6. Жбанов Ю. К., Журавлёв В. Ф. О балансировке волнового твердотельного гироскопа // Изв. РАН. МТТ. 1998. № 4. С. 4 – 16.

7. Журавлёв В. Ф. О дрейфе волнового твердотельного гироскопа (ВТГ) на вращающемся основании при управлении квадратурой в режимах «быстрого» и «медленного» времени // Изв. РАН. МТТ. 2003. № 3. С. 13-15.
8. Журавлёв В. Ф. Дрейф несовершенного ВТГ // Изв. РАН. МТТ. 2004. № 4. С. 19-23.
9. Матвеев В. А., Липатников В. И., Алёхин А. И. Проектирование волнового твердотельного гироскопа. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 1967. – 168 с.
10. Басараб М. А., Кравченко В. Ф., Матвеев В. А. Математическое моделирование физических процессов в гироскопии. М: Радиотехника, 2005. 176 с.
11. Матвеев В. А., Лунин Б. С., Басараб М. А. Навигационные системы на волновых твердотельных гироскопах. М.: Физматлит, 2008. 240 с.
12. Лунин Б. С., Матвеев В. А., Басараб М. А. Волновой твердотельный гироскоп. Теория и технология. М.: Радиотехника, 2014. 176 с.
13. Басараб М. А., Ивойлов М. А., Матвеев В. А. Оптимизация балансировки волнового твердотельного гироскопа с помощью нейронной сети Хопфилда // Наука и образование. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Электронный журнал. 2012. № 10, С. 1-22.
14. Басараб М. А., Матвеев В. А., Лунин Б. С., Фегисов С. В. Влияние неоднородности толщины оболочки волнового твердотельного гироскопа на параметры дебаланса // Гироскопия и навигация. 2016. Т. 24, № 4, С. 14-24.
15. Вахляровский Д. С., Гуськов А. М., Басараб М. А., Матвеев В. А. Численное исследование резонаторов ВТГ различной формы при наличии дефектов // Наука и образование. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Электронный журнал. 2016. № 10, С. 1-22.
16. Матвеев В. А., Лунин Б. С., Басараб М. А., Фомичев А. В., Чуманкин Е. А., Юрин А. В. Миниатюрные волновые твердотельные гироскопы для малых космических аппаратов // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. “Приборостроение”. 2014. №4. С. 80-96.
17. Лунин Б. С., Юрин А. В., Басараб М. А., Матвеев В. А., Чуманкин Е. А. Термоупругие потери в конструкционных материалах резонаторов волновых твердотельных гироскопов // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. “Приборостроение”. 2015. №2. С. 28-39.
18. Вахляровский Д. С., Гуськов А. М., Басараб М. А., Матвеев В. А. Использование метода конечных элементов совместно с методом возмущений в задаче вычисления расщепления частоты оболочки с дефектом формы срединной поверхности // Наука и образование. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Электронный журнал. 2016. № 5, С. 152-174.
19. Вахляровский Д. С., Гуськов А. М., Басараб М. А., Матвеев В. А. Численное исследование резонаторов ВТГ различной формы при наличии дефектов // Наука и образование. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Электронный журнал. 2016. № 10, С. 1-22.
20. Comsol Multiphysics [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. Режим доступа: <http://www.comsol.com>.
21. Кострюков С. А., Пешков В. В., Шунин Г. Е. и др. Конечно-элементный комплекс программ FEMPDSEsolver // Системы управления и информационные технологии. – 2010. – № 4(42). – С. 52-57.
22. Шунин Г. Е., Кострюков С. А., Пешков В. В., Ислентьева М. И. Развитие системы компьютерного моделирования сверхпроводящих подвесов // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2014. Т. 10. № 1. С. 49-52.
23. A Set of High Accuracy Low Cost Metallic Resonator CVG / V. V. Chikovani, I. M. Okon, A. S. Barabashov, P. Tewksbury // Proceedings of IEEE/ION PLANS 2008, Monterey, CA, May 2008, pp. 238-243.

SIMULATION OF A WAVE SOLID-STATE GYROSCOPE

I. L. Bataronov, G. E. Shunin, S. A. Kostryukov, V. V. Peshkov, S. V. Pisarev

Voronezh State Technical University

The influence of the sensor cover of the wave solid-state gyroscope on the spectrum of the eigenfrequencies of the resonator is investigated. It is shown that the presence of a cover practically does not change the main eigenfrequencies of the resonator.

