

ISSN 2077-3110

# **ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ**

**Материалы XIX Международного семинара**

**Воронеж 2018**

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российская академия наук

Воронежский государственный технический университет

Институт проблем химической физики РАН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XIX Международного семинара  
(г. Воронеж, 24 ноября 2017 г.)

Воронеж 2018

УДК 53.072:519.673(06)

ББК 22.1я4

Ф 503

Физико-математическое моделирование систем: материалы XIX Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2018. 168 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.

### **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*  
А.А. Долгачев (ВГТУ, г. Воронеж, Россия)  
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*  
К.В. Боженко (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия), *сопредседатель*  
С.Д. Кургалин (ВГУ, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*  
В.Н. Нечаев (ВГТУ, 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)  
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

## ВЛИЯНИЕ УПОРЯДОЧЕНИЯ ОПЕРАТОРОВ ПОЛЕЙ СМЕЩЕНИЙ ОТДЕЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК НА ПОЛЕ ДЕФОРМАЦИИ СВЯЗАННОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ

О.П. Абрамова, С.В. Абрамов

Донецкий национальный университет  
[oabramova@ua.fm](mailto:oabramova@ua.fm)

Методом численного моделирования исследовано поведение поля деформации связанной фрактальной структуры с квантовыми точками. Показано, что результирующее поле деформации структуры с числом квантовых точек больше двух существенно зависит от упорядочения операторов полей смещений для отдельных квантовых точек. Использование нулевых операторов для пар квантовых точек позволяет получить информацию об отдельных квантовых точках. Перестановка пар операторов позволяет переносить информацию из одной квантовой точки в другую

Ключевые слова: связанные фрактальные структуры, квантовые точки, поле деформации, упорядочение операторов, численное моделирование

### Введение

Для создания квантовых компьютеров (которые учитывают явления квантовой суперпозиции и перепутанности для передачи, обработки, хранения информационных данных) возникает необходимость исследования различных физических свойств наноструктур и метаматериалов [1]. В [2, 3] изучены особенности стохастического состояния поля деформации связанных фрактальных многослойных наносистем, наноловушек, квантовых точек с учетом вариации переменных параметров. Исследованию взаимовлияния отдельных структур, аттракторов, стохастических процессов друг на друга в связанной фрактальной структуре посвящены работы [4, 5]. С точки зрения экспериментальной реализации квантового компьютера актуальным является изучение различных фрактальных структур с квантовыми точками. Целью данной работы является исследование влияния упорядочения операторов полей смещений отдельных квантовых точек на поле деформации связанной фрактальной структуры.

### Упорядочение операторов полей смещений отдельных квантовых точек

В работе [3] для описания стохастического состояния поля деформации многослойной наносистемы было получено восемь модельных нелинейных уравнений относительно безразмерной функции смещения  $u$ . Появление восьми уравнений связано с наличием различных ветвей для модулей  $\pm k_u$ ,  $\pm k'_u$  функций эллиптического синуса из неявно заданного уравнения  $k_u^2 + (k'_u)^2 = 1$ . Переменные модули  $k_u$  являются функциями от индексов  $n$ ,  $m$ ,  $j$  узлов объемной дискретной решетки с размерами  $N_1 \times N_2 \times N_3$ .

В качестве исходного уравнения для безразмерной функции смещения  $u$  в данной работе рассмотрим вторую ветвь, уравнение которой имеет вид [3]

$$u = u_2 = k_u^2(1 - 2\text{sn}^2(u_2 - u_0, k'_u)); \quad k_u^2 = (1 - \alpha) / Q, \quad (1)$$

где  $u_0$  – постоянное (критическое) смещение;  $\alpha$  – фрактальная размерность поля деформации  $u$  вдоль оси  $Oz$  ( $\alpha \in [0,1]$ );  $Q$  определяет вид фрактальной структуры, тип аттракторов и учитывает взаимодействие узлов, как в плоскости основной прямоугольной дискретной решетки  $N_1 \times N_2$ , так и межплоскостные взаимодействия.

Рассмотрим связанную фрактальную структуру, состоящую из четырех отдельных фрактальных квантовых точек ( $i=1,2,3,4$ ). С учетом (1) нелинейные уравнения для безразмерной функции смещения  $u = u_2$  узла решетки имеет вид

$$u = u_2 = \sum_{i=1}^4 u_{Ri}; \quad u_{Ri} = R_i k_{ui}^2(1 - 2\text{sn}^2(u_2 - u_{0i}, k'_{ui})); \quad (2)$$

$$k_{ui}^2 = (1 - \alpha_i) / Q_i; \quad k'_{ui} = (1 - k_{ui}^2)^{1/2}; \quad (3)$$

$$Q_i = p_{0i} - b_{1i}(n - n_{0i})^2 / n_{ci}^2 - b_{2i}(m - m_{0i})^2 / m_{ci}^2 - b_{3i}(j - j_{0i})^2 / j_{ci}^2. \quad (4)$$

Здесь параметры  $p_{0i}$ ,  $b_{1i}$ ,  $b_{2i}$ ,  $b_{3i}$ ,  $n_{0i}$ ,  $n_{ci}$ ,  $m_{0i}$ ,  $m_{ci}$ ,  $j_{0i}$ ,  $j_{ci}$  характеризуют различные фрактальные структуры;  $R_i$  определяют ориентацию полей деформации отдельных структур в связанной системе. В общем случае все параметры могут зависеть от индекса слоя  $j$  и безразмерного времени  $t$ . Нелинейные уравнения (2) – (4) можно решать методом итераций по любому из индексов  $n$ ,  $m$ ,  $j$ . Если один из этих индексов считать фиксированным, то результатом итерации будет функция смещения, представляющая собой стохастическую поверхность, зависящую от двух других индексов. Явный вид результирующей стохастической поверхности существенно зависит от порядка следования отдельных слагаемых в сумме (2) для поля деформации  $u_2$ , которые могут быть интерпретированы как отдельные операторы, описывающие суммарный стохастический процесс. Появление стохастичности связано с наличием переменных модулей  $k_{ui}$ ,  $k'_{ui}$  в (2), (3). В данной работе итерационная процедура по индексу  $n$  моделирует стохастический процесс на прямоугольной решетке с размерами  $N_1 \times N_2$ ,  $N_1=240$ ,  $N_2=180$ . Уравнения поверхностей рассматриваемых структур не зависят от индекса  $j$ , поэтому параметры  $b_{3i}=0$ . Основные параметры  $\alpha_i=0.5$ ,  $u_{0i}=29.537$ ,  $p_{0i}=-3.457 \cdot 10^{-11}$ ,  $b_{1i}=b_{2i}=1$ ,  $n_{ci}=24.4793$ ,  $m_{ci}=15.7295$  выбраны одинаковыми для всех четырех квантовых точек. Параметры  $R_i$  характеризуют взаимную ориентацию квантовых точек. Параметры  $n_{0i}$ ,  $m_{0i}$  определяют положения центров тяжести квантовых точек. Квантовые точки противоположного направления I ( $i=1$ ,  $R_1=1$ ) и IV ( $i=4$ ,  $R_4=-1$ ) расположены в одной точке с координатами  $n_{0i}=111.1471$ ,  $m_{0i}=79.3267$ . Квантовые точки

противоположного направления II ( $i=2, R_2=-1$ ) и III ( $i=3, R_3=1$ ) также расположены в одной точке, но с другими координатами  $n_{0i}=131.1471$ ,  $m_{0i}=99.3267$ . При моделировании поведения суммарного поля деформации связанной фрактальной структуры с квантовыми точками сначала рассмотрим четыре варианта с парами из двух различных квантовых точек: (I, III), (I, II), (IV, II) и (IV, III). Для указанных пар на рис. 1 даны зависимости суммарного поля деформации связанной структуры от индексов ( $n, m$ ) узлов решетки.

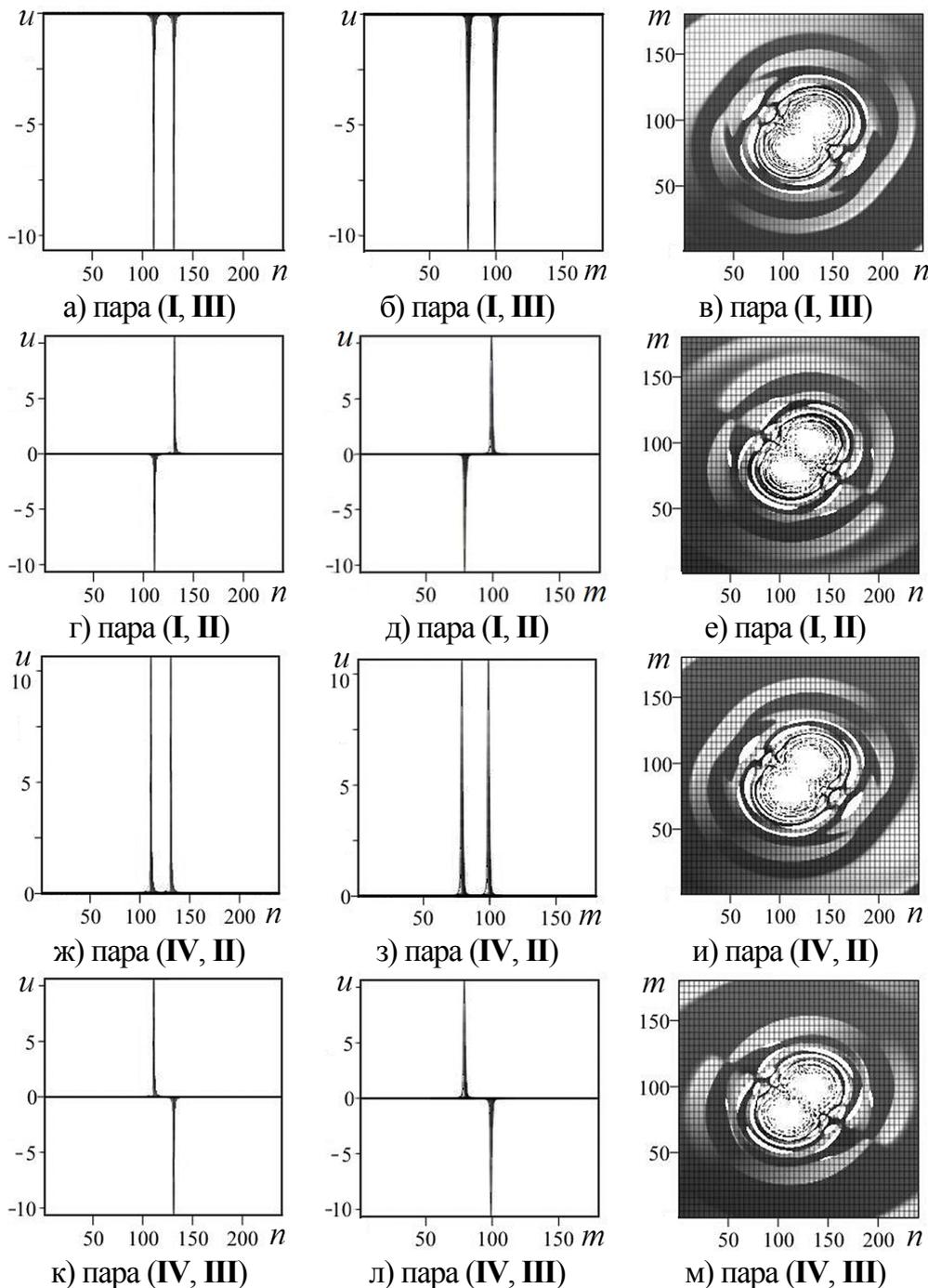


Рис. 1. Поведение поля деформации  $u = u_2 \cdot 10^{-2}$  для различных пар квантовых точек: (а, г, ж, к) – проекции на плоскость  $nOu$ ; (б, д, з, л) – проекции на плоскость  $mOu$ ; (в, е, и, м) – сечения (вид сверху)  $u_2 \in [-0.1; 0.1]$

При этом в выражениях (2) паре (I, III) соответствует упорядоченный оператор  $u_2 = u_{R1} + u_{R3}$ ; паре (I, II) – оператор  $u_2 = u_{R1} + u_{R2}$ ; паре (IV, II) – оператор  $u_2 = u_{R4} + u_{R2}$ ; паре (IV, III) – оператор  $u_2 = u_{R4} + u_{R3}$ . Так для пар (I, III) и (IV, II) наблюдаются пики вниз (рис. 1 а, б) и вверх (рис. 1 ж, з), локализованные вблизи квантовых точек I, III и IV, II с одинаковой ориентацией. В сечениях (рис. 1 в, рис. 1 и) наблюдаются две фрактальные дыры, локализованные вблизи ядер этих квантовых точек. Эти дыры характеризуются стохастическим поведением поля деформации. Вдали от области локализации ядер наблюдается волновое поведение с регулярной структурой эллиптического типа. По мере приближения к ядру эта регулярная структура изменяется – появляются особенности типа перегибов, разрывов, сужений, дополнительная тонкая структура. Для пар квантовых точек с противоположной ориентацией (I, II) и (IV, III) наблюдаются пики (рис. 1 г, д и рис. 1 к, л), локализованные вблизи квантовых точек I, II и IV, III. В сечениях (рис. 1 е и рис. 1 м) также наблюдаются две фрактальные дыры, локализованные вблизи ядер этих квантовых точек. Однако, вблизи ядер наблюдается характерный эффект сдвига волнового поведения (по сравнению с рис. 1 в, рис. 1 и), появляются особенности типа ям, ступенек, седла. Перестановки операторов полей смещений для отдельных квантовых точек в парах не приводят к изменению суммарного поля деформации  $u_2$  связанной фрактальной структуры (например, для пары (III, I) упорядоченный оператор  $u_2 = u_{R3} + u_{R1} = u_{R1} + u_{R3}$ ). Отметим, что поля смещений для отдельных пар квантовых точек (I, IV), (II, III) тождественно равны нулю, что следует из результатов моделирования итерационных процессов. Таким образом, паре (I, IV) соответствует упорядоченный нулевой оператор  $u_2 = 0 = u_{R1} + u_{R4}$ ; паре (II, III) – нулевой оператор  $u_2 = 0 = u_{R2} + u_{R3}$ .

Возможность использования таких нулевых операторов (на основе пар (II, III) и (I, IV)) позволяет восстановить информацию об отдельных квантовых точках I, IV, II, III на основе информации из троек квантовых точек (II, III, I), (II, III, IV), (I, IV, II), (I, IV, III), соответственно (рис. 2). При этом в выражениях (2) тройке (II, III, I) соответствует упорядоченный оператор  $u_2 = u_{R2} + u_{R3} + u_{R1} = u_{R1}$ ; тройке (II, III, IV) – оператор  $u_2 = u_{R2} + u_{R3} + u_{R4} = u_{R4}$ ; тройке (I, IV, II) – оператор  $u_2 = u_{R1} + u_{R4} + u_{R2} = u_{R2}$ ; тройке (I, IV, III) –  $u_2 = u_{R1} + u_{R4} + u_{R3} = u_{R3}$ . Положение пиков и амплитуд (рис. 2 а, б), (рис. 2 г, д), (рис. 2 ж, з), (рис. 2 к, л) соответствуют положению пиков и амплитуд отдельных квантовых точек I, IV, II, III. Структура ядер (рис. 2 в), (рис. 2 е), (рис. 2 и), (рис. 2 м) полностью совпадает со структурой ядер отдельных квантовых точек I, IV, II, III.

Далее рассмотрим связанную фрактальную структуру, состоящую из четырех отдельных фрактальных квантовых точек I, II, III, IV (рис. 3). Так, например, последовательности (I, II, III, IV) (рис. 3 а-г) соответствует упорядоченный оператор  $u_2 = u_{R1} + u_{R2} + u_{R3} + u_{R4}$ ; последовательности (I, III, II, IV) (рис. 3 д) – оператор  $u_2 = u_{R1} + u_{R3} + u_{R2} + u_{R4}$ ; последовательности (III, IV, I, II) (рис. 3 е) – оператор  $u_2 = u_{R3} + u_{R4} + u_{R1} + u_{R2}$ . Для последовательности (I, II, III,

**IV)** вблизи квантовой точки **III** наблюдается пик вниз существенно малой амплитуды (рис. 3 а, б) по сравнению с амплитудой самой точки **III**. Поведение поля деформации вблизи ядра (рис.3 в) связанной структуры существенно отличается от поведения ядра самой квантовой точки **III** (рис. 2 м): возникает стохастическое волновое поведение (вместо регулярных колец появляются стохастические кольца – эллиптические фрактальные дислокации), наблюдается эффект анизотропии.

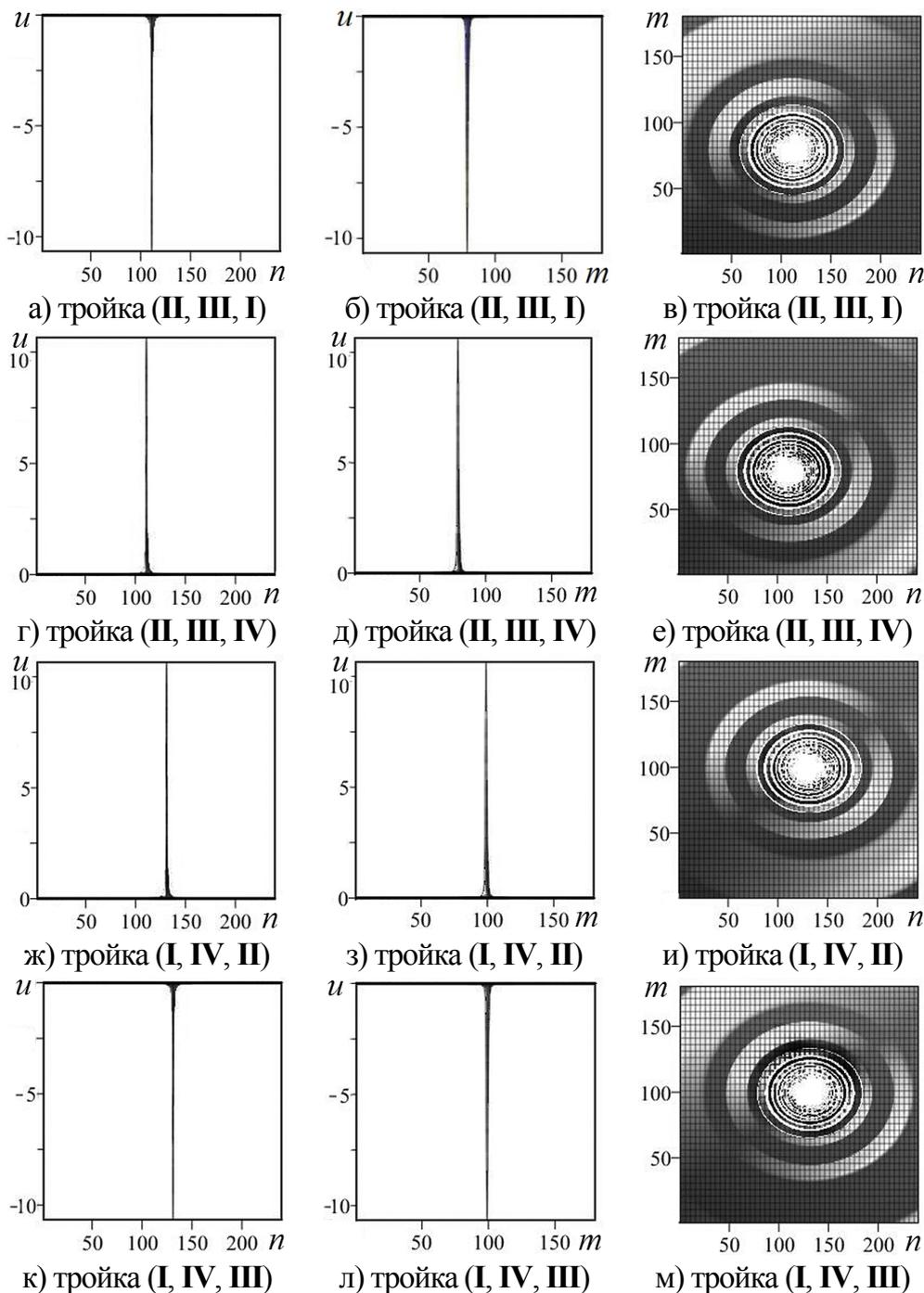


Рис. 2. Поведение поля деформации  $u = u_2 \cdot 10^{-2}$  для различных троек квантовых точек: (а, г, ж, к) – проекции на плоскость  $nOu$ ; (б, д, з, л) – проекции на плоскость  $mOu$ ; (в, е, и, м) – сечения (вид сверху)  $u_2 \in [-0.1; 0.1]$

Перестановка порядка следования отдельных внутренних операторов итерационного процесса (2)  $u_{R2}$  и  $u_{R3}$  в последовательности (I, II, III, IV) приводит к последовательности (I, III, II, IV) (рис. 3 д). При этом все основные особенности регулярного поведения поля деформации связанной структуры сохраняются, однако стохастическое поведение вблизи ядра изменяется (рис. 3 д) по сравнению с рис. 3 г. Перестановка порядка следования пар операторов итерационного процесса (2)  $(u_{R1} + u_{R2})$  и  $(u_{R3} + u_{R4})$  в последовательности (I, II, III, IV) приводит к последовательности (III, IV, I, II) (рис. 3 е). При этом пик вниз наблюдается вблизи квантовой точки I, направление анизотропии меняется на противоположное (рис. 3 е) по сравнению с рис. 3 в. Операция перестановки пар операторов позволяет переносить информацию (например, о направлении пика вниз) из точки III в точку I.

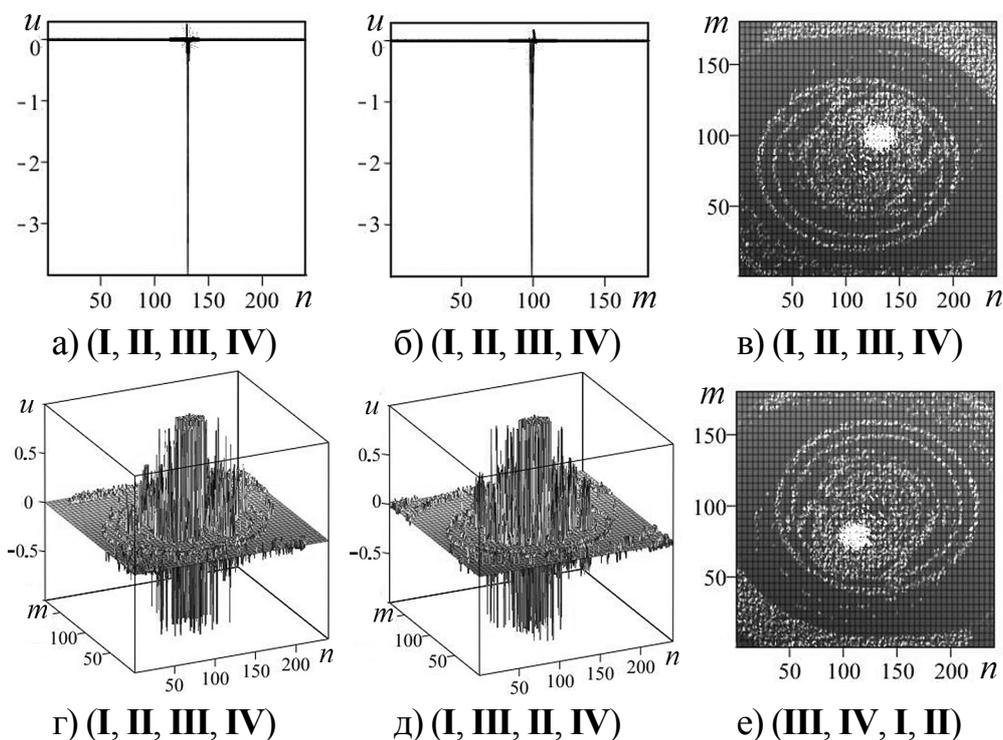


Рис. 3. Поведение поля деформации для последовательностей из четырех квантовых точек: (а, б) – проекции  $u = u_2 \cdot 10^7$  на плоскости  $nOu$ ,  $mOu$ ; сечения (г, д)  $u = u_2 \cdot 10^{10} \in [-1; 1]$ ; (в, е)  $u = u_2 \in [-10^{-10}; 10^{-10}]$  (вид сверху)

Для связанной фрактальной структуры, состоящей из четырех отдельных фрактальных квантовых точек IV, III, II, I поведение поля деформации дано на рис. 4. При этом последовательности (IV, III, II, I) (рис. 4 а-г) соответствует упорядоченный оператор  $u_2 = u_{R4} + u_{R3} + u_{R2} + u_{R1}$ ; последовательности (IV, II, III, I) (рис. 4 д) – оператор  $u_2 = u_{R4} + u_{R2} + u_{R3} + u_{R1}$ ; последовательности (II, I, IV, III) (рис. 4 е) – оператор  $u_2 = u_{R2} + u_{R1} + u_{R4} + u_{R3}$ . Для последовательности (IV, III, II, I) вблизи квантовой точки II наблюдается пик вверх существенно малой амплитуды (рис. 4 а, б) по сравнению с амплитудой самой точ-

ки **II**. Поведение поля деформации вблизи ядра (рис.4 в) связанной структуры существенно отличается от поведения ядра самой квантовой точки **II** (рис. 2 и): возникает стохастическое волновое поведение (вместо регулярных колец появляются стохастические кольца – эллиптические фрактальные дислокации), наблюдается эффект анизотропии. Перестановка порядка следования отдельных внутренних операторов итерационного процесса (2)  $u_{R3}$  и  $u_{R2}$  в последовательности (**IV**, **III**, **II**, **I**) приводит к последовательности (**IV**, **II**, **III**, **I**) (рис. 4 д). При этом все основные особенности регулярного поведения поля деформации связанной структуры сохраняются, однако стохастическое поведение вблизи ядра изменяется (рис. 4 д) по сравнению с рис. 4 г. Перестановка порядка следования пар операторов итерационного процесса (2)  $(u_{R4} + u_{R3})$  и  $(u_{R2} + u_{R1})$  в последовательности (**IV**, **III**, **II**, **I**) приводит к последовательности (**II**, **I**, **IV**, **III**) (рис. 4 е). При этом пик вверх наблюдается вблизи квантовой точки **IV**, направление анизотропии меняется на противоположное (рис. 4 е) по сравнению с рис. 4 в. Операция перестановки пар операторов позволяет переносить информацию (например, о направлении пика вверх) из точки **II** в точку **IV**.

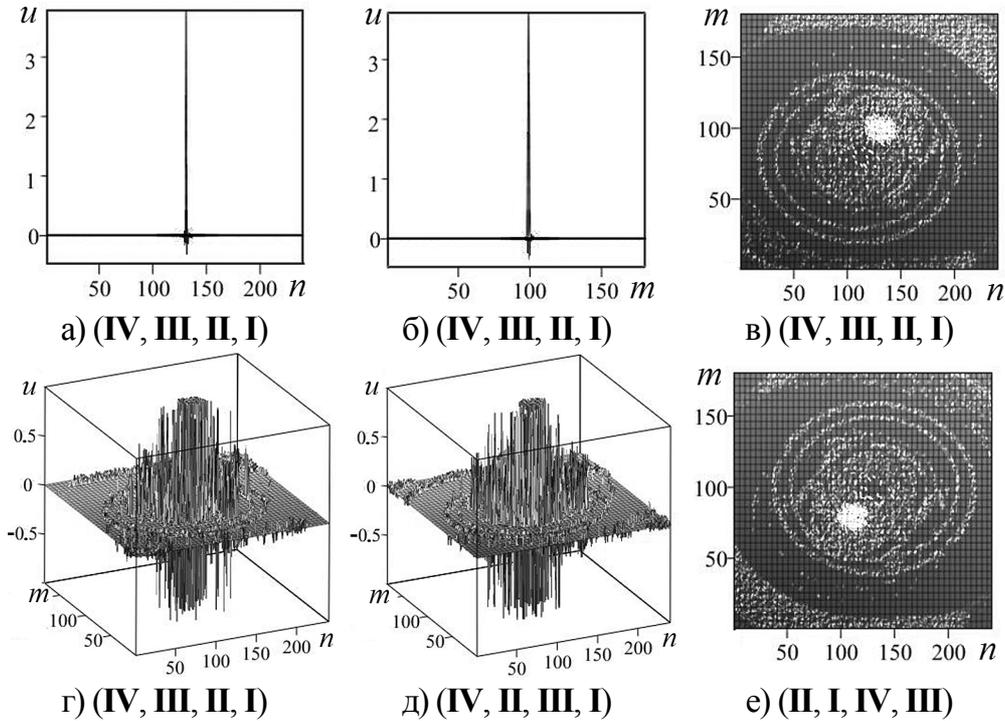


Рис. 4. Поведение поля деформации для последовательностей из четырех квантовых точек: (а, б) – проекции  $u = u_2 \cdot 10^7$  на плоскости  $nOu$ ,  $mOu$ ; сечения (г, д)  $u = u_2 \cdot 10^{10} \in [-1; 1]$ ; (в, е)  $u = u_2 \in [-10^{-10}; 10^{-10}]$  (вид сверху)

Взаимная перестановка пар с нулевыми операторами  $(u_{R1} + u_{R4})$ ,  $(u_{R2} + u_{R3})$ , например, в последовательностях (**I**, **IV**, **II**, **III**), (**II**, **III**, **I**, **IV**) из четырех квантовых точек также приводит к нулевым операторам

$$u_2 = 0 = (u_{R1} + u_{R4}) + (u_{R2} + u_{R3}) = (u_{R2} + u_{R3}) + (u_{R1} + u_{R4}).$$

При этом поле деформации для такой связанной фрактальной структуры тождественно равно нулю.

### Выводы

Для отдельных пар квантовых точек получены зависимости суммарного поля деформации связанной структуры. Показано, что перестановки операторов полей смещений для отдельных квантовых точек в парах не приводят к изменению суммарного поля деформации.

Явный вид результирующей стохастической поверхности поля деформации  $u_2$  связанной фрактальной структуры с числом квантовых точек больше двух существенно зависит от порядка следования отдельных слагаемых  $u_{Ri}$ . Это связано с наличием переменных модулей эллиптических функций в нелинейных уравнениях для поля деформации.

Возможность использования нулевых операторов для пар квантовых точек позволяет восстановить информацию об отдельных квантовых точках на основе информации о последовательности из троек квантовых точек.

Операция перестановки пар операторов в последовательности из четырех квантовых точек позволяет переносить информацию из одной квантовой точки в другую.

### Литература

1. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / под ред. Ю.С. Кившаря и Н.Н. Розанова. – М.: Физматлит, 2014. – 384 с.
2. Абрамов В.С. Квантовые точки во фрактальной многослойной наносистеме // Известия РАН. Сер. Физическая. – 2017. – Т. 81. – № 5. – С. 625-632.
3. Абрамов В.С. Перестройка стохастического состояния поля деформации в модельной многослойной наносистеме // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2014. – Вып. 2. – С. 81-89.
4. Abramova O.P., Abramov A.V. Attractors and Deformation Field in the Coupled Fractal Multilayer Nanosystem // CMSIM Journal. – 2017. – No 1. – P. 16-26.
5. Абрамова О.П. Взаимовлияние аттракторов и отдельных стохастических процессов в связанных фрактальных структурах // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2017. – № 1. – С. 50-60.

## EFFECT OF ORDERING OF DISPLACEMENT FIELDS OPERATORS OF SEPARATE QUANTUM DOTS ON THE DEFORMATION FIELD OF THE COUPLED FRACTAL STRUCTURE

O.P. Abramova, S.V. Abramov

Donetsk National University

By the numerical modelling method the behavior of the deformation field of the coupled fractal structure with quantum dots was investigated. It is shown that the resulting deformation field of the structure with a number of quantum dots larger than two essentially depends on the ordering of the displacement fields operators for separate quantum dots. Using zero operators for pairs of quantum dots makes it possible to obtain information about separate quantum dots. Transposition of pairs of operators allows us to transfer information from one quantum dot to another

Keywords: coupled fractal structures, quantum dots, deformation field, ordering of operators, numerical modelling

## ПОЛЕ ДЕФОРМАЦИИ ОТДЕЛЬНОГО СЛОЯ В МНОГОСЛОЙНОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ НАНОСИСТЕМЕ С ПЕРЕМЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

В.С. Абрамов

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина  
[vsabramov@mail.ru](mailto:vsabramov@mail.ru)

Исследовано поведение функции смещения отдельного слоя в многослойной фрактальной наносистеме. Эта функция становится случайной из-за наличия переменных параметров. Показано, что для слоя без квантовой точки характерно наличие нелинейных осцилляций, которые зависят от фрактального индекса. Поведение слоя с квантовой точкой связано с возникновением эффективного многоямного потенциала. Структура ядер квантовых точек для различных ветвей функции смещения различна. Стохастическое поведение границ ядер зависит от фрактального индекса, возможен эффект анизотропии

Ключевые слова: поле деформации, многослойная фрактальная наносистема, переменные параметры, структура ядра и границы фрактальной квантовой точки

### Введение

Гипотезу о наличии темной материи, темной энергии во Вселенной можно проверить с помощью наблюдения прямых гравитационных эффектов, волн. Электромагнитное излучение (фотоны) этой прямой информации не несет [1].

За создание детектора гравитационных волн и экспериментальное доказательство их существования Р. Вайсу, К. Торну и Б. Бэрришу в 2017 году была присуждена Нобелевская премия по физике. Слияние двух черных дыр с выделением энергии в форме гравитационных волн было зарегистрировано интерферометрами LIGO (лазерная интерферометрическая гравитационная обсерватория) [2]. Появление гравитационных волн от слияния двух нейтронных звезд впервые было зафиксировано 17 августа 2017 года [3]. Эти экспериментальные исследования и достижения в космологии дают новый толчок для развития новых теоретических моделей крупномасштабных фрактальных структур Вселенной: Галактик, сверхскоплений Галактик, стен, филоменов, войдов [4], черных дыр, нейтронных звезд [5]. С другой стороны, гипотеза иерархического строения Вселенной дает возможность использовать модели фрактальных дислокаций, квантовых точек с переменными параметрами для описания отдельных элементов крупномасштабных фрактальных структур [6].

При описании различных нелинейных физических моделей возникают особые точки (аттракторы), линии, поверхности, особые объемные структуры (странные аттракторы). Многие физические свойства вблизи указанных особенностей носят стохастический характер, возникает необходимость моделирования стохастических процессов [7]. Аттракторы и поле деформации, взаимодействие аттракторов и стохастических процессов в связанных фрактальных многослойных наносистемах исследовались в работах [8 – 11]. В работе [10] была предложена модель фрактального осциллятора на основе теории дробного исчисления. Переходные процессы в многослойной фрактальной наносистеме с

нелинейным фрактальным осциллятором исследовались в работе [11]. При наличии переменных параметров возникают особенности в поведении таких фрактальных наносистем.

Целью данной работы является исследование поля деформации отдельного слоя в многослойной фрактальной наносистеме (с переменными параметрами) и влияния фрактального индекса.

### Описание отдельного слоя с переменными параметрами

В работе [11] на основе теории дробного исчисления были получены выражения для четырех ветвей  $u_{\varepsilon i}$  ( $i=1,2,3,4$ ) поля деформации  $u$  модельной многослойной наносистемы

$$2u_{\varepsilon 1}(z, \alpha) = g_1 - g_2 + g_4; \quad 2u_{\varepsilon 2}(z, \alpha) = g_1 - g_2 - g_4; \quad (1)$$

$$2u_{\varepsilon 3}(z, \alpha) = -g_1 - g_2 + g_5; \quad 2u_{\varepsilon 4}(z, \alpha) = -g_1 - g_2 - g_5. \quad (2)$$

Функции  $g_1, g_2, g_3, g_4, g_5$  зависят от координаты  $z$ , фрактального индекса  $\alpha$  вдоль оси  $Oz$  и моделируются выражениями

$$g_2(z, \alpha) = g_{20} |z - z_c|^{-\alpha}; \quad g_3(z, \alpha) = g_{30} |z - z_c|^{-2\alpha}; \quad (3)$$

$$g_{20}(\alpha) = 2^{-2\alpha} 3^{3\alpha-1/2} \Gamma(\alpha+1/3) \Gamma(\alpha+2/3) / \sqrt{\pi} \Gamma(\alpha+1/2); \quad (4)$$

$$g_{30}(\alpha) = 2 \cdot 3^{3\alpha-1/2} \Gamma(\alpha+1/3) \Gamma(\alpha+2/3) / \pi; \quad g'_{30}(\alpha) = 1/g_{30}(\alpha); \quad (5)$$

$$g_4(z, \alpha) = [(g_1 + g_2)^2 - g_3]^{1/2}; \quad g_5(z, \alpha) = [(-g_1 + g_2)^2 - g_3]^{1/2}. \quad (6)$$

Здесь  $\Gamma$  – гамма-функция. Функции  $g_{20}$ ,  $g_{30}$  являются существенно нелинейными функциями от фрактального индекса  $\alpha$  (рис. 1), поэтому поведение функций  $g_2$ ,  $g_3$  из (3) также становится нелинейным на фоне степенных зависимостей. Характерные особенности поведения разрывных функций  $g_{20}$ ,  $g_{30}$ ,  $g'_{30}$  приведены на рис. 1 а, рис. 1 б, рис. 1 в, соответственно. Функция  $g_{20}(\alpha)$  имеет нули при  $\alpha = -(n_\alpha + 1/2)$ , где  $n_\alpha = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Функция  $g'_{30}(\alpha)$  имеет нули при  $\alpha = -(n_\alpha + 1/3)$  и при  $\alpha = -(n_\alpha + 2/3)$ .

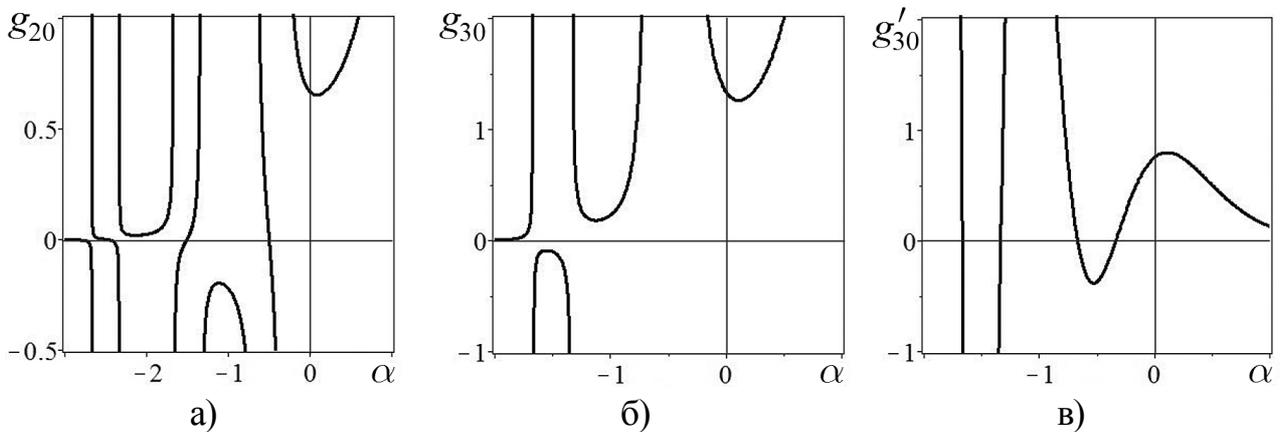


Рис. 1. Поведение функций  $g_{20}$ ,  $g_{30}$ ,  $g'_{30} = 1/g_{30}$  от  $\alpha$

Основная нелинейная функция  $g_1$  зависит от  $u$ ,  $\alpha$  и целочисленных индексов  $n$ ,  $m$ ,  $j$  узлов объемной дискретной решетки  $N_1 \times N_2 \times N_3$

$$g_1(u, \alpha; n, m, j) = k_\alpha^2 (1 - 2 \operatorname{sn}^2(u - u_0, k)); \quad k_\alpha^2 = (1 - \alpha) / Q. \quad (7)$$

Исходное выражение для  $Q$  имеет вид

$$Q = p_{0\alpha} - b_1(n - n_0)^2 / n_c^2 - b_2(m - m_0)^2 / m_c^2; \quad p_{0\alpha} = p_0 - b_3(j - j_0)^2 / j_c^2. \quad (8)$$

Здесь  $u_0$  – постоянное (критическое) смещение;  $k$  – модуль эллиптического синуса;  $p_0$ ,  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $b_3$ ,  $n_0$ ,  $n_c$ ,  $m_0$ ,  $m_c$ ,  $j_0$ ,  $j_c$  – характерные параметры. Функция  $k_\alpha$  зависит от фрактального индекса  $\alpha$ , от индексов  $n$ ,  $m$ ,  $j$  узлов решетки. В нашей модели эта функция определяет поведение модуля  $k = \operatorname{sn}(u_{0\alpha}, k_\alpha)$ . Здесь  $u_{0\alpha} = F(\varphi_{0\alpha}, k_\alpha)$ ;  $F$  – неполный эллиптический интеграл первого рода;  $\varphi_{0\alpha}$  – полярный угол. В результате модуль  $k$  неявно зависит от  $n$ ,  $m$ ,  $j$  и становится случайной функцией. Поэтому функции для четырех ветвей  $u_{\varepsilon_i}$  (1), (2) становятся случайными функциями. При этом  $g_s$  ( $s = \overline{1,5}$ ) становятся операторами. Если оператор  $g_2 \rightarrow 0 \pm 0$  (пределы справа и слева), то в общем случае  $\lim g_4 \neq \lim g_5$ , поэтому для функций смещения имеет место неравенство  $u_{\varepsilon_1} \neq -u_{\varepsilon_4}$ .

При численном моделировании для прямой  $z = z_1$  и обратной  $z = z_2$  волн полагалось, что  $z_1 = 0.053 + h_z(j_z + 33)$ ;  $z_2 = 6.653 - h_z(j_z + 33)$ ,  $h_z = 0.1$ ;  $j_z = 5$ ;  $n = \overline{1,30}$ ;  $m = \overline{1,40}$ ;  $u_0 = 29.537$ ;  $u_{0\alpha} = \pi / 5.2$ ;  $p_0 = 1.0123$ . Решение нелинейных уравнений  $u = u_{\varepsilon_i}$  (1), (2) для каждой из ветвей выполнено методом итераций по переменной  $m$ .

Рассмотрим состояние слоя с  $b_1 = b_2 = b_3 = 0$ , при этом  $Q = p_0$  не зависит от решеточных индексов. Исследуем поведение отдельных ветвей функции смещения прямой (рис. 2 а) и обратной (рис. 2 б-е) волн от фрактального индекса  $\alpha$ . Для прямой волны (рис. 2 а) поведение функции смещения для всех ветвей является регулярным: вдоль оси  $Om$  для 3, 4 ветвей наблюдаются осцилляции с постоянными амплитудами; для 1, 2 ветвей характерны затухающие осцилляции с выходом на постоянные значения при увеличении  $m$ . Для обратной волны (рис. 2 б) кроме регулярного поведения 1, 2, 3 ветвей наблюдается ярко выраженное стохастическое поведение 4 ветви, для 3 ветви характерно наличие второй гармоники. При  $\alpha = -1.5$  для ветвей 1, 4 (рис. 2 в) наблюдаются осцилляции с увеличенными амплитудами, а для ветвей 3, 2 (рис. 2 в) – затухающие осцилляции с амплитудами порядка  $\pm 6.6 \cdot 10^{-7}$ . При  $\alpha = -2.5$  для ветвей 1, 4 (рис. 2 г) характерно появление особенностей по сравнению с рис. 2 в: для ветви 1 – изменение формы, амплитуды осцилляций; для ветви 4 – удвоение периода осцилляций. Для ветвей 3, 2 (рис. 2 г) характерны затухающие осцилляции с уменьшенными амплитудами порядка  $\pm 2 \cdot 10^{-10}$ . При  $\alpha = -3.5$  ветви 3, 2 демонстрируют ярко выраженные нелинейные осцилляции (рис. 2 д). Для от-

дельных пиков 3 ветви характерно появление особенностей типа локального минимума между двумя горбами.

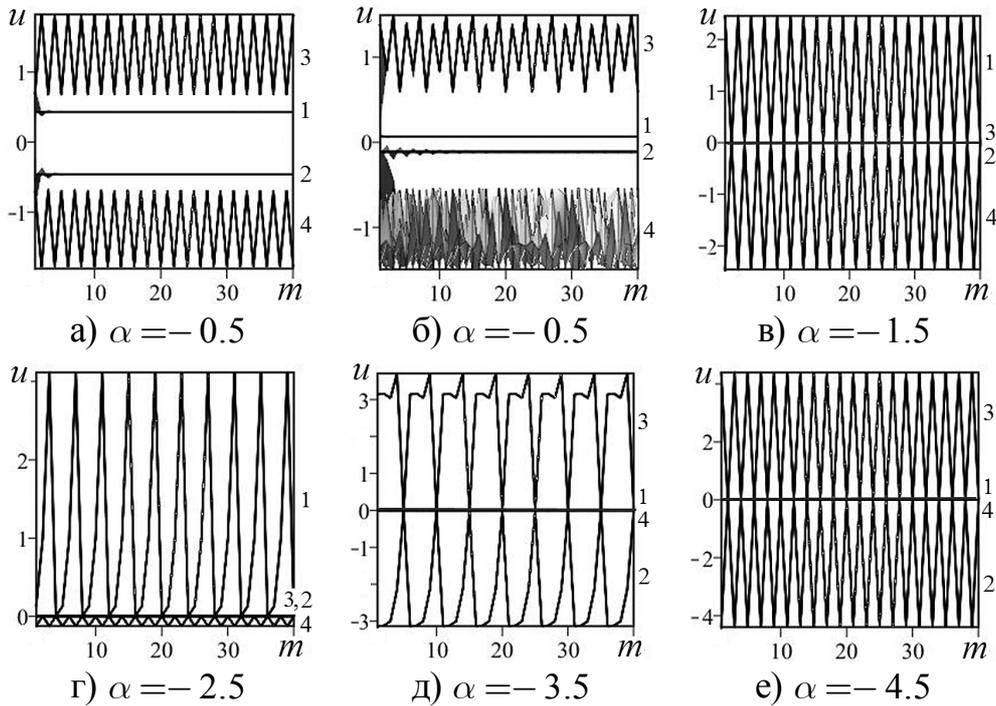


Рис. 2. Зависимости проекций  $u$  на плоскость  $mOu$  для прямой (а) и обратной (б-е) волн от  $m$  для различных  $\alpha$ : 1 –  $u_{\varepsilon 1}$ , 2 –  $u_{\varepsilon 2}$ , 3 –  $u_{\varepsilon 3}$ , 4 –  $u_{\varepsilon 4}$

Ветви 1, 4 принимают нулевые значения. При  $\alpha = -4.5$  (рис. 2 е) ветви 3, 2 демонстрируют осцилляции с увеличенными амплитудами, ветви 1, 4 остаются с нулевыми значениями. При дальнейшем изменении  $\alpha < -4.5$  характер поведения всех четырех ветвей практически не изменяется, что свидетельствует о наличии критического значения фрактального индекса вблизи  $\alpha = \alpha_c = -4.5$  для рассматриваемого состояния слоя. Это связано с нелинейным поведением разрывных функций  $g_{20}$ ,  $g_{30}$  из (4), (5) от  $\alpha$ . Характер поведения ветвей прямой волны при изменении  $\alpha$  качественно совпадает с таковым для обратной волны.

Далее рассмотрим состояние слоя с квантовой точкой (рис. 3, 4). Это состояние описывается основными параметрами  $b_1 = b_2 = b_3 = 1$ ;  $n_0 = 14.3267$ ;  $n_c = 9.4793$ ;  $m_0 = 19.1471$ ;  $m_c = 14.7295$ ;  $j_0 = 31.5279$ ;  $j_c = 11.8247$ . Из выражения (8) по заданному  $p_{0\alpha} = -3.457 \cdot 10^{-11}$  находим усредненные значения для номера слоя  $j$ :  $j_1 = 19.63070035$ ,  $j_2 = 43.42509965$ . При организации итерационного процесса полагалось  $j = j_1$ . В этом случае модуль  $k$  неявно зависит от  $n$ ,  $m$  и становится случайной функцией. Все четыре ветви для прямой (рис. 3) и обратной (рис. 4) волн демонстрируют существенно различные поведения функции смещения. Для ветвей 1, 4 прямой (рис. 3 ж, рис. 3 и) и обратной (рис. 4 ж, рис. 4 и) волн характерно наличие пиков противоположной ориентации с большими амплитудами, что свидетельствует о состоянии слоя с кванто-

вой точкой. Поведение ядра такой квантовой точки существенно отличается от поведения ядер квантовых точек из [12]. Вместо регулярного волнового поведения [12] границы ядер становятся стохастическими. Внутри ядер (рис. 3 з, рис. 4 з) наблюдаются особенности типа островков, перемычек, сужений, ям. Для 2 ветви прямой волны ядро имеет выпуклую форму (рис. 3 а-в), а для обратной волны ядро приближается к плоской форме (рис. 4 а-в).

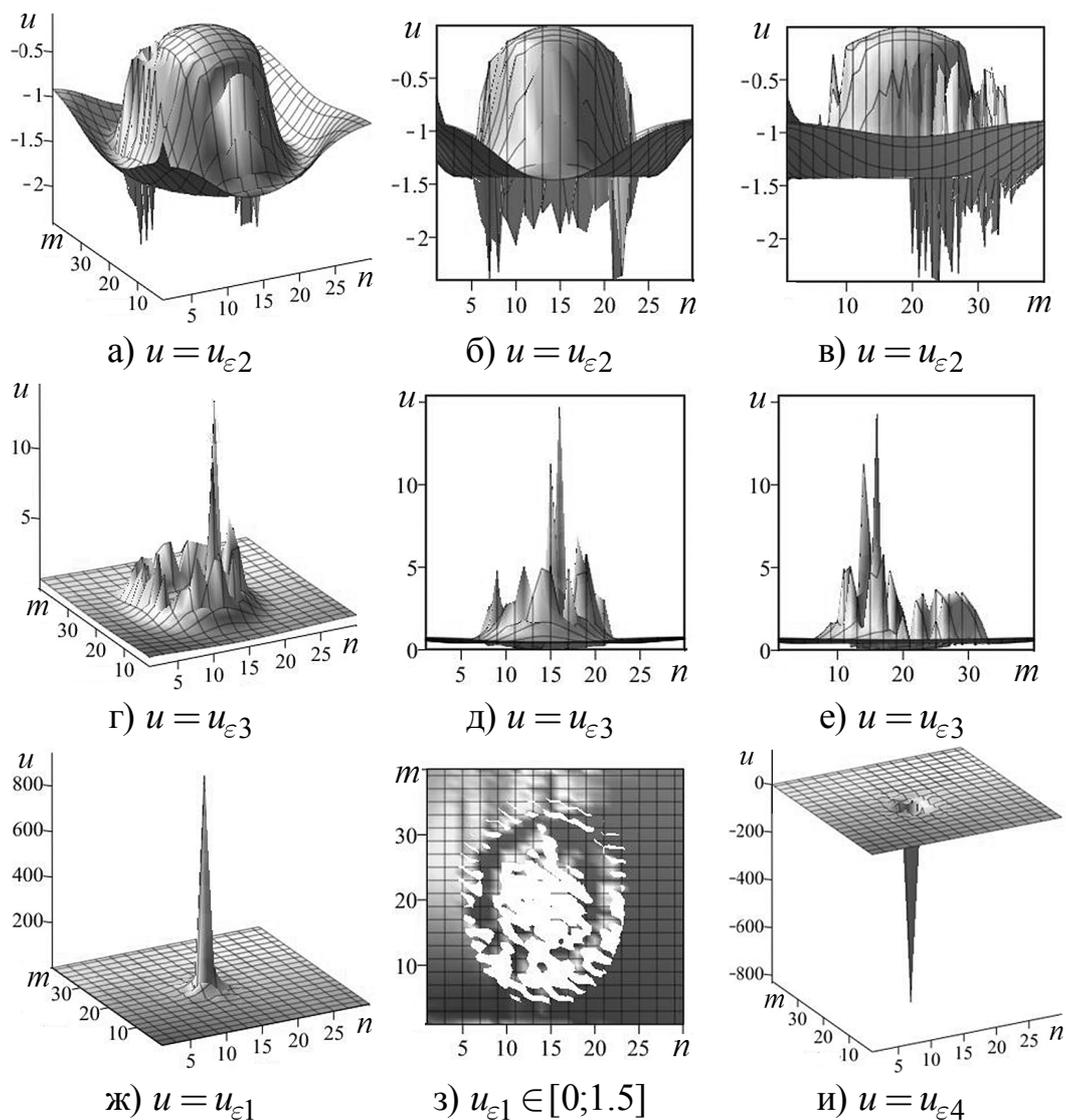


Рис. 3. Зависимости  $u$  от  $n, m$  при  $\alpha = -0.5$  для различных (а, г, ж, и) ветвей прямой волны: проекции на  $nOu$  (б, д),  $mOu$  (в, е), сечение (з) – вид сверху

Для 3 ветви прямой волны ядро имеет вогнутую форму типа ямы (рис. 3 г-е), а для обратной волны (рис. 4 г-е) ядро имеет плоское дно. Для границ этих ядер характерно наличие пиков с малыми амплитудами (образуются особенности типа дополнительных ям, перевалов, долин). Эти особенности поведения поля деформации указывают на возникновение эффективного много-ямного потенциала в слое с квантовой точкой.

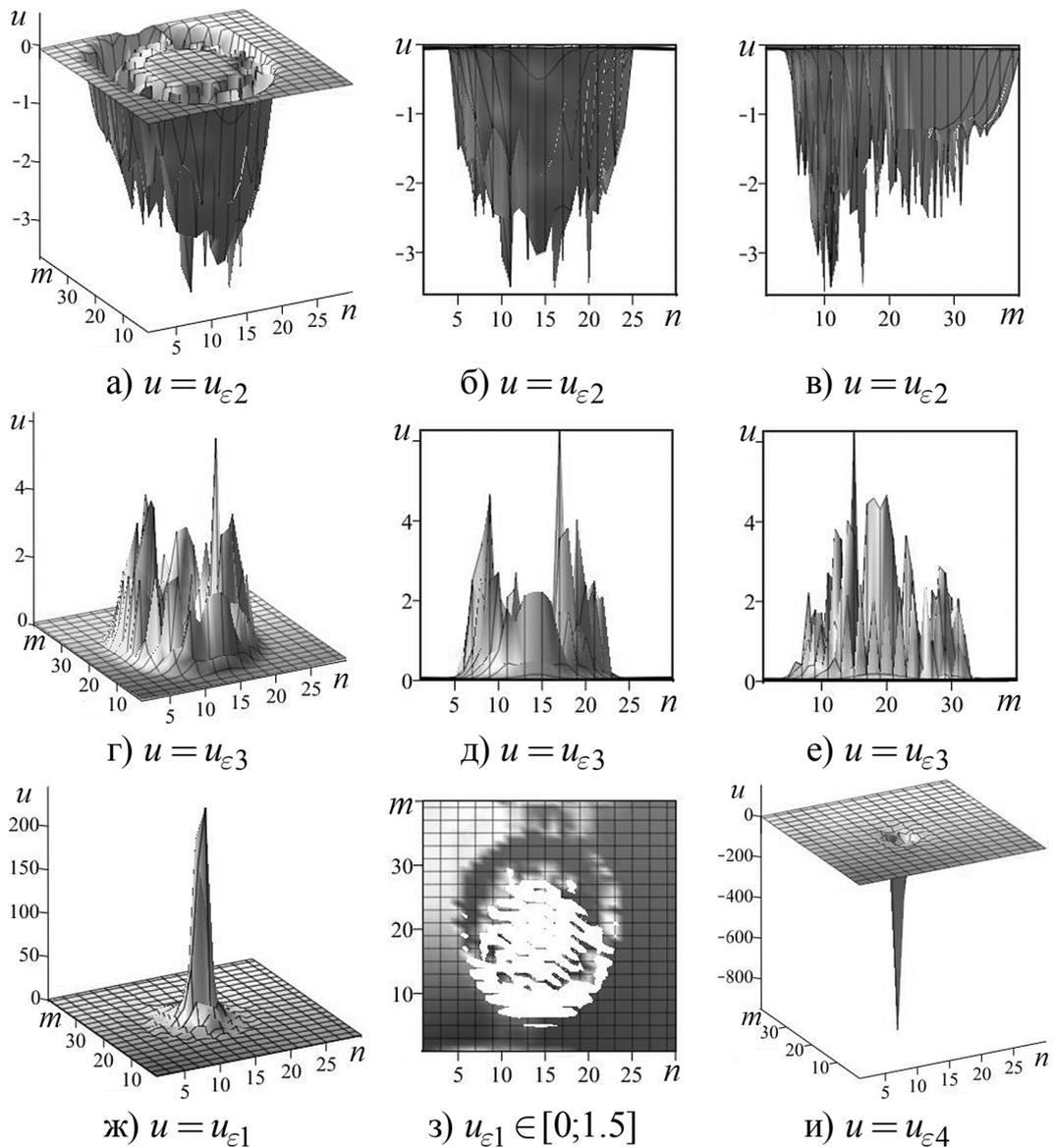


Рис. 4. Зависимости  $u$  от  $n, m$  при  $\alpha = -0.5$  для различных (а, г, ж, и) ветвей обратной волны: проекции на  $nOu$  (б, д),  $mOu$  (в, е), сечение (з) – вид сверху

Изменение фрактального индекса  $\alpha$  приводит к существенному изменению стохастического поведения границ ядер (рис. 5).

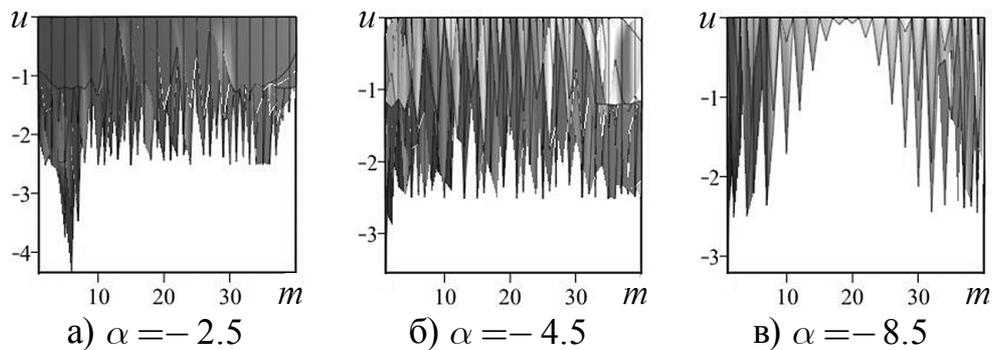


Рис. 5. Зависимости проекций  $u = u_{\epsilon 2}$  на плоскость  $mOu$  для обратной волны от  $m$  для различных  $\alpha$

Так для 2 ветви обратной волны (рис. 4 в) при  $\alpha = -2.5$  (рис. 5 а) наблюдается появление стохастического пика вниз на стохастическом фоне с практически постоянной амплитудой. При  $\alpha = -4.5$  стохастический пик исчезает, а стохастический фон остается (рис. 5 б). При дальнейшем изменении  $\alpha$  (рис. 5 в) у стохастического фона наблюдается образование провала вблизи  $m = m_0$ .

При изменении значений полюсов  $n_c, m_c$  квантовой точки поведение поля деформации ядра и его границы существенно изменяется. При этом для первой ветви  $u_{\epsilon 1}$  наблюдается эффект ярко выраженной анизотропии (рис. 6 а, б, в). На границах для прямой волны возникает практически периодическая тонкая структура (рис. 6 а), а для обратной волны – структура с мелкими ямами (рис. 6 в).

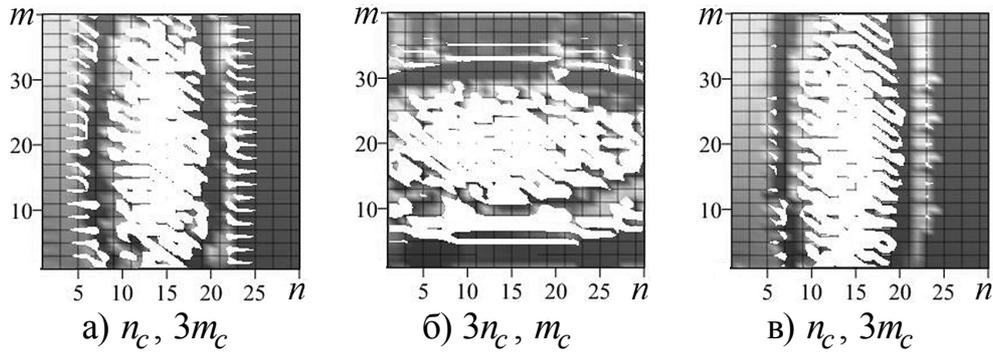


Рис. 6. Сечения  $u_{\epsilon 1} \in [0; 1.5]$  (вид сверху) для прямой (а, б) и обратной (в) волн для различных полюсов  $n_c, m_c$  при  $\alpha = -0.5$

## Выводы

Наличие переменных параметров в многослойной фрактальной наносистеме приводит к появлению неявной зависимости модуля  $k$  от узлов объемной решетки. В результате все четыре ветви функции смещения  $u_{\epsilon i}$  становятся случайными функциями.

Показано, что для слоя без квантовой точки характерно наличие нелинейных осцилляций. Поведение этих осцилляций зависит от фрактального индекса  $\alpha$ . На отдельных пиках ветви  $u_{\epsilon 3}$  появляются особенности типа локального минимума между двумя горбами. Существует критическое значение  $\alpha$ , при переходе через которое характер осцилляций практически не изменяется.

Показано, что для слоя с квантовой точкой особенности поведения поля деформации указывают на возникновение эффективного многоямного потенциала. Структура ядер квантовых точек для различных ветвей  $u_{\epsilon i}$  различна. Для  $u_{\epsilon 1}, u_{\epsilon 4}$  наблюдаются особенности типа островков, перемычек, сужений, ям. Структура ядер для  $u_{\epsilon 2}, u_{\epsilon 3}$  имеет выпуклую, вогнутую и плоскую формы со стохастической границей. Изменение фрактального индекса  $\alpha$  приводит к существенному изменению стохастического поведения границ ядер. Возможно образование стохастического пика на стохастическом фоне и появление провала у сто-

хастического фона вблизи  $m = m_0$ . Изменение полуосей квантовой точки приводит к эффекту анизотропии.

#### Литература

1. Punturo M. Opening a new window on the Universe: the future Gravitational Wave detectors. *Europhysics news*. 2013. 44/2. P. 17-20.
2. Abbott B.P. et al. Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger. *Phys. Rev. Lett.* 2016. 116, 061102. 16 p.
3. Abbott B.P. et al. Observation of Gravitational Waves from a Binary Neutron Star Inspiral. *Phys. Rev. Lett.* 2017. 119, 161101. 18 p.
4. Novosyadlyy B. Voids - "Deserts" of the Universe. *Universe, Space, Time*. 2016. 6 (143). P. 4-11.
5. Hawking S. *Black Holes and Baby Universes*, Transworld Publishers, 1994.
6. Abramov V. Higgs Field and Cosmological Parameters in the Fractal Quantum System / XI International Symposium on Photon Echo and Coherent Spectroscopy (PECS-2017). *EPJ Web Conf.* 2017. 161, 02001. 2 p.
7. Skiadas C.H., Skiadas C. *Chaotic Modeling and Simulation: Analysis of Chaotic Models, Attractors and Forms*. Taylor and Francis / CRC, London, 2009.
8. Abramova O.P., Abramov A.V. Attractors and Deformation Field in the Coupled Fractal Multilayer Nanosystem // *CMSIM Journal*. – 2017. – № 1. – P. 16-26.
9. Абрамова О.П. Взаимовлияние аттракторов и отдельных стохастических процессов в связанных фрактальных структурах // *Вестник Донецк. ун-та. Сер. А.* – 2017. – № 1. – С. 50-60.
10. Abramov V.S. Model of Nonlinear Fractal Oscillator in Nanosystem / In book *Applied Non-Linear Dynamical Systems* (Editor: Jan Awrejcewicz). Springer Proceedings in Mathematics & Statistics. – 2014. – V. 93. – P. 337-350.
11. Abramov V.S. Transient Processes in a Model Multilayer Nanosystem with Nonlinear Fractal Oscillator // *CMSIM Journal*. – 2015. – № 1. – P. 3-15.
12. Абрамов В.С. Связи космологических параметров и бозона Хиггса во фрактальной модели Вселенной // *Вестник Донецк. ун-та. Сер. А.* – 2017. – № 1. – С. 36-49.

## DEFORMATION FIELD OF A SEPARATE LAYER IN A MULTILAYER FRACTAL NANOSYSTEM WITH VARIABLE PARAMETERS

V.S. Abramov

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

The behavior of the displacement function of the separate layer in the multilayer fractal nanosystem is investigated. This function becomes random due to the presence of variable parameters. It is shown that for a layer without a quantum dot, the presence of nonlinear oscillations is characteristic, which depend on the fractal index. The behavior of the layer with quantum dot is associated with the appearance of an effective multi-well potential. The structure of the quantum dots cores for different branches of the displacement function is different. The stochastic behavior of the cores boundaries depends on the fractal index, the anisotropy effect is possible

Keywords: deformation field, multilayer fractal nanosystem, variable parameters, structure of core and boundary of fractal quantum dot

## ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА НА ЭЛЕКТРОННЫЕ ПОТОКИ В СКРЕЩЕННЫХ ПОЛЯХ ДЛЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ В ОКРЕСТНОСТИ СТАЦИОНАРНЫХ ОРБИТ

С.А. Аликов, А.Г. Шеин

Волгоградский государственный технический университет  
[sputnik\\_as@mail.ru](mailto:sputnik_as@mail.ru)

В работе представлены результаты численного моделирования взаимодействия релятивистских электронных потоков со скрещенными полями в системе из двух коаксиальных цилиндров. Задача рассматривалась с учётом эффектов запаздывания, взаимодействие рассчитывается по соотношениям Лиенара-Вихерта для электромагнитного поля методами «частица-частица». Изучено влияние пространственного заряда на формы потоков и траектории электронов в потоке

Ключевые слова: релятивистский электронный поток, скрещенные поля, эффект запаздывания, потенциалы Лиенара-Вихерта, коаксиальная система, метод сфер

### Введение

Исследование влияния поля пространственного заряда на характеристики магнетронов началось достаточно давно. Первые работы основывались на модели магнетрона с гладким анодом, а методы были аналитическими, потоки нерелятивистскими [1]. С развитием СВЧ-электроники и вычислительной техники появилась возможность применять к исследованию процессов в магнетронах методы частиц, роль поля пространственного заряда, как и в аналитических работах, сводилась к снижению эффективности работы соответствующих приборов [2] и появлению шумов [3, 4]. В рамках работ [5, 6] был предложен метод расчёта поля пространственного заряда для релятивистских пучков с учётом эффектов запаздывания. В настоящее время большое значение для СВЧ-электроники имеет магнетрон с внешней инжекцией. Представляет интерес рассмотреть пространственный заряд релятивистского пучка с учетом эффектов запаздывания для простейшей модели такого магнетрона – системы двух коаксиальных цилиндров, и его влияние на траектории электронов в пучке в окрестности стационарных орбит. В данной работе взаимодействие учитывается методами «частица-частица». Поле пространственного заряда рассчитывается с помощью соотношений Лиенара-Вихерта, момент времени в прошлом рассчитывается методом сфер.

### Геометрия системы и стационарные орбиты

Геометрия системы в цилиндрической системе координат  $(r, \alpha, z)$  приведена на рис. 1. Разность потенциалов между внешним и внутренним цилиндрами составляет  $U$ .

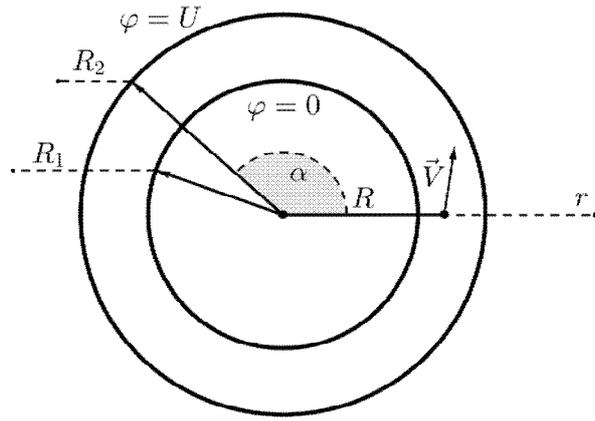


Рис. 1. Геометрия системы

Начальное положение заряженной частицы с зарядом  $q$  задаётся координатами  $(R, 0, 0)$ . Вектор начальной скорости лежит в плоскости рисунка. Электростатическое поле такой системы имеет только радиальную компоненту и задаётся в виде:

$$E_r = -\frac{U}{\ln(R_2 / R_1)} \frac{1}{r} = -\frac{A}{r}.$$

Магнитное поле обладает единственной компонентой направленной вдоль оси  $z$ . Уравнения движения, записанные через собственное время  $\tau$  принимают вид:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 r}{d\tau^2} - r \left( \frac{d\alpha}{d\tau} \right)^2 &= -\frac{qA}{m} \frac{1}{r} \frac{dt}{d\tau} + r \frac{qB_z}{m} \frac{d\alpha}{d\tau}, \\ r \frac{d^2 \alpha}{d\tau^2} + 2 \frac{dr}{d\tau} \frac{d\alpha}{d\tau} &= \frac{1}{r} \frac{d}{d\tau} \left( r^2 \frac{d\alpha}{d\tau} \right) = -\frac{qB_z}{m} \frac{dr}{d\tau}, \\ \frac{d^2 t}{d\tau^2} &= -\frac{qA}{mc^2} \frac{1}{r} \frac{dr}{d\tau}. \end{aligned}$$

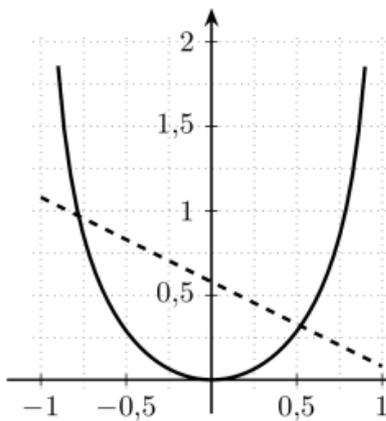


Рис. 2. Графическое решение уравнения (1)

Используя условия стационарности орбит  $r = R$ ,  $V_\alpha = \text{const} = V$ ,  $V_r = 0$ , легко получить соотношение между скоростью, радиусом, потенциалом и величиной магнитной индукции:

$$\frac{V^2}{\sqrt{1 - V^2 / c^2}} = \frac{qA}{m} - R \frac{qB_z}{m} V,$$

или

$$\frac{u^2}{\sqrt{1 - u^2}} = a - bu. \quad (1)$$

Здесь введены обозначения  $u = V / c$ ,  $a = qA / mc^2$ ,  $b = qB_z R / mc$ . Графическое решение данного уравнения представлено на рис. 2.

Видно, что в зависимости от параметров  $a$  и  $b$  возможны три случая: одно решение, два решения и нет решений. Нас интересует случай, для которого задана начальная скорость частиц, а также внешний и внутренний радиусы цилиндров. Изменяя направление магнитного поля, можно получать две стационарные траектории при различных потенциалах и заданном радиусе, скорости и абсолютной величине магнитного поля.

Используя выражения для параметров и соотношение (1), получаем для разности потенциалов при данной величине магнитного поля

$$U = \left( \frac{m}{q} \frac{V^2}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} + VB_z R \right) \ln(R_2 / R_1). \quad (2)$$

На рис. 3 представлены зависимости  $U(R)$  при шести различных параметрах  $B_z$  ( $V = 0,8c$ ;  $R_1 = 1$  см;  $R_2 = 2R_1$ ).

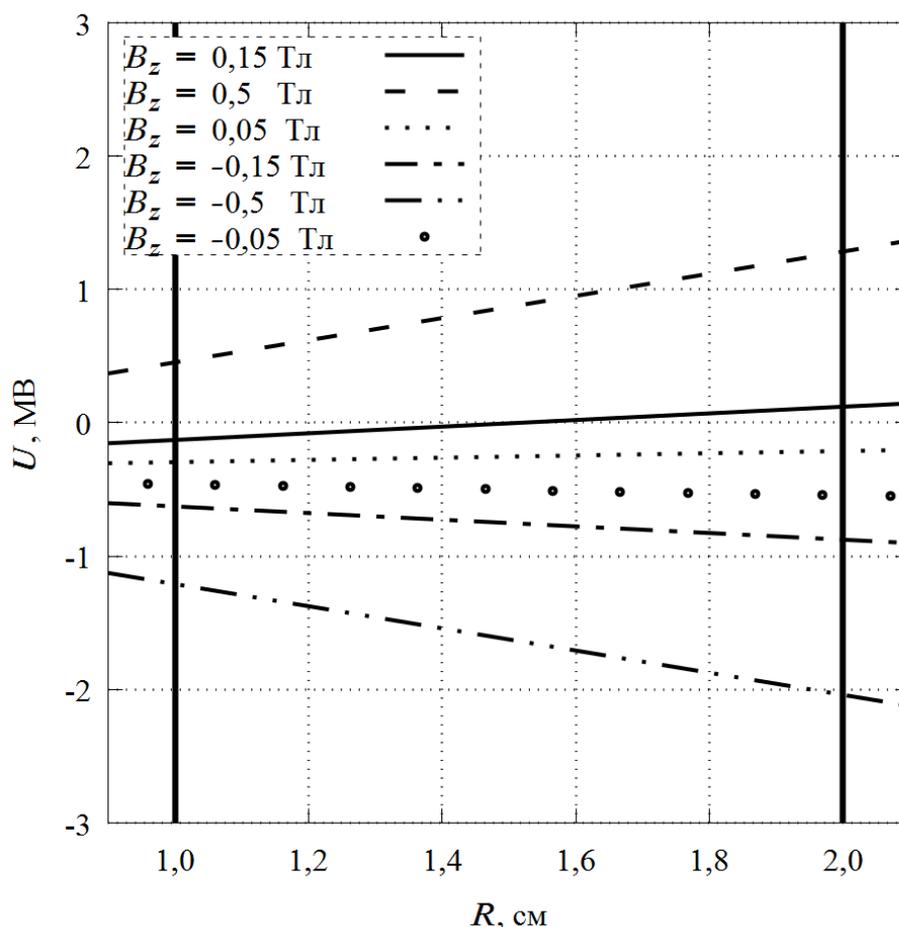


Рис. 3. Зависимость разности потенциалов от радиуса при различных значениях продольного магнитного поля

Как видно из рис. 3, при приведённых параметрах в большинстве случаев разности потенциалов чрезвычайно высоки, за исключением тех случаев, когда внутри рассматриваемого промежутка находится точка пересечения с осью абсцисс. Данная ситуация и представляет основной интерес для исследования. При

магнитном поле  $B_z = 0,15$  Тл стационарная траектория с нулевой разностью потенциалов будет находиться вблизи цилиндра с радиусом  $R = (R_1 + R_2) / 2$ . В данной работе изучение влияния пространственного заряда на форму электронных потоков будет проводиться с этим значением магнитного поля.

Пространственный заряд вносит в уравнения движения дополнительные векторные слагаемые. Для снижения вычислительной нагрузки воспользуемся методом крупных частиц. Вычисление поля пространственного заряда производится с использованием соотношения Лиенара-Вихерта для электромагнитного поля [6]. Для расчёта момента времени в прошлом применяется метод сфер.

### Результаты численного моделирования

Моделирование при различных значениях разности потенциалов  $U = 1 \div 10$  кВ показывает, что в данном диапазоне при параметрах потока  $\rho = 0,1$  Кл/м<sup>3</sup>  $1 \times 1$  мм<sup>2</sup> с центром  $R = 1,5$  см поток не выходит за пределы пространства взаимодействия за один оборот, но со временем он расширяется. Искажений в потоке при изменении потенциала от 1 до 10 кВ не наблюдается. Дальнейшее увеличение потенциала приводит к увеличению радиуса потока и смещению его центра, а затем и к оседанию потока на внешний цилиндр. На рис. 4 представлено сравнение форм потоков при различной разности потенциалов в момент времени  $t = 400$  пс от начала инжекции (12000 крупных частиц). Рис. 5 содержит формы потоков в отсутствие поля пространственного заряда.

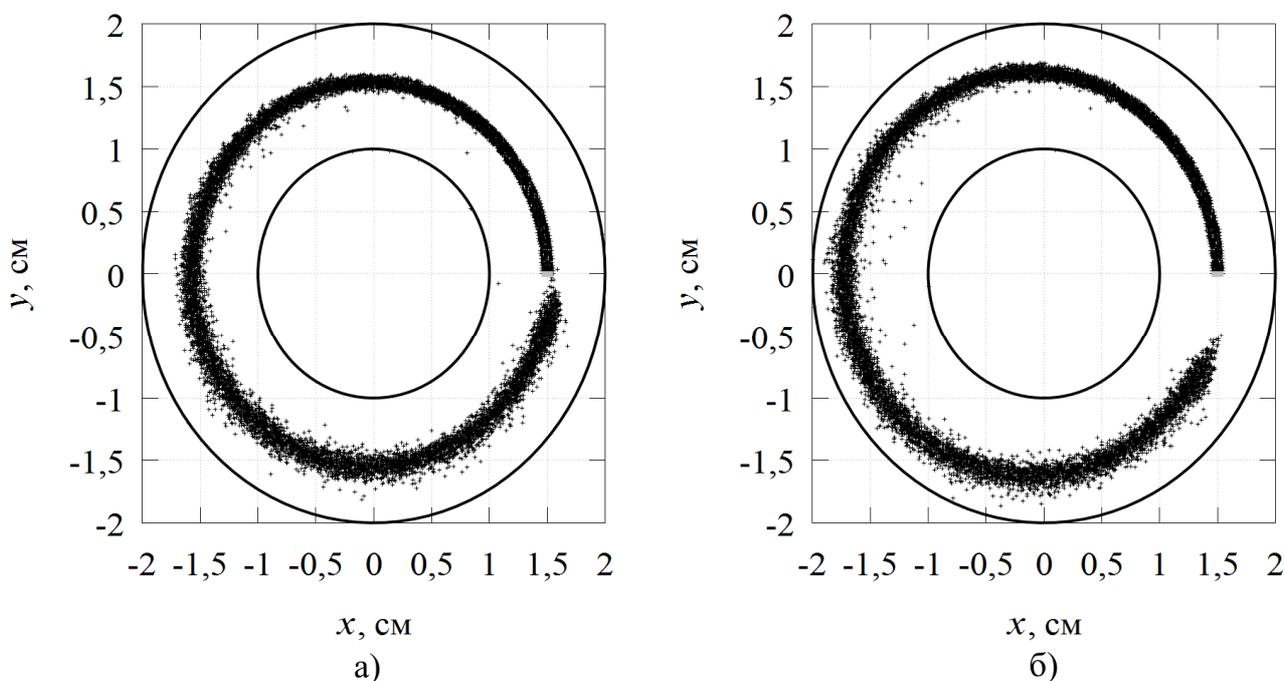


Рис. 4. Формы потоков при различных параметрах  $U$  при наличии поля пространственного заряда а)  $U = 2$  кВ; б)  $U = 20$  кВ

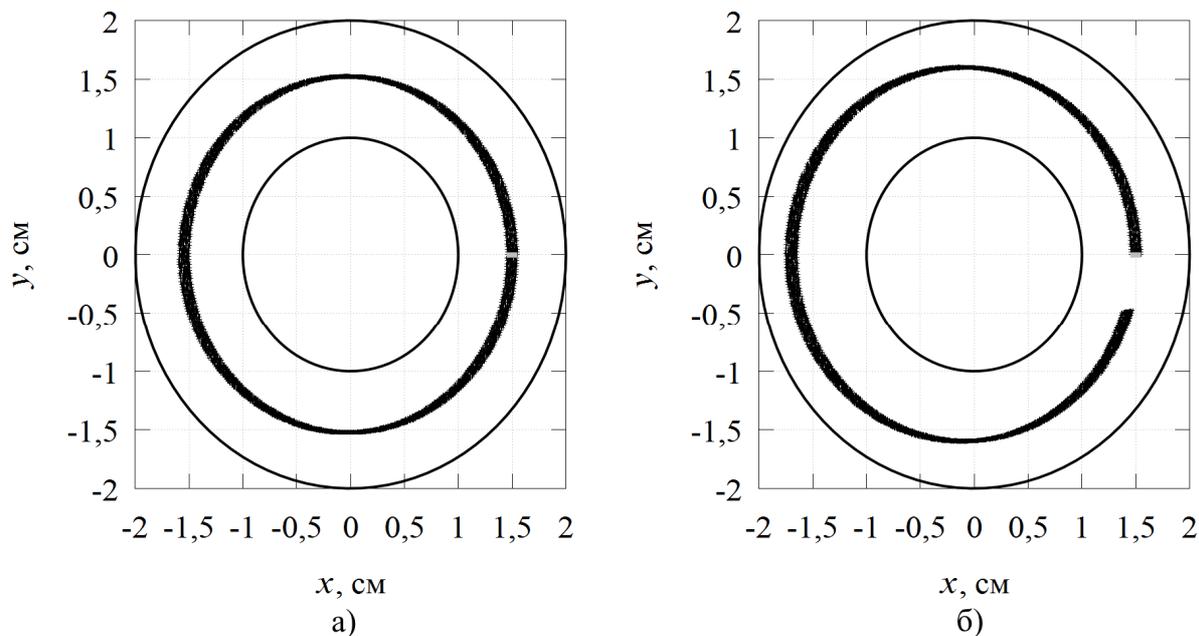


Рис. 5. Формы потоков при различных параметрах в отсутствие поля пространственного заряда; а)  $U = 2$  кВ; б)  $U = 20$  кВ

Увеличение плотности пространственного заряда приводит к расширению потока в плоскости  $xy$ . Уже при плотности пространственного заряда  $\rho = 1$  Кл/м<sup>3</sup> существенная доля электронов выходит за пределы пространства взаимодействия, но при параметрах меньших  $\rho = 0,5$  Кл/м<sup>3</sup> доля электронов, покинувших пространство взаимодействия относительно невелика. На рис. 6 представлены формы потоков в момент времени  $t = 400$  пс при разности потенциалов  $U = 2$  кВ и плотностях пространственного заряда  $\rho = 0,3$  Кл/м<sup>3</sup>,  $\rho = 0,5$  Кл/м<sup>3</sup>.

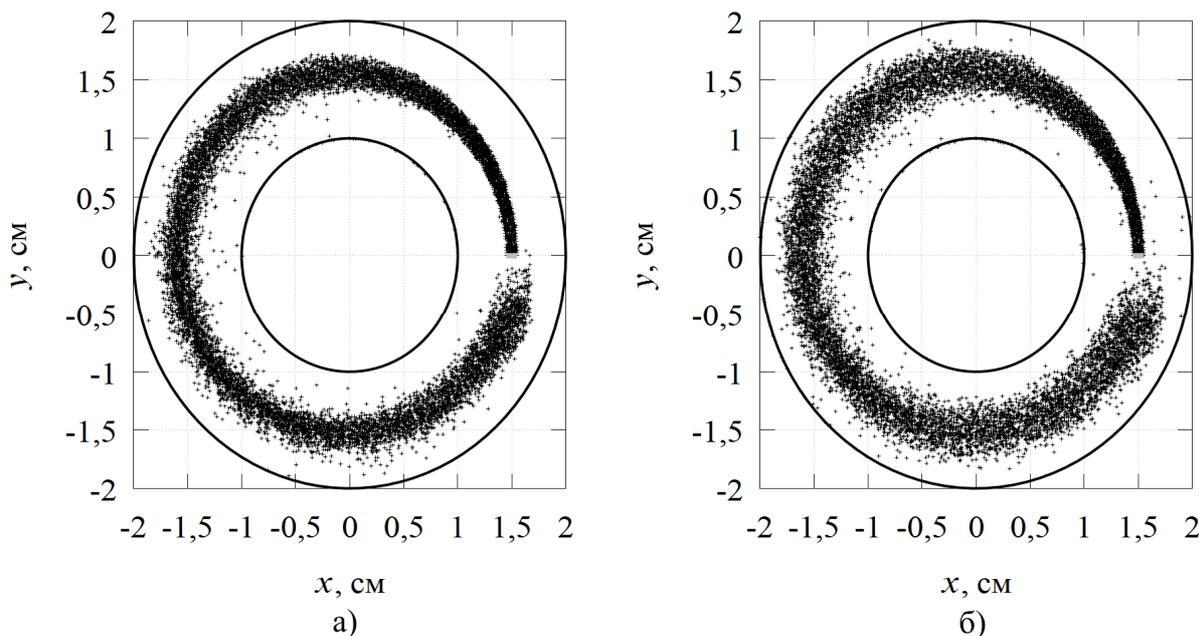


Рис. 6. Формы потоков при различной плотности пространственного заряда: а)  $\rho = 0,3$  Кл/м<sup>3</sup>; б)  $\rho = 0,5$  Кл/м<sup>3</sup>

Особенности реализации программы численного моделирования позволяют сравнивать траектории частиц с одинаковыми начальными условиями при различных параметрах пространственного заряда. На рис. 7 представлены траектории для пары частиц, влетающих в пространство взаимодействия на втором шаге при различных параметрах пространственного заряда.

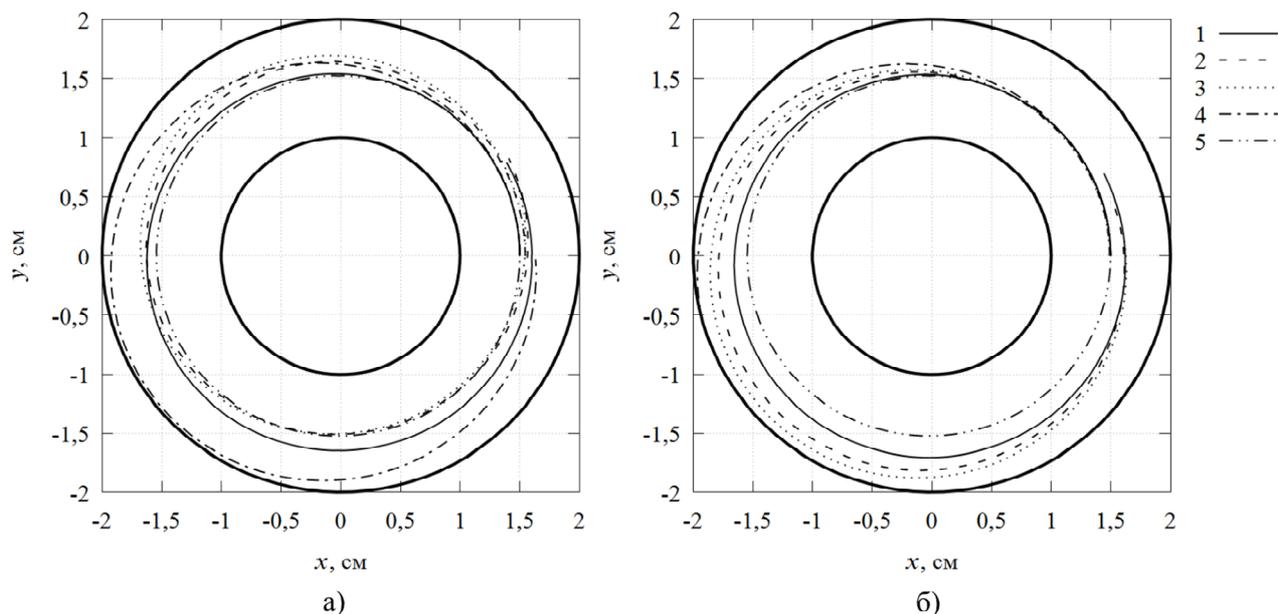


Рис. 7. Примеры траекторий частиц в потоке: 1)  $\rho = 0,1 \text{ Кл/м}^3$ ; 2)  $\rho = 0,3 \text{ Кл/м}^3$ ; 3)  $\rho = 0,5 \text{ Кл/м}^3$ ; 4)  $\rho = 1 \text{ Кл/м}^3$ ; 5) без учёта поля пространственного заряда

Предполагалось, что наличие скрещенных полей и поля пространственного заряда приведет к появлению пульсаций в потоке и к циклоидальному характеру траекторий, как это наблюдалось в системе с плоской геометрией. Но в рассматриваемой системе при модельных параметрах подобных явлений не наблюдается. Траектории электронов представляют собой спирали, изменение радиуса которых зависит от начальных условий и плотности пространственного заряда.

### Заключение

Исследование форм и траекторий релятивистских электронных потоков в окрестности стационарных орбит методами частиц с учётом эффектов запаздывания показывает отсутствие пульсаций в потоке в достаточно широком диапазоне параметров  $U$  и  $\rho$ . Роль пространственного заряда сводится к расширению потока, и при заданных параметрах не приводит к циклоидальному характеру траекторий. Проведённые исследования позволяют утверждать, что для коаксиальной системы действительно существуют стационарные орбиты, задаваемые параметрами  $U$ . При данных параметрах поток  $1 \times 1 \text{ мм}^2$  со скоростями электронов  $V = 0,8c$  не выходит за пределы пространства взаимодействия при плотностях пространственного заряда  $< 0,5 \text{ Кл/м}^3$ . Таким образом, в коакси-

альной системе можно, меняя разность потенциалов между электродами и магнитное продольное поле, контролировать время, в течение которого происходит взаимодействие электронного потока с полем, и удерживать электронный поток в пределах пространства взаимодействия аналогично тому, как это происходит в случае с плоской геометрией и однородными скрещенными полями.

#### Литература

1. Welch, H.W. Analysis of synchronous conditions in the cylindrical magnetron space charge / H.W. Welch, W.G. Dow // *Journal of applied physics*. – 1951. – V. 2. – № 4.
2. Lemke, R.W. Effects that limit efficiency in relativistic magnetrons / R.W. Lemke, T.C. Genoni, T.A. Spencer // *IEEE transactions on plasma science*. – 2000. – V. 28. – №. 3. – P. 887-897.
3. Каминский, К.В. Математическая модель анализа механизма шумов в многорезонаторном магнетроне / К.В. Каминский // *Вестник Саратовского государственного технического университета*. – 2009. – Т. 3. – № 1. – С. 86-89.
4. Учёт реальной трёхмерной цилиндрической конфигурации электродов при компьютерном моделировании магнетронных приборов / В.Б. Байбурин, А.А. Терентьев, А.С. Ершов, С.А. Лазарев // *Известия Волгоградского государственного технического университета*. – 2013. – Т. 8. – № 2. – С. 58-60.
5. Ковтун, Д.Г. Особенности моделирования поведения релятивистского электронного потока в скрещенных полях / Д.Г. Ковтун, А.Г. Шеин, А.Г. Насачев // *Радиотехника и электроника*. – Т. 50. – № 1. – С. 114-118.
6. Ковтун, Д.Г. Влияние металлических стенок пространства взаимодействия на форму релятивистских электронных потоков, движущихся в скрещенных полях / Д.Г. Ковтун, П.Д. Кравченя, А.Г. Шеин // *Известия Волгоградского государственного технического университета*. – 2011. – Т. 3. – № 5. – С. 50-56.

## INFLUENCE OF THE SPATIAL CHARGE ON ELECTRON BEAMS IN CROSSED FIELDS FOR CYLINDRICAL SYSTEM IN THE NEIGHBORHOOD OF STATIONARY ORBITS

S.A. Alikov, A.G. Shein

Volgograd State Technical University

The paper presents the results of numerical simulation of the interaction of relativistic electron beams with crossed fields in a system of two coaxial cylinders. The problem was considered with delay effects, the interaction was calculated from the Liénard-Wiechert relations for the electromagnetic field by “particle-particle” methods. The influence of the space charge on the shapes of the beams and the electron trajectories in the flow is studied

Keywords: relativistic electron beam, crossed fields, delay effect, Liénard-Wiechert potentials, coaxial system, sphere method

ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕГРАЛОВ  
ОТ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ДВУХ ФУНКЦИЙ МАТЬЕА.Н. Белов<sup>1</sup>, П.А. Захаров<sup>1</sup>, В.В. Туровцев<sup>2</sup><sup>1</sup>Тверской государственный университет[Belov.AN@tversu.ru](mailto:Belov.AN@tversu.ru)<sup>2</sup>Тверской государственный медицинский университет

Аппроксимация структурной функции  $F$  и потенциала внутреннего вращения  $V$  в действительном базисе требует вычисления интегралов от произведения двух функций Матье. В данной статье рассмотрены особенности вычисления таких интегралов и получены формулы для их численного решения

Ключевые слова: внутреннее вращение, функции Матье, матрица гамильтониана

Исследование сложных молекулярных соединений и прогнозирование их термодинамических свойств требует разработки новых высокоэффективных методов квантовых расчетов. Метод функций Матье для расчета вклада внутреннего вращения – один из них. Его основная идея – использование базиса, построенного из функций Матье. В [1] показано, что использование такого базиса при аппроксимации структурной функции  $F$  и потенциала внутреннего вращения  $V$  заметно сокращает количество удерживаемых членов ряда, что приводит к существенному сокращению вычислительных операций. Также в [1] в аналитическом виде получено выражение для элементов матрицы гамильтониана с использованием базиса, содержащего функции Матье. Это выражение представляет собой интегралы от произведений трех функций Матье. Техника вычисления таких интегралов с использованием коэффициентов Фурье-разложения рассмотрена в [3].

Однако в [1] для аппроксимации функций  $F$  и  $V$  рассматривался комплекснозначный базис с соответствующими комплекснозначными коэффициентами, что не всегда удобно для действительных значений энергий. Целесообразно использовать следующий вид аппроксимации

$$V = c_v + v_0 c e_0(q_v, \varphi) + \sum_{n=1}^{N_1} v'_n c e_n(q_v, \varphi) + \sum_{n=1}^{N_1} v''_n s e_n(q_v, \varphi), \quad (1)$$

$$F = c_f + f_0 c e_0(q_f, \varphi) + \sum_{n=1}^{N_2} f'_n c e_n(q_f, \varphi) + \sum_{n=1}^{N_2} f''_n s e_n(q_f, \varphi), \quad (2)$$

где  $q_f$ ,  $q_v$  – оптимизированные параметры функций Матье  $c e_n(q_f, \varphi)$ ,  $s e_n(q_v, \varphi)$ ;  $c_v$ ,  $v_0$ ,  $v'_n$ ,  $v''_n$ ,  $c_f$ ,  $f'_n$ ,  $f''_n$  – константы разложения. Появление свободного слагаемого в (1) и (2) приводит к необходимости вычисления интегралов от произведения двух функций Матье, чему и посвящена данная работа.

Аппроксимация функций Матъе рядами Фурье имеет вид [2]

$$ce_n(q, \varphi) = \sum_{r=r_{\min}}^{r=r_{\max}} A_r \cos(r\varphi), \quad (3)$$

$$se_n(q, \varphi) = \sum_{r=r_{\min}}^{r=r_{\max}} B_r \sin(r\varphi). \quad (4)$$

У четных (включая нулевой) порядков  $ce_n(q, \varphi)$  индексы суммирования могут принимать лишь четные значения, начиная с нуля; у нечетных порядков  $ce_n(q, \varphi)$  – нечетные, начиная с 1; у четных (начиная с 2) порядков  $se_n(q, \varphi)$  – четные, начиная с 2; у нечетных порядков  $se_n(q, \varphi)$  – нечетные, начиная с 1. Как правило, для приемлемой незначительной ошибки достаточно удерживать около десяти членов ряда [2]. Тогда произведение двух функций Матъе можно представить в виде суммы произведений тригонометрических функций.

Использование аппроксимации вида (1) и (2) приводит к необходимости вычисления следующих интегралов

$$I_1 = \int_0^{2\pi} ce_m(q, \varphi) ce_n(q, \varphi) d\varphi, \quad (5)$$

$$I_2 = \int_0^{2\pi} se_m(q, \varphi) se_n(q, \varphi) d\varphi, \quad (6)$$

$$I_3 = \int_0^{2\pi} ce_m(q, \varphi) se_n(q, \varphi) d\varphi, \quad (7)$$

$$I_4 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial ce_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial ce_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi, \quad (8)$$

$$I_5 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial ce_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial se_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi, \quad (9)$$

$$I_6 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial se_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial se_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi. \quad (10)$$

Условия нормировки при вычислении функций Матъе в [2] нами, для удобства, принимались такими же, как в Maple [4]. Тогда, учитывая ортогональность функций Матъе [5], для (5)-(7) получаем

$$I_1 = \int_0^{2\pi} ce_m(q, \varphi) ce_n(q, \varphi) d\varphi = \begin{cases} \pi, & n = m \neq 0 \\ 2\pi, & n = m = 0, \\ 0, & n \neq m \end{cases} \quad (11)$$

$$I_2 = \int_0^{2\pi} se_m(q, \varphi) se_n(q, \varphi) d\varphi = \begin{cases} \pi, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}, \quad (12)$$

$$I_3 = \int_0^{2\pi} ce_m(q, \varphi) se_n(q, \varphi) d\varphi = 0, \quad m \geq 0, \quad n > 0. \quad (13)$$

С учетом разложения (3), (4) интегралы (8)-(10) можно свести к интегралам вида

$$\int_0^{2\pi} \sin(\alpha\varphi) \sin(\beta\varphi) d\varphi = \pi (\delta_{\alpha,\beta} - \delta_{\alpha,-\beta}), \quad (14)$$

$$\int_0^{2\pi} \sin(\alpha\varphi) \cos(\beta\varphi) d\varphi = 0, \quad (15)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos(\alpha\varphi) \cos(\beta\varphi) d\varphi = \pi (\delta_{\alpha,\beta} + \delta_{\alpha,-\beta}), \quad (16)$$

где  $\alpha, \beta$  – целые числа, соответствующие индексам суммирования в (3) и (4),

$\delta_{\alpha,\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta \\ 0, & \alpha \neq \beta \end{cases}$ . Отсутствие отрицательных индексов суммирования в (3) и (4)

приводит к тому, что в (12) и (14)  $\delta_{\alpha,-\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta = 0 \\ 0, & \alpha \neq \beta \end{cases}$ . Учитывая возможные

значения индексов для четных и нечетных порядков, окончательно получаем

$$I_5 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial ce_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial se_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi = 0, \quad (17)$$

при  $m$  – четное (либо нечетное), либо 0,  $n$  – четное (либо нечетное)

$$I_4 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial ce_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial ce_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi = \sum_{r_m} \sum_{r_n} r_m A_{r_m} r_n A_{r_n} \pi \delta_{r_m, r_n}, \quad (18)$$

$$I_6 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial se_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial se_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi = \sum_{r_m} \sum_{r_n} r_m B_{r_m} r_n B_{r_n} \pi \delta_{r_m, r_n}, \quad (19)$$

при  $m$  – четное (либо нечетное), либо 0,  $n$  – нечетное (либо четное)

$$I_4 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial ce_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial ce_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi = 0, \quad (20)$$

$$I_6 = \int_0^{2\pi} \frac{\partial se_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial se_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi = 0. \quad (21)$$

Для иллюстрации результатов, приведем численный пример вычисления (18) при  $m = 2$ ,  $n = 4$ ,  $q = 3.56$ . Удерживая 12 значащих разрядов, получаем  $I_4 = -5.45717685036$ . Для вычисления рассмотренных интегралов разработаны алгоритмы, реализованные в созданных компьютерных программах.

#### Литература

1. Орлов Ю.Д. Решение одномерного торсионного уравнения Шредингера в комплекснозначном базисе, содержащем функции Матье / Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев, А.Н. Цирулев // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 119. – № 2. – С. 199-203.
2. Белов А.Н. Особенности вычисления функций Матье произвольных порядков / А.Н. Белов, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Вестник ТвГУ. Серия Прикладная математика. – 2016. – № 4. – С. 45-59.
3. Белов А.Н. Гамильтониан одномерного торсионного уравнения Шредингера в комплекснозначном базисе функций Матье / А.Н. Белов, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 6. – С. 7-12.
4. URL: <http://www.maplesoft.com>
5. McLachlan N.W. Theory and application of Mathieu functions. 2-d edition, Oxford University Press, Oxford, 1951.

## FEATURES OF CALCULATING INTEGRALS OF THE DOUBLE PRODUCT OF MATHIEU FUNCTIONS

A.N. Belov<sup>1</sup>, P.A. Zakharov<sup>1</sup>, V.V. Turovtcev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Tver State University

<sup>2</sup>Tver State Medical University

The approximation of the structure function and the internal rotation potential in the real basis requires the calculation of the integrals of the double product of the Mathieu functions. In this paper we consider the features of calculating such integrals and obtain formulas for their numerical solution

Keywords: internal rotation, Mathieu function, matrix of the Hamiltonian

## АППРОКСИМАЦИЯ СТРУКТУРНОЙ ФУНКЦИИ И ПОТЕНЦИАЛА ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В ДЕЙСТВИТЕЛЬНОМ БАЗИСЕ ФУНКЦИЙ МАТЬЕ

А.Н. Белов

Тверской государственный университет

[Belov.AN@tversu.ru](mailto:Belov.AN@tversu.ru)

Рассмотрена аппроксимация структурной функции и потенциала внутреннего вращения в базисе функций Матье с действительными коэффициентами. Обоснована рациональность его использования. Приведены численные примеры

Ключевые слова: внутреннее вращение, функции Матье, аппроксимация

Неотъемлемой частью многих квантовомеханических расчетов внутреннего вращения является аппроксимация потенциала взаимодействия и структурной функции. В [1] предложено и обосновано использование для этих целей базиса, содержащего функции Матье  $ce_n(q, \varphi)$ ,  $se_n(q, \varphi)$ . В используемых здесь обозначениях  $q$  – параметр функции Матье,  $\varphi$  – двумерный угол вращения. Однако в [1] использовался комплекснозначный базис вида

$$U_0 = ce_0(q, \varphi), U_n = ce_n(q, \varphi) + i \cdot se_n(q, \varphi), \langle U_m, U_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \bar{U}_m U_n d\varphi = \delta_{m,n}. \quad (1)$$

Аппроксимация вида (1) позволяет использовать меньшее количество членов ряда по сравнению с разложением в тригонометрические ряды.

Но так как потенциал  $V(\varphi)$  и структурная функция  $F(\varphi)$  являются действительными числами, то при аппроксимации в базисе (1) получаются комплекснозначные коэффициенты, использование которых в дальнейших вычислениях не всегда удобно и рационально. В этом случае даже невязка аппроксимации является комплексным числом, что также негативно влияет на точность вычислений. Поэтому, предлагается использовать базис, как и (1), содержащий функции Матье, но с действительными коэффициентами. Например,

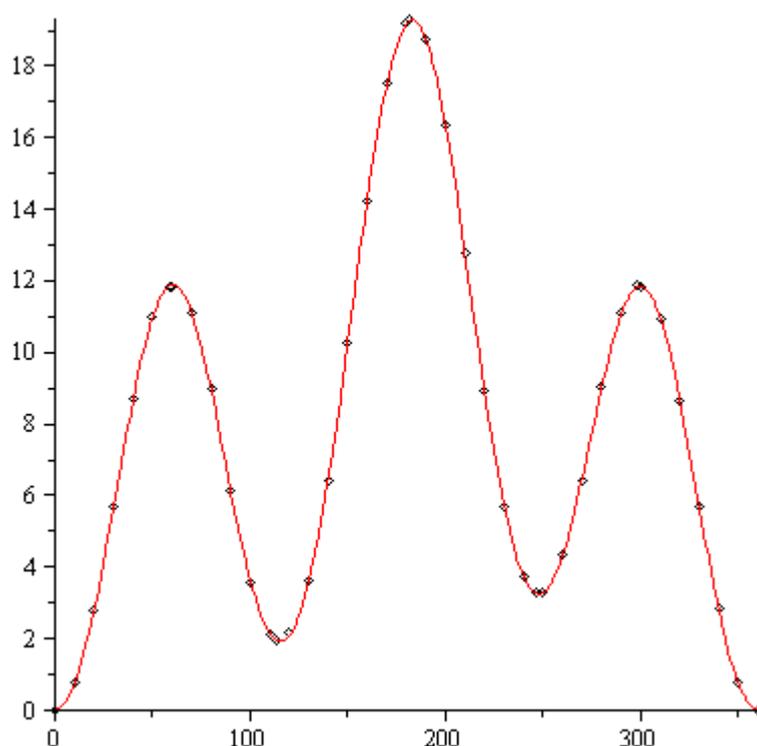
$$V(\varphi) = C + A_0 ce_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n ce_n + \sum_{n=1}^{\infty} B_n se_n. \quad (2)$$

Отметим наличие в (2) свободного слагаемого  $C$ , отсутствующего в (1). На практике либо задается количество слагаемых ряда (2), либо значение невязки. Использование базиса (2) на конкретных примерах показало, что рационально на первом шаге подобрать  $C$  и зафиксировать его значение. На следующих шагах при фиксированном  $C$  подбираются значения параметра  $q$  (одинакового для всех функций, участвующих в разложении) и действительных коэффициентов  $A_n$  и  $B_n$ . В качестве невязки использовалась величина

$$\Delta V = \sqrt{\frac{\sum_i (V_i - V_{approx})^2}{k}}, \quad (3)$$

где  $V_i - V_{approx}$  – разница значений потенциала и аппроксимирующей функции в  $i$ -й точке,  $k$  – количество точек.

Проиллюстрируем использование базиса (2) для аппроксимации потенциала внутреннего вращения радикала FC'H–C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>. Результаты расчета потенциала приведены в [2]. Полученные в Maple результаты аппроксимации потенциала в базисе (2) представлены на рисунке.



Аппроксимация потенциала внутреннего вращения в базисе (2) для FC'H–C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>. На аппроксимирующей функции точками отмечены исходные значения из [2]. По оси абсцисс отложен угол в градусах, по оси ординат – энергия в кДж/моль

В рассматриваемом примере учитывалось 10 значащих разрядов. При  $n = 11$  учитываемых слагаемых (без учета свободного слагаемого), невязка (3) для полученной аппроксимации составила 0,03186812599. Для сравнения, невязка полученная при использовании базиса (1) с таким же количеством удерживаемых членов ряда оказалась с мнимой частью и составила  $0.3202807954 \cdot 10^{-1} + 1.387785343 \cdot 10^{-10} \cdot i$ . Мнимые части коэффициентов при разложении по комплекснозначному базису (1) оказались сравнимыми по порядку с действительными.

Наличие свободного слагаемого в аппроксимации по базису (2) не создает дополнительных трудностей при вычислении интегралов от произведений двух функций Матье для элементов матрицы гамильтониана. Большинство таких получаемых интегралов равны нулю в силу ортогональности функций, находящихся в подынтегральном выражении.

#### Литература

1. Белов А.Н. Гамильтониан одномерного торсионного уравнения Шредингера в комплекснозначном базисе функций Матье / А.Н. Белов, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 6. – С. 7-12.

2. Изучение внутреннего вращения в радикалах  $FC'H-C_4H_{10}$  / А.В. Котомкин, Н.П. Русакова, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Вестник Казанского технологического университета. – 2016. – Т. 19. – № 20. – С. 20-23.

## APPROXIMATION OF STRUCTURE FUNCTION AND POTENTIAL FOR INTERNAL ROTATION

A.N. Belov

Tver State University

Approximation of structure function and potential for internal rotation is considered. The reasons for practice using are presented. Approximation illustrated by some numerical examples

Keywords: internal rotation, Mathieu function, approximation

## ЗАВИСИМОСТЬ ПОВЕРХНОСТНОГО ДАВЛЕНИЯ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ, РАЗМЕРА И ФОРМЫ НАНОКРИСТАЛЛА ВОЛЬФРАМА

Н.Ш. Газанова

Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук  
[dyuzya@gmail.com](mailto:dyuzya@gmail.com)

С помощью потенциала Ми-Леннард-Джонса изучены зависимости удельной поверхностной энергии и поверхностного давления от размера, формы поверхности и температуры нанокристалла со свободной поверхностью. На примере ОЦК-W изучена зависимость поверхностной энергии и параметра решетки от размера и формы нанокристалла, как вдоль изотерм 100, 300 и 3000 К, так и вдоль изобары 0 ГПа. Изучено изменение свойств при переходе нанокристалла из формы куба к форме стержня

Ключевые слова: нанокристалл, размер, форма, уравнение состояния, вольфрам

Известно, что физические и химические свойства нанокристалла отличаются по сравнению с макрокристаллом из-за сравнительно большого соотношения поверхности и объема, определяемых формой нанокристалла. Данная работа посвящена изучению зависимости поверхностных свойств от размера, формы и температуры нанокристалла вольфрама. Экспериментальных данных по поверхностным свойствам даже для макрокристалла вольфрама мало, а для нанокристалла их практически нет. Поэтому расчетные данные являются пионерскими исследованиями в данном вопросе.

Ограничение системы поверхностью приведет к обрыву связей на границе. Поэтому если использовано приближение «взаимодействия только ближайших соседей», то вместо первого координационного числа ( $k_n$ ) необходимо брать  $\langle k_n \rangle$  – среднее (по всей наносистеме) значение первого координационного числа, которое будет зависеть как от размера, так и от формы наносистемы [1-3]. При этом структуру системы полагаем неизменной:  $k_p = \text{const}$ . Данную модель нанокристалла в виде прямоугольного параллелепипеда (Rectangular Parallelepiped), форму которого можно варьировать с помощью параметра формы  $f$ , была названа RP-моделью [1-3].

В рамках RP-модели изменение нормированного среднего значения первого координационного числа при вариации числа атомов  $N$  и параметра формы  $f$  описывается выражением:

$$k_n^* = \frac{\langle k_n(N, f) \rangle}{k_n(\infty)} = 1 - Z_s(f) \left( \frac{\alpha^2}{N} \right)^{1/3}, \quad (1)$$

где  $k_n(\infty) = k_n(N = \infty)$  – координационное число для макрокристалла. Величина  $f = N_{ps} / N_{po}$  – это параметр формы, который определяется отношением числа атомов на боковом ребре  $N_{ps}$  к числу атомов на ребре основания  $N_{po}$  прямоугольного параллелепипеда,  $\alpha = \pi / (6k_p)$  – параметр структуры.

Объем ( $V$ ), площадь поверхности ( $\Sigma$ ) и диаметр ( $d$  – расстояние между центрами наиболее удаленных атомов модели) для RP-модели равны:

$$V = N_{po}^3 f c^3 = N \alpha c^3, \quad (2)$$

$$\Sigma = 6 c^2 \alpha_s (N \alpha)^{2/3} Z_s(f), \quad (3)$$

$$d = N_{po} (2 + f^2)^{1/2} \alpha_d c = 3^{1/2} c \alpha_d (N \alpha)^{1/3} Z_d(f). \quad (4)$$

Здесь  $c = [6k_p V / (\pi N)]^{1/3}$  – среднее (по объему  $V$  нанокристалла из  $N$  атомов) расстояние между центрами ближайших атомов, коэффициенты  $\alpha_s$  и  $\alpha_d$  учитывают плотность упаковки атомов на грани (т.е. в поверхностном слое) и на ребре нанокристалла. В первом приближении можно принять:  $\alpha_s \cong \alpha^{2/3}$  и  $\alpha_d \cong \alpha^{1/3}$ . Как видно из (2)-(4), объем RP-модели не зависит от ее формы, а значения  $\Sigma$  и  $d$  зависят от параметра  $f$ , т.е. от формы прямоугольного параллелепипеда.

Функции формы для площади  $\Sigma(N)$  (или для зависимости  $k_n(N)$  из (1)) и для диаметра  $d(N)$  имеют вид:

$$Z_s(f) = \frac{2f+1}{3f^{2/3}}, \quad Z_d(f) = \frac{1}{f^{1/3}} \left( \frac{2+f^2}{3} \right)^{1/2}. \quad (5)$$

Предположим, что атомы взаимодействуют посредством парного четырех параметрического потенциала Ми-Леннард-Джонса, имеющего вид:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)} \left[ a \left( \frac{r_0}{r} \right)^b - b \left( \frac{r_0}{r} \right)^a \right], \quad (6)$$

где  $D$  и  $r_0$  – глубина и координата минимума потенциала,  $b > a > 1$  – численные коэффициенты.

Так же, как и в [1], мы используем здесь приближение «взаимодействия только ближайших соседей», а для описания энергии колебаний атомов – модель кристалла Эйнштейна (независимые гармонические осцилляторы). Тогда удельная (на атом) свободная энергия Гельмгольца при температуре  $T$  имеет вид:

$$f_E = k_B \left( \frac{k_n}{2} \right) \left( \frac{D}{k_B} \right) \cdot U(R) + 3k_B \Theta_E \left\{ \left( \frac{1}{2} \right) + \left( \frac{T}{\Theta_E} \right) \ln \left[ 1 - \exp \left( - \frac{\Theta_E}{T} \right) \right] \right\} + \sigma \frac{\Sigma}{N}, \quad (7)$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\Theta_E$  – это температура Эйнштейна, которая связана с температурой Дебая:  $\Theta = (4/3)\Theta_E$ , которая имеет вид [2, 4]:

$$\Theta(k_n, c) = A_w(k_n, c) \xi \left[ -1 + \left( 1 + \frac{8D}{k_B A_w(k_n, c) \xi^2} \right)^{1/2} \right], \quad (8)$$

где введены обозначения:

$$A_w(k_n, c) = K_R \frac{5k_n a b (b+1)}{144(b-a)} \left( \frac{r_0}{c} \right)^{b+2}, \quad K_R = \frac{\hbar^2}{k_B r_0^2 m}, \quad \xi = \frac{9}{k_n(\infty)},$$

$m$  – масса атома,  $\hbar$  – постоянная Планка.

Функция потенциальной энергии в (7) равна:

$$U(R) = \frac{aR^b - bR^a}{b-a},$$

где  $R = r_0/c$  – линейная относительная плотность кристалла.

Удельная (на единицу площади) поверхностная энергия грани (100) для RP-модели равна [1-3]:

$$\sigma = -\frac{k_n(\infty)D R^2}{12\alpha^{2/3}r_0^2}L_E(N, f), \quad (9)$$

где введены функции:  $L_E(N, f) = U(R) + 3H_w(N, T)$ ,

$$H_w(N, T) = \frac{6\gamma(N, f)}{(b+2)} \left[ \frac{k_B \Theta_E(N, f)}{D k_n(N, f)} \right] E_w \left( \frac{\Theta_E(N, f)}{T} \right), \quad E_w(y) = 0.5 + \frac{1}{[\exp(y) - 1]}.$$

Уравнение состояния рассчитывалось путем численного дифференцирования (7) по следующей формуле ( $v = V/N$ ):

$$P = - \left( \frac{\partial f_E}{\partial v} \right)_T. \quad (10)$$

Поверхностное давление нанокристалла из  $N$  атомов рассчитывалось по формуле:

$$P_{sf}(N, f) = P(N = \infty) - P(N, f). \quad (11)$$

Параметры потенциала Ми-Леннард-Джонса (6) для объемно центрированной кубической фазы вольфрама (ОЦК-W:  $k_n(\infty) = 8$ ,  $k_p = 0.6802$ ) были определены и апробированы нами при расчете уравнения состояния и коэффициента теплового расширения макрокристалла ОЦК-W в работе [5]. Они равны:  $r_0 = 2.7365 \cdot 10^{-10}$  м,  $D/k_B = 25608.93$  К,  $a = 3.97$ ,  $b = 6.28$ .

Тогда для нормального удельного объема  $v_0 = [\pi/(6k_p)]r_0^3$ , температуры Дебая ( $\Theta$ ), первого ( $\gamma = -(\partial \ln \Theta / \partial \ln v)_T$ ) и второго ( $q = (\partial \ln \gamma / \partial \ln v)_T$ ) параметров Грюнайзена при  $v/v_0 = (c/r_0)^3 = 1$  получим:  $v_0 = 9.5 \cdot 10^{-6}$  см<sup>3</sup>/mole,  $\Theta(1) = 396.99$  К,  $\gamma(1) = 1.37$ ,  $q(1) = 3 \cdot 10^{-3}$ .

На рис. 1 показана изоморфно-изомерная (при одинаковой форме и постоянном числе атомов  $N$  в кристалле) зависимость давления  $P$  (в GPa) от нормированного объема ( $v/v_0$ ) в кубическом нанокристалле ОЦК-W. Расчеты были выполнены вдоль трех изотерм: для низкой ( $T/\Theta < 1$ ) температуры  $T = 100$  и  $300$  К, и для высокой ( $T/\Theta > 1$ ) температуры  $T = 3000$  К. Здесь  $v = V/N$ . Сравнение рассчитанной таким путем зависимости  $P(T, v/v_0)$  с экспериментальными данными для макрокристалла ОЦК-W было проведено нами в работе [5], где было получено хорошее согласие. На рис. 1 сплошные линии получены для макрокристалла (при  $N_{po} = 10^5$ ,  $N(f=1) = 1.3 \times 10^{15}$ ,  $N(f=5) = 6.5 \times 10^{15}$ ), а пунктирные линии – для нанокристалла при  $N_{po} = 5$  ( $N = fN_{po}^3/\alpha$ ,  $N(f=1) = 162$ ,  $N(f=5) = 810$ ). Две нижние линии – изотермы  $T = 100$  и  $300$  К, верхние линии – изотермы  $T = 3000$  К. Уменьшение роста давления при сжатии нанокристалла (по сравнению с макрокристаллом) указывает на уменьшение изотермического модуля упругости:  $B = -v(\partial P/\partial v)_T$ , для нанокристалла, которое было подробно изучено в работах [6, 7].

Из рис. 1 видно, что при определенном значении относительного объема  $(v/v_0)_0$  зависимости  $P(v/v_0)$  для нанокристалла и макрокристалла пересекаются. Т.е. при  $(v/v_0)_0$  поверхностное давление становится равным нулю:  $P_{sf}(v/v_0)_0 = 0$ . При  $v/v_0 < (v/v_0)_0$  поверхностное давление сжимает нанокристалл ( $P_{sf} > 0$ ), а при

$v/v_0 > (v/v_0)_0$  поверхностное давление нанокристалл растягивает:  $P_{sf} < 0$ . Величина  $(v/v_0)_0$  уменьшается при изоморфно-изомерном росте температуры, а также при изоморфно-изотермическом уменьшении размера (числа атомов), или при изомерно-изотермическом отклонении формы нанокристалла от наиболее оптимальной формы (для RP-модели – от формы куба).

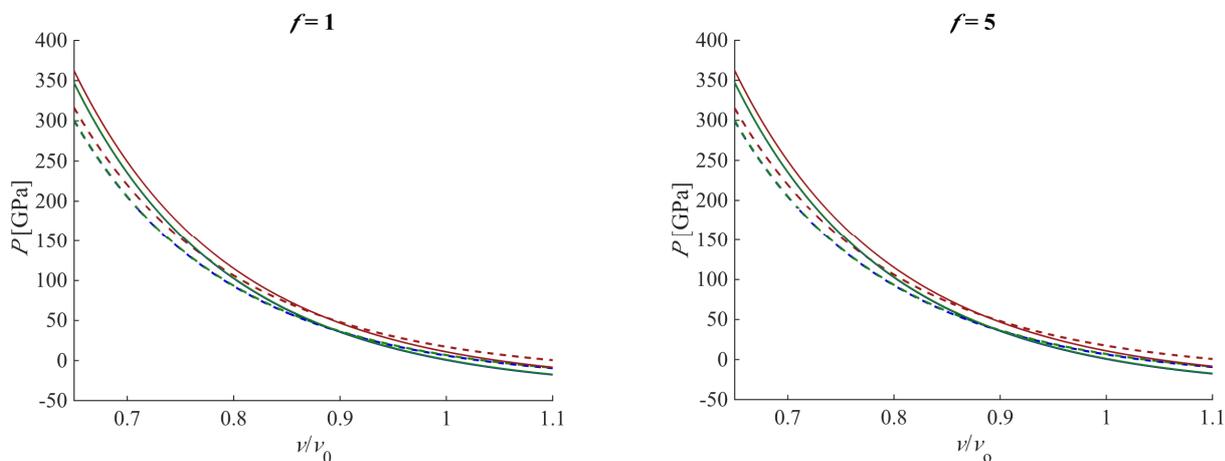


Рис. 1. Уравнения состояния для макрокристалла (сплошные линии) и для нанокристалла (пунктирные линии) ОЦК-W при  $f=1$  (слева) и  $f=5$  (справа)

Функция  $\sigma$  – удельная (на единицу площади поверхности) поверхностная энергия для грани (100) ОЦК-W была рассчитана по формуле (9) при различных температурах и давлениях как для макрокристалла, так и для нанокристалла с различной формой. Расчеты поверхностной энергии для макрокристалла ОЦК-W при различных температурах был проведен нами в работе [8], где было получено хорошее согласие с оценками других авторов.

На рис. 2 показаны рассчитанные барические изоморфно-изомерные (т.е. для данной формы нанокристалла и при постоянном значении  $N$ ) зависимости функции  $\sigma(100)$  (в  $J/m^2$ ) для нанокристалла ОЦК-W с кубической формой. Сплошные линии получены для макрокристалла (при  $N(f=1) = 1.3 \times 10^{15}$ ,  $N(f=5) = 6.5 \times 10^{15}$ ), а пунктирные линии – для нанокристалла при  $N(f=1) = 162$ , или  $N(f=5) = 810$ . Четыре верхние линии – изотермы  $T = 100$  и  $300$  К, две нижние линии – изотермы  $T = 3000$  К.

Из рис. 2 и 3 видно, что с уменьшением температуры возникает область давлений, где удельная поверхностная энергия нанокристалла становится больше, чем у макрокристалла:  $\sigma(N) > \sigma(\infty)$ . Видно, что при определенных  $P$ - $T$ -условиях функция  $\sigma$  не зависит от размера нанокристалла (т.е. от  $N$ ). Причем, как видно из рис. 2 и 3, если при  $T \geq 3000$  К на изотермах нет таких  $P$ -точек, то при  $T \leq 3000$  К на изотермах имеются две  $P$ -точки, где  $\sigma(N) = \sigma(\infty)$ .

На рис. 4 показана зависимость для  $P_{sf}$  [GPa] – поверхностного давления от относительного объема  $v/v_0$ , которая была рассчитана по формуле (11) для нанокристалла в форме куба и в форме стержня. Из рис. 4 видно, что поверхностное давление для нанокристалла много меньше, чем давление, рассчитываемое по формуле Лапласа.