Keywords: computer simulation, wave solid-state gyroscope, eigenfrequencies, resonator.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|-----|
| Алексеев Р. П., Бормонтон Е. Н., Быкадорова Г. В., Цоцорин А. Н. Приборно-технологическое проектирование LDMOS-транзисторов с отрицательным градиентом примеси LDD-области. | 3 |
| Долгополов М. А., Бабичева С. Ю. Планирование протонной терапии глаза на основе моделирования. | 9 |
| Бондарев А. В., Батаронов И. Л., Пашуева И. М. Моделирование методом Монте-Карло релаксации намагниченности в аморфных сплавах редкоземельных металлов. | 17 |
| Бондарев А. В., Батаронов И. Л., Пашуева И. М., Бочаров А. И. Компьютерное моделирование атомной структуры аморфных сплавов системы Re-Gd. | 24 |
| Бондарев А. В., Ожерельев В. В., Батаронов И. Л. Рентгенодифракционное исследование атомной структуры аморфных сплавов системы Re-Gd. | 31 |
| Гришанов М. Е., Родин В. А. Численное моделирование задач оптимального размещения с использованием аналогов точек Ферма-Штейнера. | 37 |
| Дёмин Ю. И., Чернокнижников В. Д. Моделирование процессов в электрических сетях с элементами солнечной энергетики. | 40 |
| Дубровский О. И., Павленко А. В. Моделирование электронной структуры карбид-кремниевых нанотрубок типа "zigzag". | 46 |
| Машкина Е. С. Устойчивость и адаптивность к структурным перестройкам нанокластеризованных фаз предплавления меди. | 49 |
| Кирпичева И. А. Уменьшение уровня бокового излучения в равноамплитудных антенных решетках при сохранении направленных свойств. | 54 |
| Кирпичева И. А., Останков А. В. Уровень бокового излучения равноамплитудной неэквидистантной антенной решетки с фиксированным по ширине лучом. | 60 |
| Нечаев В. Н., Шуба А. В. Структурные поверхностные фазовые переходы. | 68 |
| Ожерельев В. В., Косилов А. Т., Аксенова О. Н., Калинин Р. Б. Моделирование деформации металлического стекла железа в условиях одноосного сжатия. | 95 |
| Пашуева И. М., Бондарев А. В., Пасмурнов С. М. Математическая модель подсистемы принятия оперативных управленческих решений в работе центра дорожно-патрульной службы. | 100 |
| Пашуева И. М., Бондарев А. В., Пасмурнов С. М. Моделирование подсистемы принятия оперативных управленческих решений в работе центра дорожно-патрульной службы с применением функции агрегирования. | 103 |

| | |
|--|-----|
| Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Максимова Е. И. Компьютерный эксперимент по определению пространственной структуры нольмерных объектов | 107 |
| Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Максимова Е. И. Роль компьютерного эксперимента в прогностическом конструировании новых термоэлектриков . | 111 |
| Потуданский Г. П., Переславцева Н. С., Максимова Е. И. Первопринципное компьютерное моделирование в программном пакете WIEN2k на примере ГЦК-никеля | 116 |
| Кочетков В. А., Макаров Е. В., Пузаков А. Ю. Определение оптимального значения адгезии ремонтных составов для восстановления аэродромных покрытий. | 123 |
| Кущева И. С., Сушко Т. И., Хухрянская Е. С. Обобщенная математическая модель описания входного объекта для задач размещения . . | 128 |
| Сушко Т. И., Чернышев И. И., Пашнева Т. В., Попов С. В. Оптимизация литниково-питающей системы в программе LVMFlow | 134 |
| Сушко Т. И., Чернышев И. И., Караев Р. Ш., Пашнева Т. В. Моделирование влияний изменений температурно-фазовых полей на образование дефектов стальной отливки посредством LVMFlow | 140 |
| Катрахова А. А., Купцов В. С. Анализ стабилизации динамических распределений и их дискретных функций для систем массового обслуживания. | 145 |
| Катрахова А. А., Купцов В. С., Малиновкин В. А. Графо-аналитический анализ сигналов системы автоматического управления с нелинейной обратной связью методом Фурье. | 149 |
| Ускова Н. Б., Шелковой А. Н. Об одной задаче о продольном изгибе тяжёлых стержней | 159 |
| Шушлебин И. М. Концентрация магнитного потока в межгранульном пространстве ВТСП Y-Ba-Cu-O | 165 |
| Шушлебин И. М. Тепловые режимы транспортных холодильных установок | 169 |
| Батаронов И. Л., Надеина Т. А. Вязкое торможение в диссипативном кристалле | 171 |
| Батаронов И. Л., Шунин Г. Е., Кострюков С. А., Пешков В. В., Писарев С. В. Моделирование волнового твердотельного гироскопа | 174 |

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XVIII Международного семинара

(г. Воронеж, 30 июня 2017 г.)

Часть 2

В авторской редакции

Подписано в печать 12.12.2018.

Формат 60×84/16. Бумага для множительных аппаратов.

Усл. печ. л. 11,6. Тираж 350 экз.

Заказ № 208.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

394026 Воронеж, Московский проспект, 14

Участок оперативной полиграфии издательства ВГТУ

394026 Воронеж, Московский проспект, 14