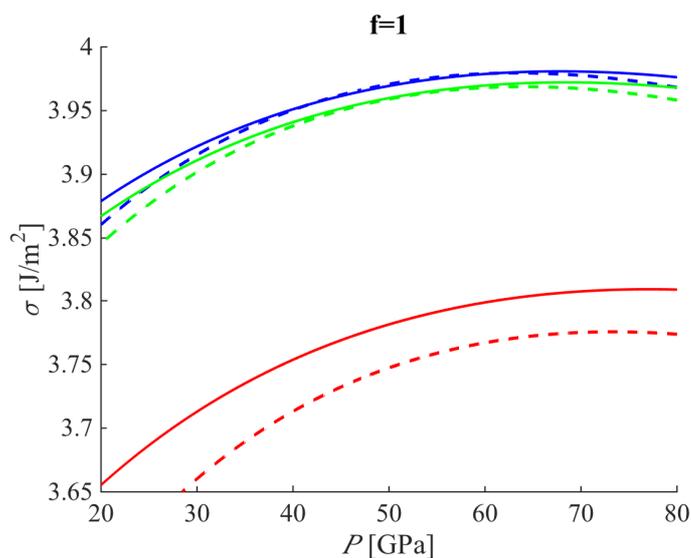


Рис. 2. Барические изоморфно-изомерные зависимости удельной поверхностной энергии грани (100) ОЦК-W. Сплошные линии получены для макрокристалла, а пунктирные линии – для нанокристалла кубической формы

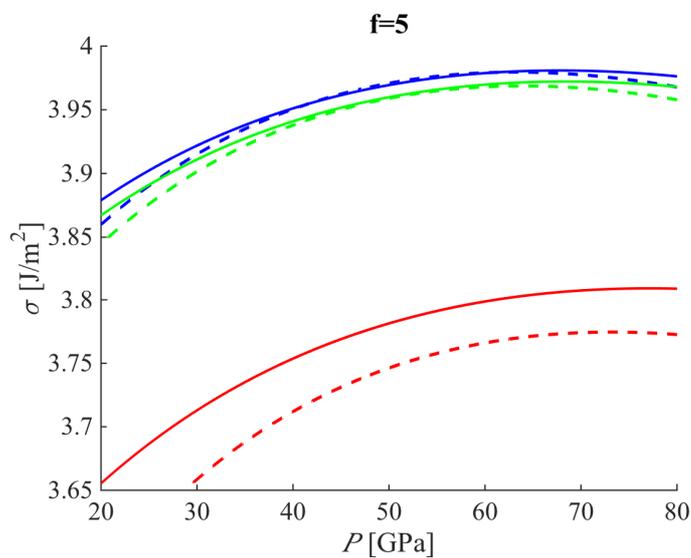


Рис. 3. Барические изоморфно-изомерные зависимости удельной поверхностной энергии грани (100) ОЦК-W. Сплошные линии получены для макрокристалла, а пунктирные линии – для нанокристалла стержневидной формы

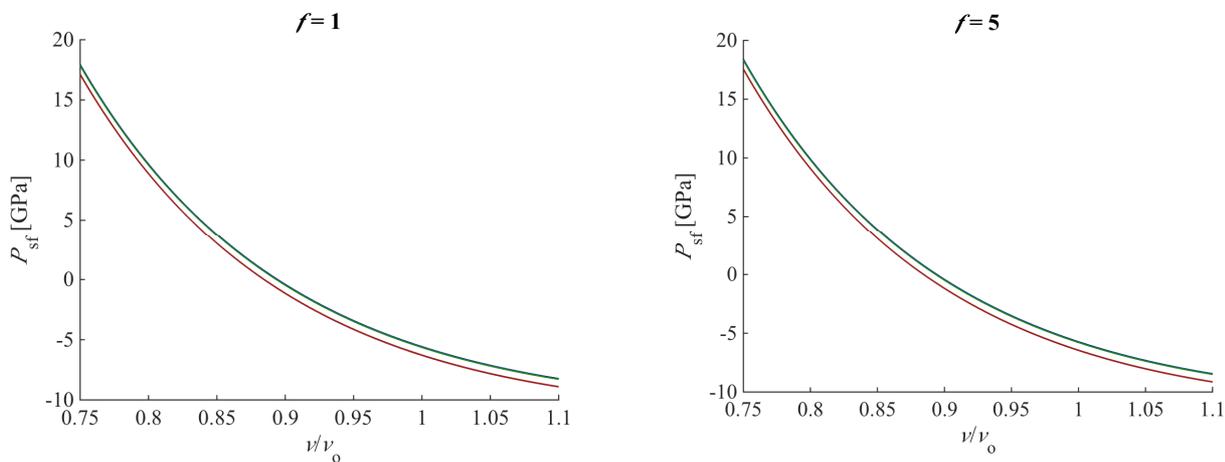


Рис. 4. Поверхностное давление при  $f=1$  (слева),  $f=5$  (справа)

Из рис. 4 видно, что при определенном значении  $(v/v_0)_0$  функция  $P_{sf}(v/v_0)$  проходит через ноль. Т.е. при  $v/v_0 < (v/v_0)_0$  поверхностное давление сжимает нанокристалл ( $P_{sf} > 0$ ), а при  $v/v_0 > (v/v_0)_0$  поверхностное давление нанокристалл растягивает:  $P_{sf} < 0$ . Физические причины такой зависимости состоят в том, что на поверхности нанокристалла имеются две конкурирующие силы [2, 3]:

1. Результирующая составляющая сил притяжения поверхностного атома со стороны окружающих его соседних атомов. Эта сила (максимальная для атомов на ребрах, и, особенно в вершинах параллелепипеда) стремится втянуть поверхностный атом внутрь нанокристалла. Она сжимает нанокристалл тем сильнее, чем меньше величина «размерного аргумента»  $k_n^*$ .

2. Сила, возникающая из-за колебаний («нулевых» при  $T = 0$  К, либо «тепловых» при  $T > 0$  К) атомов. Эта сила стремится вытолкнуть поверхностный атом из нанокристалла, и именно она растягивает нанокристалл. Причем энергия и давление, обусловленные колебаниями атомов, растут с температурой.

При низких температурах для «не квантовых» кристаллов преобладает первая сила. Но при изоморфно-изомерно-изохорическом увеличении температуры растет вторая сила, и при  $T_0$  – «температуре нулевого поверхностного давления» величины этих сил уравниваются друг друга. Причем, функция  $T_0$  определяется тремя аргументами [2, 3]:

1) «размерным аргументом»  $k_n^*$ , который зависит от размера и от формы нанокристалла;

2) относительной линейной плотностью нанокристалла  $R = r_0/c$ ;

3) «параметром квантованности» макрокристалла:  $X_w(1) = A_w(1)\xi/\Theta(1)$ , который представляет собой отношение энергии «нулевых колебаний» атома в решетке к энергии парного межатомного взаимодействия при нулевом давлении, т.е. при  $R = 1$ .

Отметим, что существование поверхностного давления для нанокристалла доказано также и методом молекулярной динамики в [9], где также было указано на возможность перехода поверхностного давления нанокристалла в отрицательную область.

### Выводы

1. В рамках RP-модели получено уравнение состояния  $P(T, v/v_0)$  для нанокристалла, в котором учтены зависимости как от размера, так и формы поверхности. Показано, что при определенном значении относительного объема  $(v/v_0)_0$  зависимости  $P(v/v_0)$  для нано- и макро-кристалла пересекаются. Т.е. при  $(v/v_0)_0$  поверхностное давление становится равным нулю. При  $v/v_0 < (v/v_0)_0$  поверхностное давление сжимает нанокристалл, а при  $v/v_0 > (v/v_0)_0$  поверхностное давление нанокристалл растягивает. Величина  $(v/v_0)_0$  уменьшается при изоморфно-изомерном росте температуры, а также при изоморфно-изотермическом уменьшении числа атомов, или при изомерно-изотермическом отклонении формы нанокристалла от наиболее оптимальной формы.

2. На примере ОЦК-W показано, что с уменьшением температуры возникает область давления, где удельная поверхностная энергия нанокристалла ста-

новится больше, чем у макрокристалла:  $\sigma(N) > \sigma(\infty)$ . При определенных  $P$ - $T$ -условиях удельная поверхностная энергия не зависит от размера нанокристалла. При низких температурах на изотермах функции  $\sigma(N, P)$  имеются две таких  $P$ -точки, где  $\sigma(N) = \sigma(\infty)$ . С ростом температуры значения  $P$ -точек сближаются и при высоких температурах таких  $P$ -точек на изотермах функции  $\sigma(N, P)$  уже нет.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-03-00041\_a и Программы Президиума РАН (программа № I.11П(1)).

#### Литература

1. Магомедов М.Н. О зависимости поверхностной энергии от размера и формы нанокристалла // Физика Твёрдого Тела. – 2004. – Т. 46. – № 5. – С. 924-937.
2. Магомедов М.Н. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. – М.: Физматлит, 2010. – 544 с.
3. Магомедов М.Н. О статистической термодинамике «безопорного» нанокристалла: Кремний // Кристаллография. – 2017. – Т. 62. – № 3. – С. 487-504.
4. Магомедов М.Н. Об определении температуры Дебая из экспериментальных данных // Физика Твёрдого Тела. – 2003. – Т. 45. – № 1. – С. 33-36.
5. Газанова Н.Ш. Уравнение состояния и плавление вольфрама при высоких  $P$ - $T$ -условиях // 19-й Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-19). Труды симпозиума. – Россия, г. Ростов-на-Дону – пос. Южный, 10 – 15 сентября 2016 г. – Ростов-н/Д: Изд-во Фонд науки и образования, 2016. – Вып. 19. – Т. 1. – С. 57-61.
6. Магомедов М.Н. Об изменении модуля упругости при уменьшении размера нанокристалла // Письма в Журнал Технической Физики. – 2013. – Т. 39. – № 9. – С. 9-17.
7. Магомедов М.Н. О поверхностном давлении для нанокристалла // Российские Нанотехнологии. – 2014. – Т. 9. – № 5-6. – С. 63-72.
8. Газанова Н.Ш. Барическая зависимость поверхностной энергии вольфрама // VII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – Россия, Москва, 7 – 10 ноября 2017 г. / Сборник материалов. – М.: ИМЕТ РАН, 2017. – С. 110-112.
9. Головнева Е.И., Головнев И.Ф., Фомин В.М. Молекулярно-динамический расчет коэффициента теплового расширения нанокристаллов меди // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2011. – Т. 2. – № 3. – С. 71-78.

## SURFACE PRESSURE DEPENDENCE OF TUNGSTEN NANOCRYSTAL TEMPERATURE, SIZE AND FORM

N.Sh. Gazanova

Institute for Geothermal Research, Dagestan Scientific Centre Russian Academy of Science

The dependence of the specific surface energy and surface pressure on the size, shape of the surface, and temperature of a nanocrystal with a free surface was studied with the help of the Mie-Lennard-Jones potential. The dependence of the surface energy and the lattice parameter on the size and shape of the nanocrystal, both along the isotherms 100, 300 and 3000 K, and along the 0 GPa isobar is studied using the example of bcc-W. The nanocrystal has the shape of a cube and a rod

Keywords: nanocrystal, size, shape, state equation, tungsten

## ФОРМИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ОБЛАСТЕЙ В ЦЕПОЧКЕ НЕСВЯЗАННЫХ ЛИНЕЙНЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Е.Е. Гетманова

ООО «Дистанционный репетитор», Москва  
[elge@mail.ru](mailto:elge@mail.ru)

В работе показано, что воздействуя импульсами силы на систему линейных несвязанных осцилляторов можно увеличивать энергию только определенной небольшой группы осцилляторов

Ключевые слова: волны в системе несвязанных линейных осцилляторов, передача энергии группе осцилляторов

В работе показано, что воздействие импульсов силы на цепочку линейных несвязанных осцилляторов (маятников) с плавно меняющимися собственными частотами позволяет сформировать области устойчивой концентрации энергии в небольшом числе указанных маятников.

Рассмотрим цепочку линейных маятников (осцилляторов), собственные частоты которых меняются по закону  $\omega_{0s} = 5s, \text{ с}^{-1}$ ,  $s = 400$  ( $s$  – количество маятников), которые испытывают силовое импульсное воздействие  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ ,  $\omega = 10^3, \text{ с}^{-1}$ . В работе [1] было показано, что после действия первого (начального) импульса, в цепочке возникают волны, являющиеся результатом согласованных колебаний различных групп маятников. Волны одинаковой длины, существующие в определенном временном интервале, объединяются в ансамбли. Со временем число волн в ансамбле меняется от максимального значения до ансамбля с двумя волнами, затем вновь происходит увеличение числа волн в ансамбле, в момент  $200,5T$  сдвиг фаз между любыми соседними маятниками равен  $2\pi$ . Полный цикл колебаний составляет  $201T$ , параметры маятников полностью идентичны в моменты  $T$  и  $201T$ . Затем процесс формирования ансамблей волн повторяется. Спектр ансамблей волн, формируемых в цепочке, проиллюстрирован на рис. 1, где показаны приведенные  $\left(\frac{t}{T}\right)$  моменты времени, при которых в цепочке формируется ансамбль с числом волн  $p_{MAX}$ . Волны обозначаются  $p + p_{MAX}i$ ,  $p = 1, 2, \dots, p_{MAX}$ ,  $i = 0, 1, \dots, 400 / p_{MAX}$  ( $i$  показывает порядковый номер осциллятора) и формируются из групп маятников, которые входят в обозначение волны. К примеру, ансамбль из четырех волн  $p_{MAX} = 4$  включает четыре волны  $p + 4i$ ,  $p = 1, 2, \dots, p_{MAX}$ ,  $i = 0, 1, \dots, 400 / p_{MAX}$ ,  $1 + 4i, 2 + 4i, 3 + 4i, 4 + 4i$ , которые показывают, какие осцилляторы входят в каждую волну. Первая волна включает  $1, 5, 9, \dots, 397$ , вторая, третья и четвертые волны  $2, 6, 10, \dots, 398$ ;  $3, 7, 11, \dots, 399$ ,  $4, 8, 12, \dots, 400$  осцилляторы. На рис. 1 показаны моменты времени  $TP_{MAX}$ , при которых сдвиг фаз между соседними маятниками в ансамб-

ле, содержащем  $p_{MAX}$  волн, кратен  $2\pi$ . Ансамбли с одинаковым числом волн в полном цикле колебаний образуются несколько раз. Например, ансамбли, включающие две волны из групп  $p + 2i$ ,  $p = 1, 2$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, 199$ , формируются вблизи  $T2MAX = 100,5T, 200,5T$  (рис. 1). Ансамбль с тремя волнами  $p + 3i$ ,  $p = 1, 2, 3$ ;  $i = 0, 1, 2, \dots, 133$  возникает вблизи  $T3MAX = \frac{403}{6}T, \frac{803}{6}T, 200,5T$ , с четырьмя  $p + 4i$ ,  $p = 1, 2, 3, 4$ ;  $i = 0, 1, 2, \dots, 99$  – в моменты  $T4MAX = 50,5T, 150,5T, 200,5T$  и т.д. В момент  $200,5T$  формируется одна волна с разностью фаз  $2\pi$  между любыми соседними маятниками в цепочке, что означает включение в данную волну всех волн, существующих в цепочке.

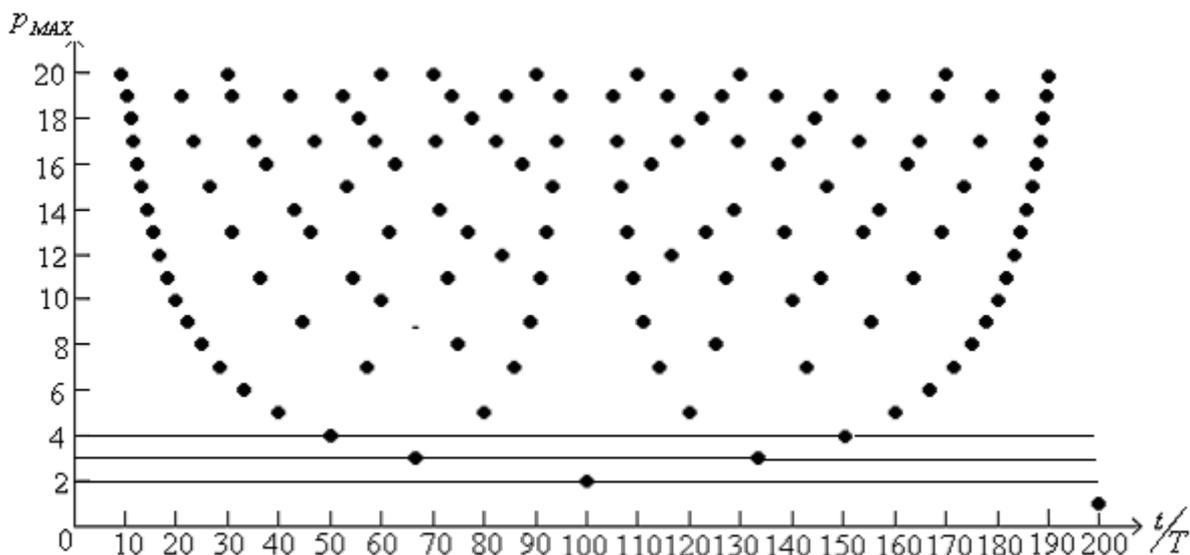


Рис. 1

Действие второго импульса, в общем случае, уменьшает количество ансамблей.

Поскольку смещение осцилляторов после действия начального и второго импульсов осуществляется независимо, то для наблюдения волн требуется выполнение следующих условий. В момент  $t_1$  ( $t_2$ ), когда разность фаз между маятниками в волновых группах первого (второго) ансамбля кратна  $2\pi$ , разность фаз в группах второго (первого) ансамбля между теми же маятниками не должна превышать  $2\pi n \pm 0,4\pi$ . Таким образом, в моменты  $t_1$  и  $t_2$ , разность фаз между маятниками в группах волн не должна превышать  $2\pi n \pm 0,4\pi$ . Поскольку не все ансамбли удовлетворяют указанному соотношению, то определенные ансамбли волн не наблюдаются, и в спектре волн возникают щели, указывающие на отсутствие некоторых ансамблей.

Если начало действия второго импульса совпадает с моментом  $T_1 = 99T$  или  $T_1 = 101T$ , то спектр волн показан на рис. 2. Черные квадратики указывают моменты времени, когда в ансамбле, сформированном после действия первого импульса между маятниками в волнах, устанавливается разность фаз, кратная

2π. Светлые квадратики указывают моменты времени, когда аналогичная разность устанавливается между теми же маятниками в группах волн, образованных после действия второго импульса. В цепочке будут наблюдаться ансамбли с четным числом волн  $p + 2i, p = 1, 2, 3, 4, \dots, p + 40i, p = 1, 2, \dots, 40$ . Ансамбли с числом волн  $41 \leq s \leq 60$  не формируются, что определяет «щель» в спектре волн. Сформируются ансамбли с числом волн  $61 \leq s \leq 139$  (только нечетные волны),  $160 \leq s \leq 240$  (только четные волны),  $261 \leq s \leq 239$  (только нечетные волны),  $260 \leq s \leq 400$  (только четные волны). Соответственно, щели в спектре ансамблей волн определяются значениями  $41 \leq s \leq 60, 140 \leq s \leq 159, 241 \leq s \leq 260, 340 \leq s \leq 359$ .

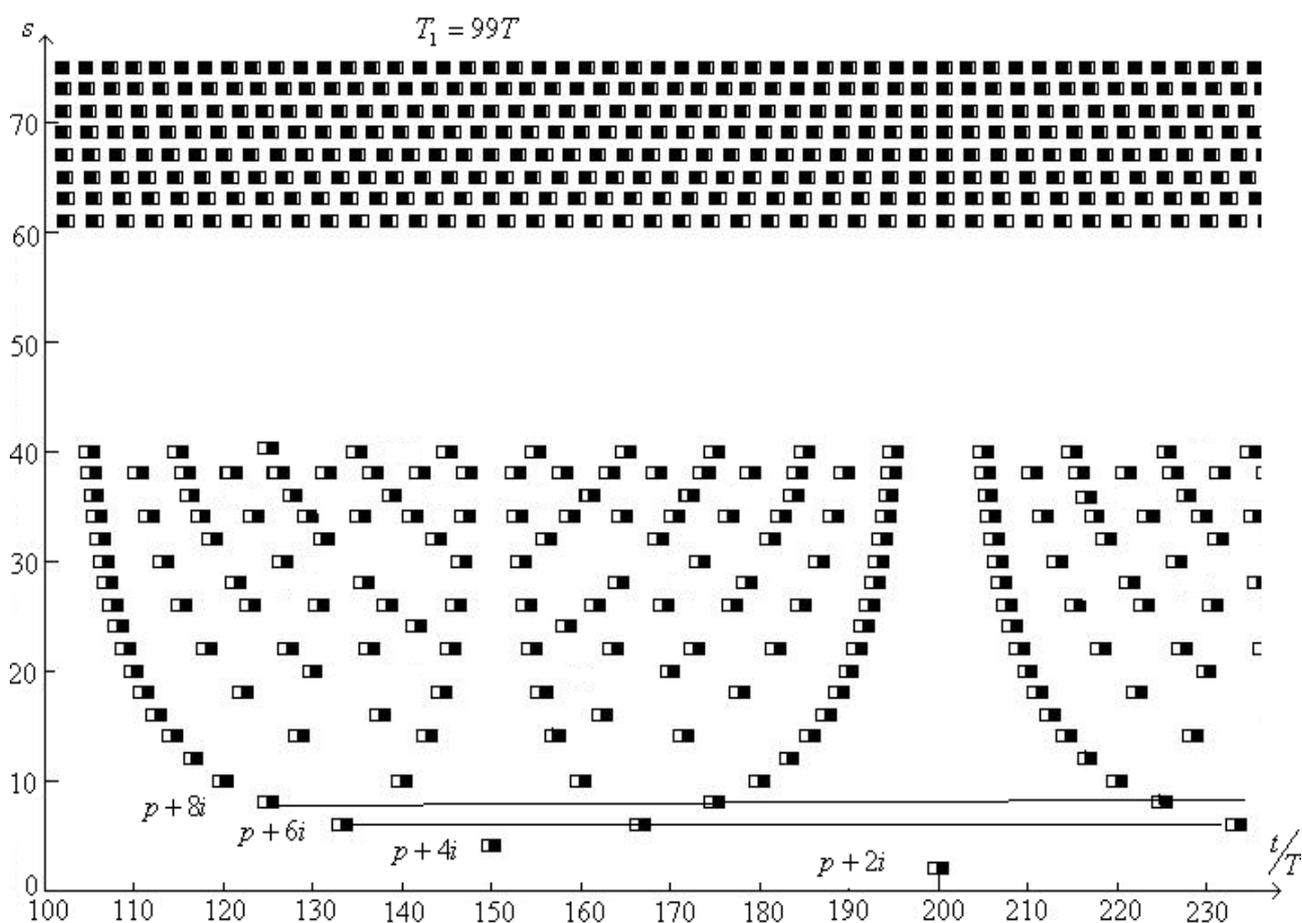


Рис. 2

Каждый последующий импульс приводит, в общем случае, к уменьшению спектра ансамблей. В случае, когда начало действия импульсов отличается от  $T2MAX - 0,5T$  на величину  $\pm T$  (времена начала действия импульсов симметричны относительно  $T2MAX - 0,5T$ ), спектр ансамблей сохраняется. Аналогично одинаковый спектр волн при действии импульсов  $T3MAX - 0,5T - T$  и  $T3MAX - 0,5T + T$ ,  $T4MAX - 0,5T - T$  и  $T4MAX - 0,5T + T$ ,  $T5MAX - 0,5T - T$  и  $T5MAX - 0,5T + T$ , и т.д. Действие такой пары симметричных импульсов приводит к образованию узловых (неподвижных) осцилляторов, что вызывает

модуляцию бегущих волн, возникших в цепочке после действия начального импульса, и способствует накоплению энергии в участках между узловыми маятниками. При этом число ансамблей волн в системе не меняется.

После четырех импульсов  $T_1 = 99T, T_2 = 101T, T_3 = 199T, T_4 = 201T$  энергия осцилляторов 150, 152, 154, ..., 250 (всего пятьдесят единиц) составляет 0,7 энергии всей цепочки. Спектр волн, сформированных в системе, соответствует спектру, полученному после действия второго импульса в момент  $T_1 = 99T$ . На рис. 3 показано распределение энергии по всем осцилляторам после действия указанных импульсов, из которого следует, что наибольшей суммарной энергией обладают четные маятники 150, 152, 154, ..., 250. Деление энергии на области связано с образованием узловых маятников.

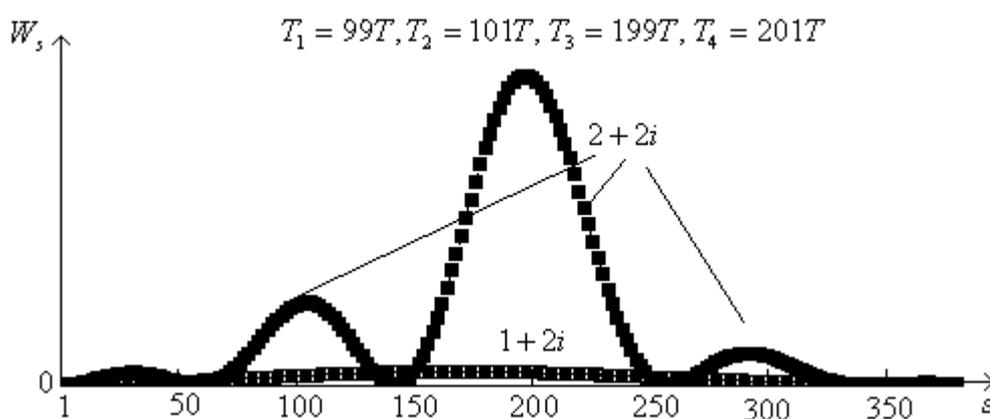


Рис. 3

На рис. 4 показано смещение и скорость маятников в момент  $t = 409T$  в ансамбле из двух волн, а также указаны узловые маятники, появление которых приводит к накоплению энергии определенными группами маятников.

Поскольку ансамбль из трех волн образуется в полном цикле колебаний три раза, в моменты  $T_{3MAX} = \frac{403}{6}T, \frac{803}{6}T, 200,5T$ , то требуется шесть импульсов для концентрации энергии осцилляторов, входящих в группу  $3+3i, i = 0, 1, 2, \dots, 132$ .

Действие трех пар импульсов  $T_1 = 394/6T, T_2 = 406/6T, T_3 = 794/6T, T_4 = 806/6T, T_5 = 199T, T_6 = 201T$  позволит сосредоточить 0,6 энергии всей системы в маятниках 151, 154, 157, ..., 250 (34 единицы). В спектре ансамблей волн в длинноволновой части возникают волны кратные трем.

На рис. 5 показано изменение энергии маятников. Как следует из рисунка, наибольшей совокупной энергией обладают маятники группы 151, 154, 157, ..., 250. На рис. 6 приведены смещение и скорость маятников в момент  $t = 274T$  и указаны узловые (неподвижные) осцилляторы.

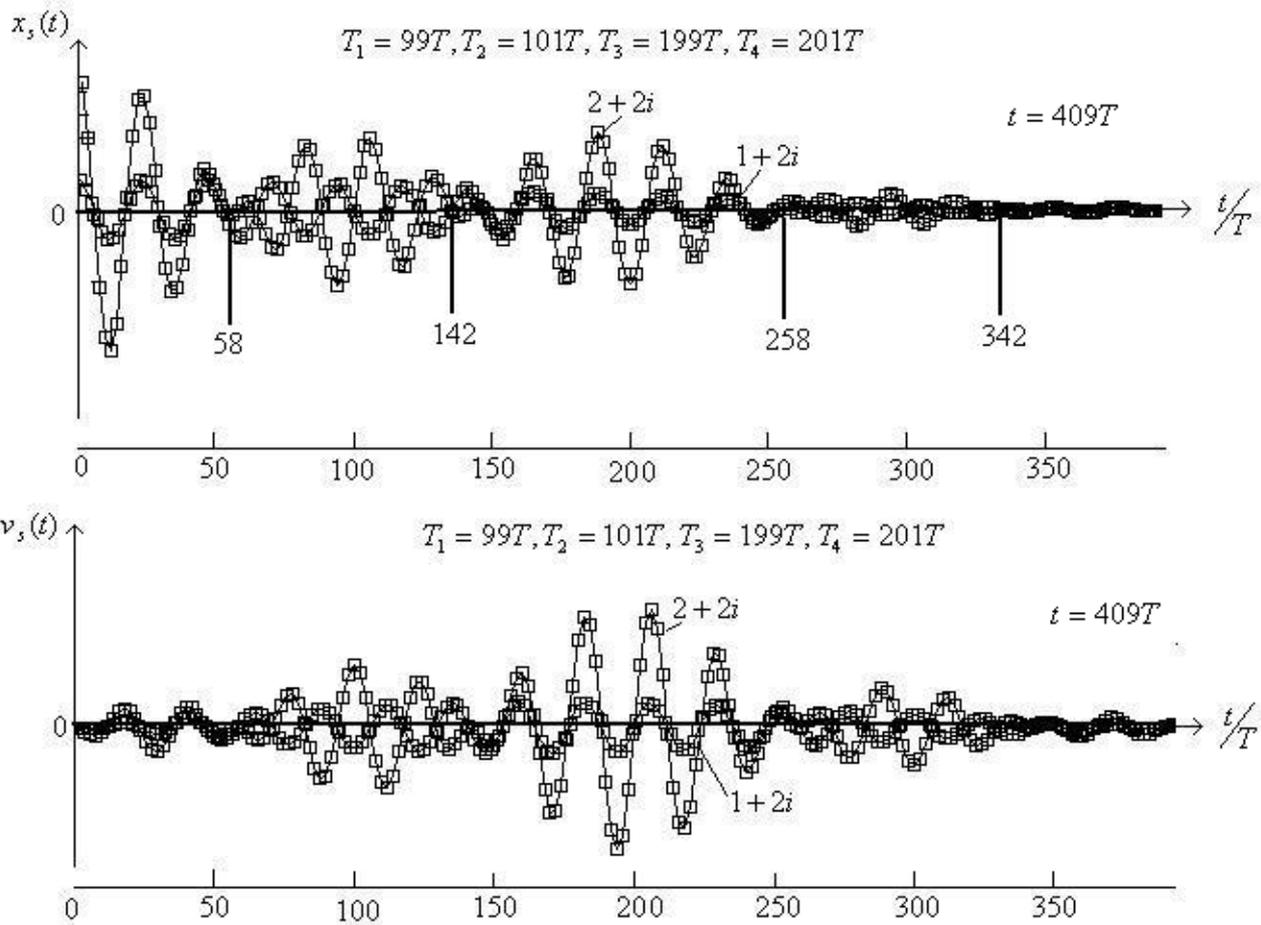


Рис. 4

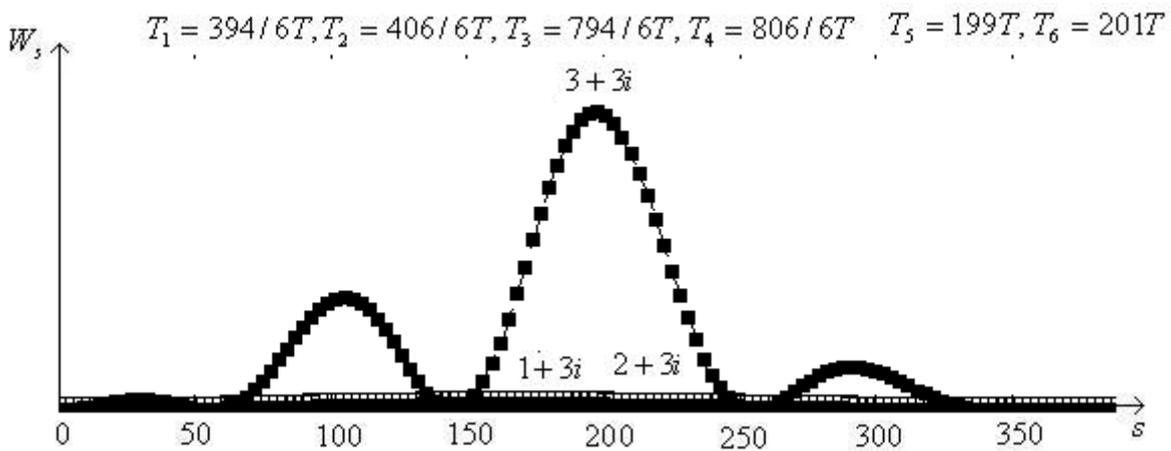


Рис. 5

После действия восьми импульсов, начала которых совпадает с моментами  $T_1 = 49T, T_2 = 51T, T_3 = 79T, T_4 = 81T, T_5 = 199T, T_6 = 201T$  в осцилляторах 152, 156, 160, ..., 248 волновой группы  $4 + 4i, i = 0, 1, 2, \dots, 99$  концентрируется 0,6 энергии всей цепочки и т.д.

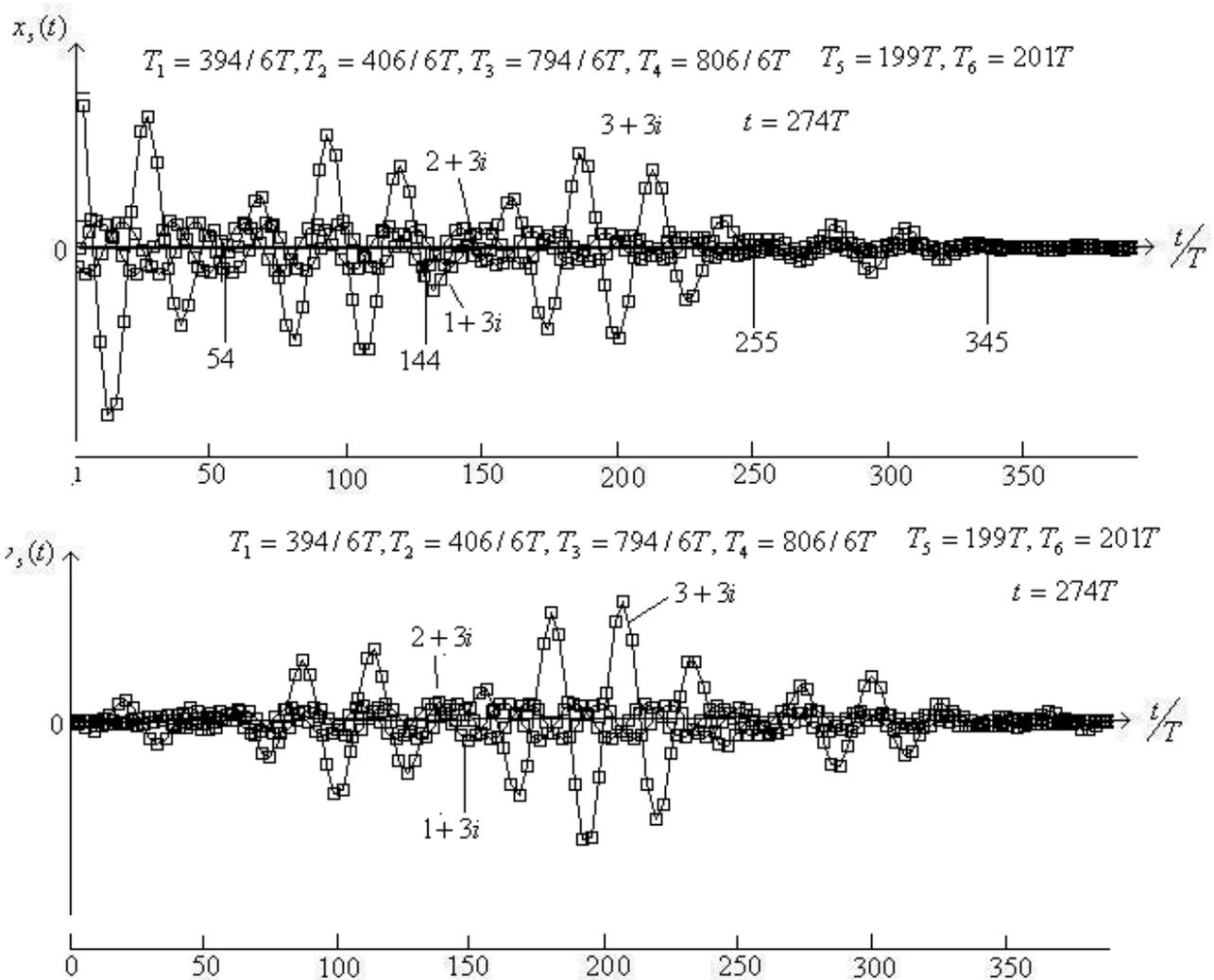


Рис. 6

Таким образом, воздействуя импульсами силы на систему линейных несвязанных маятников, можно закачать более половины всей энергии системы в небольшую группу маятников, которые находятся в интервале 150...250.

### Выводы

В цепочке несвязанных линейных маятников с плавно меняющимися собственными частотами после действия импульса силы возникают волны, которые являются результатом согласованных коллективных колебаний. Как правило, в системе существует несколько волн одинаковой длины из различных групп маятников. В любой момент времени сдвиг фаз между соседними маятниками в любой группе имеет одно и то же значение.

С течением времени происходит трансформация групп, в результате чего количество волн меняется. Это изменение носит периодический характер. В определенные моменты времени  $TP_{MAX}$  в системе существует количество волн, равное  $p_{MAX}$ , и сдвиг фаз между соседними маятниками в волновой группе кратен  $2\pi$ .

Действие второго и последующих импульсов, в общем случае, приводит к тому, что некоторые волны не формируются. Как правило, последующие импульсы не дают возможности проявиться ансамблям с небольшим числом волн, которые существуют в достаточно длинном интервале времени и легко наблюдаются.

Выбор симметричного времени начала импульсов  $TP_{MAX} - 0,5T \pm T$  сохраняет спектр ансамблей волн. Это дает возможность получать ансамбли с небольшим числом волн, волновые группы которых включают большое число маятников. Если начало действия импульсов совпадает с моментами  $TP_{MAX} - 0,5T \pm T$  для всех моментов времени  $TP_{MAX}$  в полном цикле колебаний, то после действия последней пары импульсов, которая для волн всех ансамблей определяется, как  $199T$  и  $201T$ , маятники из интервала, входящие в волну  $p_{MAX} + p_{MAX}i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, 400 / p_{MAX}$  (ансамбль  $p + p_{MAX}i$ ,  $p = 1, 2, \dots, p_{MAX}$ ;  $i = 0, 1, 2, \dots, 400 / p_{MAX}$ ) получают не меньше половины всей энергии цепочки.

Чем больше волн в ансамбле, тем больше моментов времени  $TP_{MAX}$  в полном цикле колебаний, тем большим числом импульсов надо воздействовать на систему для получения эффекта концентрации энергии и тем меньший набор осцилляторов получит энергию порядка 0,5 всей энергии цепочки.

#### Литература

1. Гетманова Е.Е. Образование волн в системе несвязанных линейных осцилляторов / Е.Е. Гетманова // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII Международ. семинара. – Воронеж: ВГТУ, 2014. – Ч. 1. – С. 54-60.

## THE CREATION OF AREAS WITH HIGH ENERGY IN A CHAIN OF UNLINKED LINEARS PENDULUMS

E.E. Getmanova

It's shown that using a pulse power system unlinked linear oscillations it's possible to increase the energy of a certain small group of oscillators

Keywords: waves in system of unlinked linear oscillators, transfer energy to group of oscillators

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНО-ЧАСТОТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КВАРЦЕВОГО РЕЗОНАТОРА МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.М. Глазкова, Д.В. Завьялов

Волгоградский государственный технический университет  
[anastasia.glazkova@yandex.ru](mailto:anastasia.glazkova@yandex.ru)

В данной работе показан анализ температурной зависимости резонаторных свойств кварцевой пластины с напыленными на нее электродами и получено качественное согласие с экспериментальными результатами

Ключевые слова: температурно-частотная характеристика, резонатор, COMSOL Multiphysics

Моделирование температурно-частотной резонансной характеристики кварцевого резонатора является актуальной задачей современной радиоэлектроники [1-5]. В основном такие задачи исследуются с помощью различных приближений типа модели Миндлина [6, 7]. В настоящей работе сделана попытка смоделировать температурно-частотную характеристику (ТЧХ) кварцевого резонатора АТ-среза без использования этих упрощений.

Упругие волны в резонаторе рассматривались в линейном приближении, то есть считалось, что деформации достаточно малы и характеристики материалов не зависят от величины деформации, механического напряжения и напряженности электрического поля.

Исследовались численные решения следующей системы дифференциальных уравнений в частных производных, которая по сути является математической моделью кварцевого резонатора.

$$\begin{aligned}
 -\rho\omega^2 \mathbf{u} &= \nabla \cdot \mathbf{S} + \mathbf{F}_V e^{i\phi}, \\
 \mathbf{S} &= c_E: \epsilon - e^T \mathbf{E}, \\
 \epsilon &= \frac{1}{2} [(\nabla \mathbf{u})^T + \nabla \mathbf{u}], \\
 \nabla \mathbf{D} &= \rho_V, \\
 \mathbf{D} &= e\epsilon + \epsilon_0 \epsilon_{rS} \mathbf{E}, \\
 \mathbf{E} &= -\nabla V.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь  $\rho$  – плотность материала,  $\omega$  – циклическая частота возбуждающего напряжения,  $\mathbf{u}$  – тензор смещений,  $\mathbf{S}$  – тензор механических напряжений,  $e$  – матрица связи,  $c_E$  – тензор эластичности,  $\epsilon$  – тензор относительной деформации,  $\mathbf{F}_V$  – объемная составляющая внешних сил,  $\phi$  – фаза колебаний,  $\mathbf{D}$  – вектор электрического смещения,  $\rho_V$  – объемная плотность сторонних зарядов,  $\mathbf{E}$  – вектор напряженности электрического поля,  $V$  – потенциал электрического поля,  $\epsilon_0$  – диэлектрическая постоянная,  $\epsilon_{rS}$  – относительная диэлектрическая проницаемость.

Приведенная система дифференциальных уравнений решалась в области, ограниченной параллелепипедом, показанным на рис. 1.

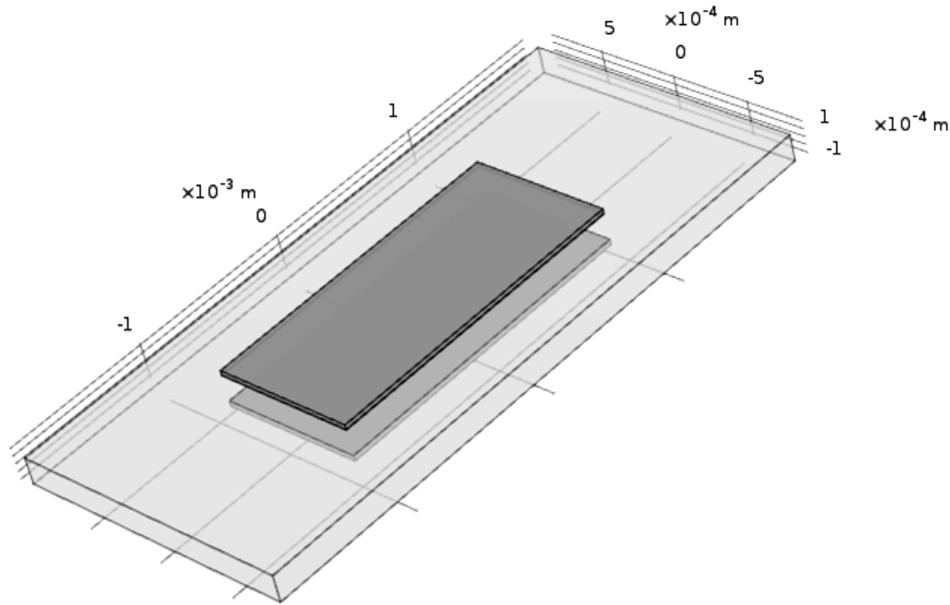


Рис. 1. Модель исследуемого объекта (светло-серым обозначена кварцевая пластина, темно-серым – электроды)

Для построения ТЧХ резонатора в (1) была добавлена зависимость [8] компонентов тензора эластичности ( $c_E$ ) от температуры  $T$  (численные значения приведены в градусах Цельсия):

$$c_E = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & c_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{14} & c_{66} \end{bmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} c_{11} &= 86,75 \cdot 10^9 T_{11}, & c_{12} &= 5,95 \cdot 10^9 T_{12}, \\ c_{13} &= 11,91 \cdot 10^9 T_{13}, & c_{14} &= 17,80 \cdot 10^9 T_{14}, \\ c_{33} &= 107,20 \cdot 10^9 T_{33}, & c_{44} &= 57,80 \cdot 10^9 T_{44}, \\ c_{66} &= 40,40 \cdot 10^9 T_{66}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{11} &= 1 - 48,5 \cdot 10^{-6} \Delta T - 107 \cdot 10^{-9} \Delta T^2 - 70 \cdot 10^{-12} \Delta T^3, \\ T_{33} &= 1 - 160 \cdot 10^{-6} \Delta T - 275 \cdot 10^{-9} \Delta T^2 - 250 \cdot 10^{-12} \Delta T^3, \\ T_{12} &= 1 - 2637 \cdot 10^{-6} \Delta T - 2678 \cdot 10^{-9} \Delta T^2 - 1110 \cdot 10^{-12} \Delta T^3, \\ T_{13} &= 1 - 550 \cdot 10^{-6} \Delta T - 1150 \cdot 10^{-9} \Delta T^2 - 750 \cdot 10^{-12} \Delta T^3, \\ T_{44} &= 1 - 177 \cdot 10^{-6} \Delta T - 216 \cdot 10^{-9} \Delta T^2 - 216 \cdot 10^{-12} \Delta T^3, \\ T_{66} &= 1 + 178 \cdot 10^{-6} \Delta T + 118 \cdot 10^{-9} \Delta T^2 + 21 \cdot 10^{-12} \Delta T^3, \\ T_{14} &= 1 - 101 \cdot 10^{-6} \Delta T - 48 \cdot 10^{-9} \Delta T^2 - 590 \cdot 10^{-12} \Delta T^3, \end{aligned}$$

$$\Delta T = T - T_{ref}.$$

Для решения системы (1) был использован программный пакет COMSOL Multiphysics.

По результатам моделирования были построены графики зависимости амплитуд полей смещения от частоты при разных температурах (рис. 2 и 3). Для наглядности на рисунках приведены результаты моделирования с низкой добротностью резонатора.

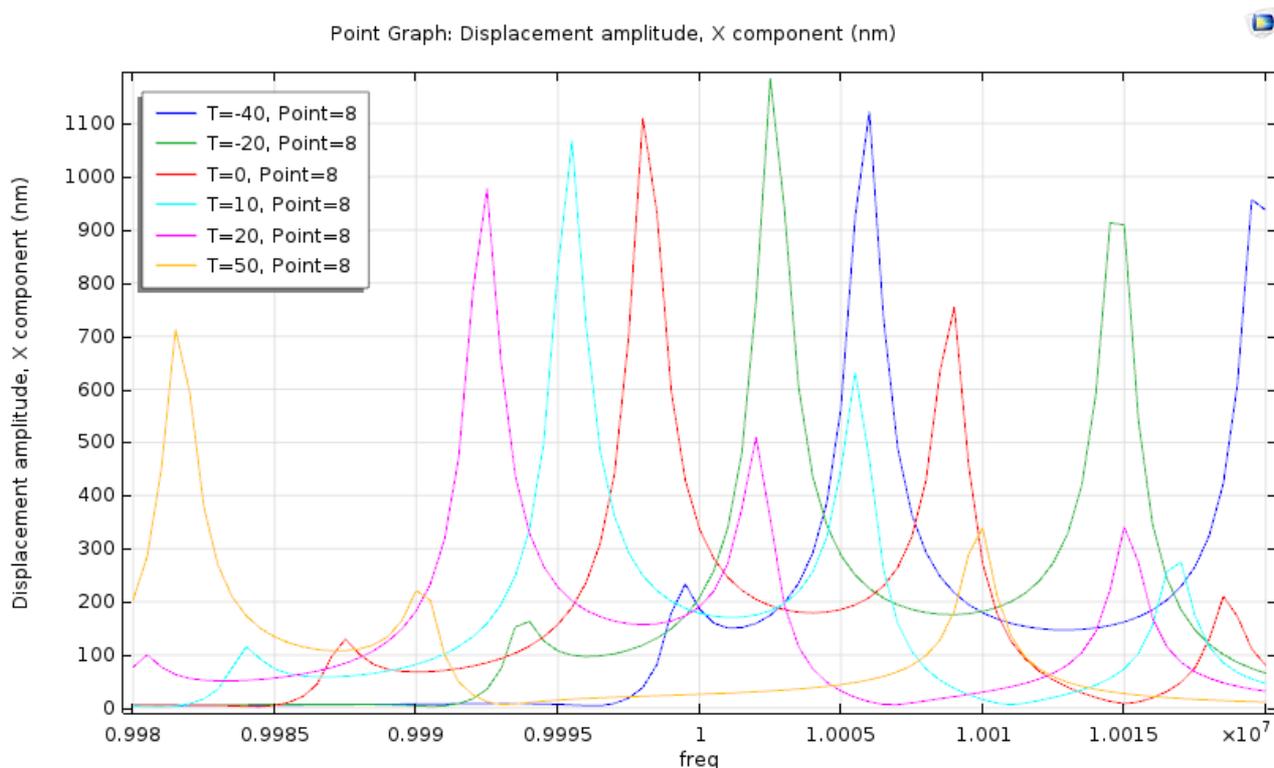


Рис. 2. Графики зависимости  $u$  от частоты при различных температурах

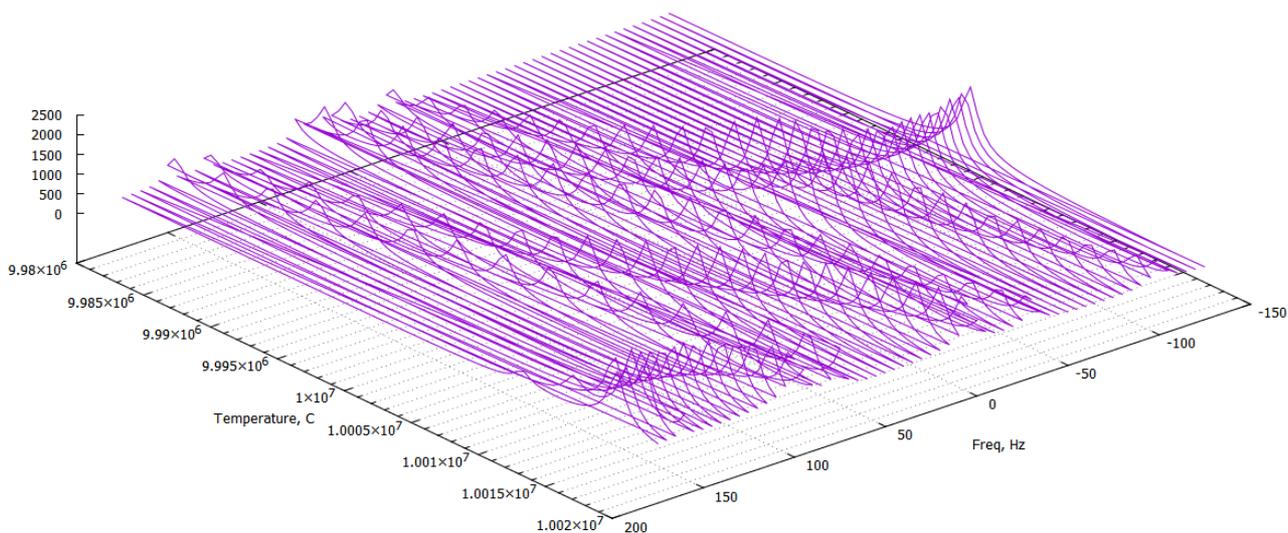


Рис. 3. Графики зависимости  $u$  от частоты при различных температурах

Из рисунков видно, что:

- 1) У разных пиков разная «скорость» движения с изменением температуры.

2) С изменением температуры амплитуды пиков также изменяются, причем в разных направлениях. Из-за этого на ТЧХ могут появляться разрывы первого рода. Отметим, что в некоторых случаях такие разрывы наблюдались экспериментально (см., например, [9]), однако для количественного сравнения результатов моделирования и эксперимента требуются дополнительные исследования по уточнению параметров модели.

Таким образом, в работе на простой модели был проведен анализ температурной зависимости резонаторных свойств кварцевой пластины с напыленными на нее электродами и получено качественное согласие с экспериментальными результатами.

#### Литература

1. John R. Vig «Quartz Crystal Resonators and Oscillators for Frequency Control and Timing Applications - A Tutorial», April 2012.
2. Лепетаев А.Н. Расчет кварцевых генераторов: современный подход / А.Н. Лепетаев // Радиотехника. – 2011. – С. 500-509.
3. Peter, C. Low Noise Chip Scale Atomic Clock (LNCSAC) / C. Peter, B. Dan, G. Ramesh, M. David // Proceedings of 2014 IEEE International Frequency Control Symposium : Taipei, Taiwan, 19–22 May, 2014. – P. 253-256.
4. Ложников А.О. Миниатюрные термокомпенсированные кварцевые генераторы / А.О. Ложников // Современная электроника. – 2016. – № 4. – С. 52-53.
5. Результаты исследования термостатированного кварцевого генератора с двухмодовым возбуждением резонатора ТД-среза на численно-аналитической модели / И.В. Хоменко // Омский научный вестник. – 2008. – № 3 (70). – С. 115-121
6. Wang J, Chen LP, Du JK, et al. Finite element analysis of nonlinear thickness-shear vibrations of AT-cut quartz crystal plates. Proceedings of the 2010 IEEE Intl. Frequency Control Symposium, 392-396, 2010.
7. Wang J, Chen YM, et al. An integrated program of vibrations of quartz crystal plates with Mindlin plate theory for resonator design. Proc.of the 2010 Symposium on Piezoelectricity, Acoustic Waves and Device Applications, 300–305, 2010.
8. Шаскольская М.П. Акустические кристаллы / А.А. Блистанов, В.С. Бондаренко, В.В. Чкалова. – под ред. М.П. Шаскольская – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. – С. 633.
9. Pao S.Y. An efficient AT-cut quartz crystal resonator design tool for activity dip in working temperature range / S.Y. Pao, Q.Q. Pan, M.C. Chao // 2011 Joint Conference of the IEEE International Frequency Control and the European Frequency and Time Forum (FCS) Proceedings, San Francisco, CA, 2011, pp. 1-4.

## INVESTIGATION OF TEMPERATURE-FREQUENCY CHARACTERISTICS OF A QUARTZ RESONATOR BY COMPUTER MODELING METHOD

A.M. Glazkova, D.V. Zavyalov

Volgograd State Technical University

This paper shows an analysis of the temperature dependence of the resonator properties of a quartz plate with electrodes deposited on it, and a qualitative agreement was obtained with the experimental results

Keywords: temperature-frequency response, resonator, COMSOL Multiphysics

## МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ВИБРОАКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

В.В. Глотов, И.И. Сапрыкин, И.В. Остроумов

Воронежский государственный технический университет

[vadik-livny@mail.ru](mailto:vadik-livny@mail.ru)

Мониторинг состояния оборудования в широком понимании подразумевает считывание информационных сигналов с различных датчиков, сбор данных, обработку сигналов и их анализ для извлечения и оценки информации о неисправностях. Цель мониторинга – предотвращение внеплановой остановки производственных процессов из-за неисправности отдельных узлов и катастрофических аварий оборудования в ходе работы. Мониторинг состояния совершенно необходим на транспорте, где соображения безопасности имеют высокий приоритет

Ключевые слова: виброакустические сигналы, импульсы, мониторинг

В последнее время для контроля состояния механизмов интенсивно применяются методы акустической и вибрационной диагностики. Вибрационные сигналы являются носителями информации как для машины в целом, так и для ее частей, каждая из которых характеризуется собственным спектром частот вибрации. Чтобы обеспечить эффективное упреждающее детектирование повреждений в сложных механизмах, содержащих множество узлов, требуются такие методы обработки и анализа сигналов, которые позволяют извлечь из полного виброакустического (ВА) сигнала парциальную информацию о состоянии каждого конкретного компонента оборудования.

Существует огромное число механизмов циклического действия, в которых характер взаимодействия элементов подчинен периодическому закону, связанному с вращательным движением. К такого рода механизмам относятся роторные механизмы, где периодическое возбуждение в наиболее простом виде проявляется как сумма гармонических составляющих, кратных основной частоте возмущения, т.е. в виде полигармонического колебания:

$$x(t) = \sum_{k=1}^n a_k \cos(kw_o t + \varphi_k). \quad (1)$$

В роторных механизмах одной из основных частот возбуждения является оборотная (роторная) частота:

$$f_o = \frac{w_o}{2\pi}, \quad (2)$$

где  $w_o$  – угловая частота вращения внутреннего кольца.

В резонансных методах ВА-диагностики акустический сигнал часто описывают как сумму радиоимпульсов, представляющих собой отклик исследуемой системы на ударное механическое воздействие:

$$x(t) = \sum_{k=1}^n a_k \cdot [s_k(t - t_k) \cdot \lambda(t - t_k)], \quad (3)$$

где  $a_k$  – пиковое значение,  $t_k$  – время прихода, а  $s_k(\tau)$  – форма  $k$ -го ударного импульса. Функция  $\lambda(\tau)$  – импульсная характеристика сложной электромеханической системы «механизм – звукопровод – датчик – усилитель», которая, вообще говоря, представляет собой сумму откликов различных конструктивных элементов данной системы.

Теоретически выражение (3) позволяет полностью восстановить исходный ВА-сигнал, но форма импульсной характеристики  $\lambda(\tau)$  весьма чувствительна к условиям проведения эксперимента. В условиях реального производства обеспечить долговременную стабильность  $\lambda(\tau)$  практически невозможно. По этой причине в качестве информативных параметров сигнала часто рассматривают только  $a_k$  и  $t_k$ , принимая в качестве  $s_k(\tau)$  дельта-функцию. В большинстве случаев, когда удаётся получить длительность  $\lambda(\tau)$  существенно меньшей, чем среднее время между соседними ударными импульсами  $\overline{t_k - t_{k-1}}$ , можно принять  $\lambda(\tau) = \mathbf{1}(0) - \mathbf{1}(\tau_u)$ , тогда

$$x(t) = \sum_{k=1}^n a_k \cdot [\mathbf{1}(t - t_k) - \mathbf{1}(t - t_k + \tau_u)], \quad (4)$$

где  $\tau_u \ll \overline{t_k - t_{k-1}}$  – длительность реальной импульсной характеристики.

#### Литература

1. Гречинский Д.А., Ковальский В.И., Дудченко И.А. Современное состояние и тенденции совершенствования средств виброзащиты изделий и средств функциональной диагностики. Дефектоскопия и вибродиагностика. Сб. Трудов НИКИМП. – М.: 1988. – С. 102-106.
2. Лэм Г. Аналоговые и цифровые фильтры. Расчёт и реализация. – М.: Мир, 1982. – 592 с.
3. Моделирование входных сигналов блока цифровой обработки автоматизированной системы виброакустической диагностики роликовых подшипников / В.А. Козьмин, М.М. Мочалов, О.М. Мысков, А.В. Поляков; Воронеж. гос. техн. ун-т. Воронеж, 1997. с.: 16, Библиогр.: 3 назв. Рус. Деп. в ВИНТИ 12.03.97, № 755-B97.

## MATHEMATICAL MODELS OF VIBROACOUSTIC SIGNALS

V.V. Glotov, I.I. Saprykin, I.V. Ostroumov

Voronezh State Technical University

Equipment monitoring in the broadest sense means reading information signals from various sensors, collecting data, processing signals and analyzing them to extract and evaluate information about faults. The purpose of the monitoring is to prevent an unplanned shutdown of production processes due to malfunction of individual units and catastrophic equipment failures during operation. Monitoring of the state is absolutely necessary on transport, where safety considerations have a high priority

Keywords: vibro-acoustic signals, pulses, monitoring

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА УВЛЕЧЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНОЙ В ДВУМЕРНОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Д.В. Завьялов<sup>1</sup>, С.В. Крючков<sup>2</sup>, Е.С. Сивашова<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Волгоградский государственный технический университет  
[sinegordon@gmail.com](mailto:sinegordon@gmail.com)

<sup>2</sup>Волгоградский государственный социально-педагогический университет

<sup>3</sup>Гимназия №11 г. Волгограда

Методом компьютерного моделирования исследованы особенности фотоэлектрического эффекта в полупроводниковой двумерной сверхрешетке в присутствии постоянного электрического поля

Ключевые слова: сверхрешетка, моделирование, электрическое поле, эффект увлечения

### ВВЕДЕНИЕ

Эффект увлечения носителей тока электромагнитными (ЭМ) волнами – фотоэлектрический или радиоэлектрический эффект (РЭЭ) – привлекает внимание исследователей [1-6] в связи с диагностикой кинетических свойств полупроводников и в связи с возможностью использования его для детектирования мощного ЭМ излучения. Данный эффект, обусловленный передачей импульса фотона электронной подсистеме, в рамках квазиклассического подхода объясняется как результат действия силы Лоренца, возникающей при движении электрона в переменном и магнитном полях волны. В полупроводниковых сверхрешетках (СР), обладающих сильной непереработностью энергетического спектра, РЭЭ обладает рядом специфических особенностей. Одной из таких особенностей является смена знака эффекта в присутствии сильного постоянного электрического поля, направленного вдоль оси СР [7]. Однако в [7] расчет был проведен в рамках простейшего приближения для интеграла столкновений – приближения постоянного времени релаксации. В настоящей работе влияние на РЭЭ постоянного поля исследовано путем прямого численного решения уравнения Больцмана с помощью метода Монте-Карло.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим полупроводниковую СР, энергетический спектр которой описывается приближением сильной связи

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p_y^2}{2m} + \Delta(1 - \cos(p_x d)), \quad (1)$$

где  $\Delta$  – полуширина минизоны проводимости,  $m$  – эффективная масса в плоскости слоев СР,  $d$  – период СР,  $p_x$  – проекция квазиимпульса на ось  $Ox$ ,  $p_y$  – составляющая квазиимпульса в плоскости слоев СР. Будем считать, что вдоль слоев СР распространяется монохроматическая электромагнитная волна так, что  $\vec{E}(y,t) = \{E_0 \cos(\omega t), 0, 0\}$   $\vec{H}(y,t) = \{0, 0, H_0 \cos(\omega t)\}$ . При этом к СР приложено постоянное электрическое поле  $E_c$ , направленное вдоль оси  $Ox$ .

## ОПИСАНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Считаем, что в промежутках между рассеяниями электрон движется согласно уравнениям движения

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}(t) + e[\mathbf{v}, \mathbf{H}(t)]. \quad (2)$$

Время движения электрона до очередного столкновения определяется из решения уравнения

$$r = \int_0^t W(\mathbf{p}(t')) \cdot \exp\left(\int_0^{t'} W(\mathbf{p}(t'')) dt''\right) dt', \quad (3)$$

где  $r$  – равномерно распределенное на интервале  $[0, 1]$  случайное число,  $W(\mathbf{p})$  – полная вероятность рассеяния электрона с импульсом  $\mathbf{p}$ .

Уравнение (3) можно свести к виду

$$r = 1 - \exp\left(-\int_0^t W(\mathbf{p}(t')) dt'\right). \quad (4)$$

Время «опыта» разбивалось на малые промежутки длительностью  $\Delta t$  и интеграл в (5) заменялся интегральной суммой по методу трапеций. Далее в цикле рассчитывались на каждом шаге  $\Delta t$  приращение импульса электрона, его перемещение и значение интегральной суммы до тех пор, пока не выполнится условие

$$-\ln(r) \leq \frac{\Delta t}{2} \sum_i (W(\mathbf{p}_i) + W(\mathbf{p}_{i-1})). \quad (6)$$

Момент времени, в который впервые выполняется (6) является моментом столкновения. После этого с помощью равномерно распределенной на интервале  $[0, 1]$  случайной величины  $s$  определялся механизм рассеяния по правилу

$$\begin{cases} \frac{W_{opt}(\mathbf{p})}{W_{ac}(\mathbf{p}) + W_{opt}(\mathbf{p})} \geq s, \text{оптические фононы;} \\ \frac{W_{opt}(\mathbf{p})}{W_{ac}(\mathbf{p}) + W_{opt}(\mathbf{p})} < s, \text{акустические фононы.} \end{cases} \quad (7)$$

Далее, с помощью выражений для вероятности рассеяния из состояния  $\mathbf{p}'$  в состояние  $\mathbf{p}$ , рассчитываются импульсы после столкновения, и процесс начинается заново для следующего шага.

Вероятность рассеяния носителей заряда на акустических фононах определяется следующим выражением

$$W_{ac}(p_x, p_y) = A_{ac} \int_0^\pi \frac{dp'_x}{\sqrt{\cos p'_x - a_{ac}}}, \quad A_{ac} = \frac{D_a^2 kT}{\pi \hbar^2 \rho s^2} \cdot \frac{1}{d} \sqrt{\frac{2m}{\Delta}},$$

$$a_{ac} = -\frac{1}{\gamma} (p_y^2 - \gamma \cos p_x), \quad p_y' = \pm \sqrt{p_y^2 + \gamma (\cos p'_x - \cos p_x)}, \quad \gamma = \frac{2m\Delta d^2}{\hbar^2}. \quad (8)$$

Здесь  $D_a$  – постоянная деформационного потенциала,  $s$  – скорость звука,  $\rho$  – поверхностная плотность материала. Для оптических фононов

$$W_{opt}(p_x, p_y) = A_{opt} \int_0^\pi \frac{dp'_x}{\sqrt{\cos p'_x - a_{opt}}}, \quad A_{opt} = \frac{D_o^2}{2\pi \hbar \rho \omega_o} \cdot \frac{1}{d} \sqrt{\frac{2m}{\Delta}},$$

$$a_{opt} = -\frac{1}{\gamma} (p_y^2 - \gamma \cos p_x - \beta \gamma), \quad p_y' = \pm \sqrt{p_y^2 + \gamma (\cos p'_x - \cos p_x) - \beta \gamma}, \quad (9)$$

$$\beta = \frac{\hbar \omega_o}{\Delta}, \quad \gamma = \frac{2m\Delta d^2}{\hbar^2},$$

где  $D_o$  – константа взаимодействия с неполярными оптическими фононами,  $\omega_o$  – частота фонона (фононы считаем бездисперсионными). Интегралы в выражениях для  $W_{ac}$  и  $W_{opt}$  были выражены через эллиптические интегралы первого рода, но получившиеся выражения довольно громоздки и здесь мы их приводить не будем.

## РЕЗУЛЬТАТЫ

Плотность тока увлечения определяется следующим выражением:

$$j_y = e \sum_{\mathbf{p}} V_y(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, t), \quad (10)$$

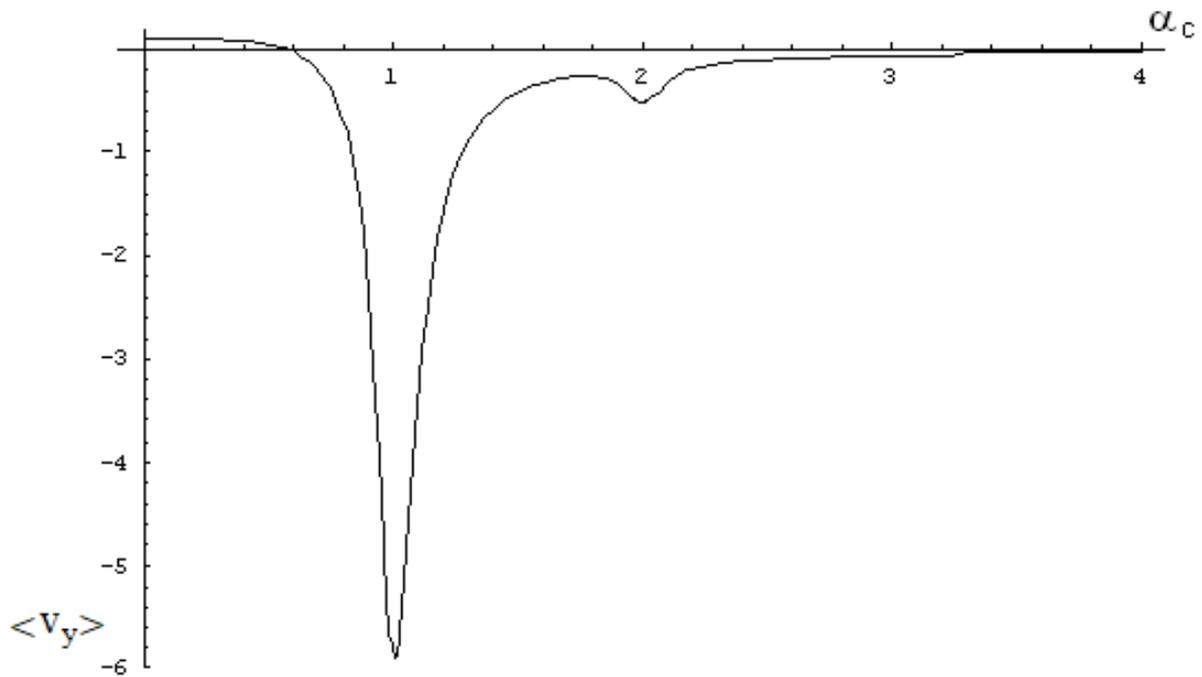
где

$$V = \left\{ \Delta d \sin(p_x d); \frac{p_y}{m} \right\}. \quad (11)$$

Фактически выражение (10) представляет собой среднее значение скорости вдоль оси  $OY$ . В процессе моделирования на каждом шаге по времени вычислялось значение выражения (11) и после окончания модельного времени накопленный временной ряд анализировался (в частности вычислялось его среднее, которое отождествлялось с точностью до множителя с плотностью тока). Технически вычисление плотности тока увлечения сталкивается с большой

трудностью в виде малости эффекта в силу малости отношения  $V/c$  так как РЭЭ определяется силой Лоренца. Это приводит к тому, что для уверенного вычисления  $\langle v_y \rangle$  (чтобы среднеквадратичное отклонение ряда значений скорости было много меньше среднего значения этого ряда) требуется огромная статистика, что решалась путем распараллеливания вычислений и, как следствие, использовании при расчетах архитектур с большим количеством вычислительных ядер – Nvidia Tesla и Intel KNL.

На рисунке представлен график зависимости  $\langle v_y \rangle$  в единицах  $\Delta d / \hbar$  от  $\alpha_c = eE_c d / \omega$ , построенный по результатам моделирования для типичных параметров СР,  $\omega \approx 10^{13} \text{ с}^{-1}$ ,  $d \approx 10^{-6} \text{ см}$ ,  $\Delta \approx 10^{-1} \text{ эВ}$ . Из него видно, что РЭЭ меняет знак при напряженности постоянного электрического поля  $\alpha_c \approx 0.6$  ( $E_c \approx 10$  ед. СГС). Кроме этого, зависимость носит резонансный характер, и наиболее яркий (первый) пик соответствует  $\alpha_c = 1$  ( $E_c \approx 20$  ед. СГС).



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом компьютерного моделирования исследованы особенности фотоэлектрического эффекта в полупроводниковой двумерной сверхрешетке в присутствии постоянного электрического поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках проектной части государственного задания, код проекта 3.2797.2017/4.6.

## Литература

1. Shalygin V.A., Moldavskaya M.D., Danilov S.N., Farbshtein I.I., and Golub L.E., Phys. Rev. B 93, 045207 (2016).
2. Hiroyuki Kurosawa, Kei Sawada, and Seigo Ohno, Phys. Rev. Lett. 117, 083901 (2016).
3. Anatoly A. Grinberg and Serge Luryi, Phys. Rev. B 38, 87 (1988).
4. A. Yakim, N. Noginova, and Y. Barnakov, "Photon Drag Effect in Nanostructured Plasmonic Films," in CLEO:2011 - Laser Applications to Photonic Applications, OSA Technical Digest (CD) (Optical Society of America, 2011), paper QThC4.
5. Gennady M. Mikheev, Aleksandr S. Saushin, Viatcheslav V. Vanyukov, Konstantin G. Mikheev and Yuri P. Svirko, . Nanoscale Research Letters, 12, 39 (2017).
6. Hyun C. Lee, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 79, 44 (2016).
7. Завьялов Д.В., Крючков С.В., Сивашова Е.С., Письма в журнал технической физики, 32, 379 (2006).

## SIMULATION OF THE PHOTODRAG EFFECT IN A TWO-DIMENSIONAL SUPERLATTICE BY THE MONTE-CARLOU'S METHOD

D.V. Zavyalov<sup>1</sup>, S.V. Kryuchkov<sup>2</sup>, E.S. Sivashova<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Volgograd State Technical University

<sup>2</sup>Volgograd State Socio-Pedagogical University

<sup>3</sup>Gymnasium № 11, Volgograd

The features of the photoelectric effect in a semiconductor two-dimensional superlattice in the presence of a constant electric field are studied using computer simulation

Keywords: superlattice, simulation, electric field, dragging effect

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПЕРЕХОДА ВОДОРОДА В МЕТАЛЛИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ

А.С. Зюбин

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка  
[zyubin@icp.ac.ru](mailto:zyubin@icp.ac.ru)

В рамках метода функционала плотности с учетом градиентной коррекции и периодических граничных условий выполнено моделирование изменения структуры водорода при постепенном увеличении плотности в диапазоне 800 – 6000 кг/м<sup>3</sup>. Найдено, что при этом молекулы H<sub>2</sub> сначала объединяются в шестичленные циклы (графитоподобная конфигурация), затем при дальнейшем сжатии формируют структуры с координационными числами атомов, равными 4 и 12. При этом давление и относительная энергия системы монотонно возрастают

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, периодические граничные условия, функционал плотности, металлический водород

Еще в тридцатые годы прошлого века [1] с помощью модельных квантово-механических расчетов было показано, что при высоком давлении (~ 250 килобар) водород может переходить в металлическое состояние, в чем-то напоминающее щелочные металлы. Большого интереса эта работа тогда не вызвала, хотя предполагалось, что металлический водород может формироваться в недрах планет-гигантов Юпитера и Сатурна [2]. Интерес к этой теме резко возрос в 1968 году после публикации Ашкрофта [3], где с помощью модельных расчетов было показано, что металлический водород должен быть сверхпроводящим при высоких температурах (200 - 400 К) и может оказаться метастабильным, т.е. не переходить в газовую фазу при снятии давления. Ряд последовавших за этим теоретических работ (например, [4-9]) подтвердили возможность возникновения сверхпроводящего состояния, но в наиболее поздних работах [8, 9], в которых для определения фононного спектра использовались современные квантово-химические подходы, величина критической температуры была оценена в 217 К для структуры, соответствующей белому олову с расстояниями Н-Н ~ 0.99 Å и координационным числом (КЧ) = 4 (рис. 1). При этом было отмечено, что при уменьшении давления от 5000 до 4500 кбар в колебательном спектре появляются мнимые частоты, что говорит о том, что структура должна измениться. Однако вследствие необходимости численного определения силовых констант для моделирования фононного спектра была использована маленькая размножаемая ячейка, состоящая из четырех атомов, что делает данную модель недостаточно гибкой для перехода к другой конфигурации атомов.

С начала 70-х годов начали проводиться и экспериментальные работы по получению металлического водорода, как с помощью статического давления, так и методом ударного сжатия, но без особого успеха. Наконец, в 2017 году Диас и Сильвера [10] опубликовали статью, в которой сообщалось о достижении давления в 5000 килобар с помощью алмазных наковален, покрытых окси-

дом алюминия (без такого покрытия водород реагировал с алмазом) и получении металлического водорода. Однако капсула с образцом быстро разрушилась. Так или иначе, эта работа дает серьезные основания полагать, что металлический водород либо уже получен, либо будет получен в скором времени. Поэтому представляет интерес моделирование изменения структуры водорода при постепенном увеличении плотности, может ли он сформировать решетки, аналогичные решеткам щелочных (с координационным числом КЧ = 8) или благородных металлов (с КЧ = 12) и как будут вести себя при этом давление и энергия системы, т.е. имеются ли хотя бы намеки на возможность формирования метастабильного состояния. Выяснению этих вопросов с помощью современных квантово-химических подходов и посвящена данная работа.

### Методика расчетов

В данной работе для моделирования энергии и строения изучаемой системы применен функционал плотности PBE [11] с периодическими граничными условиями с использованием программного комплекса VASP [11, 12] (Vienna ab-initio simulation program). В качестве базиса применены проектированные плоские волны PAW [13] с соответствующим псевдопотенциалом, и функционал PBE [14]. Предел по энергии ( $E_c$ ), определяющий полноту базисного набора, был увеличен до 800 эВ, а количество точек в к-пространстве – до 8 8 8 и 6 6 6 для размножаемых ячеек из 16 и 36 атомов, близких по форме к кубическим, и до 6,12,6 для "сплюснутых" ячеек. Дальнейшее увеличение этих параметров приводит к незначительным изменениям полных энергий и межатомных расстояний (не более 0.01 эВ на атом и 0.01 Å для параметров ячейки).

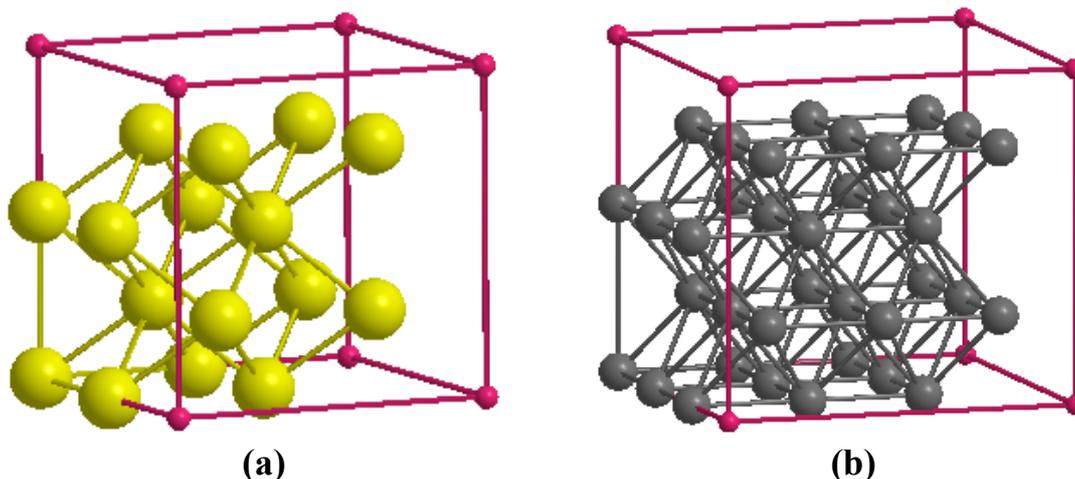
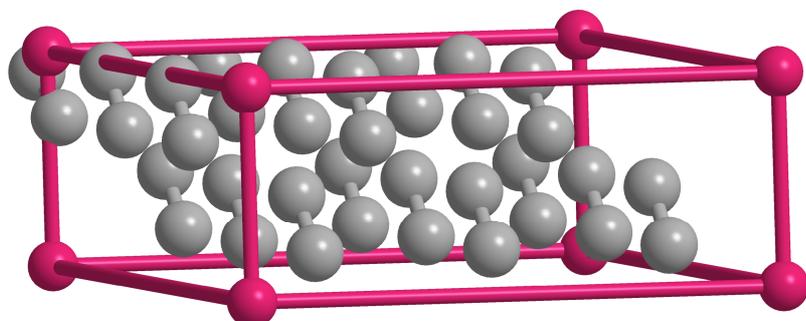


Рис. 1. Размножаемые ячейки, использованные для моделирования

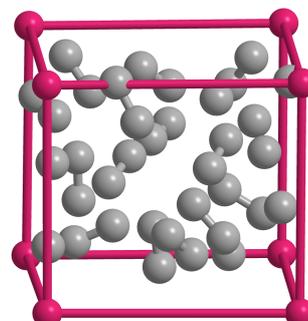
Для обеспечения возможных структурных изменений были использованы размножаемые ячейки из 16 и 36 атомов (рис. 1) с исходными структурами, соответствующими решеткам с КЧ = 8 (a) и 12 (b). В процессе оптимизации структуры варьировались не только координаты атомов, но и форма ячейки, а ее объем последовательно уменьшался, что вело к соответствующему увеличению плотности.

## Обсуждение результатов

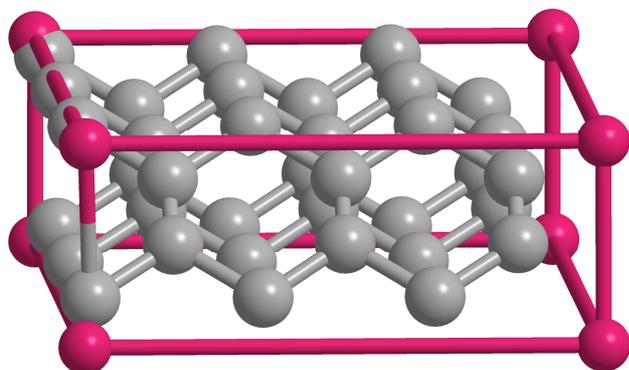
В качестве основного объекта моделирования была использована более крупная ячейка **(b)**. При плотности  $d \sim 1000 \text{ кг/м}^3$  и ниже сжатый водород остается в виде двухатомных молекул (рис. 2, **a, н**). При возрастании плотности до  $1200 \text{ кг/м}^3$  и давления до 3300 килобар начинают формироваться плоские шестичленные циклы, и структура становится графитоподобной (рис. 2, **b**), но с разными длинами связей Н-Н:  $2 \times 0.77$  и  $4 \times 0.98 \text{ \AA}$ .



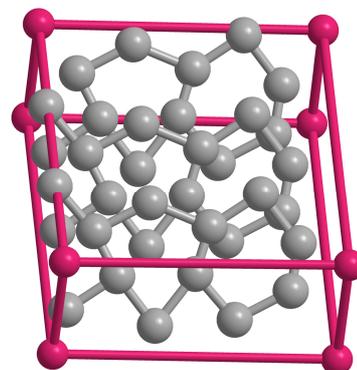
**(a)**,  $d=837 \text{ кг/м}^3$ ,  $P=1334 \text{ кбар}$ ;



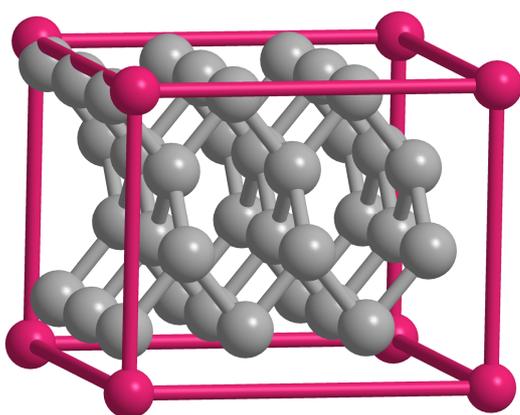
**(н)**,  $d=837 \text{ кг/м}^3$ ,  $P=1413 \text{ кбар}$ ;



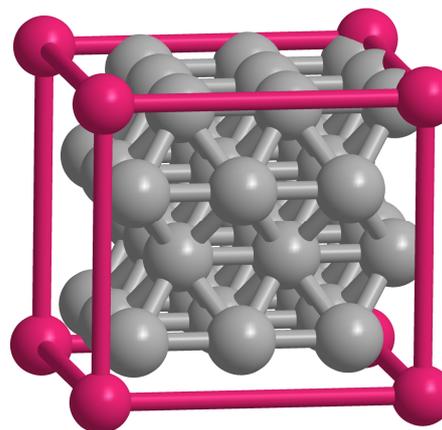
**(b)**,  $d=1205 \text{ кг/м}^3$ ,  $P=3354 \text{ кбар}$ ;



**(c1)**,  $d=1434 \text{ кг/м}^3$ ,  $P=4766 \text{ кбар}$



**(c2)**,  $d=1434 \text{ кг/м}^3$ ,  $P=5002 \text{ кбар}$



**(d)**,  $d=3544 \text{ кг/м}^3$ ,  $P=35886 \text{ кбар}$

Рис. 2. Структуры водорода при разной плотности

При дальнейшем сжатии циклы начинают искажаться (рис. 2, **c1**), и при плотности  $\sim 1400 \text{ кг/м}^3$  возникает другая структура практически с такой же энергией и четырехкратно координированными атомами Н, аналогичная рассмотренной в [8, 9] (рис. 2, **c2**). При последующем сжатии она становится наи-

более энергетически выгодной, и такая картина сохраняется до плотности  $\sim 2400 \text{ кг/м}^3$  и 16000 килобар, где наряду со структурой (с2) появляется конфигурация (d), в которой  $\text{КЧ}(\text{H})=12$  (рис. 2). Однако при этой плотности она в пересчете на одну молекулу  $\text{H}_2$  на 0.1 эВ менее выгодна, чем (с). При увеличении плотности до  $3000 \text{ кг/м}^3$  эта разница снижается вдвое, при  $3500 \text{ кг/м}^3$  она исчезает, и далее более выгодной становится (d). Структура с  $\text{КЧ}(\text{H})=8$  в данной модели не возникла, а при использовании размножаемой ячейки с 16 атомами ее удается получить, но при плотности  $\sim 2000 - 3000 \text{ кг/м}^3$  она оказывается менее выгодной, чем структура с  $\text{КЧ}=4$ , а при более высокой плотности переходит в структуру с  $\text{КЧ}=12$  с той же энергией, что и в модели с 36 атомами.

Для молекулярного водорода характерно наличие узкой валентной зоны (в рамках данного приближения  $\sim 1 \text{ эВ}$  с центром  $\sim 10.4 \text{ эВ}$ ) и широкой запрещенной зоны,  $\sim 9.5 \text{ эВ}$ . При его сжатии валентная зона существенно расширяется в область отрицательных значений, а ширина запрещенной зоны резко снижается. При плотности  $837 \text{ кг/м}^3$  и хаотичном расположении молекул  $\text{H}_2$  запрещенная зона становится очень узкой (рис. 3н), а при переходе к более энергетически выгодной упорядоченной структуре (рис. 2а) исчезает (рис. 3а), хотя в области уровня Ферми плотность состояний существенно снижается.

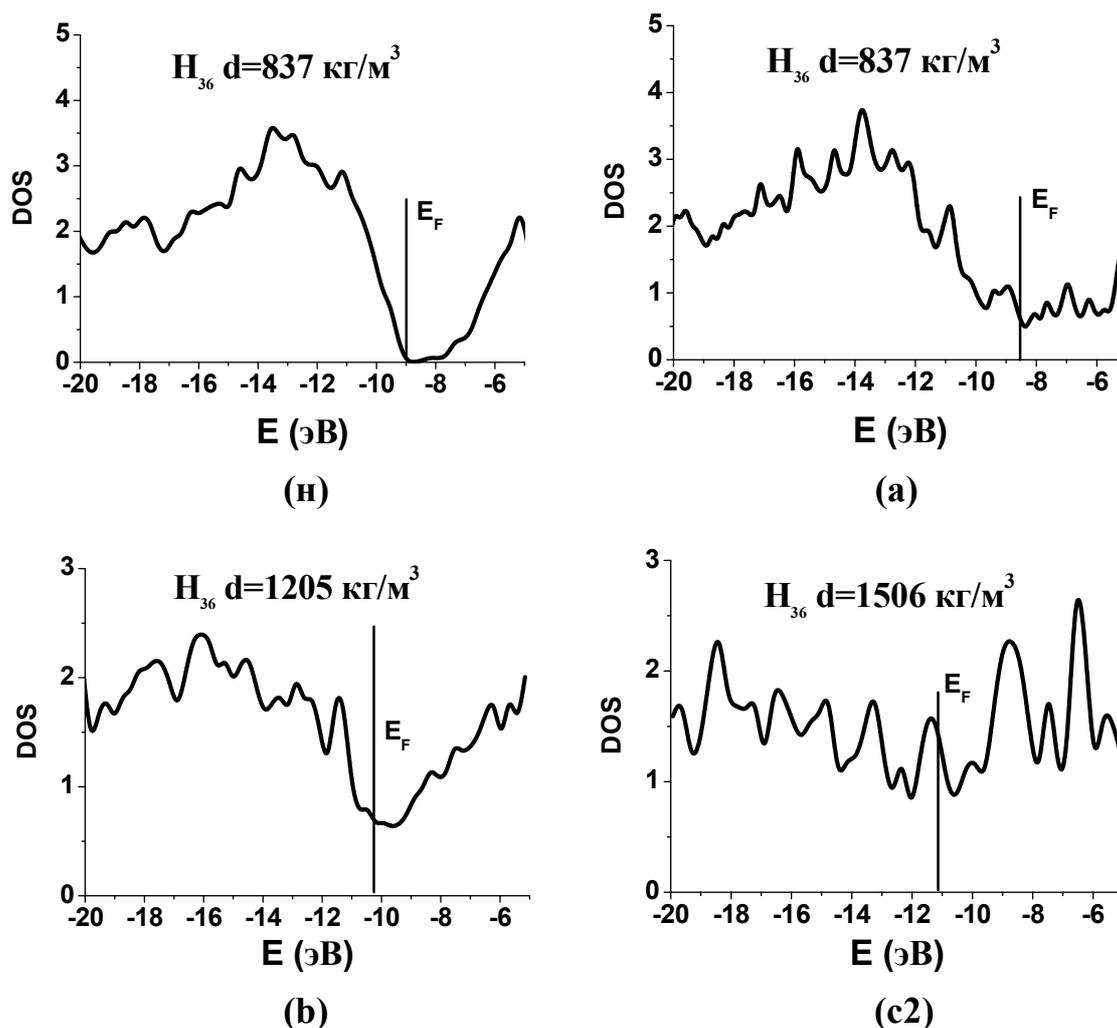


Рис. 3. Плотности состояний водорода при разной плотности вещества

Следует отметить, что энергетическая разница между этими конфигурациями мала ( $\sim 0.03$  эВ на одну молекулу), поэтому температура может оказывать существенное влияние на электронно-оптические свойства сжатого водорода в данной области. При дальнейшем повышении давления и переходе к графитоподобной структуре (рис. 2, **b**) плотность состояний вблизи уровня Ферми возрастает, но минимум еще сохраняется, и лишь при формировании конфигурации с четырехкратной координацией атомов Н (рис. 2, **c2**) он исчезает (рис. 3, **b**, **c2**).

Для более детального рассмотрения поведения запрещенной зоны при сжатии водорода были построены диаграммы изменений энергий высшей занятой и низшей свободной МО (ВЗМО и НСМО) вдоль линий в  $k$ -пространстве, пересекающих размножаемую ячейку в разных направлениях (рис. 4). При плотности  $837 \text{ кг/м}^3$  и хаотичной ориентации молекул водорода энергетическая разница между этими МО остается значительной (рис 4, **1**), т.е. данная система является диэлектриком. При той же плотности, но упорядоченном расположении молекул (конфигурация **a**) амплитуда изменения энергий уровней резко

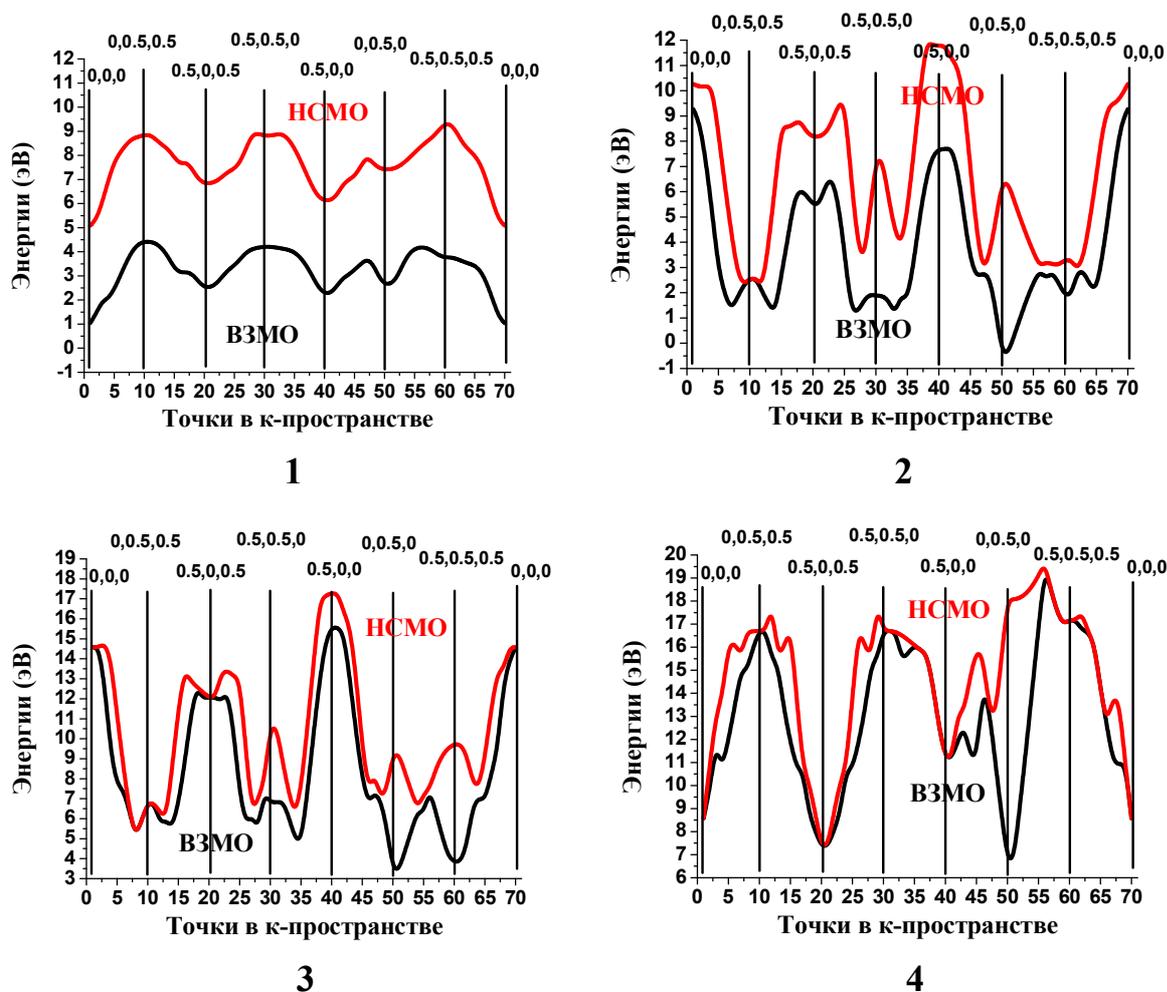


Рис. 4. Структура запрещенной зоны водорода при разной плотности: **1** – хаотичная, **2** – упорядоченная ориентации молекул  $\text{H}_2$ ,  $d=837 \text{ кг/м}^3$ ; **3** – конфигурация **b**, рис. 2,  $d=1205 \text{ кг/м}^3$ ; **4** – конфигурация **c2**, рис. 2,  $d=1506 \text{ кг/м}^3$

возрастает, а разница между ними существенно снижается, и даже появляется участок, где они соприкасаются (рис 4, 2). При дальнейшем сжатии и переходе к графитоподобной структуре энергетическая разница между ВЗМО и НСМО продолжает снижаться, и появляется несколько участков, где эти МО сливаются (рис 4, 3). Наконец, при формировании конфигурации **c2** с четырехкратно координированными атомами Н (плотность 1506 кг/м<sup>3</sup> и давление 5002 кбар) ВЗМО и НСМО сливаются на целом ряде участков (рис 4, 4). Вероятно, лишь с этого момента можно говорить о появлении четко выраженных металлических свойств.

В заключение перейдем к наиболее интересному моменту – возможности существования метастабильного состояния для металлического водорода. На рис. 5 представлен график поведения относительной энергии и давления Н<sub>2</sub> при изменении плотности. Существенно, что во всем рассмотренном диапазоне эти характеристики монотонно растут с увеличением плотности, т.е. формирование метастабильного состояния для металлического водорода вряд ли возможно, и он может существовать лишь при наличии высокого давления, например, в недрах планет-гигантов, таких, как Юпитер и Сатурн.

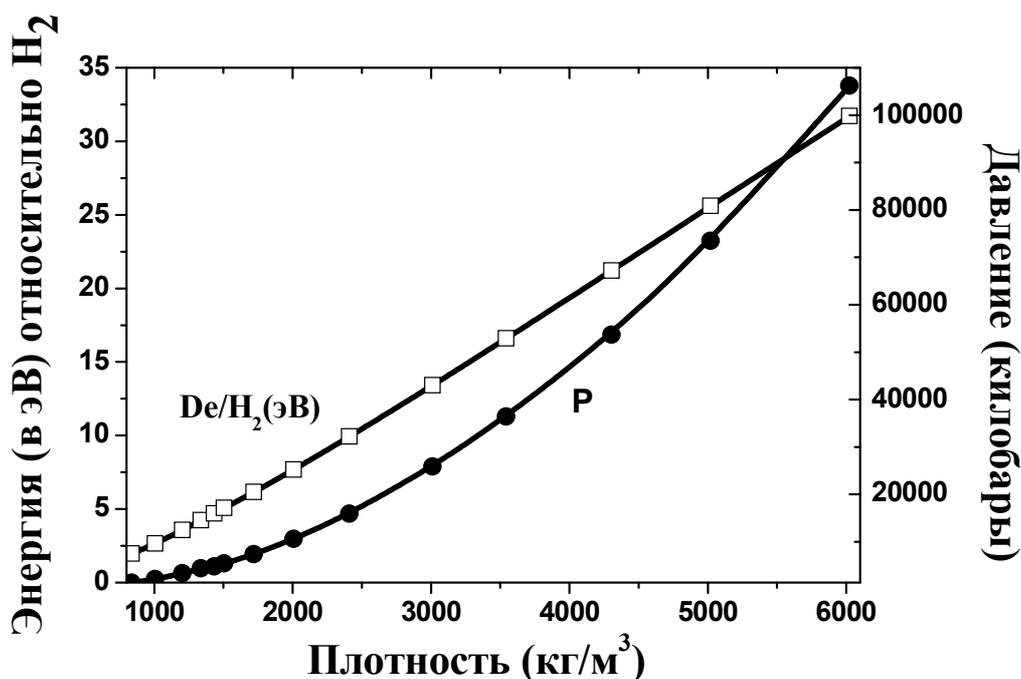


Рис. 5. Изменение энергии и давления Н<sub>2</sub> при возрастании плотности

### Основные выводы

При увеличении давления и плотности водорода первоначально не связанные между собой молекулы Н<sub>2</sub> объединяются в шестичленные циклы, формируя графитоподобную структуру (при плотности ~1200 кг/м<sup>3</sup> и давлении ~3300 кбар), при дальнейшем сжатии (плотность >1400 кг/м<sup>3</sup> и давление >5000 кбар) возникает решетка с четырехкратно координированными атомами водорода, при увеличении плотности и давления до ~3500 кг/м<sup>3</sup> и ~36000 кбар

соответственно формируется решетка с  $KЧ(H) = 12$ . Характерные для щелочных металлов структуры с  $KЧ = 8$  во всем рассмотренном диапазоне плотности уступают в стабильности конфигурациям, упомянутым выше.

Во всем рассмотренном диапазоне увеличения плотности давление и относительная энергия системы монотонно растут, т.е. формирование метастабильного состояния для металлического водорода вряд ли возможно, и он может существовать лишь при наличии высокого давления.

Данная работа выполнена на ВЦ ИПХФ РАН.

#### Литература

1. Wigner E., Huntington H. B. // J. Chem. Phys. 1935. V. 3. P. 764.
2. Абрикосов А.А. // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. С. 2038.
3. Ashcroft N.W. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 21. P. 1748.
4. Гинзбург В.Л. // УФН. 1971. Т. 103. С. 87.
5. Бровман Е.Г., Каган Ю., Холас А. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. С. 2429.
6. Бровман Е.Г., Каган Ю., Холас А. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. С. 1492.
7. Kagan Yu., Pushkarev V.V., Holas A. // JETP. 1977. V. 46 P. 511.
8. Дегтяренко Н.Н., Мазур Е.А. // ЖЭТФ. 2016. Т.104. С. 329.
9. Кудряшов Н.А., Кутуков А.А., Мазур Е.А. // ЖЭТФ. 2016. Т.104. С. 488.
10. Dias R.P., Silvera I.F. // Science. 2017. DOI: 10.1126/science.aal1579.
11. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. V.47. P. 558.
12. Kresse G., Furthmüller J. // Comput. Mat. Science. 1996. V. 6. P. 15.
13. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.
14. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // Phys. Rev. Letters. 1996. V.77. P.3865.

## QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF HYDROGEN TRANSITION INTO THE METALLIC STATE

A.S. Zyubin

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

In the framework of the density functional theory based on gradient correction and periodic boundary conditions was made a simulation of changes in the structure of the hydrogen with the gradual increase of density in the range 800 - 6000 kg/m<sup>3</sup>. It was found that the H<sub>2</sub> molecules at first combined into six-member rings (graphite-like configuration), then form structures with coordination numbers of atoms equal to 4 and 12 after further compression. In the process the pressure and the relative energy of the system monotonically increases

Keywords: quantum chemical modeling, periodical boundary condition, density-functional theory, metallic hydrogen

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КРЕМНИЕВЫХ СТЕРЖНЕЙ С ЛИТИЕМ

А.С. Зюбин, Т.С. Зюбина, Ю.А. Добровольский, Е.Ю. Евщик, В.М. Волохов

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка  
[zyubin@icp.ac.ru](mailto:zyubin@icp.ac.ru)

В рамках метода функционала плотности с учетом градиентной коррекции и периодических граничных условий выполнено квантово-химическое моделирование реорганизации структуры квазикристаллических кремниевых наностержней при литировании и делитировании. Найдено, что при внедрении лития регулярная структура стержней нарушается, и они становятся аморфными. В интервале соотношений Li/Si от 3/1 до 1/2 при нанесении атомов металла на поверхность или удалении части атомов лития из поверхностного слоя стержня и отжиге при умеренной температуре (400 - 600 К) происходит быстрое (~ 10 пикосекунд) восстановление равномерного распределения металла по объему. При более низких концентрациях лития выравнивания не происходит, при полном извлечении металла квазикристаллическая структура стержня не восстанавливается

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, периодические граничные условия, функционал плотности, литий-ионные батареи, анодные материалы, кремниевые стержни

### Введение

Литий-ионные аккумуляторы являются наиболее перспективными на сегодняшний день для использования в электрических транспортных средствах, портативной электронике, переносных электроинструментах и т.д. [1, 2], однако их возможности далеко не исчерпаны. В первую очередь это касается увеличения емкости отрицательного электрода по отношению к ионам лития. В большинстве случаев материалом для отрицательных электродов в них является графит, однако емкость такой системы невелика, поэтому продолжается поиск качественно новых анодных материалов с высокой емкостью по литию. В качестве многообещающего анодного кандидата зарекомендовал себя кремний. По сравнению с углеродом кристаллический Si способен впитать в 10 раз большее количество лития. Однако это преимущество не удастся реализовать вследствие глубоких структурных изменений, приводящих к резким изменениям объема и разрушению анода [3-6]. Одно из возможных решений проблемы – поиск некристаллических форм, способных сохраняться в процессе литирования-делитирования, состоящих из наноструктур, тонких пленок, армированных композитов и т.п. [7-16]. Квазиодномерные материалы на основе наноструктурированного кремния предпочтительны по нескольким причинам. Во-первых, они могут обеспечить значительное объемное расширение кремния и уменьшить путь миграции лития в объеме из-за небольших осевых размеров. Кроме того, в ряде случаев они обеспечивают улучшенный перенос электронов. Повышенные ионная и электронная проводимости необходимы для создания источников с высокой удельной мощностью. В наших предыдущих работах [17-22] были рас-

смотрены поглощающие литий композиты на основе кремния, нанесенного на поверхность допированного азотом карбида кремния, и кремниевые нанокластеры, помещенные в сетку из аморфного углерода. Однако в [17] была продемонстрирована еще одна достаточно перспективная структура, а именно кремниевые наностержни, которые по стабильности превосходят нанокластеры и по величине удельной энергии приближаются к кристаллу, что могло бы способствовать сохранению их структуры при внедрении и удалении лития. Моделированию процесса литирования и делитирования таких стержней и посвящена данная работа.

### Методика расчетов

В данной работе для моделирования изучаемых систем применен тот же подход, что и в [17 - 22], основанный на применении функционала плотности с периодическими граничными условиями с использованием программного комплекса VASP [23-26] (Vienna ab-initio simulation program). В качестве базиса применены проектированные плоские волны PAW [27] с соответствующим псевдопотенциалом, и функционал PBE [28]. Предел по энергии ( $E_c$ ), определяющий полноту базисного набора, был принят равным 400 эВ. Использование этого подхода для моделирования кристаллического кремния дает параметр ячейки 5.47 Å и энергию разделения на атомы  $De/n$  4.57 эВ, что хорошо согласуется с данными эксперимента: 5.43 Å и 4.64 эВ [29]. Для моделирования одно- и двумерных структур (поверхности, трубки, стержни и т.п.) размеры размножаемых ячеек выбирались так, чтобы расстояния между ближайшими поверхностями периодически повторяющихся систем составляли не менее 10 Å.

Для моделирования в рамках неэмпирической молекулярной динамики использовано приближение MD-VASP [23], где используются те же алгоритмы, что и при обычной оптимизации структур, но с более грубыми критериями точности расчета ( $E_c=200$  эВ,  $prec=low$ ). На начальном этапе производился разогрев системы до заданной температуры (как правило, 400 – 600 К), затем установление равновесия с термостатом Ноэе при заданной температуре (при его достижении интервал колебаний потенциальной энергии системы перестает меняться, что происходит обычно в пределах до 10000 шагов с временным интервалом 1 фемтосекунда), затем охлаждение до 10 К и оптимизация структуры при обычной точности ( $E_c=400$  эВ,  $prec=normal$ ).

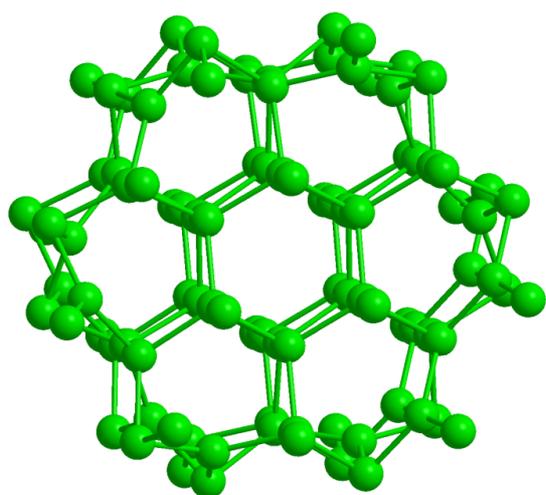
Оценка энергетической стабильности комбинированной системы определялась по величине  $De/n(Li)$ , которая вычислялась как разность между ее энергией и энергией носителя (кремниевого наностержня) и изолированных атомов лития, деленная на количество атомов адсорбированного лития:

$$De/n(Li) = -[E((Si_mLi_n) - E(Si_m) - nE(Li)]/n.$$

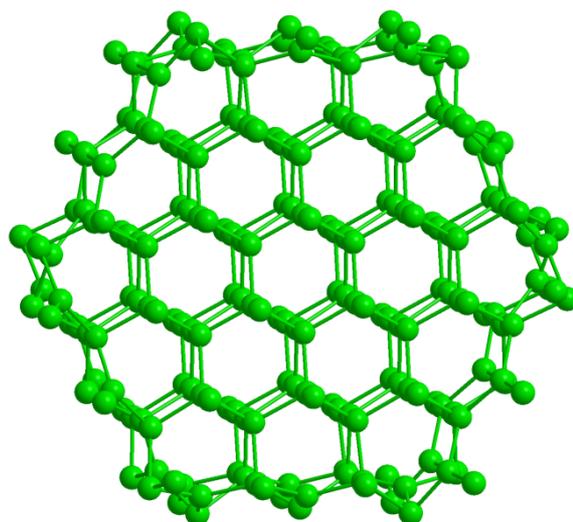
Для металлического лития соответствующая величина в рамках использованного приближения составляет 1.61 эВ, экспериментальное значение – 1.64 эВ [30].

## Обсуждение результатов

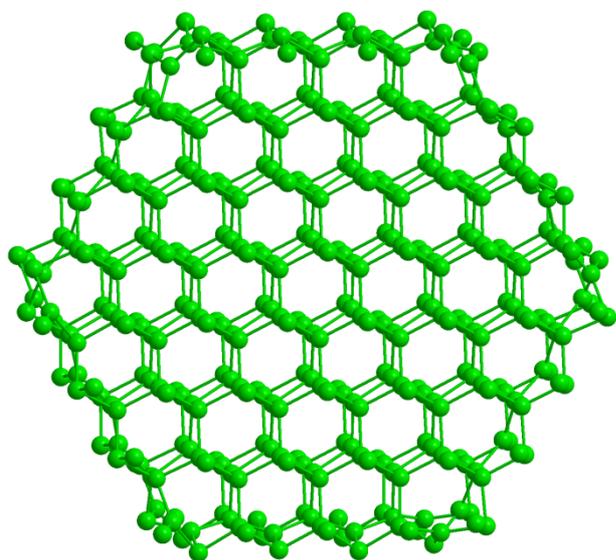
Кремниевые стержни, внутренняя часть которых близка по строению к кристаллу, а грани соответствуют его редуцированной поверхности, были рассмотрены в [17]. Уже при наличии вокруг оси всего двух слоев кремния (L2, диаметр 12.5 Å) величина  $De/n(\text{Si})$  для стержня оказывается достаточно высокой (4.14 эВ), а при увеличении количества слоев до L=3 и L=4 с диаметром ~ 19 и 26 Å она возрастает до 4.28-4.35 эВ (и при дальнейшем увеличении диаметра стремится к соответствующему значению для кристалла), что оказывается выше, чем у изолированных полиэдрических кластеров Si близкого диаметра. Так, для кластера  $\text{Si}_{350}$  с диаметром ~ 23 Å эта величина составляет 4.04 эВ.



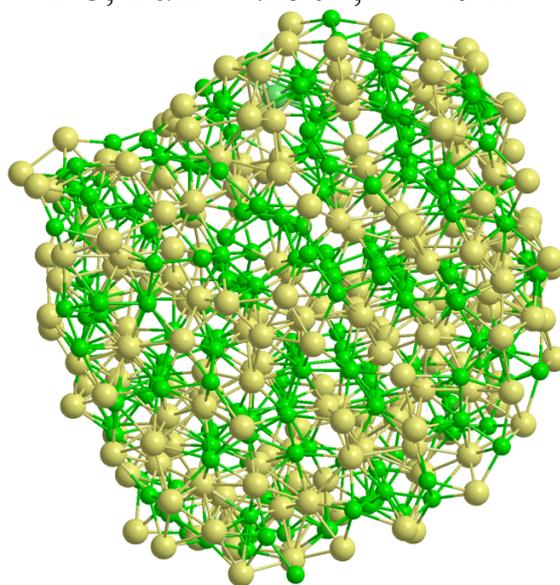
L=2,  $De/n = 4.14$  эВ,  $D = 12.5$  Å



L=3,  $De/n = 4.28$  эВ,  $D = 19$  Å



L=4,  $De/n = 4.35$  эВ,  $D = 26$  Å



L=3,  $\text{Li}_{216}/\text{Si}_{216}$ ,  $D \sim 28$  Å

Рис. 1. Сечения кремниевых стержней разного диаметра и кластер  $\text{Si}_{350}$

Для моделирования взаимодействия с литием в данной работе был использован стержень с L=3. Как было найдено в [18, 19] при моделировании литирования-делитирования кремния на подложке карбида кремния, при соотно-

шении  $\text{Li/Si} \sim 1$  атомы лития достаточно легко мигрируют по объему кремния уже при температуре  $\sim 400$  К, но при снижении концентрации лития его перемещение затрудняется, а при соотношении  $\text{Li/Si} \sim 0.25$  осуществление миграции требует повышения температуры до  $\sim 900$  К. Поэтому для моделирования в качестве начальной системы была взята структура с соотношением  $\text{Li/Si}=1$ , в которой атомы металла хаотично размещены между атомами кремния.

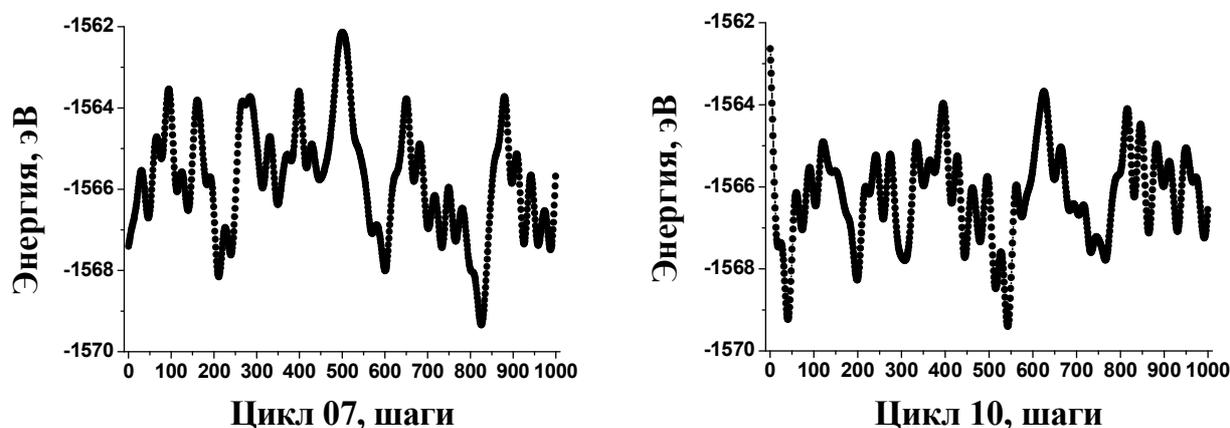


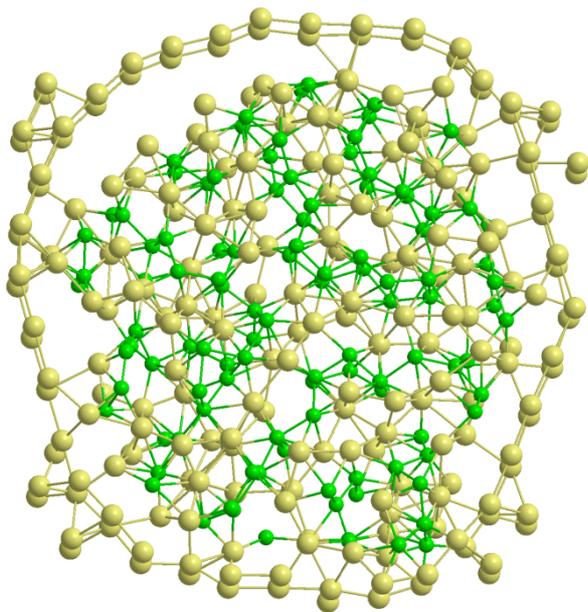
Рис. 2. Поведение потенциальной энергии системы  $\text{Li/Si}$  (L3) в рамках VASP-MD (температура 600 К)

Для оптимизации этой структуры было выполнено моделирование изменения ее строения с помощью неэмпирической молекулярной динамики VASP-MD циклами по 1000 шагов с последующим продолжением. В процессе первых шести циклов (6000 шагов) потенциальная энергия системы постепенно понижается, а затем начинает осциллировать в практически неизменных пределах (рис. 2, циклы 7 и 10). После охлаждения системы до 0 К и последующей оптимизации получается неупорядоченная структура с приблизительно равномерным распределением атомов металла по объему, при этом диаметр сечения возрастает примерно в полтора раза (рис. 1).

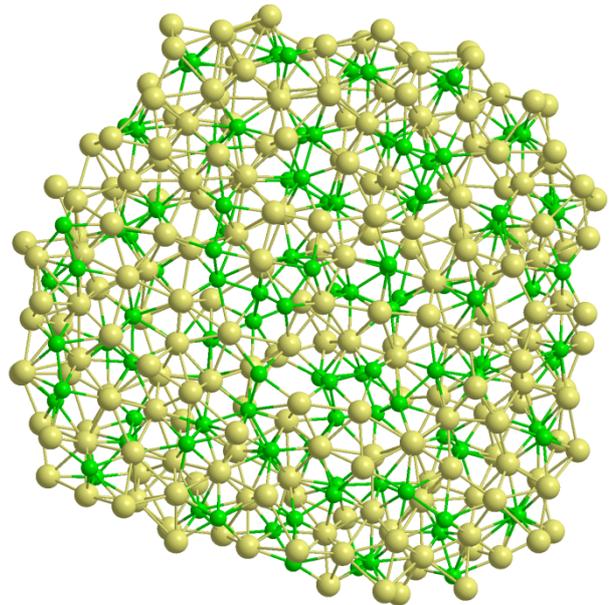
Если окружить эту систему таким количеством атомов лития, которое увеличивает соотношение  $\text{Li/Si}$  до двух (имитация литирования) и провести соответствующую процедуру "отжига", то расположенные первоначально на периферии системы атомы металла перераспределяются по объему, осциллирующая энергия системы первоначально понижается, а затем стабилизируется (рис. 3, 4). Аналогичная картина получается и при соотношении  $\text{Li/Si}=3$ , но при этом поперечный размер стержня увеличивается примерно вдвое, а величина  $\text{De/n(Li)}$  снижается (см. таблицу).

Удельная энергия удаления атомов лития ( $\text{De/n(Li)}$ , эВ) и размеры поперечного сечения стержня L3 ( $D$ , Å) при различных соотношениях  $\text{Li/Si}$

| Li/Si                  | 3/8       | 2/4       | 3/4       | 4/4       | 5/4       | 6/4       | 8/4       | 10/4      | 12/4      |
|------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| $\text{De/n(Li)}$ , eV | 1.97      | 1.98      | 1.99      | 2.01      | 1.99      | 1.98      | 1.93      | 1.92      | 1.88      |
| $D$ , Å                | $\sim 23$ | $\sim 24$ | $\sim 26$ | $\sim 28$ | $\sim 29$ | $\sim 30$ | $\sim 33$ | $\sim 36$ | $\sim 38$ |



Начальное



Конечное

Рис. 3. Начальное и конечное сечения кремниевого стержня  $L=3$  при насыщении литием в соотношении 2/1

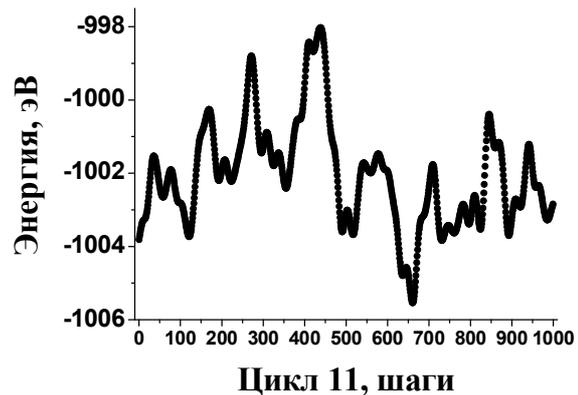
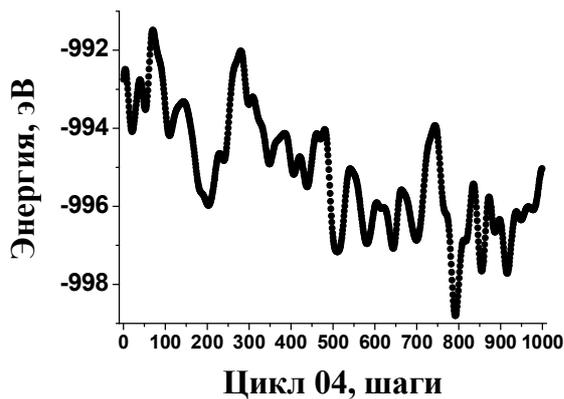
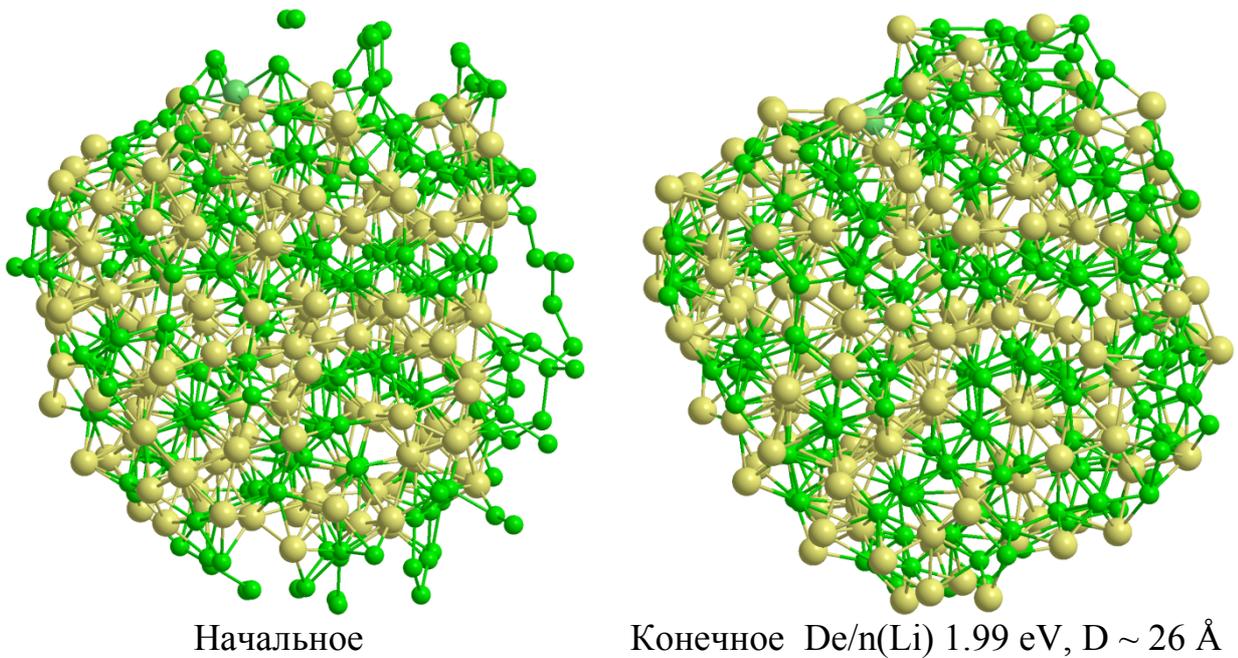


Рис. 4. Поведение потенциальной энергии системы  $2\text{Li}/\text{Si}$  ( $L3$ ) в рамках VASP-MD (температура 600 К)

При последовательном извлечении части атомов лития из наружного слоя стержня (делитировании) и проведении "отжига" происходит выравнивание распределения атомов металла по объему, снижение поперечного размера стержня и возрастание значения  $D_e/n(\text{Li})$  (см. таблицу). Эта тенденция сохраняется до снижения соотношения  $\text{Li}/\text{Si} = 1/2$ .

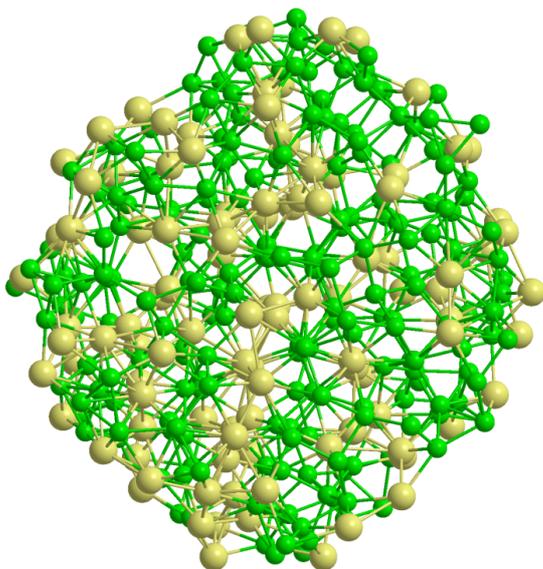
При более низких концентрациях лития его извлечение из стержня постепенно осложняется. Так, при удалении 1/4 атомов лития из внешнего слоя системы  $L3$  при соотношении  $\text{Li}/\text{Si} = 1/1$  (переход к  $\text{Li}/\text{Si} = 3/4$ , рис. 5) его распределение по объему выравнивается даже при 400 К примерно за 5000 шагов ( $\sim 5$  ps). Аналогичное перераспределение атомов лития с выходом их в приповерхностный слой реализуется и при соотношениях  $\text{Li}/\text{Si} = 4/8$  и  $3/8$ , но при более низких концентрациях атомы металла остаются преимущественно во внутренней области стержня (рис. 6). При полном удалении лития и отжиге при 600 К квази-



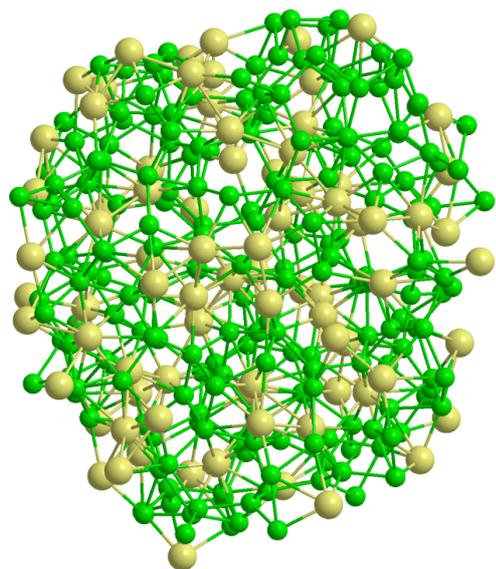
Начальное

Конечное  $De/n(\text{Li})$  1.99 eV,  $D \sim 26 \text{ \AA}$

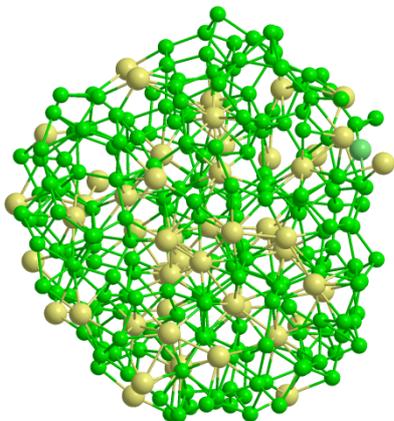
Рис. 5. Начальное и конечное сечения кремниевого стержня  $L=3$  при насыщении литием в соотношении  $3/4$



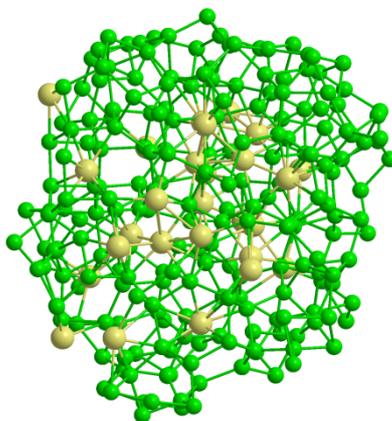
$\text{Li/Si} = 4/8$



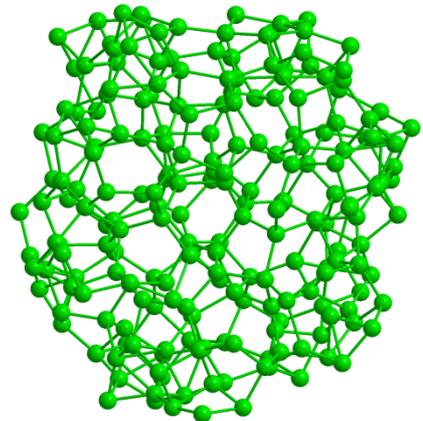
$\text{Li/Si} = 3/8$



$\text{Li/Si} = 2/8$



$\text{Li/Si} = 1/8$



$\text{Li/Si} = 0$

Рис. 6. Сечения кремниевого стержня  $L=3$  при различных концентрациях лития

кристаллическая структура стержня не восстанавливается, его строение остается аморфным. Это приводит к тому, что величина  $D_e/n(\text{Li})$  при уменьшении концентрации лития в области  $\text{Li/Si} < 1/1$  тоже падает, но это вызвано неоптимальной структурой системы, а не уменьшением энергии взаимодействия Li-Si.

### Основные выводы

При внедрении лития в квазикристаллические кремниевые стержни их регулярная структура нарушается и не восстанавливается даже при полном извлечении металла. Поэтому в процессе циклирования высока вероятность искажения формы стержней и их агломерация. Для предотвращения этого эффекта необходимо либо армировать стержни жестким не взаимодействующим с литием материалом (например, карбидом кремния), либо окружать их изолирующими слоями, препятствующими агломерации (например, аморфным углеродом).

При насыщении литием поперечные размеры стержней существенно увеличиваются, как минимум вдвое.

При соотношении  $\text{Li/Si} > 1/2$  литий легко перераспределяется по объему, т.е. внедряется в стержень или извлекается из него. При более низкой концентрации распределение металла в кремнии становится существенно неоднородным, а его переход между внешним слоем и внутренней частью стержня затруднен. Отсюда следует, что при использовании таких систем в качестве анодных материалов соотношение  $\text{Li/Si}$  не следует снижать до величины менее  $1/2$ .

Данная работа выполнена на ВЦ ИПХФ РАН при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-13-00166).

### Литература

1. Armand M., Tarascon J. M. // *Nature*. 2008. V. 451. P. 652.
2. Kang B., Ceder G. // *Nature*. 2009. V. 458. P. 190.
3. Huggins R. A. // *J. Power Sources*. 1999. V. 81. P. 13.
4. Poizot P., Laruelle S., Grugeon S. et al. // *J. Power Sources*. 2001. V. 97. P.235.
- 5 Lee H.Y., Lee S.M. // *J. Power Sources*. 2002. V. 112. P. 649.
6. Zhang H., Braun P.V. // *Nano Lett*. 2012. V. 12. P. 2778.
7. Lin Y. M., Klavetter K. C., Abel P. R. et al. // *Chem. Commun*. 2012. V. 48. P.7268.
8. Zhou X. S., Guo Y. G. // *J. Mater. Chem. A*. 2013. V. 1. P. 9019.
9. Soni S. K., Sheldon B. W., Xiao X. C. et al. // *J. Electrochem. Soc*. 2012. V. 159. A38.
10. Xiao X., Liu P., Verbrugge M. W. et al. // *J. Power Sources*. 2011. V. 196. P. 1409.
11. Yu C. J., Li X., Ma T. et al. // *Adv. Energy. Mater*. 2012. V. 2. P. 68.
12. Wu H., Chan G., Choi J. W. et al. // *Nat. Nanotechnol*. 2012. V. 7. P. 309.
13. Wu H., Zheng G. Y., Liu N. A. et al. // *Nano Lett*. 2012. V. 12. P. 904.
14. Yao Y., McDowell M. T., Ryu I. et al. // *Nano Lett*. 2011. V. 11. P. 2949.
15. Zhao K. J., Pharr M., Hartle L. et al. // *J. Power Sources*. 2012. V. 218. P. 6.
16. Jeong-Hyun Cho, Picraux S. T. // *Nano Lett*. 2014. V. 14. P. 3088.
17. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Добровольский Ю.А., Волохов В.М. // *Ж. Неорг. Химии*. 2016. Т. 61. С. 51.

18. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Добровольский Ю.А., Волохов В.М. // Ж. Неорг. Химии. 2016. Т. 61. С. 1476.
19. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Добровольский Ю.А., Волохов В.М. // Ж. Неорг. Химии. 2017. Т. 62. С. 1189.
20. Zyubina T.S., Zyubin A.S., Dobrovolsky Yu.A., Volokhov V.M. // Russian Chemical Bulletin. 2016. V. 65. P. 621.
21. Zyubina T.S., Zyubin A.S., Dobrovolskii Yu.A., Volokhov V.M. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2016. V. 61. P. 1677.
22. Zyubina T.S., Zyubin A.S., Dobrovolskii Yu.A., Volokhov V.M. // Russian Journal of Electrochemistry. 2016. V. 52. P. 988.
23. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. V.47. P. 558.
24. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1994. V.49. P. 14251.
25. Kresse G., Furthmüller J. // Comput. Mat. Science. 1996. V. 6. P. 15.
26. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.
27. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.
28. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // Phys. Rev. Letters. 1996. V. 77. P. 3865.
29. Термические константы веществ. Выпуск IV, часть 1. Под ред. В.П. Глушко. ВИНТИ-ИВТ АН СССР. Москва, 1970. С. 310.
30. Иориш В.С., Юнгман В.С. / База данных "Термические Константы Веществ" (рабочая версия – 2). <http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcom.html>

## QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF INTERACTION OF SILICON RODS WITH LITHIUM

A.S. Zyubin, T.S. Zyubina, Yu.A. Dobrovolsky, E.Yu. Evshchik, V.M. Volokhov

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

In the framework of the density functional theory based on gradient correction and periodic boundary conditions was made a quantum-chemical modeling of structure reorganization for quasi-crystalline silicon nanorods in processes of lithium insertion and extraction. It is found that the regular structure of the rods is distorted after Li insertion and they become amorphous. In the interval of the ratios Li/Si from 3/1 to 1/2 when applying the metal atoms to the surface or removal of the lithium atoms from the surface layer of the rod and annealing at moderate temperatures (400 - 600 K) there is a rapid (~ 10 picoseconds) recovery uniform distribution of the metal in volume. At lower concentrations of lithium alignment does not occur, quasicrystalline structure of the rod cannot be restored even after complete extraction of the metal

Keywords: quantum-chemical simulation, periodic boundary conditions, density-functional theory, rechargeable Li-ion battery, anode materials, silicon rods

ФОРМИРОВАНИЕ ОЗОНА ПРИ ГИДРОЛИЗЕ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ  
КЛАСТЕРОВ  $(\text{MnO}_2)_{3,6}$  И  $(\text{MnO}_2(\text{H}_2\text{SO}_4)_2)_{3,6}$ . КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ

Т.С. Зюбина, Т.С. Джабиев

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка  
[zyubin@icp.ac.ru](mailto:zyubin@icp.ac.ru)

В настоящей работе были рассчитаны структуры кластеров  $(\text{Mn-A}_2)_{3,6}$ , где  $\text{A}=\text{O}$  и  $\text{SO}_4$ , и исследована возможность выделения озона при взаимодействии с водой. Для расчетов были использованы функционал плотности РВЕ с базисом проектированных плоских волн PAW и гибридный функционал B3LYP с базисами 6-31G\*. Показано, что в отличие от кластеров  $(\text{MnA})_{3,6}$ , в случае  $(\text{MnA}_2)_{3,6}$  процесс образования озона на поверхности кластера энергетически выгоден на всех уровнях расчета

Ключевые слова: марганец,  $\text{O}_3$ ,  $(\text{MnO}_2)_n$ ,  $(\text{Mn}(\text{SO}_4)_2)_n$ 

Восстановление озонового слоя является актуальной экологической задачей. В этом плане использование для этого шестиядерных марганцевых кластеров может оказаться полезным, поскольку кластеры  $\text{Mn}_n$  окисляют воду до  $\text{O}_2$  при  $n = 2, 4, 8, 16$  и до  $\text{O}_3$  при  $n = 6, 12, 18$ . В работе [1] предположено, что в условиях водного дефицита в хлоропластах морских водорослей появляются шестиядерные марганцевые кофакторы  $6\text{Mn-co}$ , которые окисляют воду шестиэлектронно до  $\text{O}_3$ . Эксперименты [2] по окислению воды кластерами  $\text{Mn(IV)}$  в сернокислотных растворах показали, что процесс осуществляется в координационных сферах кластеров  $\text{Mn}_n$  ( $n = 2 - 18$ ), образующихся в различных условиях опытов (разные концентрации  $\text{Mn}$  и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  или разных температурах растворов). Эти кластеры получаются из биядерного комплекса  $(\text{MnO})_2$  в сернокислотных растворах. Стабильные кластеры марганца образуются также при олигомеризации трёхядерных шестиугольных комплексов  $(\text{MnO})_3$  в условиях высокого вакуума, масс-спектрометрически идентифицированы кластеры вплоть до  $(\text{MnO})_{12}$ , причем в этих же условиях образуются и другие кластеры  $(\text{MnO}_x)_n$ , где  $n = 1 - 13$  [3]. В [4-8] на основании анализа пиков в масс-спектрах было найдено, что кластеры  $(\text{MnO})_n$  для  $n=3, 6, 9, 12$  могут быть необычайно стабильными, и было высказано мнение, что  $(\text{MnO})_3$  кластер, имеющий структуру шестиугольника, является строительным блоком более крупных кластеров, которые растут шестиугольными стопками, в отличие от объемной фазы  $\text{MnO}$ , имеющей кубическую структуру. В настоящей работе мы рассмотрим взаимодействие с водой гексагональных кластеров  $(\text{MnA})_n$  и  $(\text{MnA}_2\text{B}_2)_n$ , где  $\text{A}, \text{B}=\text{O}, \text{SO}_4$  и  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В данной работе использован испробованный нами ранее [9-11] подход, основанный на применении функционала плотности с периодическими граничными условиями в рамках комплекса VASP [12-15] (Vienna ab-initio simulation program). В качестве базиса применены проектированные плоские волны PAW [16] с соответствующим псевдопотенциалом, и функционал РВЕ [17]

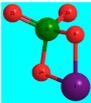
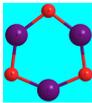
(PBE/PAW). Предел по энергии ( $E_c$ ), определяющий полноту базисного набора, был принят равным 400 эВ. Для оптимизации электронного состояния использовался метод Метфесселя-Пакстона [18] с параметром размытия ( $\sigma$ ) 0.2 и аппроксимацией энергий на величину  $\sigma = 0$ . Такой подход приводит к автоматическому определению количества неспаренных электронов ( $M$ ) наиболее стабильного изомера исследуемой системы. После определения (на уровне PBE/PAW) числа неспаренных электронов в наиболее энергетически выгодной структуре проводился расчет геометрии наиболее стабильных структур, относительной энергии и эффективных зарядов на атомах (по Малликену [22]) с использованием хорошо зарекомендовавшего себя в молекулярных расчетах гибридного функционала плотности B3LYP [19, 20] с базисами 6-31G\* и 6-31G\*\* (в рамках программного комплекса GAUSSIAN [21]).

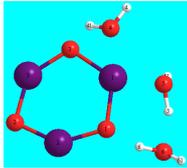
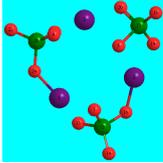
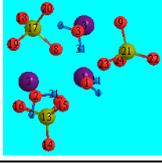
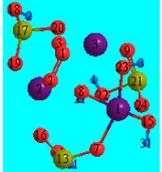
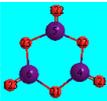
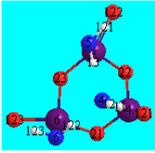
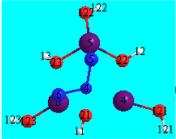
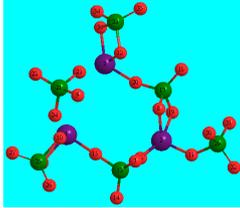
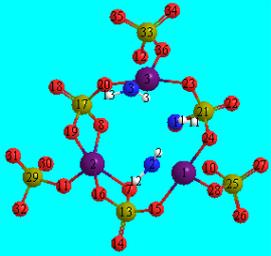
В расчетах кластеров  $(MnO_m)_n$ ,  $n = 1-12$ ,  $m = 1, 2$ , показано, что полученные нами на уровне PBE/PAW результаты хорошо (в пределах 0.01-0.02 Å в валентных расстояниях и 1-5° в углах) согласуются с литературными расчетными данными и экспериментальными значениями.

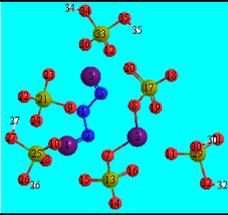
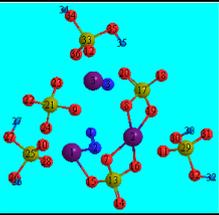
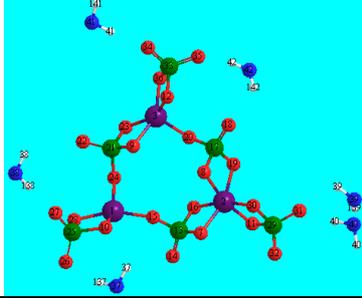
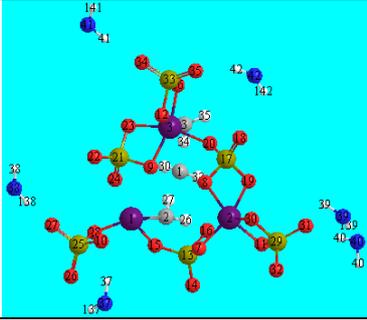
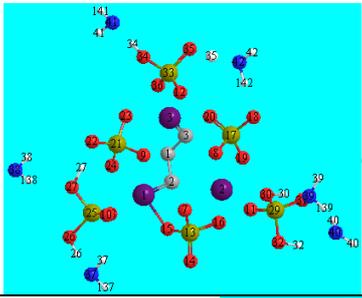
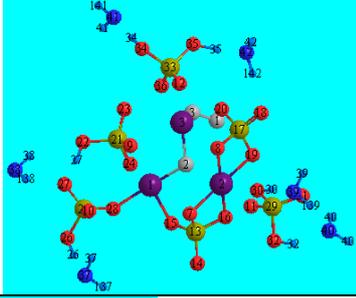
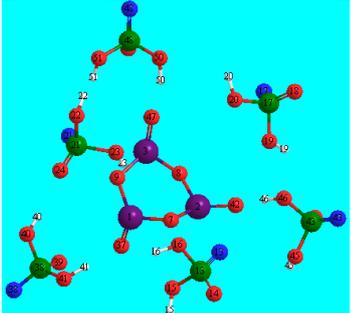
Согласно таблице гексагональные структуры кластера  $(MnO)_6$  с тринадцатью ( $M = 13$ ) и пятнадцатью ( $M = 15$ ) неспаренными электронами расположены на энергетической шкале очень близко друг к другу, однако на 1.03 эВ ниже, чем кубическая структура, поэтому в дальнейшем мы рассматривали гексагональные структуры кластеров.

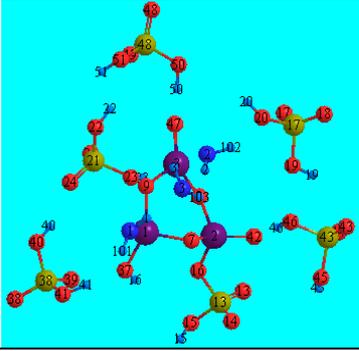
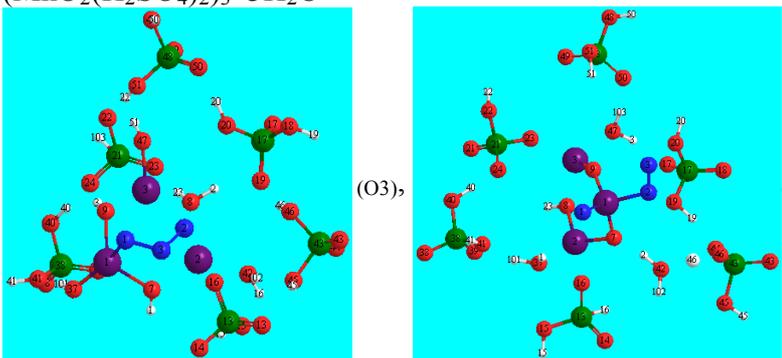
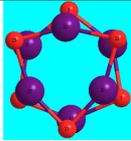
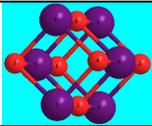
Для кластеров  $(MnO)_3$  и  $(MnSO_4)_3$  наиболее стабильны структуры с  $M = 13$  и  $M = 15$ , которые расположены на энергетической шкале очень близко друг к другу (в пределах 0.4 и 0.1 эВ). Энергия объединения трех молекул MnO с образованием кластера  $(MnO)_3$  в пределах 0.4 эВ близка к аналогичному значению образования кластера  $(MnSO_4)_3$  из трех молекул  $MnSO_4$  (7.02 и 7.41 эВ, соответственно). В свою очередь, образование кластеров  $(MnO)_6$  и  $(MnSO_4)_6$  из, соответственно, двух молекул  $(MnO)_3$  и  $(MnSO_4)_3$  приводит к выделению еще более близких (в пределах 0.1 эВ) энергий (3.38 и 3.48 эВ, соответственно).

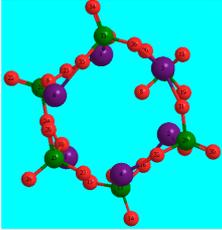
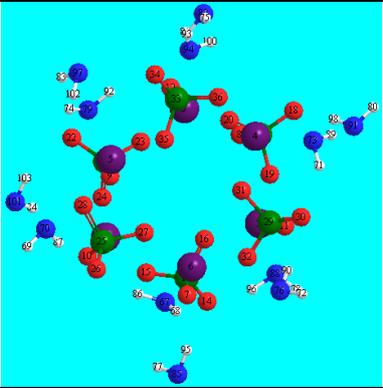
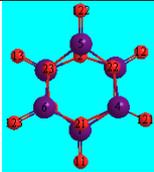
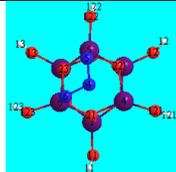
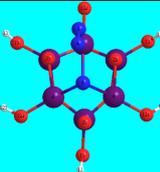
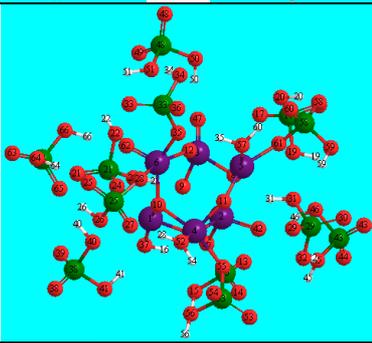
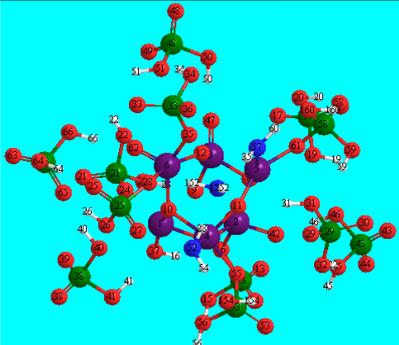
Структуры **1 – 67** рассчитанных кластеров  $(MnA_kB_i)_m \cdot nH_2O$ , ( $A, B = O, SO_4, H_2SO_4$ ;  $i, k = 0, 1, 2$ ;  $n = 3-15$ ,  $m = 3, 6, 12$ ), количество неспаренных электронов в них ( $M$ ) и относительные энергии (в эВ) различных изомеров ( $\Delta_M$  – для сравнения структур одного типа с разными  $M$  и  $\Delta_{st}$  – для сравнения структур разного типа с одинаковыми  $M$ ). Использованные уровни расчета ( $L$ ) см. в тексте

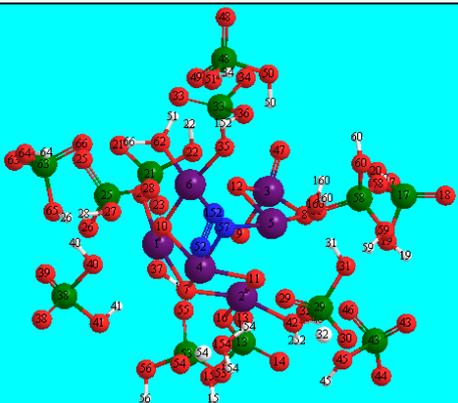
| N          | Кластер $(MnA)_n$  | M  | $\Delta_M$                   | $\Delta_{st}$ | L                    |
|------------|--|----|------------------------------|---------------|----------------------|
| <b>m=1</b> |  |    |                              |               |                      |
| <b>1</b>   | $(MnO)$       | 5  | 0                            |               | I                    |
| <b>2</b>   | $(Mn(SO_4))$  | 5  | 0                            |               | I                    |
| <b>m=3</b> |  |    |                              |               |                      |
| <b>3</b>   | $(MnO)_3$     | 13 | 0.33<br>0.31<br>0.31<br>0.32 |               | I<br>II<br>III<br>IV |

|    |  |  |    |                      |   |                      |
|----|--|--|----|----------------------|---|----------------------|
| 4  |  |  | 15 | 0<br>0<br>0<br>0     |   | I<br>II<br>III<br>IV |
| 5  | (MnO) <sub>3</sub> *3H <sub>2</sub> O                  |   | 13 | 0.31<br>0.36<br>0.42 |   | II<br>III<br>IV      |
| 6  |  |  | 15 | 0<br>0<br>0          |   | II<br>III<br>IV      |
| 7  | (Mn(SO <sub>4</sub> )) <sub>3</sub>                    |   | 13 | 0                    |   | I                    |
| 8  |  |  | 15 | 0.07                 |   | I                    |
| 9  | (Mn(SO <sub>4</sub> )) <sub>3</sub> *3H <sub>2</sub> O |   | 15 |                      | 0<br>0<br>0   | II<br>III<br>IV      |
| 10 | (Mn(SO <sub>4</sub> )) <sub>3</sub> *3H <sub>2</sub> O |    | 15 |                      | <b>4.06</b> <sub>(O3)</sub><br><b>3.82</b> <sub>(O3)</sub><br><b>3.80</b> <sub>(O3)</sub> | II<br>III<br>IV      |
| 11 | (MnO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> *                     |   | 7  | 0                    |   | I                    |
| 12 | (MnO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> *3H <sub>2</sub> O    |   | 9  | 0                    | 0   | I                    |
| 13 |  |  | 11 | 1.39                 | 0   | I                    |
| 14 |  |  | 13 | 3.21                 | 0   | I                    |
| 15 |  |  | 15 | 5.33                 | 0   | I                    |
| 16 | (MnO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> *3H <sub>2</sub> O    |  (O <sub>3</sub> ),  (O <sub>2</sub> ) | 9  | 0 <sub>(O2)</sub>    | <b>0.71</b> <sub>(O2)</sub>   | I                    |
| 17 |  |  | 11 | 0.10 <sub>(O2)</sub> | -0.58 <sub>(O2)</sub>   | I                    |
| 18 |  |  | 13 | 1.47 <sub>(O3)</sub> | -0.61 <sub>(O3)</sub>   | I                    |
| 19 |  |  | 15 | 2.93 <sub>(O3)</sub> | -1.69 <sub>(O3)</sub>   | I                    |
| 20 | (Mn(SO <sub>4</sub> )) <sub>2</sub>                    |   | 9  | 0                    |   | I                    |
| 21 |  |  | 11 | 0.06                 |   | I                    |
| 22 |  |  | 13 | 0.07                 |   | I                    |
| 23 |  |  | 15 | 0.83                 |   | I                    |
| 24 | (Mn(SO <sub>4</sub> )) <sub>2</sub> *3H <sub>2</sub> O |   | 9  | 1.65                 | 0   | I                    |
| 25 |  |  | 11 | 0                    | 0   | I                    |
|    |  |  |    | 0                    |   | II                   |
|    |  |  |    | 0                    | 0.12  | III<br>IV            |

|                |   |   |                |  |  |                                |
|----------------|---|---|----------------|--|--|--------------------------------|
| 26             |   |   | 13             | 1.46<br>0.07<br>0.03<br>0  | 0<br>0<br>0<br>0   | I<br>II<br>III<br>IV           |
| 27             |   |   | 15             | 1.36<br>0.01<br>0.02<br>0.13   | 0<br>0<br>0<br>0   | I<br>II<br>III<br>IV           |
| 28<br>29<br>30 | (Mn(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> *3H <sub>2</sub> O            |  (O3),  (O2)     | 9<br>11<br>13  | 1.09 <sub>(O2)</sub><br>0.52 <sub>(O2)</sub><br>0 <sub>(O3)</sub><br>0 <sub>(O3)</sub><br>0 <sub>(O3)</sub><br>0 <sub>(O3)</sub> | 0.41 <sub>(O2)</sub><br>1.48 <sub>(O2)</sub><br>-0.69 <sub>(O3)</sub><br>-0.29 <sub>(O3)</sub><br>-0.25 <sub>(O3)</sub><br>-0.27 <sub>(O3)</sub> | I<br>I<br>I<br>II<br>III<br>IV |
| 31             |   |   | 15             | 0.74 <sub>(O3)</sub><br>0.22 <sub>(O3)</sub><br>0.23 <sub>(O3)</sub><br>0.24 <sub>(O3)</sub>                                     | 0.14 <sub>(O3)</sub><br>-0.01 <sub>(O3)</sub><br>-0.01 <sub>(O3)</sub><br>-0.16 <sub>(O3)</sub>  | I<br>II<br>III<br>IV           |
| 32             | (Mn(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> *6H <sub>2</sub> O            |   | 11             | 0  |  | I                              |
| 33<br>34       | (Mn(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> *9H <sub>2</sub> O            |    | 11<br>13       | 0<br>0.55  | 0<br>0   | I<br>I                         |
| 35<br>36<br>37 | (Mn(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> *9H <sub>2</sub> O,           |  (O3),  (O2) | 11<br>13<br>13 | 0 <sub>(O2)</sub><br>0.56 <sub>(O2)</sub><br>1.29 <sub>(O3)</sub>  | -1.31 <sub>(O2)</sub><br>-1.31 <sub>(O2)</sub><br>-0.58 <sub>(O3)</sub>  | I<br>I<br>I                    |
| 38             | (MnO <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> |    | 9              | 0  |  | I                              |

|            |   |   |         |   |                                     |   |
|------------|---|---|---------|---|-------------------------------------|---|
| 39<br>40   | $(\text{MnO}_2(\text{H}_2\text{SO}_4)_2)_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ |    | 9<br>13 |   | 0                                   | I<br>I                                      |
| 41<br>42   | $(\text{MnO}_2(\text{H}_2\text{SO}_4)_2)_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ |   | 9<br>13 | 0 <sub>(O2)</sub><br>0.50 <sub>(O3)</sub>   | 1.07 <sub>(O2)</sub>                | I<br>I                                      |
| <b>m=6</b> |   |   |         |   |                                     |   |
| 43         | $(\text{MnO})_6$ гексагональная                                       |   | 26      | 0<br>0<br>0<br>1.56<br>1.58<br>1.61         | 0                                   | I<br>YI<br>II<br>IX<br>X<br>II<br>III<br>IY |
| 44         |   |   | 28      | 0.27<br>0.51<br>0.53<br>0.56                | 0<br>0<br>0<br>0                    | I<br>II<br>III<br>IY                        |
| 45         |   |   | 30      | 0.71<br>0.83<br>0.78<br>0.71<br>0<br>0<br>0 | 0<br>0<br>0<br>0                    | I<br>YI<br>II<br>IX<br>X<br>II<br>III<br>IY |
| 46         | $(\text{MnO})_6$ кубическая   |  | 26      | 0.88<br>2.10<br>2.09<br>2.04                | 1.90<br>0.83<br>0.79<br>0.71        | I<br>II<br>III<br>IY                        |
| 47         |   |   | 28      | 0.63<br>0.45<br>0.48<br>0.49                | 1.39<br>0.23<br>0.23<br>0.21        | I<br>II<br>III<br>IY                        |
| 48         |   |   | 30      | 0<br>0<br>0<br>0                            | <b>0.31</b><br>0.29<br>0.28<br>0.28 | I<br>II<br>III<br>IY                        |

|    |  |   |  |    |                      |                       |                       |   |
|----|--|---|--|----|----------------------|-----------------------|-----------------------|---|
| 49 | (Mn(SO <sub>4</sub> )) <sub>6</sub>  |          |  | 30 |                      |                       | I                     |   |
| 50 | (Mn(SO <sub>4</sub> )) <sub>6</sub> *12H <sub>2</sub> O  |          |  | 30 |                      |                       | I                     |   |
| 51 | (MnO <sub>2</sub> ) <sub>6</sub>   |          |  | 6  | 0.15                 |                       | I                     |   |
| 52 |  |   |  | 10 | 0                    |                       | I                     |   |
| 53 | (MnO <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> *3H <sub>2</sub> O  |         |  | 8  | 0                    | 0                     | I                     |   |
| 54 |  |   |  | 18 | 0.36                 | 0                     | I                     |   |
| 55 |  |   |  | 22 | 3.93                 | 0                     | I                     |   |
| 56 | (MnO <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> *3H <sub>2</sub> O,   |  (O3), |  | 8  | 0 <sub>(O2)</sub>    | -0.38 <sub>(O2)</sub> | I                     |   |
| 57 |  |   |  | 18 | 0.94 <sub>(O2)</sub> | 0.20 <sub>(O2)</sub>  | I                     |   |
| 58 |  |   |  (O2) |    | 22                   | 2.00 <sub>(O3)</sub>  | -2.31 <sub>(O3)</sub> | I |
| 59 | (MnO <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ) <sub>6</sub>                    |        |  | 16 | 3.55                 |                       | I                     |   |
| 60 | (MnO <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> *3H <sub>2</sub> O |        |  | 18 | 0                    |                       | I                     |   |
| 61 |  |   |  | 24 | 0.55                 | 0                     | I                     |   |
| 62 |  |   |  | 26 |                      |                       |                       | I |
| 63 |  |   |  | 30 |                      |                       |                       | I |

|    |   |  |    |                      |                      |   |
|----|---|--|----|----------------------|----------------------|---|
| 64 | $\text{MnO}_2(\text{H}_2\text{SO}_4)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ |  | 20 | 0.78 <sub>(O2)</sub> | 0.05 <sub>(O2)</sub> | I |
| 65 |   |  | 24 | 0.48 <sub>(O2)</sub> |                      | I |
| 66 |   |  | 26 | 4.58 <sub>(O3)</sub> |                      | I |
| 67 |   |  | 30 | 6.49 <sub>(O3)</sub> |                      | I |

Из таблицы видно, что вблизи наиболее стабильных гексагональных кластеров  $(\text{MnA}_{1,2})_m$  на энергетической шкале расположены несколько близко лежащих изомеров, отвечающих различным значениям количества неспаренных электронов ( $M$ ) на атомах металлов. В процессе адсорбции воды на поверхность гексагональных кластеров или образования более крупных кластеров из более мелких (например,  $(\text{MnA}_{1,2})_3 + (\text{MnA}_{1,2})_3 = (\text{MnA}_{1,2})_6$ ) часть электронных пар разрывается с небольшими затратами энергии (в пределах 1.5 эВ).

На основании анализа таблицы можно сказать, что гексагональные структуры в основном состоянии кластеров марганца типа  $(\text{MnA}_k\text{B}_i)_m \cdot n\text{H}_2\text{O}$ , ( $A, B = \text{O}, \text{SO}_4, \text{H}_2\text{SO}_4$ ;  $i, k = 0, 1, 2$ ;  $n = 3-15$ ,  $m = 3, 6, 12$ ) при взаимодействии с водой могут выделять кислород и озон (при возбуждении или нагревании). В исследованных кластерах на энергетической шкале близко лежат несколько изомеров с различным количеством неспаренных электронов. Окисление окружающего пространства кластеров с  $m = 3, 6$  приводит к стабилизации изомеров с большим, чем в нейтральной среде, количеством неспаренных электронов. Увеличение числа неспаренных электронов приводит к образованию предпосылок к образованию озона на поверхности кластера. Возбуждение ( $< 3$  эВ) может приводить к переходу от изомера с фрагментом  $\text{O}_2$  на поверхности кластера к изомеру с фрагментом  $\text{O}_3$ . Меняя число неспаренных электронов путем возбуждения (или нагревания) основного изомера, можно переключать процесс образования кислорода или озона на концевых поверхностях гексагонального кластера. В частности, для кластера  $(\text{MnO}_2)_6$  этот процесс происходит на фрагментах  $(\text{MnO}_2)_3$ . Учитывая, что таких поверхностей у гексагонального изомера  $(\text{MnO}_2)_6$  две, можно ожидать образования лишь двух молекул озона. Аналогично, для кластера  $(\text{MnO}_2(\text{H}_2\text{SO}_4)_2)_m$  характерно выделение двух молекул  $\text{O}_3$  на один кластер при  $m = 6$ . Строение кластеров с  $m = 12$  и  $m = 18$  в виде димера и тримера открывает для образования кислорода или озона в два и три раза больше мест, поэтому для них характерно выделение четырех и шести молекул  $\text{O}_3$  соответственно, что согласуется с экспериментальными результатами [2]. В газовой фазе на поверхности кластеров при взаимодействии с молекулами водорода может происходить поглощение озона с выделением тепла.

## Литература

1. Джабиев Т.С., Моисеев Д.Н., Шилов А.Е., Докл. Акад. Наук. 2005. Т.402. С. 555.
2. Т.С. Джабиев // Кинетика и катализ. 2010. Т. 51. № 6. С. 816.
3. P.J. Ziemann and A.W. Castleman, Jr. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 13480.
4. S.K. Nayak and P. Jena // J.Am.Chem.Soc. 1999. V. 121. P. 644.
5. Ziemann, P.; Castleman, A. W., Jr. // Phys. Rev. B 1992, 46, 13480.
6. A. Kirilyuk, K. Demyk, G. von Helden, and G. Meijer, A. I. Poteryaev and A. I. Lichtenstein // J. Appl. Phys. 2003, 93(10)7379-7381
7. S. K. Nayak and P. Jena J. Am. Chem. Soc. 1999, 121, 644-652
8. Wyckoff, R. W. G. Crystal Structures; Interscience: New York, 1964.
9. Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Ю.А. Добровольский, В.М. Волохов / Квантово-химическое моделирование наноструктурированного кремния  $Si_n$  ( $n=2\div 308$ ). Структуры типа снежный ком // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2016. – № 3. – С. 621-630.
10. Литирование-делитирование бесконечных нановолокон типа  $Si_nC_m$  как возможных перспективных анодных материалов для литий-ионных источников тока. Квантово-химическое моделирование / Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Ю.А. Добровольский, В.М. Волохов // Электрохимия. – 2016. – Т. 52. – № 10. – С. 1109-1112.
11. T.S. Zyubina, A.S. Zyubina, Yu.A. Dobrovolskii, and V.M. Volokhov. Quantum-Chemical Modeling of Lithiation–Delithiation of Infinite Fibers  $[Si_nC_m]_k$  ( $k = \infty$ ) for  $n = 12–16$  and  $m = 8–19$  and Small Silicon Clusters // ISSN 0036-0236, Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2016. – V. 61. – No. 13. – P. 1677-1687.
12. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. V.47. P. 558.
13. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1994. V.49. P. 14251.
14. Kresse G., Furthmüller J. // Comput. Mat. Science. 1996. V. 6. P. 15
15. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.
16. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.
17. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // Phys. Rev. Letters. 1996. V.77. P.3865.
18. Methfessel M., Paxton A. T. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P.3616.
19. Becke A.D. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. № 4. P.5648.
20. Johnson B.J., Gill P.M.W., Pople J.A. // J.Chem. Phys. 1993. V.98. № 4. P.5612.
21. Gaussian 03, Revision C.02. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
22. Mulliken, R.S. Interpretation of the atmospheric oxygen bands; electronic levels of the oxygen molecule // Nature. – 1928. – V. 122. – P. 505.

### (MnO<sub>2</sub>)<sub>3,6</sub> AND (MnO<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>)<sub>3,6</sub> HEXAGONAL STRUCTURES INTERACTION WITH WATER AND OZONE FORMATION. SUPERCOMPUTER SIMULATION

T.S. Zyubina, T.S. Dzhabiyev, A.S. Zyubin, Yu.A. Dobrovolsky

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

In the present work were calculated structures of clusters  $(MnA_2)_{3,6}$  where  $A=O$  and  $SO_4$ , and theoretically investigated the possibility of separating ozone by the hexagonal cluster when interacting with water. For calculations used the PBE density functional with a basis plane waves PAW and the hybrid functional B3LYP with the basis 6-31G\*. It is shown that the hexagonal structure of clusters  $(MnA_2)_{3,6}$  (where  $A=O$  or  $SO_4$ ) can interact with water to allocate ozone under the influence of visible light

Keywords: manganese, oxidation of water to O<sub>3</sub>, clusters  $(MnO)_n$ ,  $(MnSO_4)_n$

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПОР В DPPC МЕМБРАНАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Д.В. Завьялов, Ш.Ш. Камбарова

Волгоградский государственный технический университет  
[topsy\\_krets@mail.ru](mailto:topsy_krets@mail.ru)

Исследовано методом молекулярной динамики образование поры в биологической мембране под действием постоянного электрического поля, приложенного поперек ее слоев. Создана модель бислоя квадратной DPPC мембраны, у которой имеется водяной слой с обеих сторон мембраны. Рассмотрено образование поры в промежутке между двумя слоями под действием внешнего электрического поля

Ключевые слова: DPPC мембрана, диффузия, моделирование, электрическое поле, молекулярная динамика, биофизика, липиды

### ВВЕДЕНИЕ

Изучение биологических мембран является одним из основных проблем биофизики. Благодаря исследованию структуры и функциональных особенностей мембран, станет возможным решить основные задачи биофизики, относящиеся к поведению клеток и организма как открытых систем (транспорт веществ), к биоэнергетике, регуляции биосинтетических и структурообразующих процессов, к действию ферментативных систем. Биологические мембраны благоприятно влияют на транспорт, а также выполняют множество различных клеточных функций [1].

Мембрана, в основном, состоит из липидов, белков и углеводов. Она имеет сложную структуру, подвижна, между молекулами имеется тесная связь и взаимопроникновение. Мембрана существенно отличается от окружающего ее водного раствора, к примеру, ее внутренние гидрофобные слои характеризуются малым значением диэлектрической проницаемости.

Одной из важнейших функций биологических мембран является транспорт веществ сквозь мембрану. Различают два вида транспорта веществ в мембране пассивный и активный. Если вещество движется через мембрану из области с высокой концентрацией в сторону низкой концентрации (т.е. по градиенту концентрации этого вещества) без затраты клеткой энергии, то такой транспорт называется пассивным, или диффузией. Активный транспорт имеет место в том случае, когда перенос осуществляется против градиента концентрации. Такой перенос требует затраты энергии. Также говорят, что имеет место активный транспорт веществ сквозь мембрану в том случае, когда приложено внешнее электрическое поле, что рассмотрено в данной работе.

Задачей работы было исследование методом молекулярной динамики образования поры в биологической мембране под действием постоянного электрического поля, приложенного поперек ее слоев.

## ОБРАЗОВАНИЕ ПОРЫ ВОДЫ В ЛИПИДНЫХ МЕМБРАНАХ

Исследовалась мембрана, состоящая из бислоя липидов дипальмитоил-фосфатидилхолина (DPPC). Для моделирования выбрано силовое поле CHARMM36. Оно предложено в 2010 г. и хорошо описывает динамику фосфолипидных мембран (см. например [2]). Для окружающего мембрану водяного слоя потенциал взаимодействия выбран в виде TIP3. Модель построена с помощью сервиса [www.charmm-gui.org](http://www.charmm-gui.org). Была выбрана квадратная модель мембраны с периодическими граничными условиями в ее плоскости. Количество липидов 512 (256 на каждый слой), имеется водяной слой с обеих сторон мембраны. Давление 1 бар для всех температур. Исходный вид мембраны представлен на рис. 1.

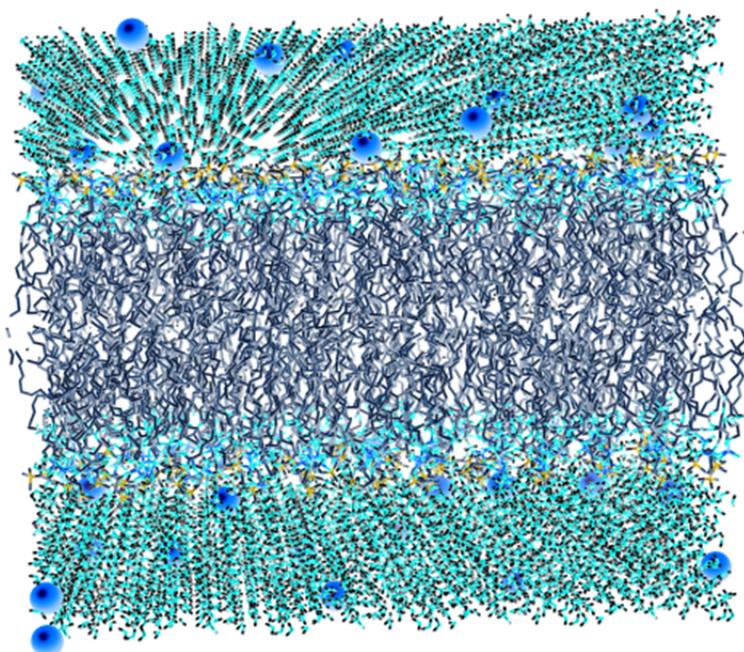


Рис. 1. Бислой липидов DPPC, окруженный молекулами воды сверху и снизу, ионы – KCl

Образование поры наблюдалась, когда бислой был подвергнут воздействию внешнего электрического поля. Температура моделирования составляет 298.15 К. В системе также присутствуют ионы KCl. Время моделирования составило 1 нс.

Моделирование состоит из трех этапов.

1. На первом этапе проводится минимизация энергии системы. Целью этапа является приведение системы в состояние с как можно более равномерно распределенными по объему молекулами (и, соответственно, как меньшими силами), чтобы в начале моделирования не получить пробеги молекул за время шага интегрирования порядка размеров системы.

2. Следующим этапом проводится приведение системы в состояние термодинамического равновесия (так называемая термализация). Термализуемая система находится в NVT ансамбле. При этом в качестве термостата применя-

ется термостат Berendsen. Группы атомов, принадлежащие воде и липидам, термализуются отдельно. Термализация проходит в течение 400 пикосекунд с шагом в 1 фемтосекунду.

Третьим этапом моделирования является production-этап. На этом этапе система заключается в NPT ансамбль. При этом термостатом является термостат Nose-Hoover, а в качестве баростата используется алгоритм Parrinello-Rahman. Моделирование проводится в течение 1 наносекунды модельного времени с шагом в 2 фемтосекунды.

В результате моделирования наблюдалось образование поры в мембране, что представлено на рис. 2.

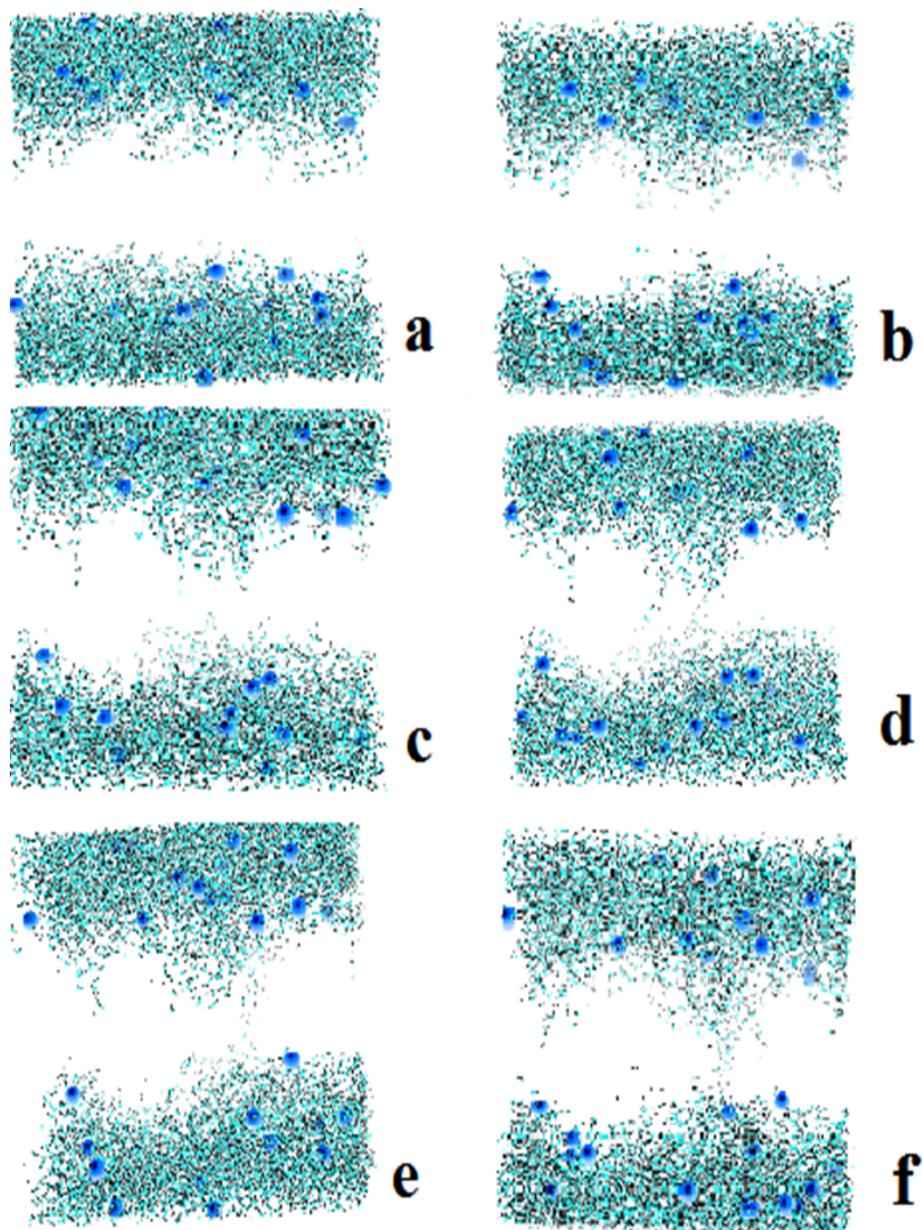


Рис. 2. Образование поры в DPPC мембране под действием электрического поля; а – мембрана под действием электрического поля в момент времени 100 пс; б – 300 пс; с – 500 пс; д – 600 пс; е – 800 пс; ф – 1000 пс

Липиды, которые видны на рис. 1 в промежутке между слоями, были удалены с рис. 2, для того, чтобы можно было наглядно рассмотреть образование поры в мембране.

Из рисунка видно, что со временем в двухслойной мембране DPPC образуется пора, обусловленная действием электрического поля. Анализ полученных данных позволяет сделать вывод, что выбранного времени моделирования в 1 нс недостаточно, чтобы наблюдать диффузию ионов  $K^+$  и  $Cl^-$  сквозь мембрану, но уже достаточно для образования самой поры.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследования наблюдалось образование поры в DPPC мембране под действием постоянного электрического поля, приложенного в поперечном направлении к бислою. В дальнейшем предполагается провести моделирование на гораздо больших временах (порядка десятков наносекунд). Результаты моделирования будут применены для вычисления профиля электрического потенциала в поре мембраны и коэффициента диффузии ионов сквозь нее.

### Литература

1. Katsaras J, Gutberlet T, eds. 2001. Lipid bilayers: structure and interactions. Berlin: Springer-Verlag.
2. Pastor R.W., MacKerell A.D., Jr. Development of the CHARMM Force Field for Lipids: [Электронный ресурс]: Режим доступа: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3133452/>
3. Karplus M. Program for atomic-level simulation: [Электронный ресурс]: Режим доступа: <http://www.charmm-gui.org/>
4. Feller SE, Gawrisch K, MacKerell Jr AD. 2001. Polyunsaturated fatty acids in lipid bilayers: intrinsic and environmental contributions to their unique physical properties. *J Am Chem Soc* 124:318–326.
5. Klauda JB, Roberts MF, Redfield AG, Brooks BR, Pastor RW. 2008. Rotation of lipids in membranes: molecular dynamics simulation, 31P spin-lattice relaxation, and rigid-body dynamics. *Biophys J* 94:3074–3083.
6. Moore PB, Lopez CF, Klein ML. 2001. Dynamical properties of a hydrated lipid bilayer from a multianosecond molecular dynamics simulation. *Biophys J* 81:2484–2494.

## SIMULATION OF PORE FORMATION IN DPPC MEMBRANES UNDER THE ACTION OF AN ELECTRIC FIELD

D.V. Zavyalov, Sh.Sh. Kambarova

Volgograd State Technical University

The molecular dynamics method was used to study the formation of pores in a biological membrane under the action of a constant electric field applied across its layers. A bilayer model of a square DPPC membrane has been created, which has a water layer on both sides of the membrane. The formation of a pore in the interval between two layers under the influence of an external electric field is considered

Keywords: DPPC membrane, diffusion, modeling, electric field, molecular dynamics, biophysics, lipids

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ  
НЕУПОРЯДОЧЕННОГО  $S$ - $I$ - $S$  КОНТАКТА СО СЛУЧАЙНЫМИ  
КВАНТОВЫМИ ЗАКОРОТКАМИ В  $I$ -СЛОЕ

Н.В. Кирпиченкова, К.В. Крыжановский

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)  
им. М.И. Платова, Новочеркасск  
[wkirpich@rambler.ru](mailto:wkirpich@rambler.ru)

Сформулирована математическая модель для исследования электродинамических процессов в неупорядоченном  $S$ - $I$ - $S$  контакте ( $S$  – сверхпроводник,  $I$  – изолятор)

Ключевые слова: математическая модель, вихретоковые процессы, неупорядоченный контакт, случайные квантовые закоротки, туннельная проводимость, пространственный «шум» туннельной проводимости

Физическая модель рассматриваемого в данной работе длинного неупорядоченного  $S$ - $I$ - $S$  туннельного контакта [1 – 4] состоит в следующем (рис. 1). Контакт находится при температуре  $T = 0$  во внешнем магнитном поле  $(0, H_y, 0)$ . Одинаковые  $S$ -берега контакта разделены  $I$ -слоем с характерными размерами: длина  $L_x \gg \lambda_J$  (длинный контакт), который в рамках рассматриваемой модели в теоретических формулах формально может считаться бесконечным:  $L_x = \infty$ , ширина  $L_y \ll \lambda_J$  (узкий контакт),  $\lambda_J$  – джозефсоновская глубина проникновения магнитного поля в контакт, толщина  $L_z \sim 10a$ , где  $a \sim 10^{-10}$  м – межатомное расстояние. Высота потенциального барьера (для туннелирующих электронов)  $I$ -слоя:  $U_0 = \text{const}$ . Внутри  $I$ -слоя случайно распределены одинаковые притягивающие электроны примеси, на которых происходит рассеяние туннелирующих через  $I$ -слой электронов.  $N \gg 1$  – полное число примесей в  $I$ -слое,  $\Gamma_N = \{\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N\}$  – их случайная пространственная конфигурация в  $I$ -слое,  $\bar{r}_i$  – координаты примесей.  $E_0$  – энергия локального электронного уровня на примеси,  $\alpha^{-1} = [2m(U_0 - E_0)/\hbar^2]^{-1/2}$  – характерный радиус локализации электронной волновой функции на уровне  $E_0$ , где  $m$  – масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка. Примеси распределены макроскопически однородно по объему  $V = L_x L_y L_z$   $I$ -слоя с безразмерной концентрацией  $c = n\alpha^{-3} \ll 1$ , ( $n = N/V$ ) – модель слабого структурного беспорядка. Уровень Ферми контакта  $\mu < U_0$  находится в ближайшей окрестности уровня  $E_0$  – внутри энергетического спектра туннельных резонансов, ассоциированных с квантовыми резонансно-перколяционными траекториями (КРПТ) [5]. При этом наибольший интерес представляет область энергий  $|\mu - E_0| \leq \gamma$ ,  $\Delta \leq \gamma \ll \mu$ , где  $\gamma$  – характерная энергетическая ширина существенных туннельных резонансов,  $\Delta$  – энергетическая щель сверхпроводящего конденсата (электронных куперовских пар) в  $S$ -берегах

контакта. Волновая функция сверхпроводящего конденсата в  $S$  берегах имеет вид:  $\psi_{1,2} = \psi_0 \cdot \exp(i\varphi_{1,2})$ , где  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  фазы этой волновой функции в каждом из  $S$ -берегов [6, 7]. Модуль этой волновой функции, как обычно в таких задачах, считается постоянным  $\psi_0 = \text{const}$ , не возмущенным слабой туннельной связью через  $I$ -слой между  $S$ -берегами [1, 8], а возмущается лишь разность фаз  $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$  между  $S$ -берегами.

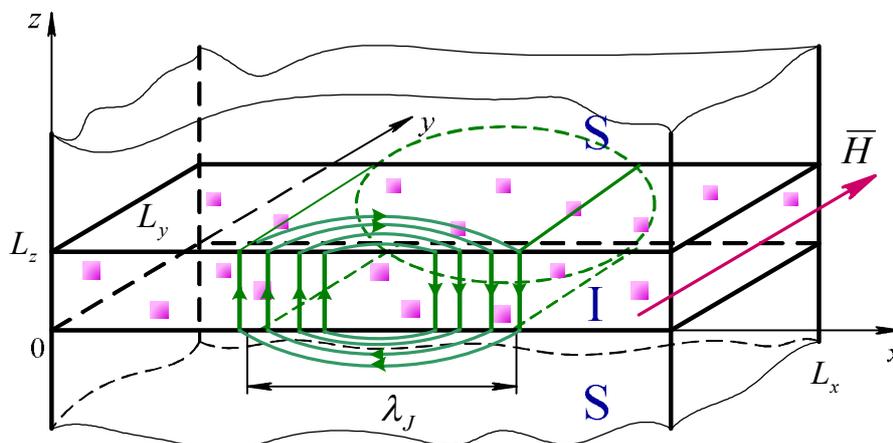


Рис. 1. Физическая модель джозефсоновского контакта с примесями в  $I$ -слое, помещенного в параллельное плоскости контакта магнитное поле  $(0, H_y, 0)$ , большее нижнего критического.  $\lambda_J$  – характерный размер джозефсоновского вихря. Точки в  $I$ -слое символизируют примеси

Основное уравнение математической модели вихревых токов в длинном  $S$ - $I$ - $S$  контакте, находящемся в магнитном поле, следует из уравнения Максвелла

$$\text{rot } \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (1)$$

которое для рассматриваемой геометрии контакта и магнитного поля (рис. 1) принимает вид [1]:

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = j_z + \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t}, \quad (2)$$

где  $j_z$  – плотность туннельного тока в  $I$ -слое контакта,  $\epsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость вакуума,  $\epsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость  $I$ -слоя,  $E_z = V/L_z$  – напряженность электрического поля в  $I$ -слое,  $V$  – электрическое напряжение на контакте. Отметим, что в условиях длинного ( $L_x \gg \lambda_J$ ) и узкого ( $L_y \ll \lambda_J$ ) контакта, зависимостью всех физических полей в контакте от пространственной переменной  $y$  можно пренебречь [1, 8].

Плотность тока  $j_z$  включает в себя два слагаемых

$$j_z = j_s + j_n, \quad (3)$$

где  $j_s$  – плотность сверхтока через контакт,  $j_n$  – плотность нормального тока через контакт.

Плотность нормального тока равна

$$j_n = \frac{V}{R_T(V)} = \frac{1}{R_T(V)} \frac{\hbar}{2e} \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (4)$$

где  $R_T(V)$  – некоторое, зависящее от температуры  $T$  сопротивление (на единицу поверхности) контакта. При  $T \rightarrow 0$  сопротивление  $R_T(V) \rightarrow \infty$  для напряжений  $|V| < 2\Delta/e$  [8], а  $j_n \rightarrow 0$ .

Плотность сверхтока  $j_s$ , напряжение  $V$  и напряженность магнитного поля  $H_y$  связаны с разностью фаз макроскопической волновой функции сверхпроводящего конденсата  $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$  в  $S$ -берегах контакта соотношениями Джозефсона [1]:

$$\begin{aligned} j_s &= j_c \sin \varphi, \\ V &= \frac{\hbar}{2e} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \\ H_y &= \frac{\hbar}{2\mu_0 e d} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $\mu_0$  – магнитная проницаемость вакуума,  $d = L_z + 2\lambda_L$ ,  $\lambda_L$  – лондоновская глубина проникновения магнитного поля в  $S$ -берега контакта,

$$j_c = \frac{\pi \Delta}{2e} g \quad (6)$$

– критическая плотность сверхтока через  $I$ -слой,  $g$  – не зависящая от температуры туннельная проводимость контакта в нормальном состоянии.

Кроме того, при исследовании динамики джозефсоновского вихря в рассматриваемом здесь неупорядоченном контакте в правую часть уравнения (2) будет включаться еще создаваемая внешним источником равномерно распределенная вдоль контакта плотность тока  $j_r$ , компенсирующая радиационные потери, обусловленные рассеянием вихря на квантовых закоротках (плотность тока «смещения» [1, 2, 4]), и тем самым обеспечивающая возможность его равномерного движения в неупорядоченном контакте. При этом для того, чтобы выделить в чистом виде радиационные потери, обусловленные рассеянием вихря, именно на квантовых закоротках, мы не будем учитывать омические потери в контакте ( $j_n = 0$ ) и ту часть тока «смещения», которая компенсирует эти потери [2].

Подставляя теперь соотношения (3) – (5) в уравнение (2) получаем уравнение для разности фаз  $\varphi = \varphi(x, t)$  [2]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \lambda_J^{-2} \sin \varphi + \delta_r, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad t \geq 0. \quad (7)$$

где

$$c_0 = \left( \frac{L_z}{\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon d} \right)^{\frac{1}{2}} = c \left( \frac{L_z}{\varepsilon d} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

– скорость Свихарта – скорость распространения электромагнитных волн вдоль контакта,  $c = (\mu_0 \varepsilon_0)^{-1/2}$  – скорость света в вакууме,

$$\lambda_J^{-2} = \left( \frac{\pi \mu_0 d \Delta}{\hbar} \right) \cdot g, \quad \delta_r = \left( \frac{2 \mu_0 e d}{\hbar} \right) j_r, \quad (9)$$

здесь  $\lambda_J$  – случайная джозефсоновская глубина проникновения магнитного поля в  $S$ - $I$ - $S$  контакт.

Уравнение (7) должно дополняться соответствующими начальными и граничными условиями, зависящими от постановки конкретной задачи. Это уравнение, вместе с соотношениями (5), является основным уравнением математической модели для исследования электродинамики вихрековых процессов в  $S$ - $I$ - $S$  контакте, находящемся в магнитном поле. Схематически это исследование выглядит так: сначала решается уравнение (7), а затем на основе этого решения с помощью соотношений (5) исследуется электродинамика.

Существенным отличием рассматриваемой здесь модели от других моделей вихревых токов в  $S$ - $I$ - $S$  контактах является случайный характер туннельной проводимости контакта  $g$ , обусловленный упругим рассеянием туннелирующих через  $I$ -слой электронов на случайно расположенных в этом слое примесях. Причем в рассматриваемой здесь области параметров контакта случайная туннельная проводимость  $g$  определяется случайными КРПТ (случайными квантовыми закоротками), возникающими в неупорядоченном (с примесями в  $I$ -слое) туннельном контакте [5]. Случайный характер туннельной проводимости  $g$  определяет статистические свойства случайного параметра  $\lambda_J^{-2}$  (9), входящего в правую часть основного уравнения математической модели (7). Представим этот случайный параметр в следующем виде:

$$\lambda_J^{-2} = \langle \lambda_J^{-2} \rangle [1 + v(x)], \quad (10)$$

где  $\langle \dots \rangle$  – символ усреднения по ансамблю случайных примесных конфигураций  $\{\Gamma_N\}$ ,

$$\langle \lambda_J^{-2} \rangle = \left( \frac{\pi \mu_0 d \Delta}{\hbar} \right) \langle g \rangle, \quad (11)$$

$$v(x) = \frac{g(x) - \langle g \rangle}{\langle g \rangle}, \quad (12)$$

$\langle g \rangle$  – средняя туннельная проводимость неупорядоченного  $I$ -слоя,  $v(x)$  – случайная функция – относительное отклонение случайной туннельной проводимости неупорядоченного  $I$ -слоя от своего среднего значения – пространственный «шум» туннельной проводимости  $I$ -слоя.

Подставляя (10) в (7) запишем последнее в виде [2]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \langle \lambda_J^{-2} \rangle [1 + v(x)] \sin \varphi + \delta_r, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad t \geq 0. \quad (13)$$

Для завершения формулировки математической модели необходимо иметь выражения: для средней туннельной проводимости неупорядоченного  $I$ -слоя  $\langle g \rangle$ , определяющей параметр  $\langle \lambda_J^{-2} \rangle$  (11), среднего значения случайной функции  $\langle v(x) \rangle$  (12) и корреляционной функции  $\langle v(x) \cdot v(x') \rangle$ , которые даются их выражениями, полученными в рамках теории КРПТ, развитой для неупорядоченных  $I$ -слоев [3, 5]:

$$\langle g \rangle = \frac{\pi e^2}{\hbar} \left[ \sigma_0 \sum_{m=1}^N \int_{L/m}^{\infty} p_m(u) e^{-\frac{(\mu-E_0)^2}{\gamma^2(u)}} du + g_0 \right], \quad (14)$$

$$\begin{cases} \langle v(x) \rangle = 0, \\ \langle v(x)v(x') \rangle = w\delta(x-x'), \end{cases} \quad (15)$$

$$w = \left( \frac{\pi e^2}{\hbar \langle g \rangle} \right)^2 \frac{\alpha \sigma_0^2}{L_1} \sum_{m=1}^{\infty} \int_{L/m}^{\infty} p_m(u) e^{-\frac{2(\mu-E_0)^2}{\gamma^2(u)}} du, \quad (16)$$

$$\sigma_0 = \frac{\alpha^2 \kappa^2}{\pi^4 (\alpha^2 + \kappa^2)^2},$$

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E_0), \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \mu,$$

$\gamma(u) = \frac{2\hbar^2}{m} \alpha^2 u^{-1} e^{-u}$  – энергетическая ширина туннельного резонанса для КРПТ с безразмерным шагом  $u = \alpha \cdot 2y$ , где  $2y$  – расстояние между соседними примесями вдоль КРПТ,  $L_1 = \alpha L_y$  – безразмерная ширина  $I$ -слоя,  $p_m(u) = \alpha^2 c^m e^{-cm\pi u^3} [u^2 \theta^2(m, u)]^{m-1}$  – вероятность возникновения (в расчете на единицу площади неупорядоченного  $I$ -слоя)  $m$ -примесной КРПТ с безразмерным шагом  $u$ ,  $\theta(m, u)$  – угол, характеризующий извилистость КРПТ,  $g_0 = 4\pi^3 \sigma_0 \alpha^2 L^{-1} e^{-2L}$  – туннельная прозрачность «пустого» (без примесей)  $I$ -слоя,  $L = \alpha L_z$  – безразмерная толщина  $I$ -слоя.

Соотношения (13) – (16) вместе с соответствующими начальными и граничными условиями представляют собой математическую модель неупорядоченного  $S$ - $I$ - $S$  контакта с квантовыми закоротками в  $I$ -слое.

На рис. 2 в качестве примера приведены результаты численного расчета обусловленных квантовыми закоротками резонансов средней туннельной проводимости неупорядоченного контакта (в логарифмическом масштабе) на плоскости  $(\mu - E_0, c)$  для низкоомного контакта. Более узкий и высокий пик туннельной проводимости учитывает вклад однопримесных туннельных резонансов, ассоциированных с КРПТ, проходящими через одну примесь. Увеличение туннельной проводимости в максимуме однопримесного резонанса по сравне-

нию со случаем «пустого» контакта примерно полтора порядка, а его энергетическая ширина  $\gamma_1 \sim 10^{-3}$  эВ. Более низкий и широкий пик учитывает вклад дву-примесных туннельных резонансов, ассоциированных с КРПТ, проходящими через две примеси. Увеличение проводимости в максимуме двупримесного резонанса примерно на порядок, а его характерная ширина  $\gamma_2 \sim 10^{-2}$  эВ. Резонансы, соответствующие  $m$ -примесным КРПТ ( $m \geq 3$ ) не проявляются вследствие весьма малой вероятности их реализации.

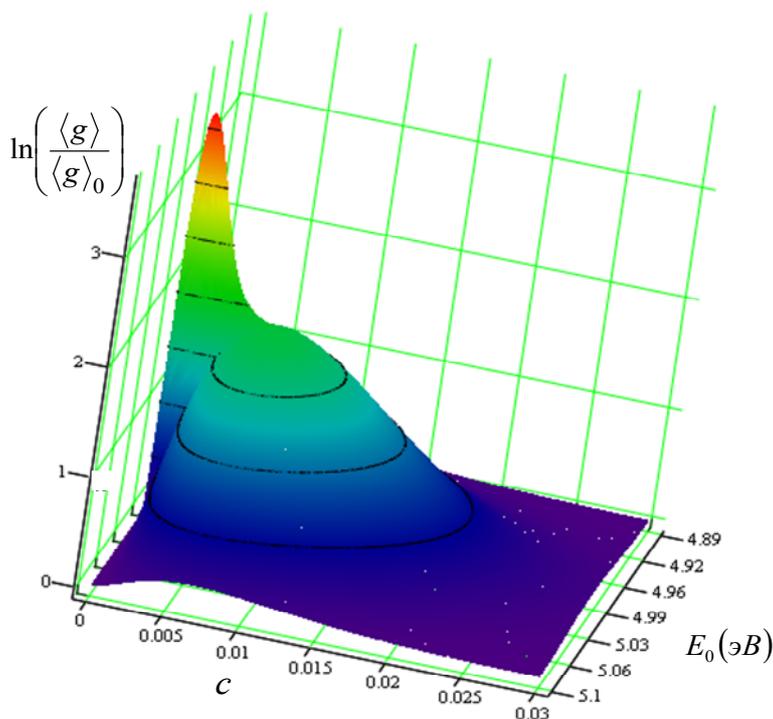


Рис. 2. Поверхность туннельных резонансов проводимости неупорядоченного контакта над плоскостью  $(\mu - E_0, c)$ ,  $\mu = 5$  эВ. Случай низкоомного контакта  $\langle g \rangle_0 = 3 \cdot 10^8 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-2}$

На рис. 3 приведены результаты аналогичного расчета для высокоомного контакта. Обратим внимание на чрезвычайно малую энергетическую ширину однопримесного резонанса  $\gamma_1 \sim 10^{-5}$  эВ, что на два порядка меньше характерной ширины «сверхпроводящей» энергетической щели, используемой в дальнейших расчетах:  $\Delta = 10^{-3}$  эВ. Поэтому в рамках рассматриваемой математической модели, где требуется  $\Delta \leq \gamma$ , этот резонанс «не работает», и учитываются лишь двупримесные резонансы. Как и в случае низкоомного контакта  $m$ -примесные ( $m \geq 3$ ) туннельные резонансы не проявляются на фоне проводимости «пустого»  $I$ -слоя.

На рис. 4 для случая низкоомного контакта приведены результаты численных расчетов для относительных среднеквадратичных флуктуаций – интенсивности пространственного «шума» туннельной проводимости неупорядоченного контакта, усредненного на характерном масштабе решаемых задач – джо-

зефсоновской длине:  $\|v\| = \langle v^2 \rangle^{1/2} = [w \langle \lambda_J^{-2} \rangle]^{1/2}$ , где  $w$  – параметр корреляционной функции (16). Результаты расчетов показывают, что эти флуктуации малы:  $\|v\| \sim 10^{-2}$ . Таким образом, средняя туннельная проводимость  $\langle g \rangle$  рассматриваемого неупорядоченного контакта является хорошо определенной величиной на характерных пространственных масштабах решаемых задач.

На рис. 5 приведены аналогичные результаты численных расчетов для высокоомного контакта.

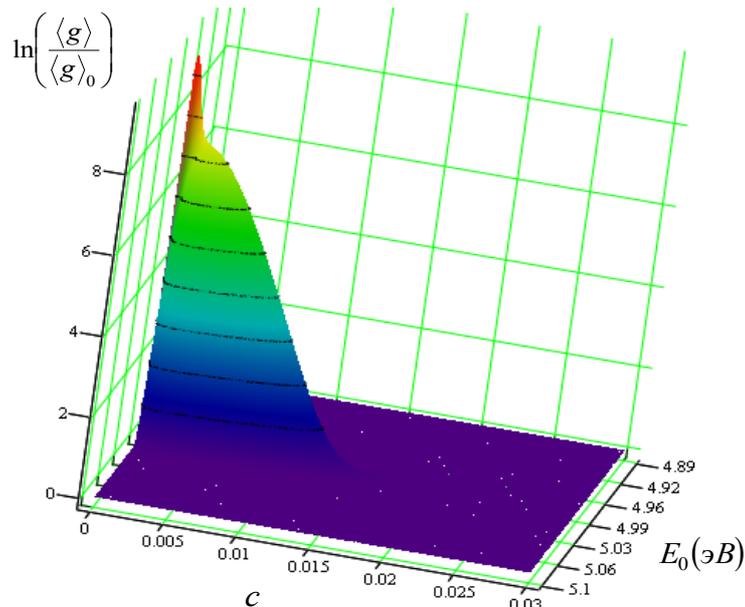


Рис. 3. Поверхность туннельных резонансов проводимости неупорядоченного контакта над плоскостью  $(\mu - E_0, c)$ ,  $\mu = 5$  эВ. Случай высокоомного контакта  $\langle g \rangle_0 = 3 \cdot 10^5 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-2}$

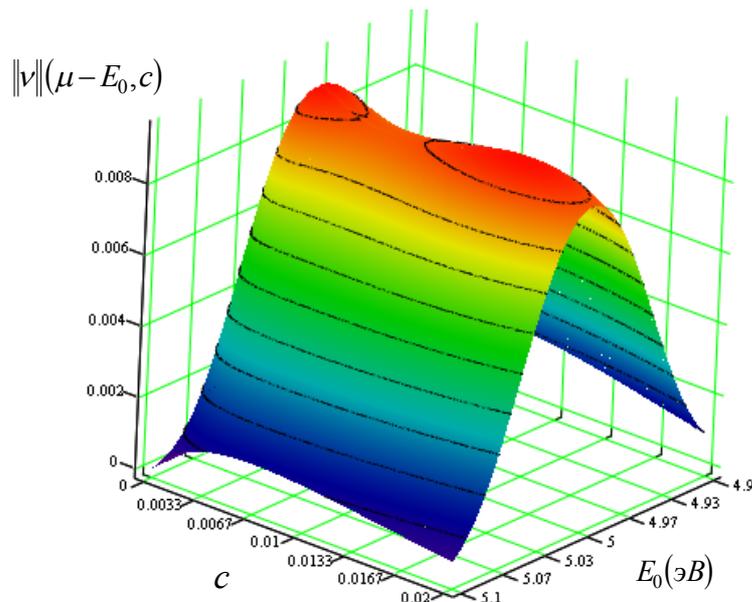


Рис. 4. Интенсивность пространственного «шума» туннельной проводимости низкоомного неупорядоченного контакта

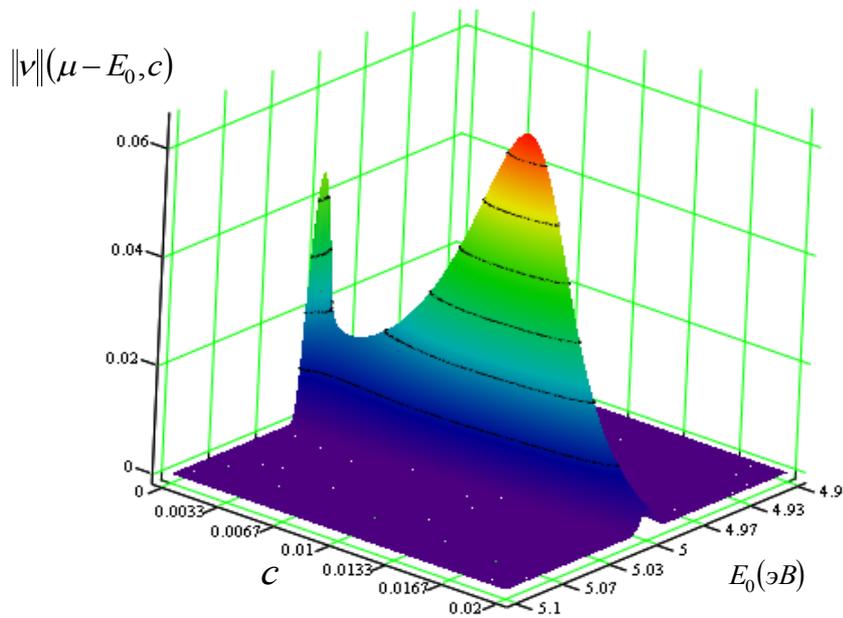


Рис. 5. Интенсивность пространственного «шума» туннельной проводимости высокоомного неупорядоченного контакта

Таким образом, основное уравнение математической модели (13) представляет собой нестационарное нелинейное стохастическое уравнение *sin-Gordon*, статистические свойства которого определяются соотношениями (14)-(16).

#### Литература

1. Бароне А., Патерно Дж. Эффект Джозефсона. Физика и применение. – М., 1984. – 639 с.
2. Минеев М.Е., Фейгельман М.В., Шмидт В.В. Движение джозефсоновского вихря в поле случайного потенциала // ЖЭТФ. – 1981. – Т. 81. – С. 290-298.
3. Кирпиченков В.Я. Влияние квантовых резонансно-перколяционных траекторий на параметры джозефсоновского вихря // ЖЭТФ. – 2007. – Т. 132. – С. 294-296.
4. Кирпиченков В.Я. Теория стохастического туннелирования в неупорядоченных наноструктурах. – М.: Экономическое образование, 2006. – 193 с.
5. Лифшиц И.М., Кирпиченков В.Я. О туннельной прозрачности неупорядоченных систем // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 77. – С. 989-1016.
6. Абрикосов А.А. Основы теории металлов. – М.: Наука, 1987. – 520 с.
7. Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводников. – М: МЦНМО, 2000. – 397 с.
8. Кулик И.О., Янсон И.К. Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах. – М.: Наука, 1970. – 272 с.

## MATHEMATICAL MODEL OF THE ELECTRODYNAMICS OF THE DISORDERED S-I-S CONTACT WITH STOCHASTIC QUANTUM SHORTING IN THE I-LAYER

N.V. Kirpichenkova, K.V. Kryzhanovskiy

Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novocherkassk

A mathematical model for the investigation of electrodynamic processes in a disordered S-I-S contact is formulated (S – superconductor, I – insulator)

Keywords: mathematical model, eddy current processes, disordered contact stochastic quantum shorting, tunneling conductivity, spatial "noise" of tunneling conduction

## КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ СТОХАСТИЧЕСКИ ВОЗМУЩЕННОГО ЛИНЕАРИЗОВАННОГО СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ SIN-GORDON

Н.В. Кирпиченкова, В.Я. Кирпиченкова, К.В. Крыжановский

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)  
им. М.И. Платова, Новочеркасск  
[wkirpich@rambler.ru](mailto:wkirpich@rambler.ru)

Получена усредненная конечно-разностная схема для численного решения стохастически возмущенного линеаризованного стационарного уравнения sin-Gordon, предназначенная для математического моделирования вихретоковых процессов малой амплитуды в неупорядоченных джозефсоновских контактах

Ключевые слова: математическое моделирование, конечно-разностная схема, вихретоковые процессы, стохастически возмущенное линеаризованное уравнение sin-Gordon, неупорядоченный контакт, квантовые закоротки

### 1. Введение

Электродинамике джозефсоновских  $S-I-S$  контактов посвящено огромное число публикаций, эта тематика отражена в многочисленных обзорах, монографиях и учебниках, что обусловлено как фундаментальностью самой этой проблемы, так и уже широким спектром применения сквидов (SQUID – Superconducting QUantum Interference Device) – устройств на основе джозефсоновских контактов в различных областях науки и техники. В качестве перспективных исследуются, например, возможности создания элементной базы квантовых суперкомпьютеров на базе джозефсоновских контактов. В этой связи следует отметить фундаментальную монографию А. Бароне и Дж. Патерно [1].

Одним из направлений электродинамики джозефсоновских  $S-I-S$  контактов является исследование вихревых токов и, в том числе, уединенных джозефсоновских вихрей, появляющихся в контактах, находящихся в параллельном плоскости контакта внешнем магнитном поле, превышающем нижнее критическое значение. Джозефсоновский вихрь (флюксон) несет квант магнитного потока и может перемещаться вдоль контакта при приложении к этому контакту внешнего напряжения. Это направление исследований связано, в частности, и с практически важной задачей изучения транспорта информации (один бит = один флюксон) вдоль длинных джозефсоновских контактов – джозефсоновских линий связи, соединяющих логические элементы в перспективных компьютерах, основанных на джозефсоновской технологии [1].

Электродинамика вихревых токов в длинных идеальных джозефсоновских контактах давно и хорошо изучена на основе математической модели, основанной на нелинейном уравнении  $\sin\text{-Gordon}$  [1]. Вместе с тем в реальных джозефсоновских контактах присутствуют различные искажения в слое изолятора этого контакта, в частности, случайные квантовые закоротки, обнаруженные и исследованные

дованные в [2]. Наличие случайных квантовых закороток приводит к необходимости рассматривать стохастически возмущенное уравнение *sin-Gordon* [3 – 9] в качестве математической модели вихретовых процессов в реальных джозефсоновских контактах.

Вместе с тем математическая сложность и «многопараметричность» этой модели неупорядоченного джозефсоновского контакта со случайными квантовыми закоротками, большие массивы входных и выходных данных делают весьма затруднительным её достаточно детальное и точное аналитическое исследование в широкой области параметров модели, что приводит к необходимости разработки численных методов и основанных на них компьютерных моделей, предназначенных для анализа электродинамики джозефсоновского вихря в таком контакте.

## 2. Постановка задачи

Численное решение основного уравнения математической модели вихретовых процессов в неупорядоченном *S-I-S* (*S* – сверхпроводник, *I* – изолятор) контакте со случайными квантовыми закоротками в *I*-слое – стохастического уравнения *sin-Gordon* – сильно осложняется случайным характером туннельной проводимости неупорядоченного *I*-слоя, обусловленным наличием хаотически распределенных по этому слою примесей со случайной конфигурацией примесей  $\Gamma_N = \{r_1, r_2, \dots, r_N\}$ , где  $r_i$  – координаты примесей в *I*-слое. В таких задачах, в первую очередь необходимо искать усредненное по стохастическому ансамблю  $\{\Gamma_N\}$  решение этого уравнения и дисперсию решения, с помощью которых затем исследуются представляющие физический интерес электродинамические параметры и процессы в таких контактах.

Для нахождения усредненного решения численными методами теоретически возможен путь, основанный на параллельных вычислениях, когда уравнение численно решается для каждой конкретной реализации стохастического ансамбля  $\{\Gamma_N\}$ , т.е. для каждого случайного распределения координат примесей в *I*-слое. Затем на основе полученных таким образом решений (для каждой реализации) можно найти усредненное решение путем численного усреднения по всем реализациям ансамбля  $\{\Gamma_N\}$ . Однако этот путь практически нереализуем, поскольку требует огромных вычислительных мощностей. Действительно, например, для джозефсоновского контакта с характерными размерами *I*-слоя  $L_x \times L_y \times L_z = 10^6 a \times 10^3 a \times 10a$ , где  $a \sim 10^{-10}$  м – межатомное расстояние, при концентрации примеси  $c = 10^{-2}$  (одна примесь на 100 атомов) число примесных атомов  $N_{imp} = 10^8$  и они могут равномерно распределяться по  $N = 10^{10}$  позициям (полное число атомов в *I*-слое). Таким образом, полное число различных конфигураций примесей в таком *I*-слое, т.е. полное число элементов стохастического ансамбля  $\{\Gamma_N\}$  по порядку величины оценивается как

$$N_p = C_{10^{10}}^{10^8} > 10^{2 \cdot 10^8}.$$

Задача с таким огромным количеством вариантов оказывается невычислимой для современных классических (не квантовых) компьютеров даже при параллельных вычислениях на всех суперкомпьютерах Земли за любой разумный промежуток времени.

Второй путь получения усредненного численного решения основан на том, что в рассматриваемой здесь области энергий туннельных резонансов при рассматриваемых концентрациях примесей, подавляющий вклад в туннельную проводимость неупорядоченного  $I$ -слоя дают случайные квантовые закоротки, которые и определяют статистику туннельной проводимости в рассматриваемой модели. Поэтому можно аналитически произвести статистическое усреднение по ансамблю  $\{\Gamma_N\}$  уже на уровне конечно-разностных схем, применяемых для решения уравнения, используя статистику случайных квантовых закороток [10], и в дальнейшем численно решать только одно – усредненное уравнение. Именно этот путь и реализуется в настоящей работе.

### 3. Метод стохастического усреднения конечно-разностной схемы

Рассмотрим метод усреднения конечно-разностной схемы по стохастическому ансамблю  $\{\Gamma_N\}$  на примере линейризованного стохастически возмущенного уравнения *sin-Gordon*.

Стационарное уравнение для вихретоковых процессов в рассматриваемом здесь неупорядоченном  $S$ - $I$ - $S$  контакте имеет вид [10]:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = k(1 + v(x))\sin\varphi, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad (1)$$

где  $\varphi = \varphi(x, \Gamma_N)$  – случайная разность фаз сверхпроводящих параметров порядка в  $S$ -берегах контакта,  $v(x) = v(x, \Gamma_N)$  – случайные флуктуации туннельной проводимости неупорядоченного  $I$ -слоя, обусловленные присутствием квантовых закороток в этом слое,  $k = \langle \lambda_J^{-2} \rangle$ , где  $\lambda_J = \lambda_J(\Gamma_N)$  – случайная джозефсоновская глубина проникновения магнитного поля в неупорядоченный  $S$ - $I$ - $S$  контакт,

$$\begin{cases} \langle v(x) \rangle = 0, \\ \langle v(x)v(x') \rangle = w\delta(x - x'), \end{cases} \quad (2)$$

где  $w$  – известный параметр корреляционной функции,  $\langle \dots \rangle$  – символ усреднения по стохастическому ансамблю  $\{\Gamma_N\}$ .

Сначала рассмотрим наиболее простой вариант – вихретоковые процессы малой амплитуды:  $\varphi \ll 1$ . Тогда линейризованное уравнение (1) примет вид:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = k[1 + v(x)]\varphi, \quad -\infty \leq x \leq \infty. \quad (3)$$

Трехточечная конечно-разностная схема для уравнения (3) имеет вид:

$$\frac{\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1}}{h^2} = k[1 + v_i]\varphi_i, \quad (4)$$

где  $\varphi_i = \varphi(x_i, \Gamma_N)$ ,  $v_i = v(x_i, \Gamma_N)$  – случайные сеточные функции,  $h$  – шаг равномерной сетки,  $x_i = ih$  ( $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).

Усредняя конечно-разностное уравнение (4) по стохастическому ансамблю  $\{\Gamma_N\}$ , получим конечно-разностное уравнение для усредненной функции  $\langle \varphi \rangle_i$

$$\frac{\langle \varphi \rangle_{i+1} - 2\langle \varphi \rangle_i + \langle \varphi \rangle_{i-1}}{h^2} = k\langle \varphi \rangle_i + k\langle v_i \varphi_i \rangle. \quad (5)$$

Дальнейшая задача состоит в нахождении выражения для коррелятора  $\langle v_i \varphi_i \rangle = \langle v(x_i) \varphi(x_i) \rangle$  через  $\langle \varphi_i \rangle$  с целью получения «замкнутой» конечно-разностной схемы.

Для вычисления этого коррелятора запишем уравнение (1) в виде соответствующего интегрального уравнения, для чего сначала перепишем (1) в виде:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} - k\varphi = kv(x)\varphi. \quad (6)$$

Соответствующее этому дифференциальному уравнению интегральное уравнение имеет вид:

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) - k \int_{-\infty}^{\infty} G(x-x')v(x')\varphi(x') dx', \quad (7)$$

где  $\varphi_0(x)$  – решение однородного (при  $v(x) = 0$ ) уравнения (6) – не случайная функция,  $G(x-x')$  – функция Грина (не случайная) оператора левой части уравнения (6), удовлетворяющая уравнению

$$\frac{d^2 G(x-x')}{dx^2} - kG(x-x') = -\delta(x-x')$$

и имеющая вид:

$$G(x-x') = \frac{1}{2\sqrt{k}} e^{-\sqrt{k}|x-x'|}. \quad (8)$$

Для нахождения искомого коррелятора умножим (7) на  $v(x)$  и результат усредним по  $\{\Gamma_N\}$ :

$$\langle v(x)\varphi(x) \rangle = \langle v(x)\varphi_0(x) \rangle - k \int_{-\infty}^{\infty} G(x-x')\langle v(x)v(x')\varphi(x') \rangle dx'. \quad (9)$$

Учитывая, что  $\varphi_0(x)$  – не случайная функция, получаем, с учетом (2)

$$\langle v(x)\varphi_0(x) \rangle = \langle v(x) \rangle \varphi_0(x) = 0.$$

Далее проведем «расцепление» тройного коррелятора в подынтегральном выражении (9). Учитывая, что в рассматриваемых условиях [10] стохастическая норма  $\|v\| \ll 1$ , учтем при этом члены  $\sim \|v\|^2$ , отбрасывая члены более высокого порядка, получаем:

$$\langle v(x)v(x')\varphi(x') \rangle = \langle v(x)v(x') \rangle \langle \varphi(x') \rangle + O(\|v\|^3).$$

Тогда, учитывая (2), с требуемой точностью имеем для тройного коррелятора:

$$\langle v(x)v(x')\varphi(x') \rangle = w\delta(x-x')\langle \varphi(x') \rangle. \quad (10)$$

Подставляя теперь (10), (8) в (9), имеем после вычисления интеграла с  $\delta$ -функцией:

$$\langle v(x)\varphi(x) \rangle = -kG(0)w\langle \varphi(x) \rangle,$$

где, как видно из (8)

$$G(0) = \frac{1}{2\sqrt{k}}.$$

Таким образом, в конечно-разностной схеме (5) имеем:

$$\langle v_i\varphi_i \rangle = -\frac{\sqrt{k}}{2}w\langle \varphi \rangle_i.$$

Тогда с учетом этого результата явная конечно-разностная схема (5) приобретает вид:

$$\langle \varphi \rangle_{i+1} = \left[ 2 + k \left( 1 - \frac{\sqrt{k}w}{2} \right) h^2 \right] \langle \varphi \rangle_i - \langle \varphi \rangle_{i-1}. \quad (11)$$

Для «запуска» этой схемы должны задаваться соответствующие граничные условия, определяемые постановкой конкретной задачи.

Таким образом, конечно-разностная схема (11) может быть использована при численном моделировании вихретоковых процессов малой амплитуды в джозефсоновских контактах с квантовыми закоротками.

#### Литература

1. Бароне А., Патерно Дж. Эффект Джозефсона. Физика и применение. – М.: Мир, 1984. – 638 с.
2. Лифшиц И.М, Кирпиченков В.Я. О туннельной прозрачности неупорядоченных систем // ЖЭТФ. 1979. – Т. 77. – С. 989-1016.
3. Кирпиченков В.Я. Влияние квантовых резонансно-перколяционных траекторий на параметры джозефсоновского вихря // ЖЭТФ. 2007. – Т. 132. – С. 294-296.
4. Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Лозин О.И. Нижнее критическое поле длинного джозефсоновского S-I-S-туннельного контакта с квантовыми закоротками в I-слое // Известия РАН. Серия физическая. 2009. – Т. 73. – № 7. – С. 1018-1020.
5. Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Лозин О.И. Влияние туннельных резонансов на радиационные потери флюксона в длинном S-I-S-туннельном контакте со слабым структурным беспорядком в I-слое // Известия РАН. Серия физическая. 2009. – Т. 73. – № 8. – С. 1135-1137.

6. Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Лозин О.И. Влияние квантовых резонансно-перколяционных траекторий в неупорядоченном I-слое на критический ток джозефсоновского S-I-S-контакта // Известия РАН. Серия физическая. 2011. – Т. 75. – № 5. – С. 767-769.

7. Кирпиченкова Н.В., Шавров В.Г. Джозефсоновские плазмоны в длинном S-I-S туннельном контакте с квантовыми закоротками в неупорядоченном I-слое // Известия РАН. Серия физическая. 2012. – Т. 76. – № 7. – С. 838-839.

8. Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Лозин О.И. Влияние двупримесных туннельных резонансов на нижнее критическое поле длинного S-I-S туннельного контакта со слабым структурным беспорядком в I-слое // Известия РАН. Серия физическая. 2014. – Т. 78. – № 4. – С. 508.

9. Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Лозин О.И., Постников А.А. Рассеяние джозефсоновских плазмонов на случайных квантовых закоротках в неупорядоченном I-слое S-I-S контакта // Известия РАН. Серия физическая. 2016. – Т. 80. – № 5. – С. 590-592.

10. Кирпиченков В.Я. Теория стохастического туннелирования в неупорядоченных наноструктурах. М.: 2006. – 193 с.

## FINITE-DIFFERENCE SCHEME FOR STOCHASTICALLY PERTURBED LINEARIZED STATIONARY EQUATION SIN-GORDON

N.V. Kirpichenkova, V.Ya. Kirpichenkova, K.V. Kryzhanovskiy

Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novocherkassk

There is obtained averaged finite-difference scheme for the numerical solution of stochastic perturbed linearized stationary equation sin-Gordon, is designed for mathematical modeling of eddy current processes of small amplitude in disordered Josephson junctions

Keywords: math modeling, finite-difference scheme, eddy current processes, stochastically perturbed linearized equation sin-Gordon, disordered contact, quantum shorting

## РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НАГРУЗОЧНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПНЕВМОЭЛЕМЕНТА С РЕЗИНОКОРДНОЙ ОБОЛОЧКОЙ МОДЕЛИ Н-50

В.А. Адонин, С.А. Корнеев, В.С. Корнеев

Омский государственный технический университет  
[bobobadze@yandex.ru](mailto:bobobadze@yandex.ru)

В статье представлены результаты статических испытаний пневмопружины с резинокордной оболочкой модели Н-50. Эмпирически определены силовые характеристики и зависимость внутреннего объема пневмоэлемента при нулевом избыточном давлении. Данный результат имеет важное прикладное значение, позволят сопоставлять математические модели пневмоэлементов реальному объекту, тем самым получать более достоверные данные о рабочих характеристиках амортизирующих устройств

Ключевые слова: пневмоэлемент, пневмопружина, резинокордная оболочка, нагрузочная характеристика, силовая характеристика

Для верификации математических моделей взаимодействия физических объектов необходимо обладать достаточно точными экспериментальными данными. В данной работе приведены результаты испытаний по определению силовых характеристик и внутреннего объема пневмоэлемента (ПЭ) с резинокордной оболочкой (РКО) модели Н-50 (рис. 1) при нулевом избыточном давлении и нагрузочных характеристик ПЭ.

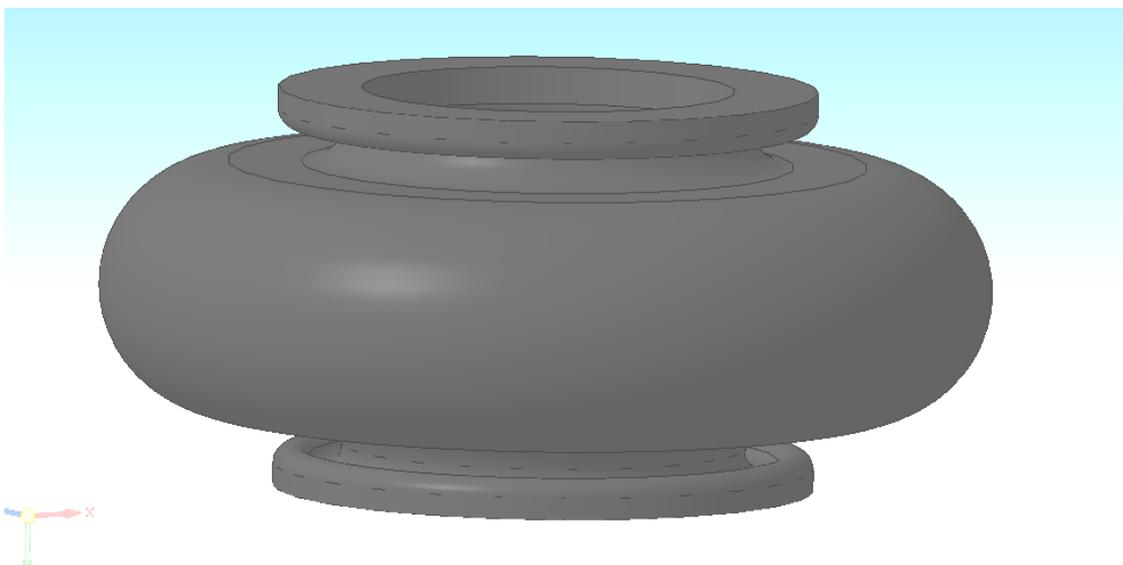


Рис. 1. Оболочка резинокордная пневматическая баллонного типа 250-100 модели Н-50

### **Объем ПЭ с РКО модели Н-50 при нулевом избыточном давлении**

По методике, описанной в [1], проведено три независимых испытания по определению объема оболочки при нулевом избыточном давлении  $V_*(x)$ , результаты которых представлены на рис. 2.

Для аналитического описания полученной эмпирической зависимости использовалось квадратичное уравнение регрессии:

$$V_*(x) = a_V + b_V(x - x_0) + c_V(x - x_0)^2, \quad (1)$$

где  $x_0 = 112$  мм – координата ПЭ в его среднем положении. Методом наименьших квадратов получены следующие значения коэффициентов регрессии:

$$a_V = 2.834 \text{ литр}, \quad b_V = 0.226 \text{ литр/см}, \quad c_V = -0.012 \text{ литр/см}^2. \quad (2)$$

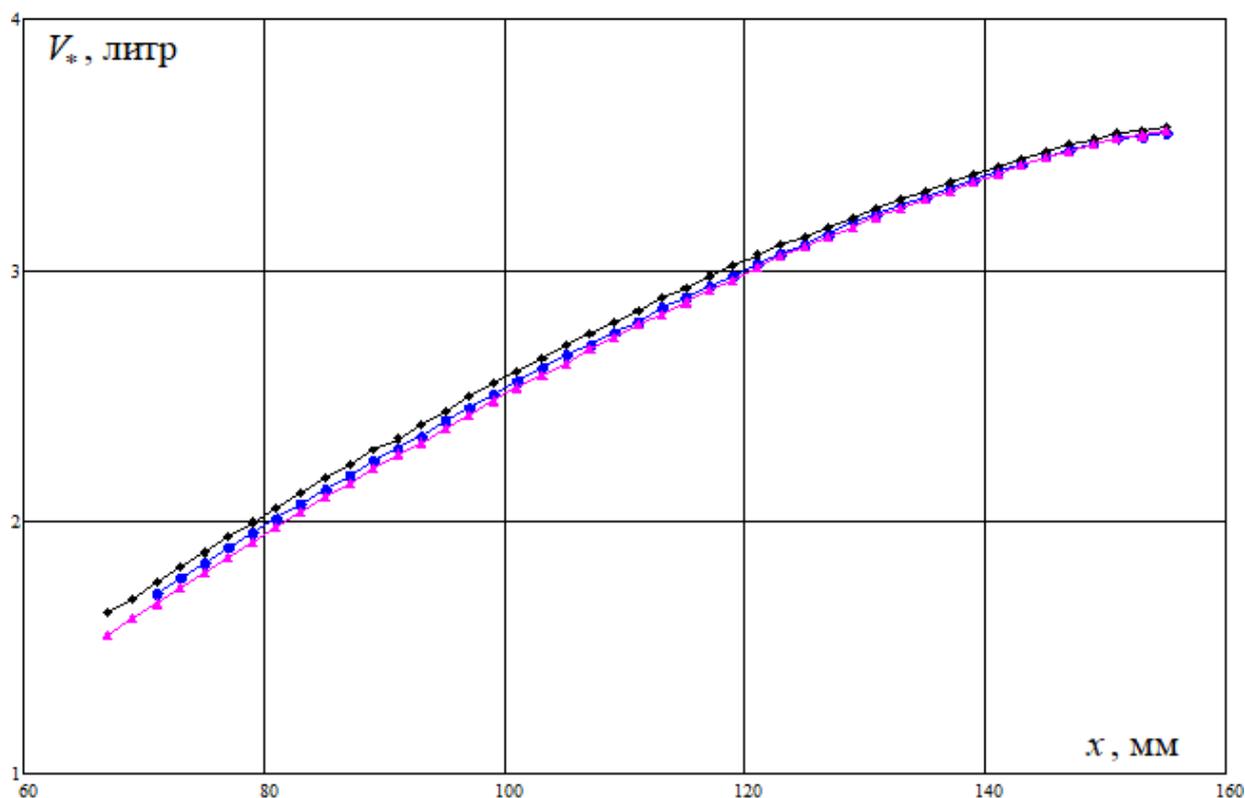


Рис. 2. Зависимость объема РКО модели Н-50 от координаты ПЭ при нулевом избыточном давлении: ● – испытание 1; ◆ – испытание 2; ▲ – испытание 3

Физический смысл коэффициентов (2) можно пояснить через следующие выражения для объема ПЭ и его эффективной площади:

$$V_*(x) = V(x) \Big|_{p=p_{atm}}, \quad F_{*eff}(x) = \frac{dV(x)}{dx} \Big|_{p=p_{atm}}. \quad (3)$$

Получается, что

$$a_V = V_*(x_0), \quad b_V = F_{*eff}(x_0), \quad c_V = F'_{*eff}(x_0). \quad (4)$$

Здесь штрихом обозначена производная по координате  $x$ . Эмпирическая зависимость (1) при значениях (2) представлена на рис. 3.

Среднеквадратическая ошибка отдельного измерения составила  $s_V = 0.026$  литр, среднеквадратическая ошибка среднего  $\sigma_V = 2.242 \cdot 10^{-3}$  литр, а средняя относительная ошибка  $\varepsilon_V = 0.9\%$ .

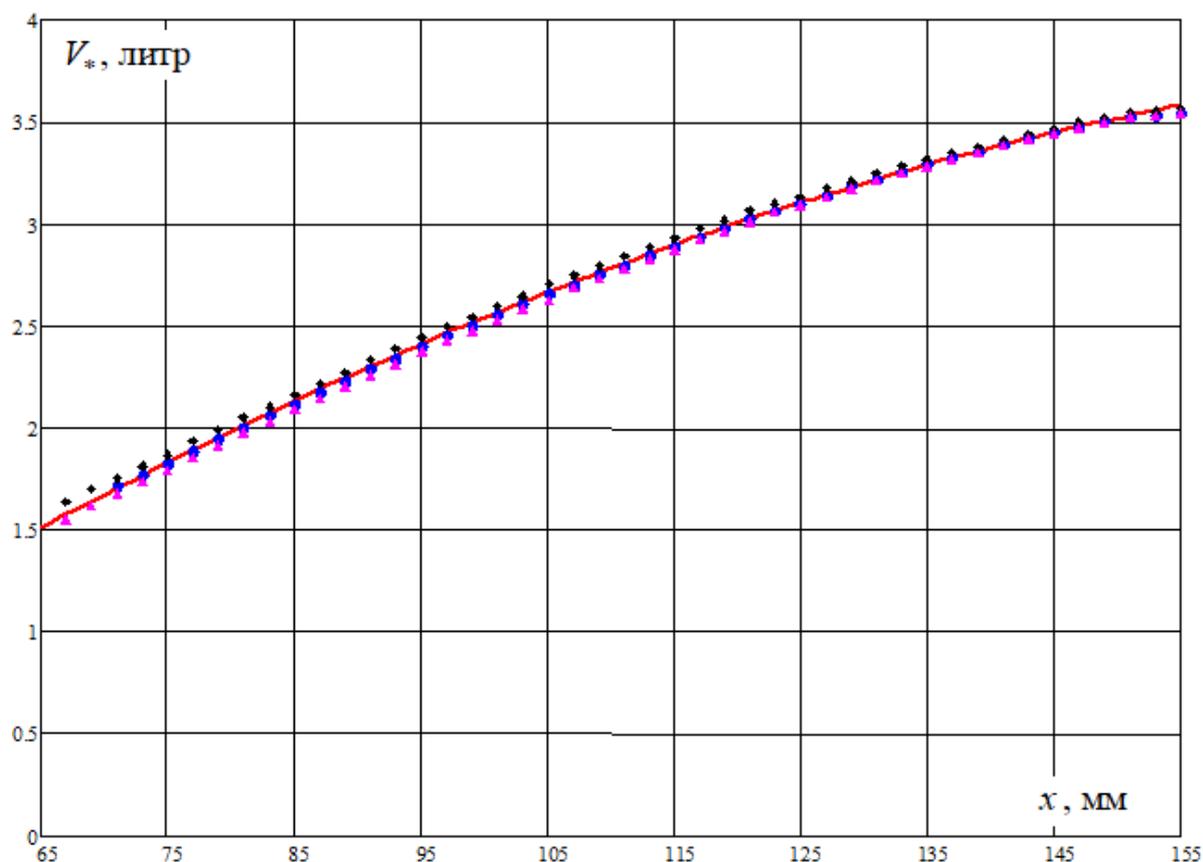


Рис. 3. Эмпирическая зависимость (сплошная линия) и опытные данные (точки) для объема РКО модели Н-50 по уравнению регрессии (1)

### Результаты статических испытаний ПЭ с РКО модели Н-50

Для математического описания статических (равновесных) характеристик ПЭ с РКО модели Н-50 проведены восемь независимых испытаний с управлением по перемещению при разных значениях начальной координаты ПЭ  $x_*$  (рис. 3): 145 мм, 140 мм, 135 мм, 125 мм, 115 мм, 110 мм, 105 мм, 100 мм. Испытания проводились по методике, описанной в статье [1].

Проиллюстрируем порядок обработки первичных опытных данных на примере испытания, проведённого при  $x_* = 140$  мм. Для других значений начальной координаты ПЭ использовалась аналогичная процедура.

При заданном ступенчатом законе изменения координаты ПЭ (рис. 4, а) определялись усилие ПЭ (рис. 4, б) и избыточное давление в рабочей среде (рис. 4, в), в качестве которой использовалась кипячёная вода. На каждой ступени испытания после изменения координаты на заданную величину (шагом 5 мм, с постоянной скоростью 5 мм/мин) устанавливалась длительная выдержка 10...60 мин, в течение которой протекал процесс релаксации усилия ПЭ (рис. 4, б) и избыточного давления (рис. 4, в) к своему равновесному состоянию. Причиной релаксации является вязкоупругость резинокордного композита РКО и связанное с ней изменение объёма оболочки (рис. 4, г). В ходе выдержки при неизменной координате ПЭ объём оболочки под действием избыточного давления медленно увеличивается, стремясь к некоторому предельному (равно-

весному) значению. Одновременно с этим из-за малой сжимаемости рабочего тела (воды) даже незначительное увеличение объёма (на сотые доли процента) приводит к существенному спаду давления и, как следствие, усилия ПЭ. Процесс перехода в равновесное состояние является крайне длительным и занимает много времени для каждой ступени. Поэтому в испытаниях достичь равновесного состояния на каждой ступени за приемлемый срок не удавалось, о чём свидетельствует индикаторная диаграмма на рис. 5.

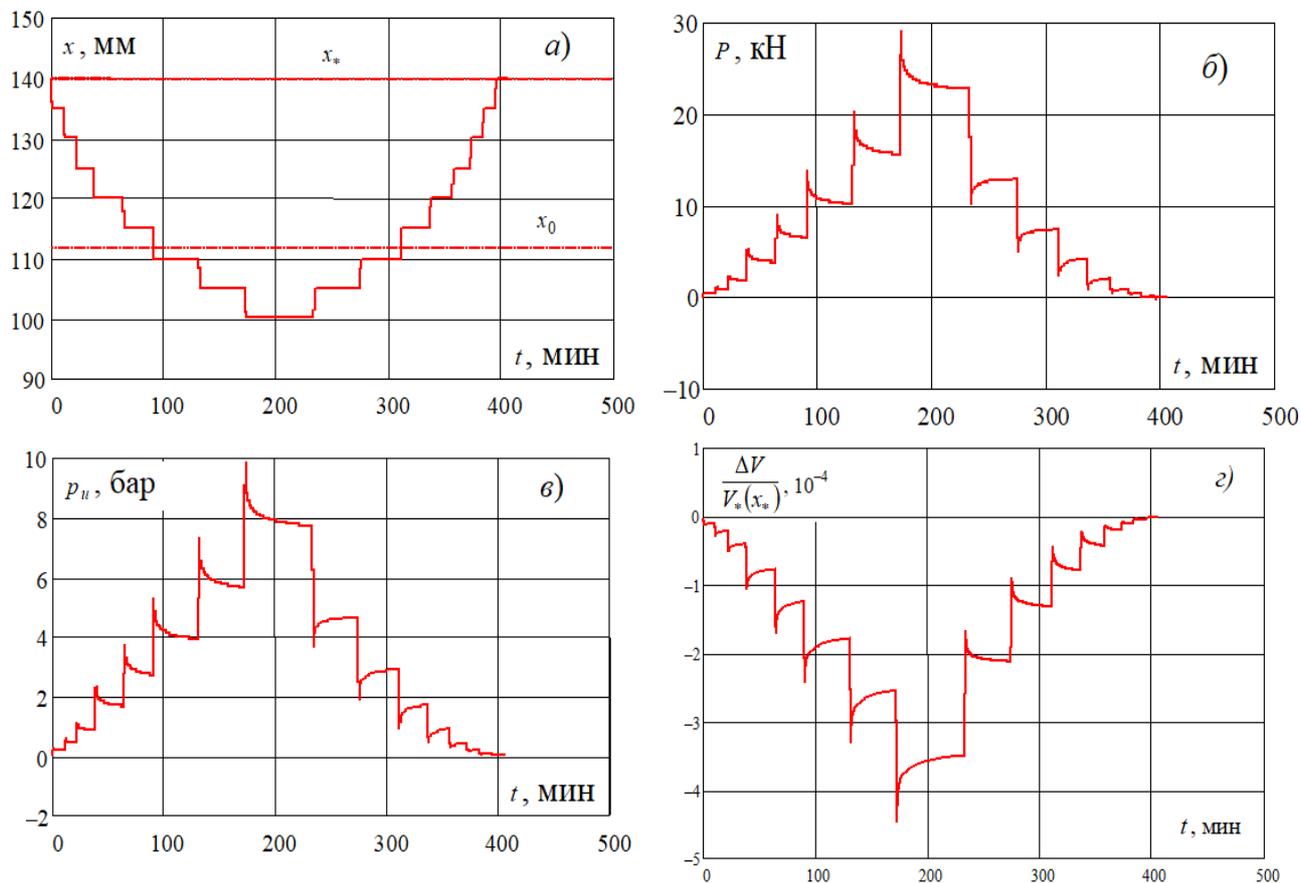


Рис. 4. Первичные данные испытания ПЭ с РКО модели Н-50 ( $x_* = 140$  мм, рабочая среда – вода): *a* – координата ПЭ; *б* – усилие ПЭ; *в* – избыточное давление; *г* – относительное изменение объёма

Равновесные значения давления  $p_{ueq}$  и усилия  $P_{eq}$  для каждой ступени изменения координаты ПЭ определялись расчётным путём. С этой целью использовалось релаксационное уравнение нелинейной вязкоупругости

$$\dot{p}_u = -\frac{|p_u - p_{ueq}|^{\alpha_p}}{\tau_p} \frac{p_u - p_{ueq}}{|p_u - p_{ueq}|}, \quad p_u|_{t=t_0} = p_{u0}, \quad (5)$$

где  $\tau_p$  – время релаксации,  $\alpha_p$  – показатель нелинейности,  $p_{u0}$  – значение избыточного давления в момент времени  $t = t_0$  в начале выдержки.

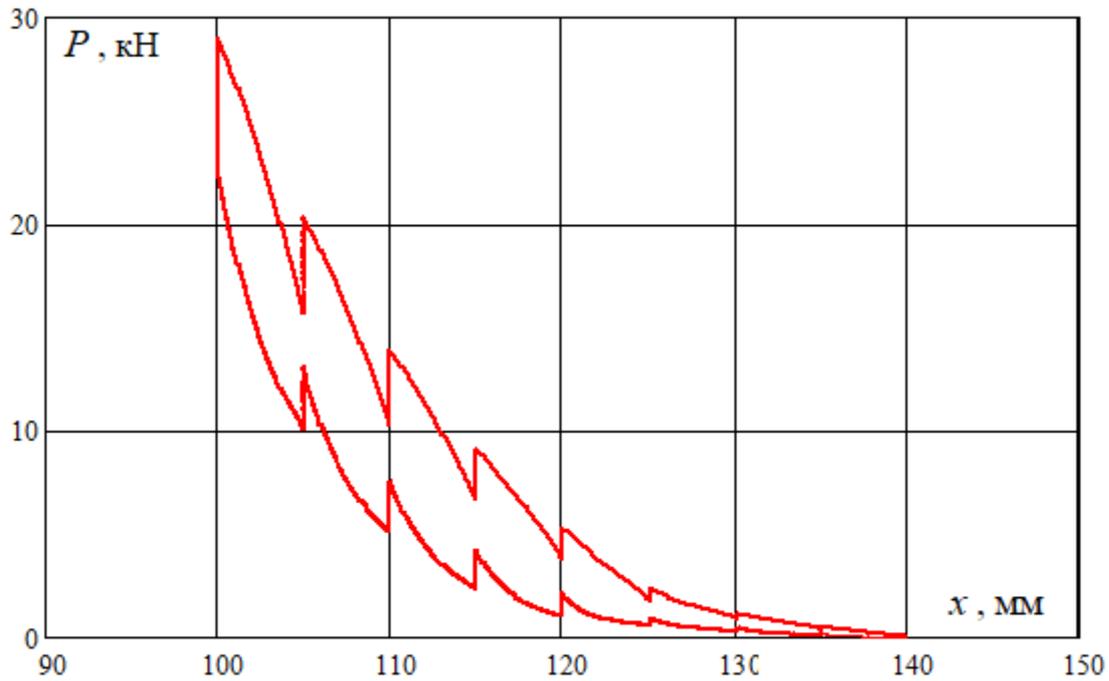


Рис. 5. Индикаторная диаграмма (рабочая среда – вода,  $x_* = 140$  мм)

Решение дифференциального уравнения (5) имеет следующий вид:

$$p_u(t) = \begin{cases} p_{ueq} + \left[ (p_{u0} - p_{ueq})^{1-\alpha_p} - (1-\alpha_p) \frac{t-t_0}{\tau_p} \right]^{\frac{1}{1-\alpha_p}} & \text{if } p_{u0} > p_{ueq}, \\ p_{ueq} - \left[ (p_{ueq} - p_{u0})^{1-\alpha_p} - (1-\alpha_p) \frac{t-t_0}{\tau_p} \right]^{\frac{1}{1-\alpha_p}} & \text{if } p_{u0} < p_{ueq}. \end{cases} \quad (6)$$

Результат применения уравнения регрессии (6) для описания процесса релаксации избыточного давления проиллюстрирован на рис. 6 для одной ступени нагрузки и разгрузки ПЭ при  $x = 130$  мм. Точность аппроксимации опытных данных достаточно высокая: относительная погрешность не превышает 1.5%. При этом время релаксации  $\tau_p = 2.0 \cdot 10^{26}$  мин, показатель нелинейности  $\alpha_p = 7.0$ .

При определении равновесного значения усилия  $P_{eq}$  считалось, что для каждой ступени изменения координаты ПЭ в процессе выдержки

$$P(t) - P_{eq} = C_p (p_u(t) - p_{ueq}), \quad (7)$$

где  $C_p$  – коэффициент пропорциональности. В каждом испытании и на каждой ступени соотношение (7) выполнялось с достаточно высокой относительной точностью (порядка 1.0...1.5%), о чём свидетельствует рис. 7.

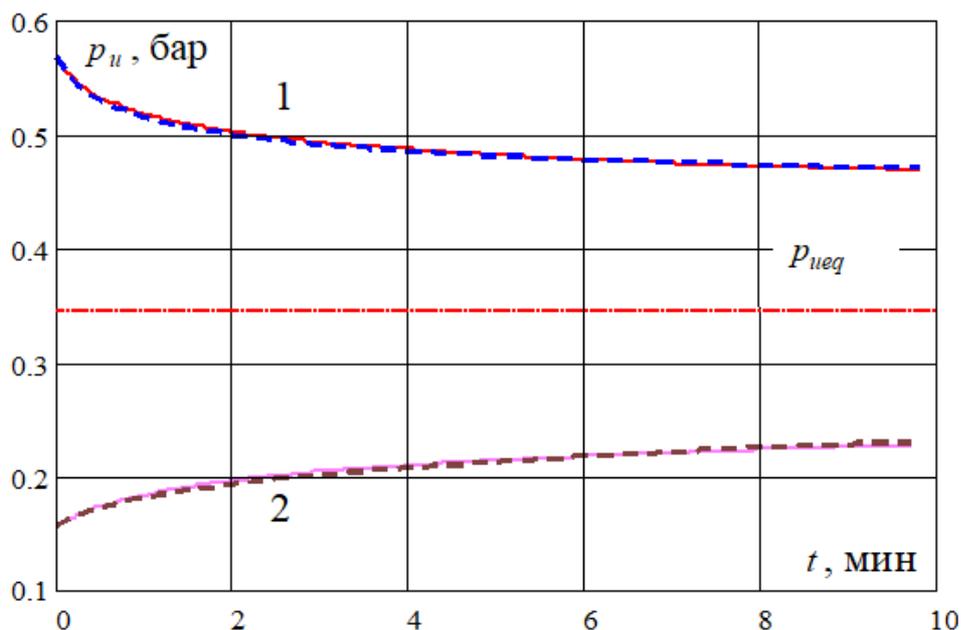


Рис. 6. Релаксация избыточного давления (рабочая среда – вода,  $x_* = 140$  мм) при постоянной координате  $x = 130$  мм: 1 – при нагружении; 2 – при разгрузке; сплошная линия – результат аппроксимации, пунктирная линия – данные опыта

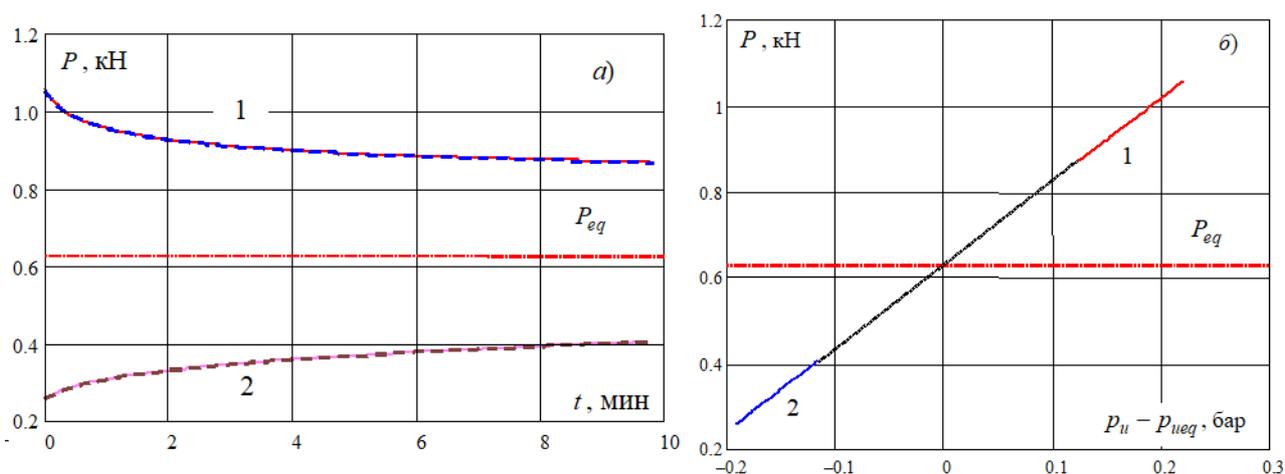


Рис. 7. Релаксация усилия ПЭ (рабочая среда – вода,  $x_* = 140$  мм) при постоянной координате  $x = 130$  мм: 1 – при нагружении; 2 – при разгрузке; а – в зависимости от времени; б – в зависимости от приращения давления; сплошная линия – результат аппроксимации, пунктирная линия – данные опыта

Результатом обработки опытных данных каждого испытания являются статические (равновесные) нагрузочные характеристики ПЭ для усилия (рис. 8, а), избыточного давления (рис. 8, б) и объёма (рис. 8, в). Данные характеристики с высокой точностью аппроксимируются полиномами пятой степени. Из-за малого изменения объёма (рис. 8, в) нагрузочные характеристики ПЭ для усилия (рис. 8, а) и избыточного давления (рис. 8, б) являются фактически изохорными характеристиками, получаемыми при постоянном объёме ПЭ.

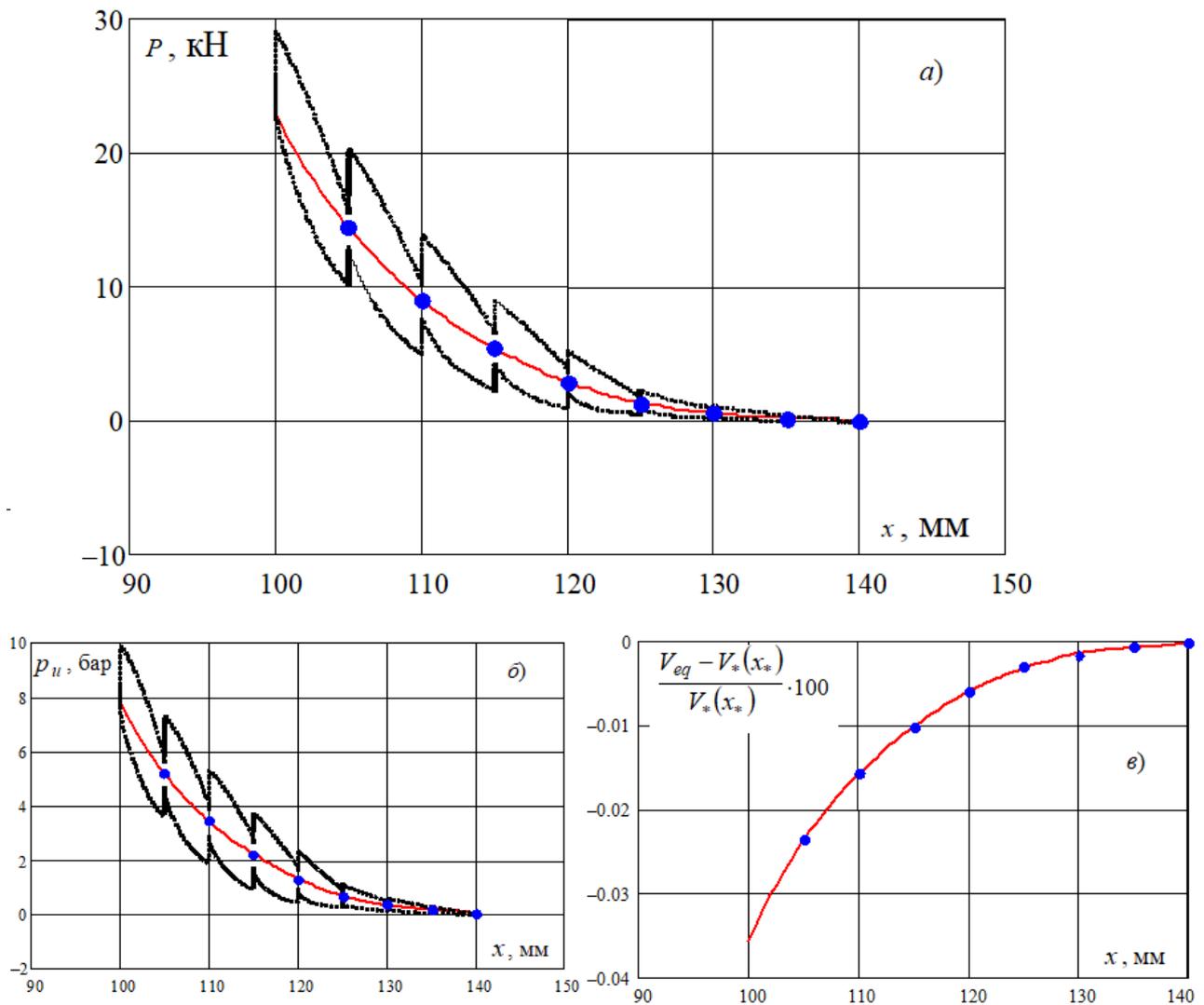


Рис. 8. Статические нагрузочные характеристики ПЭ с РКО модели Н-50 в отдельном испытании (рабочая среда – вода,  $x_* = 140$  мм): *a* – для усилия; *б* – для избыточного давления; *в* – для объёма; сплошная линия – по эмпирической зависимости (полиному 5-й степени); точки – опытные данные для равновесных состояний; штриховая линия – исходные опытные данные

Отличительные параметры проведённых статических испытаний сведены в таблице. Начальный объём ПЭ, имеющий место при нулевом избыточном давлении, определяется эмпирической зависимостью (1). Полученные статические (равновесные) нагрузочные характеристики ПЭ приведены на рис. 9 отдельно для избыточного давления и для усилия ПЭ.

Параметры проведённых статических испытаний

| Номер испытания                   | 1     | 2     | 3     | 4     | 5     | 6     | 7     | 8     |
|-----------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Начальная координата, $x_*$ мм    | 145   | 140   | 135   | 125   | 115   | 110   | 105   | 100   |
| Начальный объём $V_*(x_*)$ , литр | 3.450 | 3.374 | 3.291 | 3.108 | 2.901 | 2.788 | 2.670 | 2.545 |

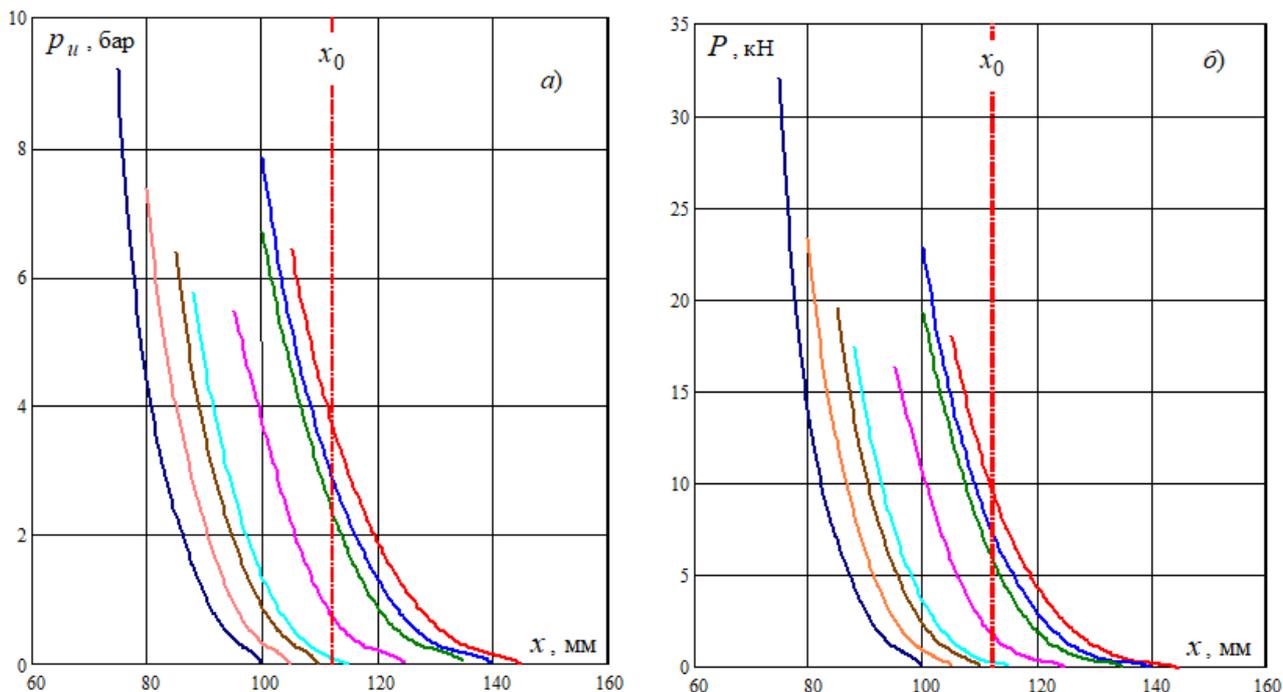


Рис. 9. Статические нагрузочные характеристики ПЭ с РКО модели Н-50 всей совокупности испытаний: *а* – для избыточного давления; *б* – для усилия

#### Литература

1. Адонин В.А. Экспериментальный стенд для исследования нагрузочных характеристик пневматических упругих элементов / В.А. Адонин, С.А. Корнеев, В.С. Корнеев, И.А. Пеньков, В.Н. Костюков // Россия молодая: передовые технологии – в промышленность: матер. VII Всеросс. научн.-техн. конф. – Омск: Изд-во ОмГТУ, 2017. – № 1. – С. 5-7.

### THE RESULTS OF EXPERIMENTAL STUDIES OF THE LOAD CHARACTERISTICS OF THE PNEUMOLOGIST WITH RUBBER-CORD ENVELOPES MODEL N-50

V.A. Adonin, S.A. Korneyev, V.S. Korneyev

Omsk State Technical University

The article presents the results of static tests air springs with rubber-cord envelopes model N-50. The dependence of the internal volume of the pneumatic element at zero excess pressure is empirically determined. This result has important practical value, will allow the comparison of the mathematical model of the pneumatic elements to the real object, thereby to obtain more reliable data on the operating characteristics of damping devices

Keywords: pneumatic element, air springs, rubber-cord envelopes, load characteristics, power characteristics

СТРУКТУРНЫЕ ФУНКЦИИ ВНУТРЕННЕГО  
ВРАЩЕНИЯ В 1,1,1 – ТРИФТОРГЕКСАНЕА.В. Котомкин<sup>1</sup>, Н.П. Русакова<sup>1</sup>, В.В. Туровцев<sup>1,2</sup>, Ю.Д. Орлов<sup>1</sup><sup>1</sup>Тверской государственный университет[prospectpobedy@mail.ru](mailto:prospectpobedy@mail.ru)<sup>2</sup>Тверской государственный медицинский университет

Прецизионный расчет термодинамических свойств органических соединений требует учета вкладов всех внутренних вращений. В работе найдены пять структурных функций  $F(\varphi)$ , описывающих вращения вокруг связей С-С в молекуле 1,1,1-трифторгексана  $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4-\text{CF}_3$

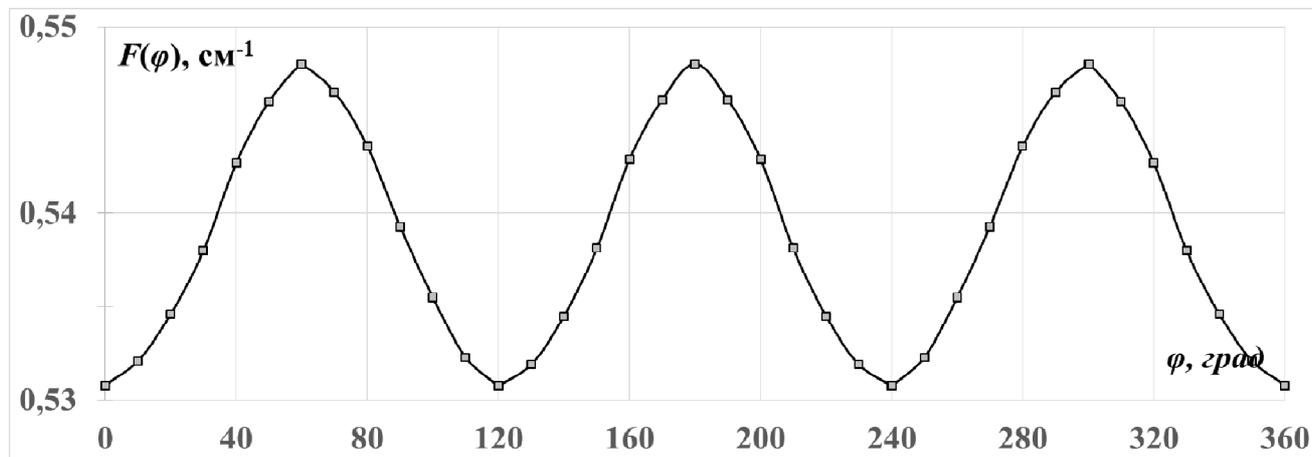
Ключевые слова: внутреннее вращение, структурная функция, 1,1,1-трифторалканы

Внутреннее вращение дает существенный вклад в термодинамические свойства веществ. Решение торсионного уравнения Шредингера, позволяющее получить всю информацию об этой степени свободы [1, 2], требует знание потенциальной  $V(\varphi)$  и структурной  $F(\varphi)$  функций.

Расчёт равновесного строения молекулы  $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4-\text{CF}_3$  и оптимизация структур, возникающих при повороте волчков вокруг всех С-С связей на каждые  $10^\circ$ , были выполнены в программе GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++g(3df,3pd) [3]. Для каждого вращения методом Питцера [4] найдены структурные функции  $F(\varphi)$  (рис. 1-5).

Функции  $F(\varphi)$  для  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4-\text{CF}_3$  и  $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4\text{CF}_3$  имеют по три эквивалентных ямы (рис. 1 и 2), соответственно с максимальными значениями  $0,54 \text{ см}^{-1}$  и  $5,56 \text{ см}^{-1}$  в точках  $\varphi = 60^\circ, 180^\circ$  и  $300^\circ$  и минимумами  $0,53 \text{ см}^{-1}$  и  $5,51 \text{ см}^{-1}$  при  $\varphi = 0^\circ, 120^\circ$  и  $240^\circ$ .

$F(\varphi)$  вращения  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3-\text{CH}_2\text{CF}_3$  симметрична относительно глобально-го максимума  $F(\varphi)=0,51 \text{ см}^{-1}$  при  $\varphi = 180^\circ$ . Локальный максимум  $F(\varphi)=0,47 \text{ см}^{-1}$  находятся в точке  $\varphi = 0^\circ$  и два одинаковых минимума  $F(\varphi)=0,39 \text{ см}^{-1}$  в точках  $\varphi = 90$  и  $\varphi = 270^\circ$  (рис. 3).

Рис. 1. Структурная функция  $F(\varphi)$  вращений  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4-\text{CF}_3$

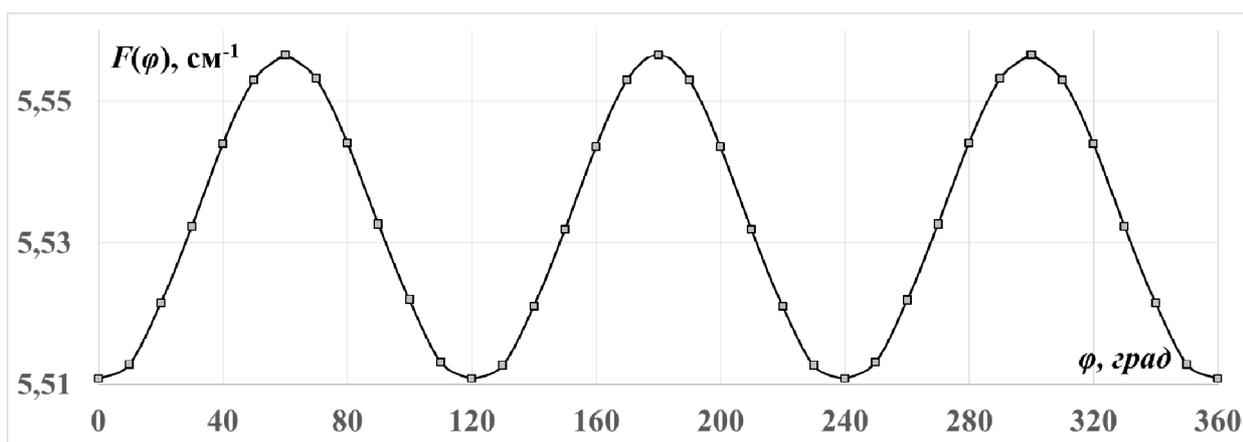


Рис. 2. Структурная функция  $F(\varphi)$  вращения  $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4\text{CF}_3$

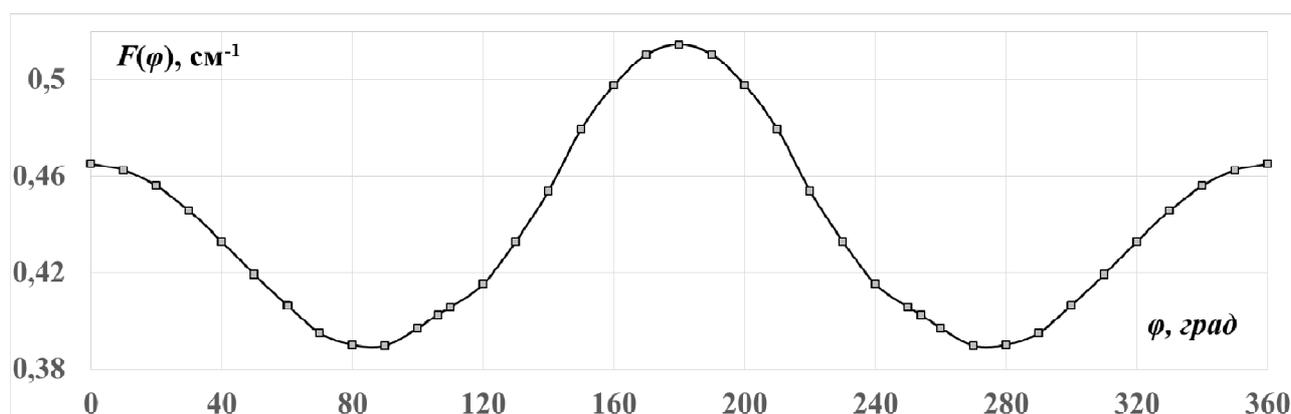


Рис. 3. Структурная функция  $F(\varphi)$  вращения  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3-\text{CH}_2\text{CF}_3$

Функции, описывающие вращения  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_3$  и  $\text{CH}_3\text{CH}_2-(\text{CH}_2)_3\text{CF}_3$ , также симметричны; точкам  $\varphi = 180^\circ$  соответствуют глобальные максимумы величиной  $0,80 \text{ см}^{-1}$  и  $0,85 \text{ см}^{-1}$ , а  $\varphi = 0^\circ$  – локальные максимумы  $0,69 \text{ см}^{-1}$  и  $0,77 \text{ см}^{-1}$ . Минимумы для этих вращений имеют значения  $F(80^\circ) = F(280^\circ) = 0,66 \text{ см}^{-1}$  и  $F(90^\circ) = F(270^\circ) = 0,74 \text{ см}^{-1}$  соответственно (рис. 4, 5).

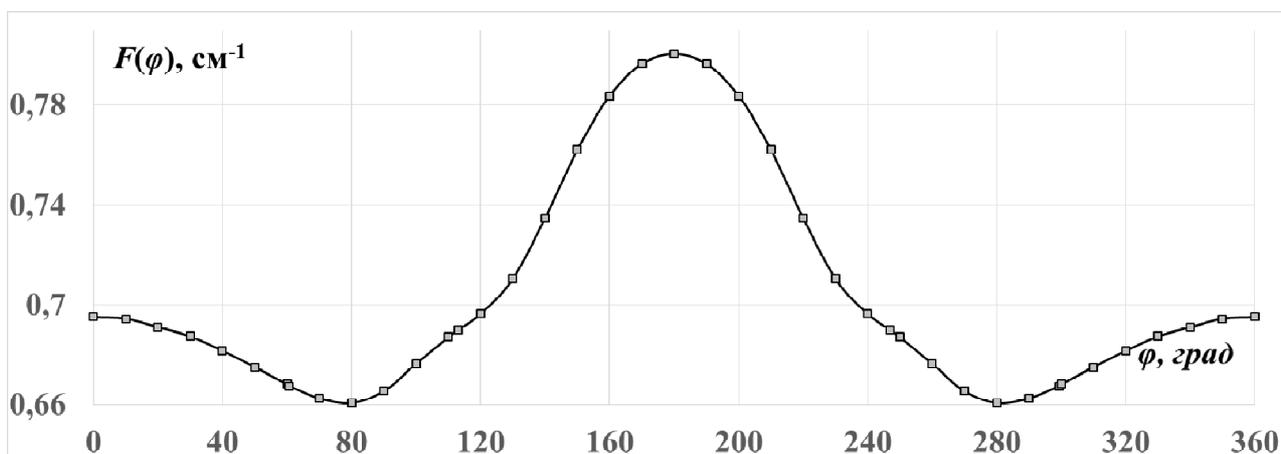


Рис. 4. Структурная функция  $F(\varphi)$  вращения  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2-(\text{CH}_2)_2\text{CF}_3$

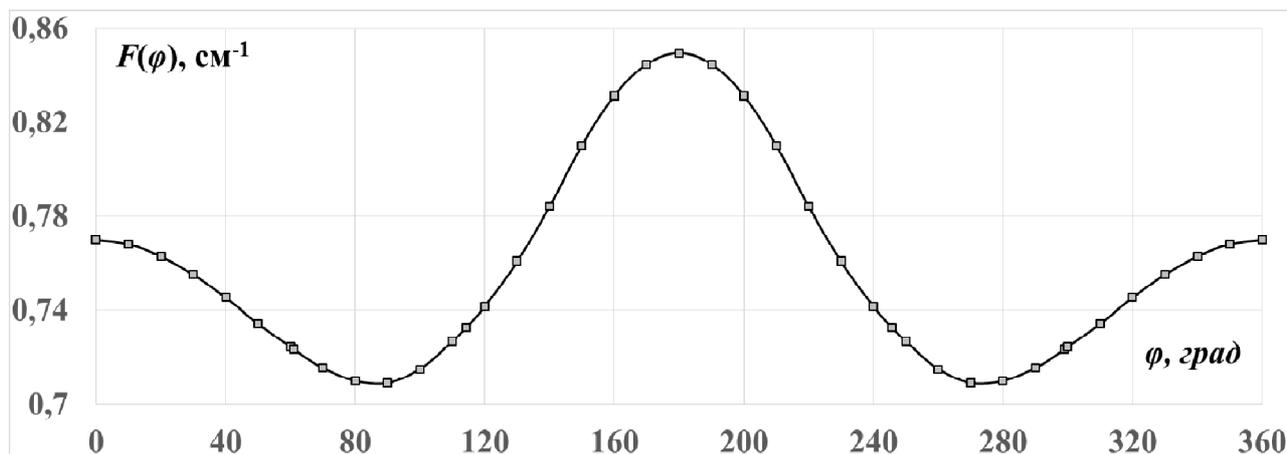


Рис. 5. Структурная функция  $F(\varphi)$  вращения  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{--CH}_2\text{CF}_3$

Статья выполнена в рамках выполнения научно исследовательской работы «Разработка программного комплекса для расчета термодинамических свойств органических соединений» по договору с Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере №9498ГУ/2015 от 28.12.2015.

Работа выполнена в рамках проекта № 4.6469.2017/Б4 госзадания Минобрнауки РФ.

#### Литература

1. Туровцев В.В., Белоцерковский А.В., Орлов Ю.Д. Решение одномерного торсионного уравнения Шредингера с периодическим потенциалом общего вида // Оптика и спектроскопия. 2014. – Т. 117. – № 5. – С. 731.
2. Орлов Ю.Д., Туровцев В.В., Цирулев А.Н. Решение одномерного торсионного уравнения Шредингера в комплекснозначном базисе, содержащем функции Матье // Оптика и спектроскопия. Т. 119. – № 2. – 2015. – С. 199-203.
3. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. at all. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.
4. Kenneth S. Pitzer /Energy Levels and Thermodynamic Functions for Molecules with Internal Rotation/ The Journal of Chemical Physics, 1946, 14, 4, p. 239-243.

## STRUCTURAL FUNCTIONS OF INTERNAL ROTATION IN 1,1,1-TRIFLUORINEHEXANE

A.V. Kotomkin<sup>1</sup>, N.P. Rusakova<sup>1</sup>, V.V. Turovtsev<sup>1,2</sup>, Yu.D. Orlov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Tver State University

<sup>2</sup>Tver State Medical University

Precise computation of the thermodynamic properties of organic compounds requires taking into account contributions of internal rotation. In this work 5 structural functions  $F(\varphi)$  for the internal rotation around C-C bound in 1,1,1-trifluorinehexane  $\text{CH}_3\text{--}(\text{CH}_2)_4\text{--CF}_3$  have been made

Keywords: internal rotation, structural function, 1,1,1-trifluorinealkanes

ПРОГРАММНО-АППАРАТНАЯ ЗАЩИТА ИНЖЕНЕРНЫХ СИСТЕМ  
«УМНОГО ДОМА»

К.В. Маркина, И.А. Мещеряков, Д.А. Солопов, И.А. Дьяков

Тамбовский государственный технический университет  
[KsuMarkina96@yandex.ru](mailto:KsuMarkina96@yandex.ru), [m.ivan8@mail.ru](mailto:m.ivan8@mail.ru), [solopov.dmitriy@mail.ru](mailto:solopov.dmitriy@mail.ru)

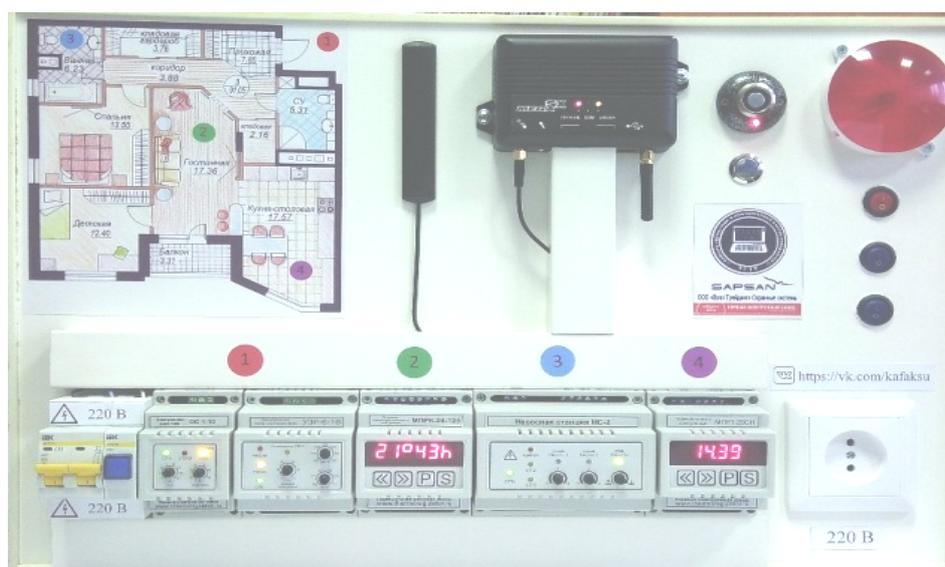
В данной статье рассмотрена программно-аппаратная защита инженерных систем «Умного дома». Авторами разработан комплекс программно-аппаратной защиты инженерных систем умного дома, который представляет собой системную интеграцию охранных GSM сигнализаций, микропроцессорных и аналоговых приборов контроля и управления

Ключевые слова: программно-аппаратная защита, инженерные системы, системная интеграция, инженерно-техническое оборудование

Управление системами умного дома – современное, перспективное направление цифровизации жизни человека. Умный дом представляет собой комплекс программно-аппаратных средств, служащих для управления инженерно-техническим оборудованием и бытовыми устройствами в доме или квартире [1].

Состав системы может быть различен и зависит от решаемых задач. Наиболее востребованными являются подсистемы управления: микроклиматом (отопление, кондиционирование, регулирование влажности); энергопотреблением (освещение, бытовые электрические приборы); доступом (охрана) [2].

Авторами разработан комплекс программно-аппаратной защиты инженерных систем умного дома и представляет собой системную интеграцию охранных GSM сигнализаций, микропроцессорных и аналоговых приборов контроля и управления (см. рисунок).



Комплекс программно – аппаратной защиты инженерных систем умного дома

GSM сигнализации предназначены для автономной охраны квартир, магазинов, частных домов, дач, гаражей и других объектов от несанкционированного проникновения, пожара, утечки газа, протечки воды и других событий. Микропроцессорные и аналоговые приборы позволяют контролировать в реальном времени температуру, влажность, появление воды в зоне установки датчиков, сопротивление изоляции, предельно допустимые токи и напряжение потребителей, повышение или понижение напряжения любого количества фаз и при обрыве или нарушении порядка их чередования [3].

Системная интеграция заключается в разработке комплексных решений программно-аппаратной защиты объектов различного назначения. Решаются задачи: выбора технического и программного обеспечений, разработки устройств согласования и коммутации сигналов, разработки алгоритмов и программного обеспечения; автономное тестирование компонент; изготовление и комплексное тестирование прототипа.

Технические характеристики комплекса.

GSM сигнализация:

- Напряжение питания – 9...16 В.
- Ток, потребляемый в режиме «охрана» – не более 40 мА.
- Количество беспроводных зон – 10.
- Количество беспроводных датчиков на зону – 10.
- Дальность радиоканала прямой видимости – 100 м.
- Рабочая частота радиоканала – 433 МГц.
- Количество проводных контролируемых выходов – 6.
- Рабочий интервал температур +20 ... +40 °С.

Приборы контроля и управления:

- Контроль температуры и влажности от –40 до +125°С.
- Датчик влажности SHT21.
- Встроенный таймер реального времени с учетом рабочих и выходных дней (5-, 6-, 7-дневная рабочая неделя).

– Принцип определения наличия воды – кондуктометрический или контактными датчиками.

- Напряжение питания датчиков – переменное 9-12 В.
- Гальваническая развязка датчиков – через трансформатор с электрической прочностью изоляции 6 кВ.

– Независимые чувствительные каналы – уровень 1, уровень 2, уровень 3 аварийный.

- Контролируемая сеть 220 В.
- Частота контролируемой сети 50-60 Гц.
- Время задержки реле регулируемое 0-10 сек.
- Нижний порог срабатывания защиты – регулируемое 165-215 В.
- Верхний порог срабатывания защиты – регулируемое 225-255 В.
- Рабочий интервал температур –24 ... +50°С.

- Рабочая влажность воздуха – до 80% при температуре 25 °С.
- Рабочее атмосферное давление – 84 – 106,7 кПа.

Индустриальные партнёры проекта: Первый электронный завод (г. Санкт-Петербург), ООО "Вэлл Трейдинг" Охранные системы (г. Санкт-Петербург).

#### Литература

1. Гололобов В.Н. «Умный дом» своими руками / В.Н. Гололобов. – М.: НТ Пресс. 2012. – 416 с.
2. Харке В. Умный дом. Объединение в сеть бытовой техники и систем коммуникаций в жилищном строительстве: пер. с нем. / В. Харке. – Техносфера, 2013. – 292 с.
3. Официальный сайт ООО "Вэлл Трейдинг" Охранные системы. Режим доступа: <https://sbis.ru/contragents/7804465802/780401001>.

## HARDWARE-SOFTWARE PROTECTION OF "SMART HOUSE" ENGINEERING SYSTEMS

K.V. Markina, I.A. Meshcheryakov, D.A. Solopov, I.A. Dyakov

Tambov State Technical University

In this article, the software and hardware protection of engineering systems of the "Smart House" is considered. The authors developed a complex of software and hardware protection for smart house systems, which is a system integration of GSM security alarms, microprocessor and analog control and control devices

Keywords: hardware-software protection, engineering systems, system integration, the technical equipment

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОННОГО ПУЧКА В ЛАЗЕРНОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРЕ ЭМАЛ-2

П.О. Медакин<sup>1</sup>, А.Г. Шеин<sup>1</sup>, А.М. Потапов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Волгоградский государственный технический университет

<sup>2</sup>Институт химии высокочистых веществ РАН

[pawel.med@yandex.ru](mailto:pawel.med@yandex.ru)

Рассмотрена динамика ионного пучка в лазерном масс-спектрометре ЭМАЛ-2. Реализована численная модель, построенная на методе «крупных частиц», учитывающая влияние полей пространственного заряда и взаимодействие заряженных частиц с полем электродинамической системы. Проведена серия численных экспериментов и их сравнение с данными полученными экспериментально

Ключевые слова: метод «крупных частиц», лазерный масс-спектрометр, метод «частица – частица»

Классической, весьма распространенной и испытанной на большом количестве приборов схемой работы статических масс-спектрометров является схема Маттауха-Герцога. Возможность создания на ее основе масс-спектрометров с измененными ионно-оптическими схемами [1] и не исчерпанный запас модернизации [2] привлекает внимание исследователей.

В настоящей работе рассматривается движение ионного потока в лазерном масс-спектрометре ЭМАЛ-2 (рис. 1), который работает по вышеупомянутой схеме.

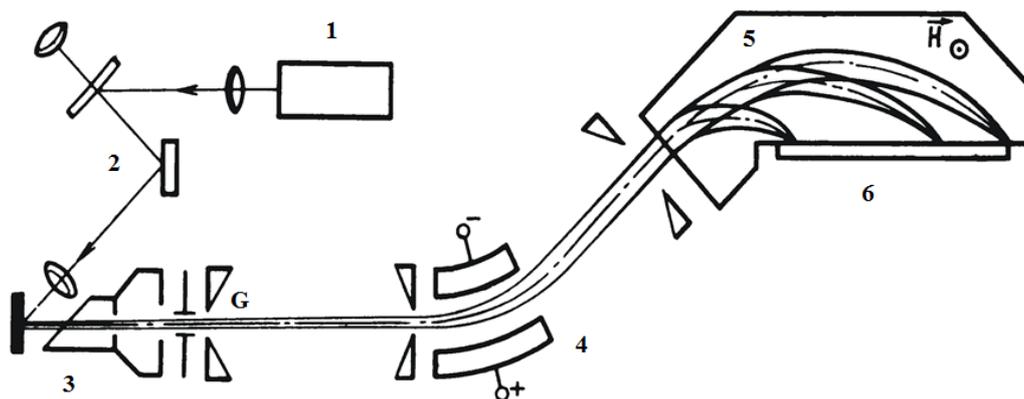


Рис. 1. Схема лазерного масс-спектрометра с двойной фокусировкой ЭМАЛ-2: 1 – лазер, 2 – оптическая система, 3 – источник ионов с фокусирующей системой, 4 – электростатический анализатор, 5 – магнитный анализатор, 6 – фотопластинка

Будем считать, что ионный пучок уже создан источником ионов и фокусирующей системой. Энергия ионов на выходе из фокусирующей системы составляет 25 кэВ, заряд ионного пучка, образованного одним лазерным импульсом, составляет 1 пКл, напряжение на каждой из пластин электростатического анализатора составляет 900 В, а магнитное поле внутри магнитного анализатора 1.3 Тл [3]. Телесный угол движения ионов ограничивается при прохождении  $G$  и  $\alpha$  щелей, поэтому будем считать, что ионы имеют только продольную компоненту скорости.

Математическая модель построена на методе крупных частиц. Уравнение движения имеет вид :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2, \quad (1)$$

где  $\vec{F}_1$  – силы кулоновского взаимодействия между частицами,  $\vec{F}_2$  – силы взаимодействия ионного пучка с статическим электрическим и магнитным полем масс анализаторов. Для численного решения дифференциального уравнения (1) используется метод Рунге-Кутты четвертого порядка, так как данный метод обладает хорошей сходимостью, приемлемой точностью и невысокой вычислительной сложностью.

Для численного нахождения распределения поля внутри электростатического анализатора используется принцип суперпозиции полей от зарядов, находящихся на каждой из пластин. Преобразование цилиндрических обкладок в аналогичный плоский конденсатор, позволяет найти суммарный заряд на каждой из них. Далее, распределив заряды по обкладкам анализатора, рассчитав и просуммировав поля от каждого из них, получаем распределение электростатического поля внутри анализатора (рис. 2).

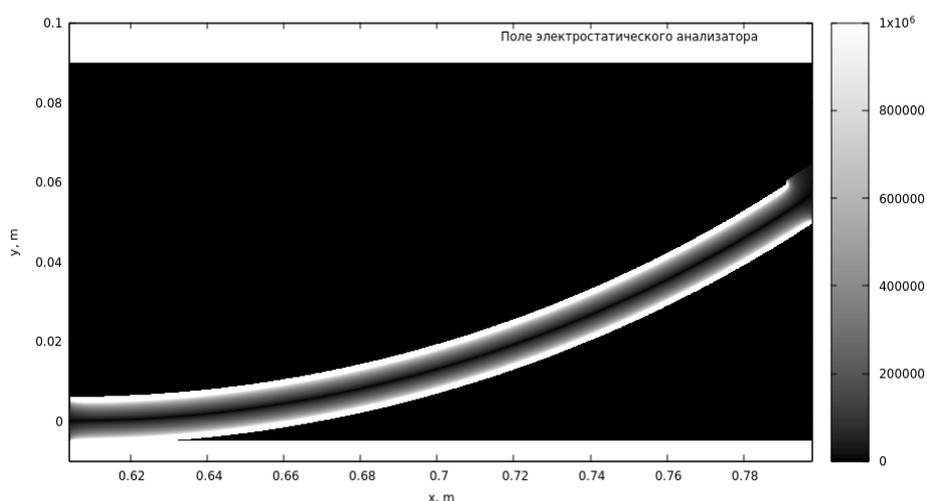


Рис. 2. Распределение модуля поля между пластинами электростатического анализатора

Для реализации данной численной модели написана программа. Траектории движения ионов цинка и меди, рассчитанные с ее помощью представлены на рис. 3.

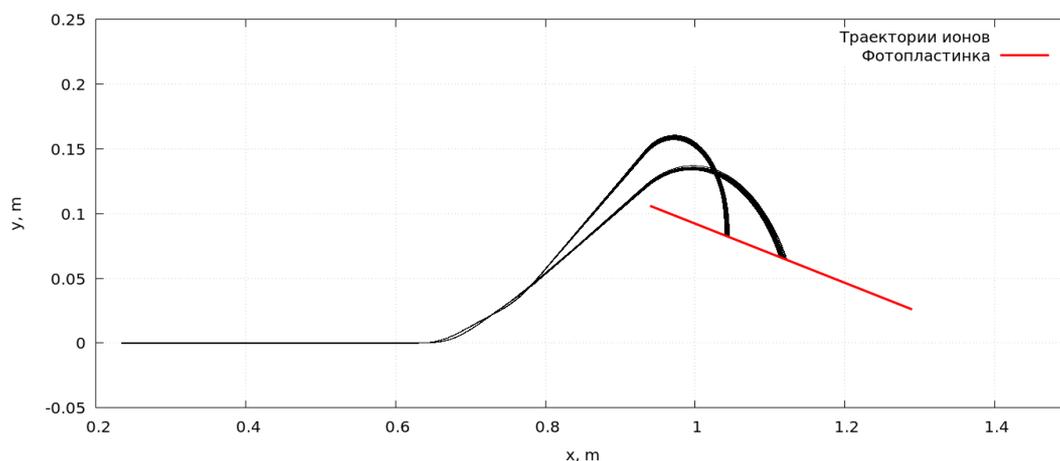


Рис. 3. Траектории движения ионов  $^{63}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{63}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{1+}$

Сравнение распределений ионов цинка и меди на фотопластине, полученных численно и экспериментально, представлено на рис. 4.

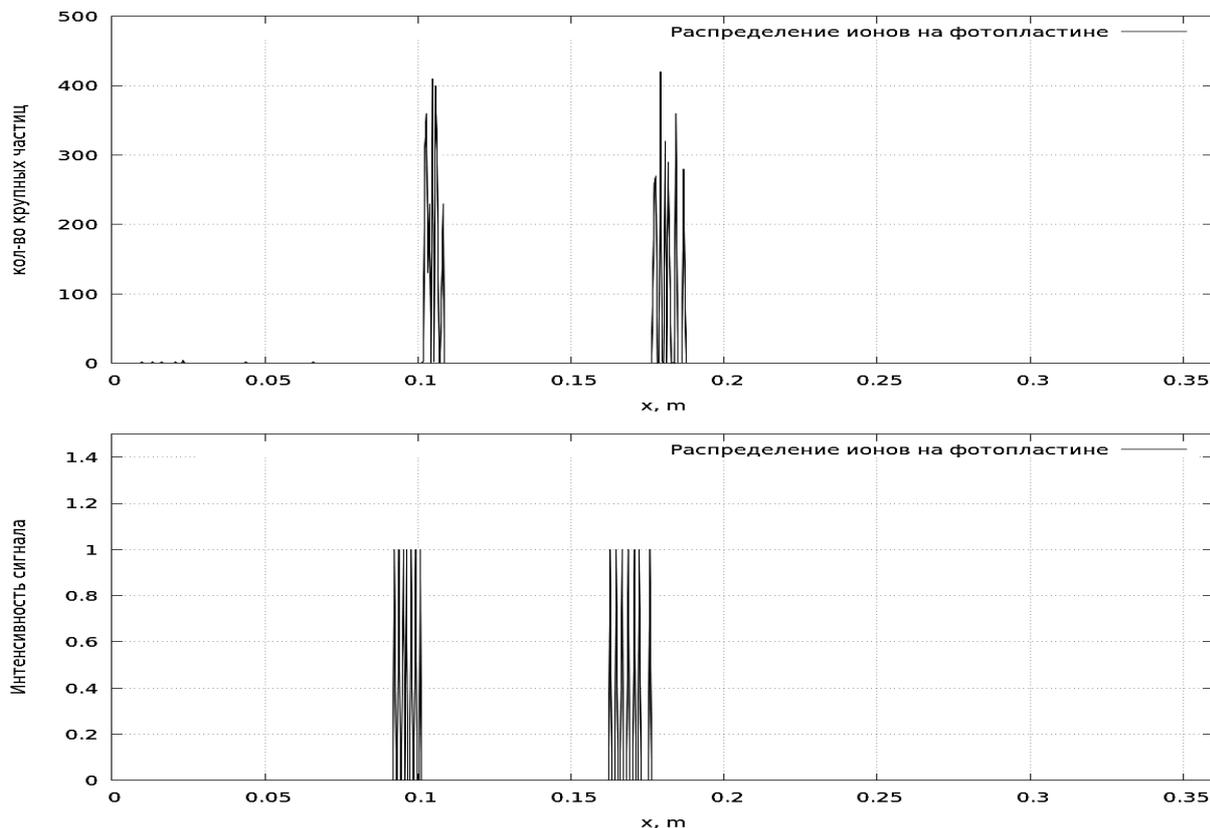


Рис. 4. Распределение ионов  $^{63}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{63}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{1+}$  на фотопластине: а – численное, б – экспериментальное

В дальнейшем планируется использование, полученного программного комплекса для расчета динамики ионного пучка в тандемном лазерном масс рефлектроне [4].

## Литература

1. Ионно-оптическая схема для высокочувствительного, портативного масс-спектрографа / В.Т. Коган [и др.] // Журнал технической физики. – 2005. – Т. 75. – Вып. 6. – С. 121-125.
2. Исследование лазерно-плазменного источника ионов с системой постоянных кольцевых магнитов/ С.Н. Мордик [и др.]// Журнал технической физики. – 2017. – Т. 87. – Вып. 5. – С. 788-790.
3. Быковский, Ю.А. Лазерная масс-спектрометрия / Ю.А. Быковский, В.Н. Неволин. – Москва: Энергоатомиздат, 1985. – 128 с.
4. Определение водорода и кислорода в халькогенидных стеклах на тандемном лазерном масс-рефлектроне / В.В. Безруков [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2002. – 57. – С. 378-382.

## MODELING OF THE MOVEMENT OF THE ION BEAM IN LASER MASS-SPECTROMETER EMAL-2

P.O. Medakin<sup>1</sup>, A.G. Shein<sup>1</sup>, A.M. Potapov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Volgograd State Technical University

<sup>2</sup>Institute of Chemistry of High-Purity Substances of the RAS

The movement of the ion flow in laser mass-spectrometer Emal-2 is considered. The numerical model constructed by a method "large - particles", considering influence of fields of a space charge and interaction of the charged particles with the field of electrodynamic system is realized. A series of numerical experiments and their comparison with the data obtained experimentally is conducted

Keywords: method of "large particles", laser mass spectrometer, the method of "particle – particle"

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДБОРА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В АНАЛИЗЕ ВЫЖИВАЕМОСТИ

Г.Г. Рапаков, В.А. Горбунов, К.А. Абдалов

Вологодский государственный университет  
[grapakov@yandex.ru](mailto:grapakov@yandex.ru)

Выполнено исследование подгонки теоретического распределения к данным непараметрической оценки выживаемости в ходе поддержки управленческих решений для муниципального проекта активного долголетия в части онкопатологии

Ключевые слова: подбор распределения, оценка параметров, поддержка принятия решений

### **Введение**

Распределение наилучшего выбора позволяет эффективно хранить данные типа времени жизни в автоматизированных информационных системах, сокращать размер баз данных и повышать быстродействие СУБД. Практическая значимость работы определяется возможностью использования параметрического метода распределений времен жизни для динамической оценки эффективности мероприятий в ходе исполнения муниципальной концепции активного долголетия в части онкопатологии. Актуальной является задача экспериментального исследования параметрического метода в анализе времени до события для оценки выживаемости экстренных больных с онкопатологией при формировании моделей принятия решений в проекте активного долголетия для предотвращения преждевременной смертности населения [1, 2].

### **Цель исследования**

Сопоставление непараметрического и параметрического подходов в анализе времени до события позволит повысить эффективность формирования управленческих стратегий медицинской профилактики в системе медико-социальной поддержки населения и выявлять аномалии в показателях выживаемости экстренных больных с онкопатологией, что обуславливает новизну работы.

### **Материалы и методы**

Межведомственную работу по формированию здоровьесберегающего пространства активного долголетия регулируют ряд нормативно-правовых актов [2]. Сбор данных для анализа выполнен в ходе проведения медико-социологического исследования. Объем выборки обеспечивает точность оценки не ниже 7% с доверительной вероятностью  $\alpha = 0,95$ , что отвечает требованиям пилотного проекта. Мониторинг посвящен оценке летальности и выживаемости экстренных больных с онкопатологией на основе данных хирургического отделения №2 БУЗ ВО «Вологодская городская больница № 1» за период 2003-2015 гг. Основными параметрами являются пол пациента и время жизни в днях. При исследовании

летальности экстренных онкобольных, пациенты наблюдаются от момента поступления в хирургическое отделение до наступления летального исхода.

## Результаты исследования и обсуждение

Метод оценки выживаемости является разновидностью анализа времени наступления события, который позволяет описать любой исход, дихотомический по природе и встречающийся в ходе наблюдения один раз. Модели выживаемости относятся к числу моделей анализа данных, для которых отклик является временем ожидания исхода; для ряда участников исход на момент анализа данных еще не наступил (наблюдения цензурированы); на время ожидания могут оказывать влияние предикторы (объясняющие переменные или ковариаты). Использование в расчетах сведений обо всех участниках (не умерших к моменту проведения анализа или утерянных) позволяет повысить точность оценки.

Прогнозирование на основе анализа дожития позволяет определить вероятность изучаемого исхода для любого момента времени — выполнить оценку функции выживаемости  $S(t)$ .

Моделирование  $S(t)$  возможно на основе трех подходов. Параметрический подход исходит из предположения об определенной форме кривой  $S(t)$  и выполняет подгонку модели выживаемости на основе подбора распределений. Полупараметрическое моделирование позволяет выполнить построение кривой дожития для сочетания прогностических факторов на основе регрессионной модели пропорциональных рисков Кокса. При непараметрическом подходе отсутствуют даже слабые предположения для  $S(t)$  и набор данных говорит сам за себя. В случае, когда ковариаты носят естественно-обусловленный характер (например, пол респондента) или отсутствуют, в анализе выживаемости используется непараметрический метод Каплана-Мейера.

Оценка Каплана-Мейера:

$$\hat{S}(t) = \prod_{j: t_j \leq t} \frac{n - j}{(n - j + 1)^{\delta_j}},$$

где  $n$  – общее число событий;  $j$  – его номер;  $\delta_j = 1$ , если  $j$ -е событие – исход;  $\delta_j = 0$ , если  $j$ -е событие цензурировано.

В результате применения метода Каплана-Мейера к данным мониторинга получено семейство кривых дожития экстренных онкобольных за период наблюдения с 2003 по 2015 гг. (рис. 1).

Выполнена проверка нулевой гипотезы  $H_0$  об отсутствии статистически значимых различий выживаемости в группах по полу пациентов на основе критерия Мантела-Кокса (уровень значимости  $p < 0,05$ ). По результатам проверки нулевая гипотеза была принята в подавляющем числе случаев.  $H_0$  была отклонена только для данных 2009 г.

Для сравнения выживаемости (survival) в группах по половому признаку во времени наблюдения (analysis time) рассчитаны  $p$ -процентили, определяющие время, в течение которого летальный исход наступит у  $p$  % участников исследования, и их 95% доверительные интервалы (ДИ) (табл. 1).

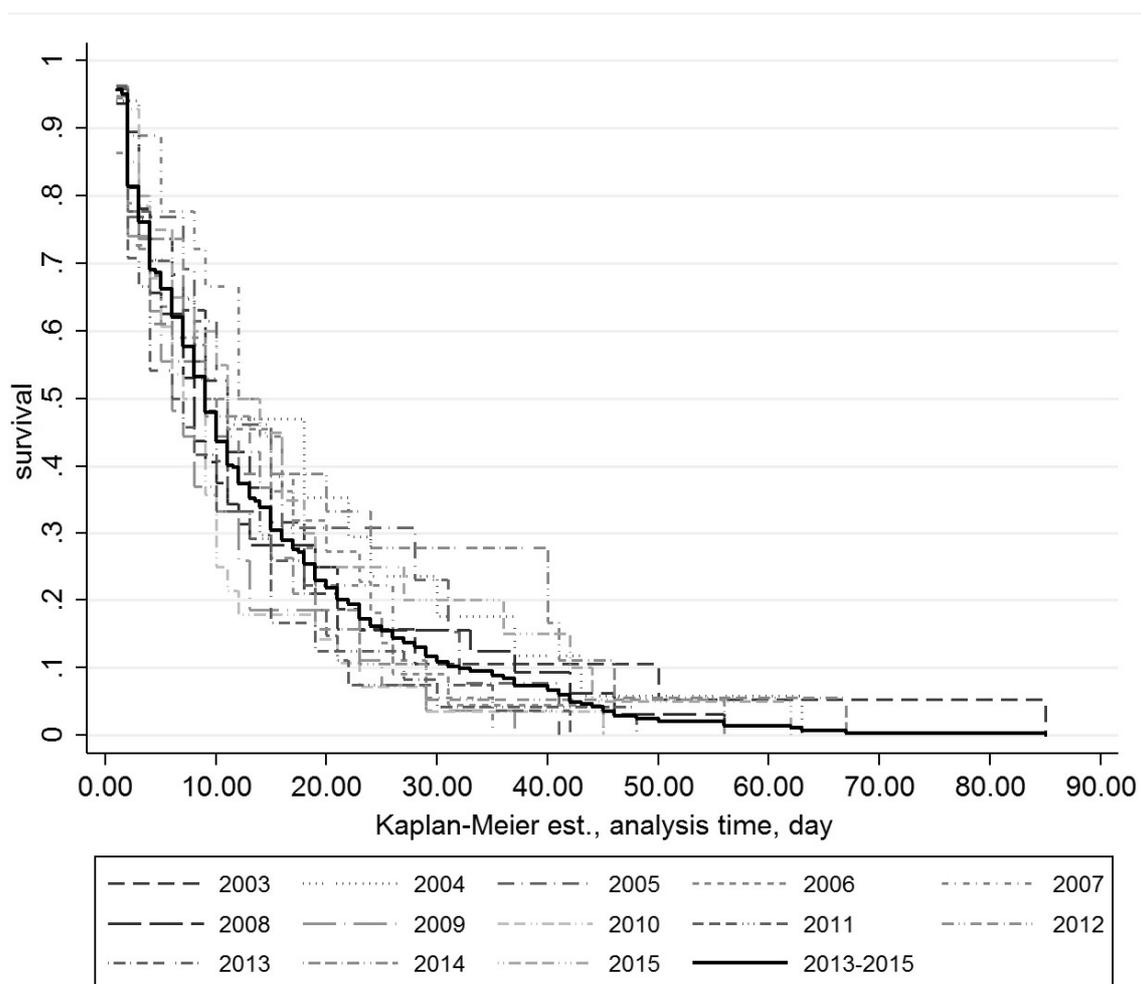


Рис. 1

Таблица 1

| Летальный исход,<br>день | 25% проц.,<br>95 ДИ | 50% проц.,<br>95 ДИ | 75% проц.,<br>95 ДИ |
|--------------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| Когорта                  | 4 (3; 4)            | 9 (8; 10)           | 19 (16; 21)         |
| Мужчины                  | 4 (2; 6)            | 10 (8; 12)          | 19 (15; 23)         |
| Женщины                  | 3 (2; 4)            | 8 (7; 10)           | 18 (13,5; 23)       |

В ходе процедуры подгонки теоретического распределения к данным непараметрической оценки продолжительности жизни были исследованы следующие виды распределений, зависящих от параметров: экспоненциальное, Вейбулла, Гомпертца, лог-логистик, лог-нормальное, гамма. Выбор между различными распределениями осуществлялся на основе критерия отношения правдоподобия ( $\log \text{likelihood} - LL$ ) и информационного критерия Акаике (Akaike's information criteria – AIC) (табл. 2).

Выбирается распределение, для которого значение логарифмического правдоподобия LL максимально (с учетом знака), а критерий Акаике AIC – минимален [3]. Расчеты свидетельствуют о предпочтительности гамма перед другими распределениями. Параметры модели представлены в табл. 3. Ближайшей, в целях удобства расчета, является лог-нормальная модель.

Таблица 2

| Распределение  | Экспоненциальное | Вейбулла | Гомпертца | Лог-нормальное | Лог-логистик | Гамма    |
|----------------|------------------|----------|-----------|----------------|--------------|----------|
| Log likelihood | -424,847         | -424,247 | -424,842  | -417,844       | -426,87      | -416,884 |
| AIC            | 851,694          | 852,494  | 853,683   | 839,688        | 857,74       | 839,768  |

Таблица 3

| Параметры распределения Гамма | $\mu$ , 95% ДИ       | $\sigma$ , 95% ДИ    |
|-------------------------------|----------------------|----------------------|
| Значения                      | 2,251 (2,022; 2,480) | 1,038 (0,951; 1,133) |

В результате применения параметрического метода к данным мониторинга получены параметрические модели функции выживаемости экстренных больных с онкопатологией за период наблюдения с 2003 по 2015 гг. (рис. 2).

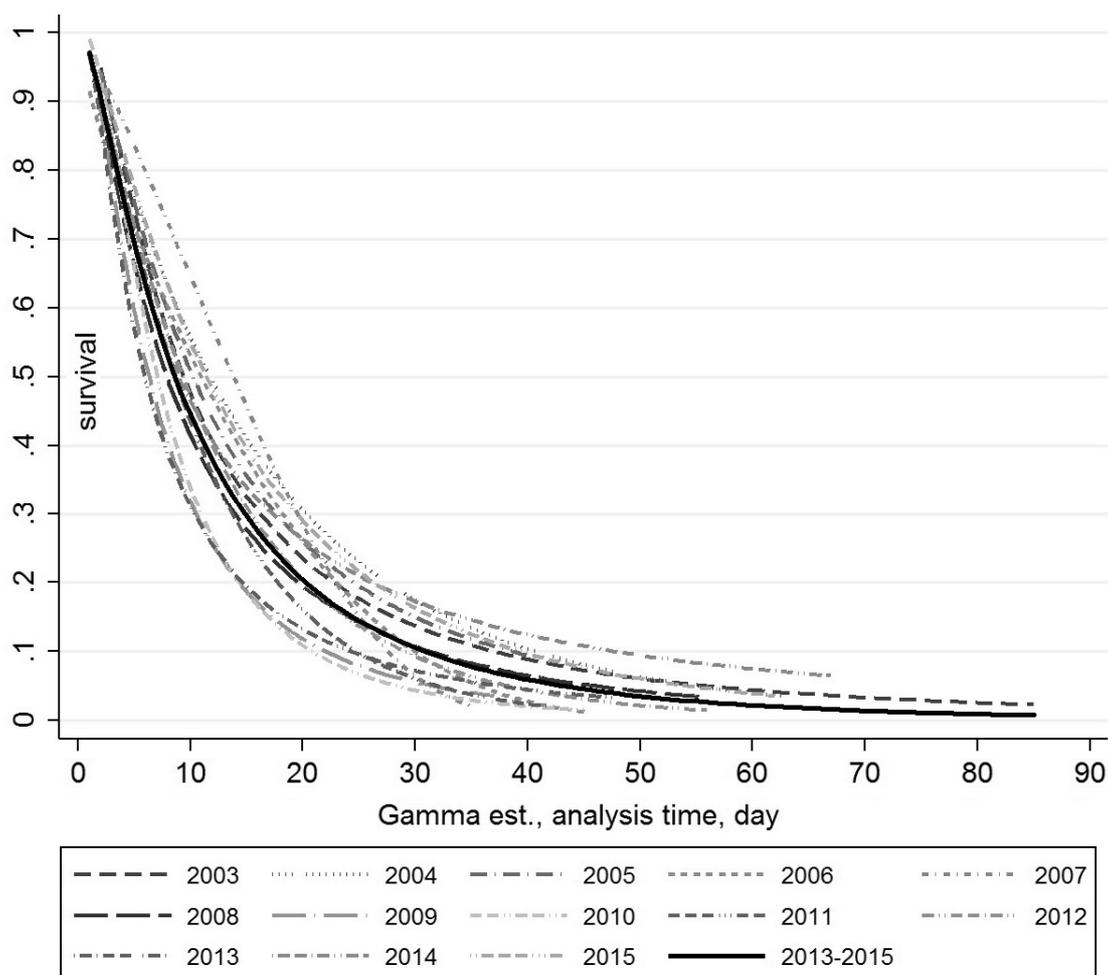


Рис. 2

## Заключение

При помощи метода Каплана-Мейера получено семейство кривых дожития экстренных онкобольных за период наблюдения с 2003 по 2015 гг. Выполнена проверка нулевой гипотезы об отсутствии статистически значимых различий выживаемости в группах по полу на основе критерия Мантела-Кокса. Для сравнения выживаемости рассчитаны процентиля времени летального исхода. В результате подгонки теоретического распределения к данным непараметрического исследования продолжительности жизни на основе критерия отношения правдоподобия и информационного критерия Акаике выбрано распределение гамма. Выполнена оценка его параметров. Получены параметрические модели функций выживаемости.

## Литература

1. Рапаков Г.Г. Методы анализа выживаемости в задачах активного долголетия (опыт г. Вологды): монография / Г.Г. Рапаков; М-во образ. и науки РФ, Вологод. гос. ун-т, Междуна-род. акад. наук эколог. и безопасн. жизнедеятельности. – Вологда: ВоГУ, 2015. – 119 с.
2. Вологда – город долгожителей [Электронный ресурс]: концепция активного долголетия на территории муниципального образования «Город Вологда» на период до 2035 года: решение Вологодской городской Думы от 29 декабря 2014 г. № 129 // КонсультантПлюс: справ. – правовая система / Компания «КонсультантПлюс».
3. An Introduction to Survival Analysis Using Stata / M. Cleves, W. Gould, R. Gutierrez, Y. Marchenko. – 2nd ed. – Stata Press, College Station, TX, 2008. – 372 p.

## THE EMPIRICAL RESEARCH OF FITTING TECHNIQUE FOR SURVIVAL ANALYSIS

G.G. Rapakov, V.A. Gorbunov, K.A. Abdalov

Vologda State University

Fitting technique study performs evaluation of fatal outcome for cancer patients during active longevity project

Keywords: fitting technique, parameter estimation, decision support

## НЕЙРОСЕТЕВОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ДЕБИТА НЕФТИ

В.И. Серкова

Ухтинский государственный технический университет  
[viserkova@mail.ru](mailto:viserkova@mail.ru)

Рассматривается система нейронных сетей, которые связывают скважины с моделью, интеллектуальная система анализа и прогноза состояния разработки нефтяных месторождений. Рассматриваются особенности нейросетевого моделирования в при естественном падении дебита нефти

Ключевые слова: нейронные сети, интеллектуальная система, модель, запасы нефти, обучающая выборка, дебит нефти, гидродинамическая модель, скважина

Чтобы геолого-гидродинамическую модель можно было использовать для прогноза уровней добычи и для выполнения модельных экспериментов формируется система из десятков тысяч нейронных сетей, которые связывают скважины с моделью и между собой. Эта система нейронных сетей моделирует интерференцию скважин. С обычной моделью скважины связываются через формулу Дюпюи с набором поправочных коэффициентов. По ней определяется объемный дебит одиночной скважины в пластовых условиях. При подъеме нефти в скважине происходит ее разгазирование и, вследствие этого, уменьшение объема. Это уменьшение учитывается введением объемного коэффициента нефти. Кроме того, на практике чаще всего используется массовый дебит (т/сут). С учётом этого коэффициента формула примет вид:

$$Q_r = \frac{2\pi kh(P_k - P_c)}{\mu \ln(R_k/R_c)},$$

где  $k$  – коэффициент проницаемости, дарси;  $h$  – мощность пласта, см;  $P_k$  и  $P_c$  – давление на контуре питания и в скважине, ат;  $R_k$  и  $R_c$  – радиусы контура питания и применяется в нефтепромысловом скважины, см;  $\mu$  – вязкость жидкости;  $Q_r$  – дебит скважины, см<sup>3</sup>/сек. Но сложно охватить все разнообразие условий одной формулой.

Поэтому скважины связываются с моделью посредством нейронных сетей, причем для каждой скважины формируются свои нейронные сети, которые не только связывают ее с моделью, но и с окрестными скважинами. Именно так поступает и специалист, он не только смотрит на модель в районе скважины, но и следит за поведением окрестных скважин, особенно нагнетательных.

Каждая скважина является образующей и связана с 8-16 окрестными скважинами, но и она в свою очередь входит в нейронные сети окрестных скважин, и таким образом получается, что все скважины взаимосвязаны и любое изменение на какой-либо из них отражается на остальных скважинах в той части залежи, где она находится. Нейронные сети обучаются на истории работы скважин, и в этом процессе они «запоминают» взаимоотношения скважин между собой (интерференцию), и поэтому их можно использовать для прогноза.

Ситуация на месторождении может меняться, но закономерности взаимовлияния скважин более устойчивы и потому могут быть экстраполированы на относительно небольшой период будущего. На 18 месяцев вперед. Этот срок оптимален с той точки зрения, что при увеличении срока возрастают погрешности прогноза, в то же время необходимо, чтобы срок позволял прогнозировать в рамках годовых планов работ.

Вопрос естественного падения добычи является одним из наиболее трудных, и ему придается особенно большое значение на западе. Обычно для описания падения добычи используют экспоненциальную, гармоническую или гиперболическую кривые, впервые предложенные J. Arps в 1945 г. [1]. Это простой и эффективный способ для оценки падения добычи по месторождению в целом, но его сложно применить для оценки падения добычи по отдельным скважинам, которые характеризуются различными геологическими условиями, и к тому же на добычу скважины сильное влияние оказывает интерференция соседних скважин. Поэтому был реализован способ оценки падения добычи по скважинам с помощью нейронных сетей. Точнее, падение не добычи, а дебита нефти. Падение дебита является функцией накопленной добычи нефти и может быть описано дифференциальным уравнением:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = f(q(t-1), Q(t), W(t) \dots).$$

Входные параметры берутся из истории работы скважины и снимаются с гидродинамической модели.

Входные параметры для нейронной сети падения дебита

| № п/п | Название                             | Тип              |
|-------|--------------------------------------|------------------|
| 1     | Предыдущий дебит нефти               | История скважины |
| 2     | Накопленная добыча нефти             | История скважины |
| 3     | Накопленная добыча жидкости          | История скважины |
| 4     | Текущая фазовая проницаемость        | Модель           |
| 5     | Текущая обводненность пласта         | Модель           |
| 6     | Текущие запасы нефти                 | Модель           |
| 7     | Текущая компенсация                  | Модель           |
| 8     | Текущее пластовое давление           | Модель           |
| 9     | Дисперсия плотности запасов по слоям | Модель           |

Решается это дифференциальное уравнение с помощью матрицы каскадов нейронных сетей с девятью входами, применительно к расчету базовой обводненности скважин.

Здесь используется в общем аналогичная матрица.

Для обучения этого каскада отбираются такие участки истории работы скважин, где наблюдается монотонное падение дебита нефти. На этой выборке обучаются нейронные сети, которые затем используются для вычисления падения дебита нефти вследствие отбора одной тонны нефти. Вычисляются произ-

водные падения дебита нефти на каждый месяц работы скважины, в том числе и на будущий период. Эти производные затем интегрируются, и таким образом вычисляется тренд будущего падения дебита нефти. Аналогично вычисляется и нейросетевая матрица для описания падения дебита жидкости. Он также может падать вследствие отбора жидкости, если этот отбор не компенсируется закачкой и приводит к падению пластового давления.

Падение (Decline), рассчитанное таким образом, направляет всю систему модели добычи в процессе расчета и обеспечивает логику ее поведения при имитации разработки залежи.

### Производная падения дебита нефти

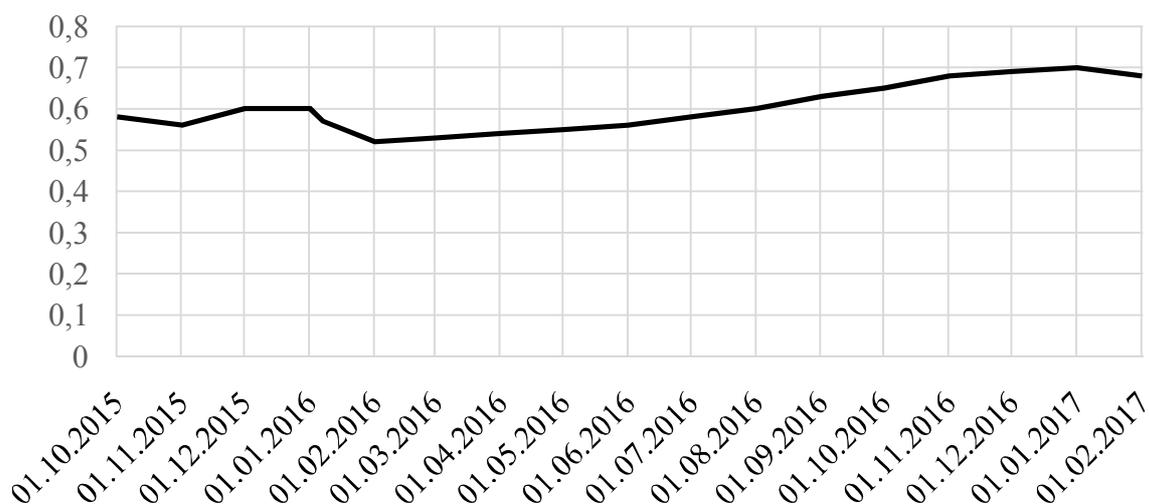


Рис. 1. Пример вариации коэффициента падения дебита на прогнозный период

С течением времени этот коэффициент возрастает, следовательно, дебит падает все сильнее.

Информация по истории добычи при построении геологической модели является не менее важной, чем геологическая информации РИГИСов. Во всяком случае, эти два вида информации не должны противоречить друг другу. Поэтому сейчас реализованы функции использования этой информации для восстановления разрезов и для расчета полей вероятности начальных запасов нефти. Данные по добыче и средним дебитам используются для оценки возможных значений эффективной толщины разреза наряду с данными нейрогридов.

При расчете полей начальных запасов используются данные предварительной оценки того, из каких зон пласта пришла отобранная в скважинах нефть. Это быстрый алгоритм предварительной оценки, где накопленная добыча «разгоняется» по пласту на основании имеющихся на тот момент полей гидропроводности, поровых объемов и начальных запасов нефти. А также весовыми функциями для отборов является окрестная закачка, а для закачки соответственно окрестная добыча жидкости.

Эта новая функция была реализована только в настоящем проекте с целью избежать ситуации, когда по скважине показана добыча, но нет данных РИГИС,

а при восстановлении данных она может оказаться без коллектора нужной мощности и в результате выпадет из расчета гидродинамической модели.

Прогноз дебита нефти для каждой скважины выполняется разновидностью метода Монте-Карло, таким образом, что вычисляется 8000 вариантов дебита согласно случайно заданным наборам. Каждый элемент в нейросетевом кумулятивном каскаде состоит из 7 нейронных сетей, каждая из которых обучалась по своей подвыборке. Поэтому, выбирая различные наборы кластеров, можно получать разные значения прогнозного дебита нефти для одной и той же скважины. Распределение прогнозных значений показано на рис. 3.

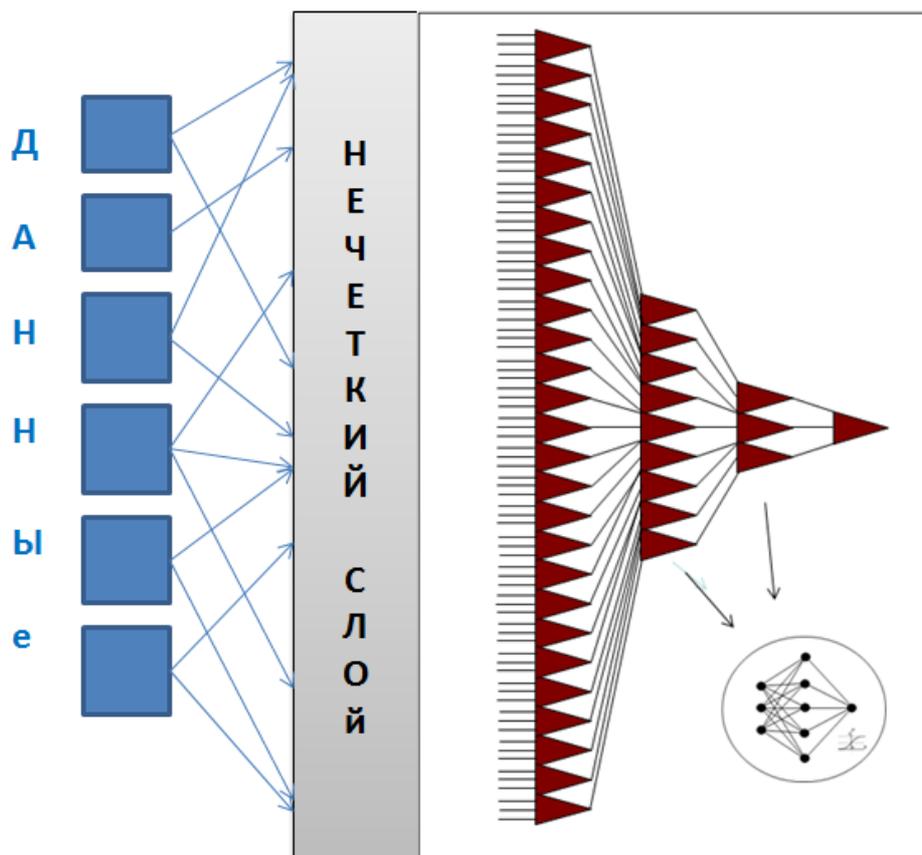


Рис. 2. Общая схема расчета прогноза. Нечеткий слой формируется случайным образом

Это дало методу большую устойчивость, и результат прогноза стал более жестко зависеть от количества и качества входной информации. Раньше эта зависимость искажалась за счет настройки на частные особенности обучающей выборки. Результат прогноза имел более случайный характер, и было непонятно, как его улучшить. Сейчас улучшения можно достичь более определенно за счет улучшения входной информации.

При наличии нейросетевой модели и обученных нейронных сетей можно быстро, в течение суток, выполнить прогнозы по сотням или тысячам скважин. Таким образом, на каждую скважину получится по несколько прогнозов, и специалист уже может выбрать, какой вид ГТМ более перспективен, или выберет комплекс мероприятий.

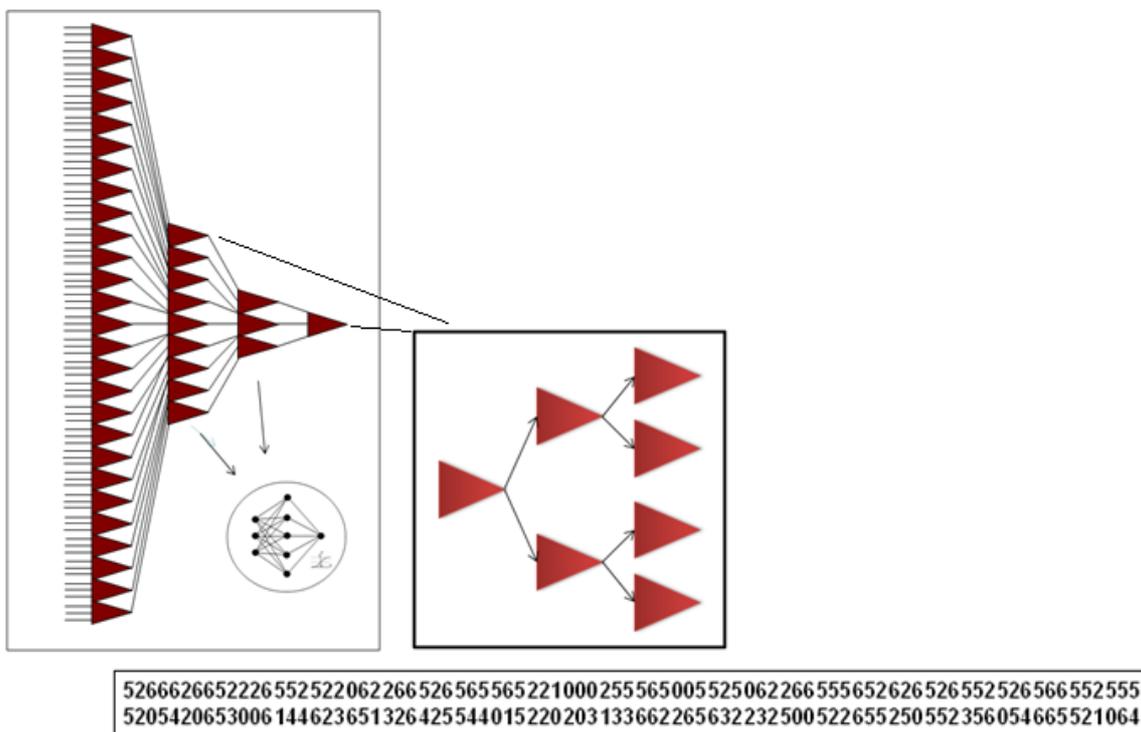


Рис. 3. Схема расчета прогнозных дебитов нефти

Хотя прогнозы делаются быстро и автоматически, но зато интерпретация их должна выполняться вручную. В этом плане система не заменяет специалиста, но дает ему дополнительный мощный и объективный инструмент. Сами по себе прогнозы могут быть неправильными, но они всегда небезосновательны. Понять, как их можно эффективно использовать, можно только на практике. Простейший способ – это использовать прогнозы системы Cervart как дополнительный аргумент при оценке скважин-кандидатов для проведения ГТМ. Если прогноз системы совпадает с оценкой специалиста, то, видимо, такая скважина может быть отобрана для проведения ГТМ. Если же прогнозы системы и специалиста расходятся, то проведение ГТМ в такой скважине связано с повышенным риском, и, возможно, от него следует пока отказаться до получения новой информации, особенно если имеется достаточное количество скважин, где прогнозы согласуются.

#### Литература

1. Хайкин С. Нейронные сети. Москва – Санкт-Петербург – Киев, 2006.
2. Соломатин Г.И., Захарян А.З., Ошкарин Н.И. Прогнозирование работы скважин с помощью искусственных нейронных сетей // Нефтяное хозяйство. 2002. – № 10. – С. 92-98.

## NEURAL NETWORK PREDICTION OF OIL PRODUCTION

V.I. Serkova

Ukhta State Technical University

Describes a system of neural networks that connect well with the model, an intelligent system for analysis and forecast of the development of oil fields. Discusses the features of neural network modeling in the natural decline of oil production

Keywords: neural networks, intelligent systems, model, oil, training sample, oil production rate, reservoir model, well

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОВОДИМОСТИ НЕФТЯНОЙ ЭМУЛЬСИИ В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ В МОДЕЛИ КОУЛ-КОУЛА ДЛЯ КОНТРОЛЯ СОДЕРЖАНИЯ ВОДЫ В НЕФТИ

Ю.Г. Смирнов<sup>1</sup>, И.С. Баткин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ухтинский государственный технический университет

[ysmirnov@ugtu.net](mailto:ysmirnov@ugtu.net)

<sup>2</sup>University of Ottawa, Ontario, Canada

[vbatkin@rogers.com](mailto:vbatkin@rogers.com)

Выполнен теоретический анализ и численное моделирование проводимости водонефтяной эмульсии в переменном электрическом поле в модели Коул-Коула. Показано, что учет входной паразитной емкости измерительной цепи позволяет добиться хорошего согласия теоретических расчетов с экспериментальными данными

Ключевые слова: проводимость водонефтяной эмульсии, модель Коул-Коула, переменное электрическое поле, содержание воды

### Введение

В процессе добычи нефть с большой скоростью выходит из скважины вместе с сопутствующей ей пластовой водой, что способствует образованию устойчивых эмульсий вода в нефти. Устойчивость водонефтяных эмульсий зависит от величины дисперсности глобул воды, вязкости и плотности нефти, содержания в ней естественных эмульгаторов и стабилизаторов эмульсии [1, 2]. Естественными стабилизаторам эмульсий являются содержащиеся в нефти асфальтены, смолы, нафтены и парафины, которые представляют собой природные поверхностно-активные вещества.

В процессе обессоливания нефть промывается пресной водой, что также приводит к ее дальнейшему эмульгированию. Повышенное содержание воды в нефти, поступающей на переработку, ухудшает качество получаемых из неё продуктов, создаёт проблемы в нефтеперерабатывающих установках на нефтеперерабатывающих заводах.

Для улучшения свойства нефти и нефтепродуктов предпринимаются меры по разрушению образующихся в производственных процессах нефтяных эмульсий. Это в свою очередь ведет к снижению содержания воды, которое стремятся минимизировать и которое, соответственно, постоянно контролируется на этапах разработки, транспортировки и переработки нефти.

Особый интерес представляют методы, позволяющие оперативно определять содержание воды в нефти и нефтепродуктах в режиме реального времени.

Процесс обезвоживания нефти фактически сводится к разрушению эмульсий. Суть моделирования состоит в том, чтобы контролировать этот процесс в реальном масштабе времени.

Как отмечалось в одной из наших предыдущих работ [3], содержание водонефтяных эмульсий сказывается на электрофизических характеристиках неф-

ти и нефтепродуктов в широком диапазоне частот электрического сигнала, а из частотной зависимости проводимости нефти и нефтепродуктов мы можем оценить размеры эмульсионных капель и их число. В свою очередь, определив их число и размеры, можно оценить содержание воды.

### Физико-математическая модель

Рассмотрим следующую физическую модель. Пусть в емкости находится водонефтяная эмульсия. Внутри емкости размещена измерительная ячейка с плоскими параллельными электродами, к которым прикладывается внешнее переменное напряжение с частотой, меняющейся в широких пределах, создающее в объеме жидкости переменное электрическое поле. Регистрация отклика изучаемой среды осуществляется частотным анализатором.

При погружении электродов измерительной ячейки в нефть, на них образуется слой налипшей нефти. Таким образом, появляется дополнительная емкость за счет прослойки нефти [4]. И эту емкость надо учитывать при теоретических расчетах. Величина этой емкости существенно зависит от толщины налипшей нефтяной прослойки и от свойств нефти.

С учетом указанных обстоятельств, эквивалентная электрическая схема измерительной ячейки с анализируемой нефтью может быть представлена в следующем виде:

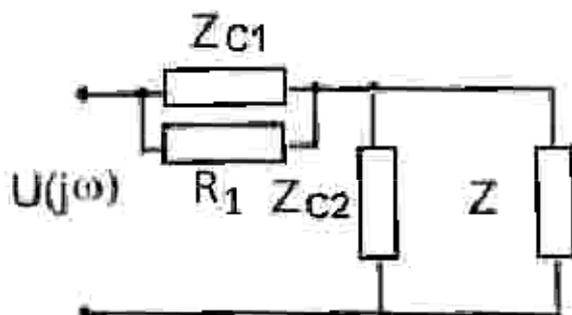


Рис. 1. Эквивалентная электрическая схема измерительной ячейки

Здесь  $Z_{c1} = 1/(j\omega C1)$  – реактивное емкостное сопротивление, обусловленное входной емкостью измерительной цепи. Емкость  $C1$  появляется из-за слоя нефти, налипающего на пластины измерительной ячейки.  $R_1$  – активное сопротивление изучаемой жидкости. Емкость  $C2$  – это емкость плоского конденсатора, каким фактически является измерительная ячейка. Ее легко можно оценить по известной формуле

$$C2 = \varepsilon\varepsilon_0 \frac{S}{d}, \quad (1)$$

где  $S$  – площадь пластины электрода измерительной ячейки;  $d$  – расстояние между пластинами;  $\varepsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость среды;  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная. Соответственно, указанная емкость обуславливает

реактивное емкостное сопротивление  $Z_{C2} = 1/(j\omega C2)$ ,  $Z$  – комплексное сопротивление (импеданс) рассматриваемой жидкой среды в модели Коул-Коула:

$$Z(j\omega) = R_{\infty} + \frac{R_0 - R_{\infty}}{1 + (j\omega\tau)^{\alpha}}, \quad (2)$$

где  $R_0, R_{\infty}$  – сопротивление среды при нулевой и бесконечно большой частоте изменения внешнего электрического поля,  $\tau$  – макроскопическое время релаксации, определяющее (фундаментальную) характеристическую частоту  $\omega_c = 1/\tau$ ;  $\alpha$  – безразмерный параметр ( $0 < \alpha < 1$ ).

Таким образом, полное комплексное сопротивление  $Z_S$  рассматриваемой измерительной цепи будет определяться формулой

$$Z_S = \frac{R_1 Z_{C1}}{R_1 + Z_{C1}} + \frac{Z_{C2} Z}{Z_{C2} + Z}. \quad (3)$$

Очевидно, что вклад реактивных сопротивлений  $Z_{C1}$  и  $Z_{C2}$  на величину полного импеданса  $Z_S$  будет сказываться больше всего на высоких частотах.

В работе [5] по результатам экспериментальных исследований частотных зависимостей комплексной проводимости эмульсий выведена полуэмпирическая зависимость содержания воды в нефти от проводимости  $y$  на разных частотах:

$$y \sim Aw^2, \text{ от } 50 \text{ Гц до } 10 \text{ МГц}. \quad (4)$$

Здесь  $w$  – содержание воды (%),  $A$  – коэффициент, значение которого зависит от частоты.

Указанная зависимость (4) в принципе может быть использована для мониторинга процесса обезвоживания нефти путем регистрации проводимости на разных частотах в реальном времени.

### Результаты и их обсуждение

Для оценки возможности использования предлагаемого подхода было выполнено моделирование зависимости проводимости от частоты внешнего электрического поля в модели Коул-Коула [5] с учетом паразитных емкостей (3). Экспериментальные данные для сравнения с теоретической аппроксимацией в указанной модели брались из работы [6].

Моделирование выполнялось в рамках пакета MatLab в диапазоне частот внешнего электрического поля от 100 Гц до 100 МГц. Были выбраны следующие параметры модели: характеристическая частота  $\omega_c = 16$  МГц; безразмерный параметр  $\alpha = 0,67$ , паразитные емкости  $C1 = 30$  пФ,  $C2 = 50$  пФ. Результаты моделирования приведены на рис. 2.

Из рисунка видно, что модель Коул-Коула (2) с учетом вышеприведенных модификаций (3) хорошо описывает низкочастотную область проводимости и довольно неплохо область средних и высоких частот в отличие от результатов работы [3], в которых наблюдалось заметное расхождение экспериментальных

данных с теоретическими расчетами в высокочастотной области из-за не учета паразитных емкостей  $C_1$  и  $C_2$ .

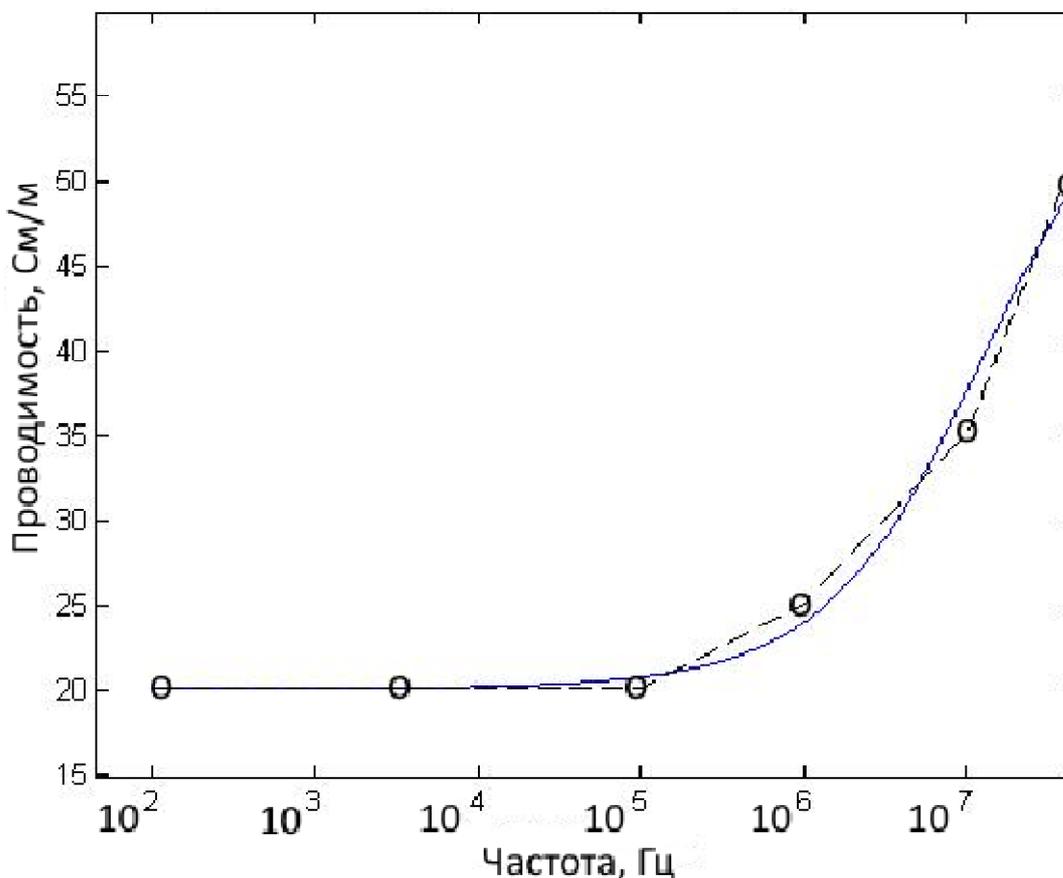


Рис. 2. Аппроксимации частотной зависимости проводимости в модифицированной модели Коул-Коула (сплошная линия) в сравнении с экспериментальными данными (кружочки) для нефти с содержанием воды 5,8%

Рост проводимости в области высоких частот может свидетельствовать о наличии большого числа мелких капель эмульсии в данном образце нефти.

### Заключение

Подводя итоги, можно сделать следующее заключение. В процессе электрического обезвоживания нефти мы контролируем изменение свойства нефти при разрушении эмульсионных капель и удалении из нее воды.

Измеряя частотную зависимость проводимости и опираясь на результаты моделирования, мы можем предсказывать параметры нефти. Эти параметры входят в модель Коул-Коула, а именно, проводимость на низких и высоких частотах и фундаментальная частота. На высокочастотную часть распределения также оказывают влияние входные паразитные емкости измерительной цепи.

Как можно видеть из формул (2-3), имеется четыре параметра, каждый из которых связан с физическими свойствами нефти. Речь идет о размерах и количестве эмульсионных капель. Таким образом, мы измеряем электрические параметры и связываем их с физическими параметрами, что очень важно для кон-

троля процесса уничтожения капель эмульсии, т.е. обезвоживания нефти. Эта связь устанавливается путем калибровки, когда для конкретного типа нефти измеряются электрические и физические параметры, по которым строится калибровочная зависимость.

Задача моделирования состоит в том, чтобы по измерению в реальном времени электрических характеристик нефти предсказать ее физические параметры с учетом калибровочной зависимости. Это и является главным результатом моделирования.

Далее, основываясь на результатах мониторинга в реальном времени, мы можем сделать заключение о необходимости продолжения процесса обезвоживания в зависимости от достигнутой степени очистки. Если электрическая очистка дошла до стадии мелких трудноудаляемых эмульсионных капель, то можно перейти к следующей стадии более глубокой очистки с использованием технологии добавления крупных капель эмульсии для более эффективного удаления мелких капель, как предложено в нашей работе [7]. Для принятия решения о переходе к более глубокой очистке необходимо связать электрические и физические параметры нефти. А для этого нужна модель, рассмотрению которой и посвящена настоящая работа.

Особенность рассматриваемой модели состоит в том, что мы используем уточненную модель Коул-Коула с учетом влияния паразитной емкости измерительной цепи, что дает более точные результаты.

Отметим, что наше моделирование отличается направленностью на достижение конкретного практического результата – мониторинг важнейших физических характеристик нефти в реальном времени.

Результаты моделирования позволяют сделать заключение, что изучая частотную зависимость проводимости нефти и нефтепродуктов мы можем оценить размеры эмульсионных капель, а также отношение проводимости на высоких и низких частотах. Кроме того, из сравнения теоретической зависимости проводимости с экспериментальными данными удастся получить информацию об одном из важнейших параметров модели Коул-Коула – фундаментальной частоте. По этим данным с учетом калибровки может быть вычислено содержание воды в нефти.

#### Литература

1. Позднышев Г.Н. Стабилизация и разрушение эмульсий. М.: Недра, 1982. – 222 с.
2. Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. – М.: Химия, 1982. – 399 с.
3. Баткин И.С., Смирнов Ю.Г. Математическая модель процесса определения электрофизических параметров нефтепродуктов с использованием электрорезонансного метода в переменном электрическом поле // Физико–математическое моделирование систем: матер. XVIII Междунар. семинара – Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2017. – Ч. 1 – С. 99-105.
4. Sjoblom J., Skodvin T., Jakobsen T. and Dukhin S. S. Dielectric spectroscopy and emulsions. A theoretical and experimental approach. Journal of Dispersion Science and Technology, 15(4):401-421, 1994.

5. Cole K.S., Cole R.H. Dispersion and absorption in dielectrics i. alternating current characteristics // J. Chem. Phys. 9 (1941) 341-351.
6. Chute F.S., Vermeulen F.E., Cervenak M.R. and McVea F.J. Electrical properties of Athabasca Oil Sand // Canadian Journal Earth Science. 1979. – V. 16. – No. 10. – P. 2009-2021.
7. Баткин И.С., Смирнов Ю.Г. Моделирование процесса разрушения нефтяных эмульсий при комбинированном воздействии электрического и магнитного полей // Физико-математическое моделирование систем: Материалы VIII Междунар. семинара. Воронеж, 25-26 ноября 2011 г., Воронеж: ВГТУ, 2012. – Ч. 3. – С. 82-88.

## MATHEMATICAL MODELING OF CONDUCTIVITY OF OIL-EMULSION IN THE VARIABLE ELECTRIC FIELD IN THE COUL-COUL MODEL FOR CONTROL OF OIL WATER CONTENT

Yu.G. Smirnov<sup>1</sup>, I.S. Batkin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ukhta State Technical University

<sup>2</sup>University of Ottawa, Ontario, Canada

A theoretical analysis and numerical modeling of the conductivity of the water-in-oil emulsion in an alternating electric field in the Cole-Cole model is performed. It is shown that taking into account the input parasitic capacitance of the measuring circuit makes it possible to achieve good agreement between the theoretical calculations and the experimental data

Keywords: water-oil emulsion conductivity, Cole-Cole model, alternating electric field, water content

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТОКА ГАЗА ЧЕРЕЗ БЛОК ПЫЛЕУЛОВИТЕЛЕЙ

С.Н. Беляев, Т.Т. Алиев, А.А. Федоров, Н.П. Богданов

Ухтинский государственный технический университет  
[SBelyaev@ugtu.net](mailto:SBelyaev@ugtu.net)

С использованием теории малых возмущений предлагается метод расчета изотермического потокораспределения с целью определения отклонений от равномерной нагрузки отдельных блоков аппаратов установки очистки газа от оптимальных значений

Ключевые слова: метод малых возмущений, потокораспределение, пылеуловители

Расчет потокораспределения на ЭВМ является одной из основных массовых задач, и этому вопросу за последние годы посвящено огромное количество публикаций. Метод контурных расходов (МКР) – один из самых эффективных методов расчета стационарного потокораспределения в нелинейных гидравлических цепях. Метод узловых давлений (МД) является обобщением электротехнического метода – метода узловых напряжений в сочетании с методом Ньютона.

В данном сообщении предлагается метод расчета изотермического потокораспределения с целью определения отклонений от равномерной нагрузки отдельных блоков аппаратов установки очистки газа от оптимальных значений.

Для простого трубопровода постоянного сечения общей длины  $l$  и диаметра  $d$ , содержащего ряд местных сопротивлений  $\xi_m$ , расчетное падение давления на входе и выходе трубопровода определяется по формуле

$$\Delta P = \frac{\rho}{2} \left( \frac{\lambda L}{d} + \sum_l \xi_m \right) \frac{16q^2}{\pi^2 d^4}, \quad (1)$$

здесь  $Q$  – расход газа.

Расчет потерь давления для газопроводов высокого давления выполняется по формуле

$$P_{ex}^2 - P_{вых}^2 = \frac{16}{\pi^2} \cdot \lambda \cdot \frac{Q^2}{d^5} \cdot \rho_0 \cdot P_0 \cdot l \cdot \frac{T}{T_0}, \quad (3)$$

где  $P_{ex}, P_{вых}$  – давление на входе и выходе трубопровода,  $P_0$  – атмосферное давление,  $T, T_0$  – рабочая температура и температура газа при нормальных условиях,  $\rho_0$  – плотность газа при нормальных условиях,  $\lambda$  – коэффициент гидравлического трения.

С учетом сжимаемости газа и зависимости плотности газа от температуры, а также малости участка трубопровода и  $P_{ex}^2 - P_{вых}^2 = (P_{ex} - P_{вых})(P_{ex} + P_{вых}) \approx \Delta P \cdot 2P_0$ , формулу (3) можно привести к виду (1).

При гидравлическом расчете сложных трубопроводов определяются потери давления  $\Delta p$  и распределение расходов газа  $Q_i$ . Для вычисления искомых величин используются законы Кирхгофа:

- сумма расходов входящих и выходящих из узла равна нулю;
- сумма падений давления на всех участках замкнутого контура равна нулю.

Пусть  $Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, Q_5$  – потоки газа через пылеуловители,  $k, k_1$  – гидравлическое сопротивление пылеуловителя и участка трубы между двумя соседними пылеуловителями соответственно,  $\Delta p$  – полное падение давления на входе и выходе блока пылеуловителей.

Точная система уравнений, описывающая транспорт газа через блок пылеуловителей, может быть решена только численно. Однако можно воспользоваться тем, что гидравлическое сопротивление трубы много меньше гидравлического сопротивления пылеуловителя, и решать систему уравнений в рамках теории возмущений [1]. Теория возмущений приводит к выражению для искомого решения в виде формального степенного ряда по степеням некоторого «малого» параметра. Главный член в этом степенном ряде соответствует точно решаемой задаче, а дальнейшие члены описывают отклонения в решении в связи с отклонением от исходной задачи.

Другими словами, в нашем случае, можно искать решение системы уравнений в виде

$$Q_i = q_0 + \frac{k_1}{k} q_i + \dots, \quad i = 1, \dots, 5, \quad (4)$$

где  $q_0$  – поток через пылеуловитель в предположении «идеальности» несущей трубы. Расчет гидравлических сопротивлений обвязки трубопровода и самого пылеуловителя показывают, что  $\frac{k_1}{k}$  в зависимости от сортамента труб и режимов работы, варьирует в пределах  $0,001 \div 0,01$ .

Ставится задача вычислить потокораспределения газа через пылеуловители при различных вариантах схем обвязки. В качестве примера рассмотрим два варианта П-образной схемы обвязки пылеуловителей с промежуточным выходом на ГПА.

**Вариант 1.** Выход на ГПА № 2 находится посередине между четвертым и пятым блоками пылеуловителей (рис. 1).

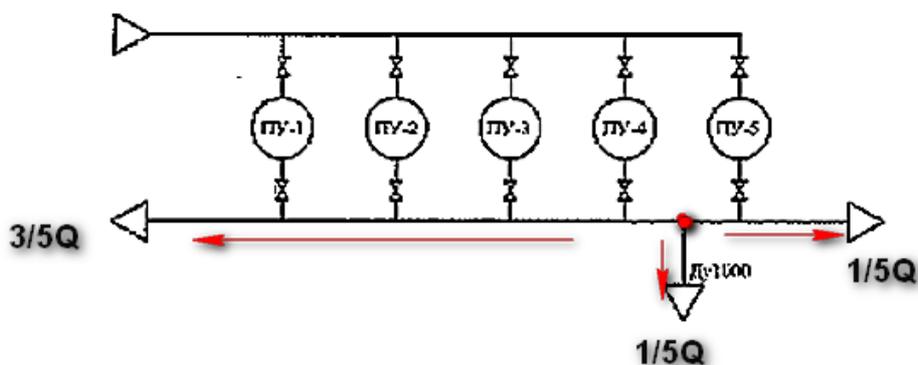


Рис. 1. Схема и определение расходов газа П-образной схемы обвязки блоков пылеуловителей с промежуточным выходом на ГПА посередине между четвертым и пятым блоками пылеуловителей

Система уравнений, описывающая данную задачу, имеет вид

$$\begin{aligned} k_1 Q_5^2 + k Q_5^2 &= k Q_4^2 + \frac{k_1}{2} (2q_0 - Q_5)^2 + \frac{k_1}{2} (q_0 - Q_5), \\ k_1 (Q_4 + Q_5)^2 + k Q_4^2 &= k Q_3^2 + k_1 (2q_0 - Q_5 - Q_4)^2, \\ k_1 (Q_3 + Q_4 + Q_5)^2 + k Q_3^2 &= k Q_2^2 - k_1 (Q_3 + Q_4 + Q_5 - 2q_0)^2, \\ k_1 (Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5)^2 + k Q_3^2 &= k Q_2^2 - k_1 (Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 - 2q_0)^2. \end{aligned}$$

С точностью до первого порядка малости получаем

$$\begin{aligned} Q_1 &= q_0, Q_2 \approx q_0 \left(1 - \frac{10k_1}{k}\right), Q_3 \approx q_0 \left(1 - \frac{15k_1}{k}\right), Q_4 \approx q_0 \left(1 - \frac{17k_1}{k}\right), \\ Q_5 &\approx q_0 \left(1 - \frac{17,25k_1}{k}\right) \\ \frac{Q_1}{Q} &= 0,226, \frac{Q_2}{Q} = 0,204; \frac{Q_3}{Q} = 0,193; \frac{Q_4}{Q} = 0,188; \frac{Q_5}{Q} = 0,187. \end{aligned}$$

Расчет показывает, что присутствует неравномерность распределения газопотоков при данной схеме обвязки. Результаты расчета представлены на рис. 2. При численных оценках считали, что  $\frac{k_1}{k} = 0,01$ . Соответственно, отклонение от равномерного распределения потока на каждом пылеуловителе составляет:

$$\delta_1 = 13 \cdot \% , \delta_2 = 2 \cdot \% , \delta_3 = 3,5 \cdot \% , \delta_4 = 6 \cdot \% , \delta_5 = 6,5 \cdot \% .$$

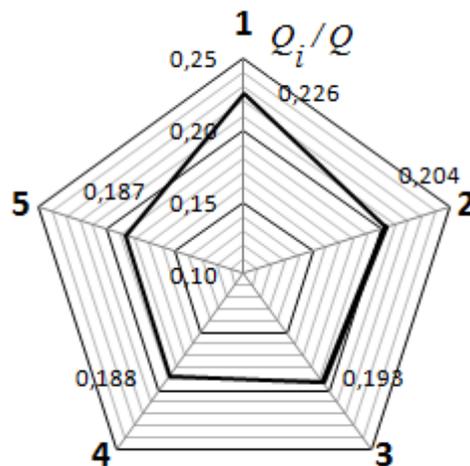


Рис. 2. Соотношение расходов газа  $Q_i/Q$  через блоки пылеуловителей

**Вариант 2.** Подключение блоков пылеуловителей с промежуточным выходом на ГПА посередине между вторым и третьим блоком пылеуловителей представлено на рис. 3. Результаты расчета для  $\frac{k_1}{k} = 0,01$  представлены на рис. 4.

$$\delta_1 = 14 \cdot \% , \delta_2 = 3 \cdot \% , \delta_3 = 3,5 \cdot \% , \delta_4 = 6,5 \cdot \% , \delta_5 = 7 \cdot \% ,$$

или

$$\frac{Q_1}{Q} = 0,228; \frac{Q_2}{Q} = 0,206; \frac{Q_3}{Q} = 0,193; \frac{Q_4}{Q} = 0,187; \frac{Q_5}{Q} = 0,186.$$

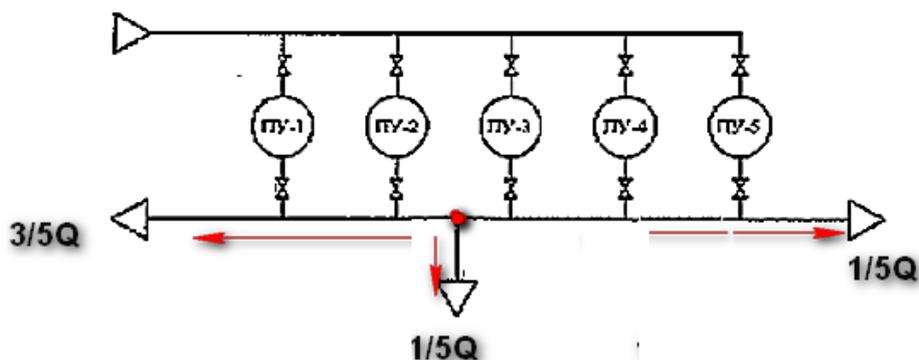


Рис. 3. Схема и определение расходов газа П-образной схемы обвязки блоков пылеуловителей с промежуточным выходом на ГПА посередине между вторым и третьим блоком пылеуловителей

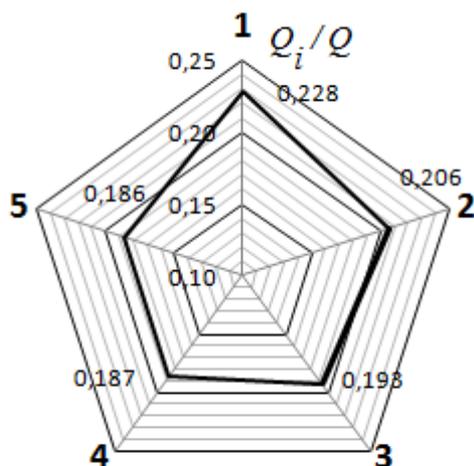


Рис. 4. Соотношение расходов газа  $Q_i/Q$  через блоки пылеуловителей

Предложенный метод изотермического потокораспределения позволяет рассчитать отклонение от равномерного распределения потока на каждом пылеуловителе, которое зависит от схемы подключения блоков пылеуловителей и промежуточного выхода на ГПА.

#### Литература

1. Найфе А.Х. Методы возмущений / А.Х. Найфе. – М.: Мир, 1976. – 454 с.

### MODELING OF THE DISTRIBUTION OF THE GAS FLOW THROUGH THE BLOCK DUST COLLECTORS

S.N. Belyaev, T.T. Aliev, A.A. Fyodorov, N.P. Bogdanov

Ukhta State Technical University

Using the theory of small perturbations, a method is proposed for calculating the isothermal flow distribution to determine deviations from the uniform load of individual units of the apparatus of a gas purification unit from optimum values

Keywords: method of small perturbations, flow distribution, dust collectors

## СТРАТИФИКАЦИЯ ЗАДАЧИ ПРЕДСКАЗАНИЯ УГРОЗЫ ЛЕСНЫХ ПОЖАРОВ МЕТОДАМИ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА

С.А. Колычев

ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж  
[rc@icmail.ru](mailto:rc@icmail.ru)

В настоящее время прогнозирование состояния лесных массивов в зависимости от изменения внешних условий является одной из первоочередных проблем, гарантирующих безопасность близлежащих жилых построек. В докладе предлагается информационно-логическая модель отбора эффективных технологий методами системного анализа

Ключевые слова: отбор эффективных технологий, методы системного анализа, состояние лесных массивов, оценка угрозы лесного пожара, информационно-логическая модель

В настоящее время прогнозирование состояния лесных массивов в зависимости от изменения внешних условий является одной из первоочередных проблем, гарантирующих не только безопасность близлежащих жилых построек, но и уровень экологической обстановки в целом. Поэтому в последнее время вырабатываются различные технологии и проекты технических систем по анализу и прогнозу состояния лесных массивов [1-5, 7-8]. Однако спектр этих технологий достаточно широк и слабо систематизирован. Поэтому в докладе предлагается информационно-логическая модель отбора эффективных технологий методами системного анализа.

Строго говоря, под технологией чаще всего понимается некое знание качества и количества необходимых и достаточных ресурсов и способов их использования для выполнения определённой функции в выбранной сфере деятельности (в данном случае в сфере оценки состояния лесных массивов с целью предотвращения катастрофических последствий). Под ресурсами в широком смысле следует понимать всё, что может привлекаться для выполнения функции. Это могут быть: персонал, материалы, продукты, технические средства, тип и объёмы энергообеспечения, время и области пространства. Для выполнения некоторых функций нужны специфические ресурсы, например, информационные; методическое и программное обеспечения и т.д.

Выбор технологии это всегда принятие некоторого решения. В общем случае процесс принятия решения сводится к семи этапам:

- определение цели (формальная оценка состояния лесных массивов);
- общая постановка задачи;
- определение показателей и критериев эффективности решения;
- генерация возможных альтернативных вариантов решения;
- оценка ожидаемых значений показателей эффективности решения задачи каждым предложенным альтернативным вариантом;
- критериальный отбор приемлемого (наилучшего) варианта решения;
- исследование отобранного варианта решения.

В части, касающейся развития технологий, общий характер этих этапов следующий. На первом этапе принятия решений определяется (идентифицируется) цель в сфере деятельности, в интересах достижения которой будет применяться (создаётся, совершенствуется) развиваемая технология.

На втором этапе уточняются условия, в которых эта цель должна быть достигнута, могут накладываться ограничения на используемые для достижения цели ресурсы или даваться рекомендации по их использованию, т.е. даётся общая формулировка задачи.

Фундаментальным ограничением системотехники является то, что выполнение подсистемой своей функции не гарантирует достижения преследуемой при этом цели в системе [1]. Поэтому на третьем этапе принятия решения вводятся, как правило, численно оцениваемые величины (показатели), характеризующие степень достижения цели и устанавливаются области значений этих величин, при которых задачу можно считать успешно решённой. До этого момента включительно особенности развиваемой технологии не имели значения. Фактически на этом этапе происходит окончательное уточнение задачи безотносительно того как она будет решаться.

На четвёртом этапе принятия решений на основе анализа сформулированной задачи определяется (идентифицируется) функция, выполнение которой способствует достижению цели и возможно в указанных условиях. Затем формируется (синтезируется) множество прототипов (прообразов) реализации функции (т.е. развиваемой технологии) с описанием их параметров и характеристик в объёме, достаточном для оценки введённых на третьем этапе показателей эффективности, т.е. строятся варианты принципиальных решений задачи. Это множество своего рода информационная база процедуры отбора нужной технологии.

На пятом этапе, исходя из достижимых значений параметров и характеристик каждого возможного альтернативного варианта развиваемой технологии, прогнозируется степень достижения преследуемой цели при его применении. Прогнозирование может проводиться по результатам теоретической оценки и/или на основе экспериментальных данных. Результат прогноза кроме характера решаемой задачи определяется, естественно, особенностями того варианта технологии, который оценивается (тестируется экспериментально), т.е. составом, структурой привлекаемых ресурсов, их параметрам и характеристикам, а также параметрам и характеристикам способа применения этих ресурсов.

На шестом этапе проводится проверка полученных на предыдущем этапе значений показателей эффективности прототипов (прообразов) искомой технологии на соответствие введённым на третьем этапе критериям. Как правило, это попадание результата оценки показателя эффективности варианта в область значений, ограниченную заданными критериальными уровнями.

Как правило, принимаемое технологическое решение является частью более сложной технологии и его реализация может влиять на характер других совместно используемых технологических решений. Поэтому на седьмом этапе исследуются проблемы и в возможно полном объёме последствия реализации

отобранных эффективных вариантов развиваемой технологии. Отбор эффективных по основному предназначению вариантов является важной, но не единственной частью процедуры выбора приоритетной технологии. Этот выбор носит многокритериальный характер. Нужно оценивать варианты технологий, и в плане рисков, и в плане экономической целесообразности их реализации. Все такие оценки могут быть отнесены к седьмому этапу процедуры принятия решения, содержанием которого могут быть исследования: доступности ресурсов, затратности, соответствие нормативам, совместимость с другими технологиями, проблемы утилизации и т.д. К этому этапу может относиться собственно реализация и проверка на практике функциональной состоятельности отобранной приоритетной технологии. Для осуществления этого этапа в системном анализе используются специальные многокритериальные методы сравнения альтернатив (например, метод Саати).

Актуальная задача, рассматриваемая в данном докладе, не имеет простых решений. Для ее решения необходимо привлечение квалифицированных исполнителей разной специализации. Для организации совместной работы таких специалистов практикуется анализ и структуризация (детализация) задач с представлением сложной задачи системой более простых подзадач, согласованное решение которых и является решением исходной задачи.

В рамках предложенного подхода при оценке состояния лесных массивов необходимо определиться с целью выбора технологий. В настоящее время целью таких исследований является предотвращение критических ситуаций (пожаров, экологических и техногенных катастроф). При этом выбранные технологии контроля состояния должны работать в широком диапазоне температур и их изменений, в труднодоступных, а иногда и не проходимых местах и в режиме реального времени. Особым вопросом является скудость энергетических источников в природных системах, агрессивная для технических средств окружающая среда.

Анализ литературных источников [2–3] и проведенных нами исследований [4–5,7] показывает, численно оцениваемые величины (показатели) характеризующие состояние лесных массивов должны базироваться на:

- результатах наблюдения за изменениями температуры и влажности окружающей среды;
- оценках отклика ксилемы стволов древесных растений и грунта на изменение внешних факторов (разности потенциалов, измеряемой в стволах деревьев, и влажности почвы);
- результатах измерения относительных изменений химического состава почвы и ксилемы (например, методом ИК-спектроскопии).

На современном этапе решения поставленной задачи именно определение функции связывающей показатели, характеризующие состояние лесных массивов и критерии эффективности (например, вероятность возникновения катастрофической ситуации) является темой актуальных исследований. Без серьезных изучений критических значений вышеуказанных показателей дальнейший вы-

бор технологий затруднен. Данная задача потребует совместной работы специалистов из различных слабо связанных областей науки.

#### Литература

1. Гриднева И.В. Исследование транспорта воды в стволах древесных растений методом математического моделирования [Текст] / И.В. Гриднева, Н.С. Камалова, Н.Ю. Евсикова // Вестник Воронежского государственного аграрного университета. – 2015. № 1 (44). – С. 58-64.
2. Мирцхулава Ц.Е. Об одном подходе прогнозирования крупных лесных пожарных опасностей, уязвимости и их повторяемости [Текст] // Экологические системы и приборы. – 2006. – №5. – С. 19-22.
3. Козин В.В., Петровский В.А. Геоэкология и природопользование. Понятийно-терминологический словарь [Текст] / В.В. Козин, В.А. Петровский. – Смоленск: Изд-во «Ойкумена», 2005. – 576 с.
4. Сканирование электрического поля в стволах древесных растений как метод выявления жизненного состояния [Текст] / Н.Ю. Евсикова [и др.]; Н.Ю. Евсикова, Н.Н. Матвеев, О.М. Корчагин, Н.С. Камалова, В.Ю. Заплетин // Известия высших учебных заведений. Лесной журнал. – 2008. – № 6. – С. 43-49.
5. Термополяризационный механизм сокодвижения в период весеннего равноденствия / Н.Н. Матвеев, Н.С. Камалова, Н.Ю. Евсикова, В.И. Лисицын // Лесотехнический журнал. – 2014. – Т. 4. – № 4 (16). – С. 26-36.
6. Сейдж Э.П. Системотехника. Фундаментальные ограничения и перспективы // ТИИЭР. – 1981. – № 2. – С. 18-31.
7. Электрические поля термического происхождения в природной древесине [Текст] / Н.Ю. Евсикова [и др.]; Н.Ю. Евсикова, В.В. Постников, Н.Н. Матвеев, В.И. Лисицын // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения (INTERMATIC - 2006): материалы Междунар. науч.-техн. конф., Москва, 24-28 октября 2006 г. / под ред. А.С. Сигова. – М.: Энергоатомиздат, 2006. – Ч. 3. – С. 87-89.
8. Камалова Н.С. Модель распределения неоднородного электрического поля термического происхождения по радиальной составляющей в стволе дерева / Н.С. Камалова, Н.Ю. Евсикова, В.И. Лисицын, Н.Н. Матвеев, В.В. Постников, Н.А. Саврасова, В.В. Саушкин // Наука и образование на службе лесного комплекса (к 75-летию ВГЛТА). Материалы междунар. науч.-практ. конф. (к 75-летию ВГЛТА). Воронеж, 2005. – С. 294-297.

## STRATIFICATION OF THE TASK OF PREDICTING THE THREAT OF FOREST FIRES WITH THE METHODS OF SYSTEM ANALYSIS

S.A. Kolichev

Military Educational and Scientific Center Of Military Aircraft  
“Military Aircraft Academy n.a. prof. N.E. Zhukovsky and Yu.A. Gagarin”, Voronezh

Currently, forecasting of forest depending on changes in the external environment is one of the priority issues, guaranteeing not only the safety of nearby residential buildings, but also the level of environmental situation as a whole. The report proposes a logical model of information and selection of effective technologies of system analysis methods

Keywords: selection of effective technologies, methods of system analysis, state of forest massifs, assessment of the threat of forest fire, information-logical model

## МОНИТОРИНГ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ БИОКОМПОЗИТА С ПОМОЩЬЮ ФОРМАЛИЗОВАННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В.И. Лисицын, Н.Н. Матвеев, Н.С. Камалова

Воронежский государственный лесотехнический университет им. Г.Ф. Морозова  
[rc@icmail.ru](mailto:rc@icmail.ru)

В докладе посредством формализованного моделирования проводится анализ отклика слоев древесины на постоянную неоднородность температуры в интервале 290–320 К. С помощью простых оценок показывается, что в рамках такого подхода можно анализировать изменение надмолекулярной структуры сложного композита природного происхождения

Ключевые слова: неразрушающий мониторинг микроструктуры, фибрилообразующие полимеры, разность потенциалов, температурное сканирование, надмолекулярная структура, кристаллиты

Физико-механические свойства сложных пластиков и композитных материалов, используемых в современных технологиях, во многом определяются надмолекулярной структурой их волокнообразующей компоненты. В модифицированной древесине и искусственных пластиках на ее основе (таких как арбоформ) такой составляющей является целлюлоза, в микрофибрилах которой кристаллическая фаза чередуется с аморфной. Исследование микроструктуры волокнообразующей составляющей внутри композита сопряжено с рядом трудностей, обусловленных тем, что его составляющие взаимовлияют друг на друга, что делает надмолекулярное строение этого материала довольно чувствительным к изменениям окружающей среды [1-3]. При этом выделение этой составляющей из композита для исследования чревато изменением ее свойств. Поэтому актуальной является задача разработки методов неразрушающего мониторинга изменений надмолекулярной структуры целлюлозы непосредственно в образцах композита.

В основе таких методов лежит анализ отклика древесины на изменение физического фактора окружающей среды с помощью формализованного моделирования. В качестве параметра, характеризующего отклик надмолекулярной структуры целлюлозы удобно выбрать относительное изменение концентрации кристаллитов, определяемой как

$$\delta = \frac{\Delta n}{n}, \quad (1)$$

где  $\Delta n$  – изменение концентрации кристаллической фазы  $n$  в результате отклика биокompозита на изменение физического фактора окружающей среды. Такими факторами могут быть импульсное магнитное поле, ультразвук или постоянная неоднородность температуры вдоль одного из линейных размеров образца. Экспериментально постоянная неоднородность температуры в слое композита формируется в силу его низкой температуропроводности при медленном нагревании одной из плоскостей слоя с постоянной скоростью  $\beta$ . При таких условиях

нагрева температура электродов при толщине образца  $l_0$  будет отличаться на величину [1-2]

$$\Delta T = K_{yc} l_0 \beta, \quad (2)$$

где  $K_{yc}$  – коэффициент пропорциональности, контролирующей условия проведения эксперимента. В неоднородном температурном поле происходит тепловое расширение наполнителя, приводящее к деформации (сжатию) кристаллита волокнообразующей, значение которого можно оценить как

$$\Delta x = -\alpha \Delta T x = -\alpha K_{yc} l_0 \beta, \quad (3)$$

где  $\alpha$  – коэффициент расширения наполнителя. Тогда с учетом того, что  $n = n_0 \exp(-x/x_k)$ , можно получить оценочное выражение для  $\delta$ :

$$\ln \delta = \ln \frac{\Delta n}{n} = \alpha K_{yc} \frac{l_0^2}{x_k} \beta, \quad (4)$$

где  $x_k$  – размер кристаллита фибриллообразующей. Кристаллиты целлюлозы обладают пьезо- и пироэлектрическими свойствами, поэтому их деформация приводит к возникновению электрического поля термического происхождения, оценочное выражение для разности потенциалов вдоль толщины слоя которого с учетом концентрации кристаллитов можно оценить как [3-8]

$$U = U_0 \delta. \quad (5)$$

Здесь  $U_0 = n_0 (d_R c_R \mu_R \alpha - \gamma_R) \frac{K_{yc} l_0 \beta}{\epsilon_0 \epsilon_R} l_0$  характеризует пьезо- и пироэлектрические свойства волокнообразующей ( $\epsilon_R, \gamma_R, d_R, c_R$  – экспериментально полученные максимальные значения составляющих тензоров диэлектрической проницаемости, пироэлектрического коэффициента, пьезоэлектрических модулей и модуля Юнга для древесины в радиальном направлении соответственно,  $\mu_R$  – отношение модуля Юнга лигнина к модулю Юнга целлюлозы,  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная). Аналитические оценки в соотношениях (1-5) позволяют по разности потенциалов определить изменение надмолекулярной структуры целлюлозы, не разрушая композит. Однако создание режима с постоянной скоростью нагрева сопряжено с рядом трудностей. Скорость нагрева, вообще говоря, зависит от времени, в линейном приближении эту зависимость можно моделировать как

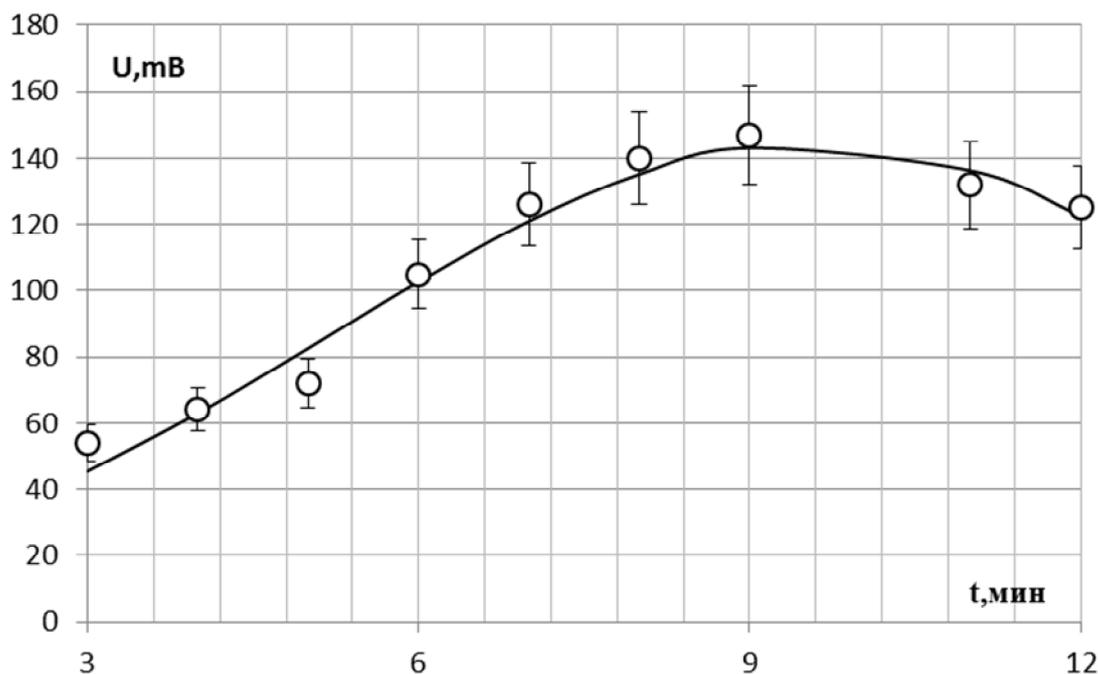
$$\beta(t) = \beta(1 - \chi t), \quad (6)$$

где  $\chi$  – параметр линейной формализации. Согласно экспериментальным данным  $\chi$  составляет 2,8% от  $\beta$ . В рамках такого подхода выражение (5) приобретает вид

$$U(t) = U_0 \exp((1 - 2\chi t) \ln \delta) (1 - \chi t). \quad (7)$$

На рисунке приведены данные измерений  $U(t)$  и оценочные значения, рассчитанные по (7) для определенных значений  $U_0$  и  $\delta$ . Таким образом, с по-

мощью формализованного моделирования параметров зависимости  $U(t)$  (для определенной точности сопоставления экспериментальных данных с параметрической кривой) можно оценить изменение надмолекулярной структуры целлюлозы в древесине и параметры наполнителя. В заключение необходимо отметить, что подобный формализованный подход может лечь в основу экспериментального мониторинга влияния внешних условий на изменение концентрации кристаллитов, которая в свою очередь у многих полимерных композитов не только природного, но и искусственного происхождения является показателем напрямую связанным с такими их характеристиками как прочность, твердость и износостойкость.



Изменение разности потенциалов в тонком слое ( $l_0 \sim 100$  мкм) древесины березы влажностью около 40% при термическом сканировании

#### Литература

1. Матвеев Н.Н. Поляризационные эффекты в кристаллизующихся полимерах [Текст] / Н.Н. Матвеев, В.В. Постников, В.В. Саушкин. – Воронеж: ВГЛТА, 2000. – 170 с.
2. Новый подход к определению степени кристалличности целлюлозы в древесине [Текст] / Н.Ю. Евсикова, Н.С. Камалова, Н.Н. Матвеев, В.В. Постников // Известия РАН. Серия физическая. – 2010. – Т. 74. – № 9. – С. 1373-1374.
3. Матвеев Н.Н. Аномалии тепловых свойств целлюлозы при переходах кристалл-кристалл [Текст] / Н.Н. Матвеев, Н.С. Камалова, Н.Ю. Евсикова // Пластические массы. – 2015. – № 3-4. – С. 30-32.
4. Роль кристаллитов целлюлозы в поляризации биополимерного композита-древесины в неоднородном температурном поле [Текст] / Н.Н. Матвеев, Н.Ю. Евсикова, Н.С. Камалова, Н.И. Коротких // Известия РАН. Серия физическая. – 2013. – Т. 77. – № 8. – С. 1185.
5. Электрические поля термического происхождения в кристаллизующихся полимерах [Текст] / Н.И. Коротких, Н.Н. Матвеев, Н.С. Камалова // Известия РАН. Серия физическая. – 2010. – Т. 74. – № 9. – С. 1370-1372.

6. Евсикова Н.Ю. Степень кристалличности целлюлозы и время релаксации сегментальной подвижности ее макромолекул в неоднородном температурном поле [Текст] / Н.Ю. Евсикова, Н.Н. Матвеев, Н.С. Камалова // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2011. – Т. 7. – № 8. – С. 180-182.

7. Матвеев Н.Н. Роль кристаллитов целлюлозы в поляризации биополимерного композита - древесины в неоднородном температурном поле [Текст] / Н.Н. Матвеев, Н.Ю. Евсикова, Н.С. Камалова, Н.И. Коротких // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2013. – Т. 77. – № 8. – С. 1185.

8. Matveev N.N. Role of cellulose crystallites in the polarization of a biopolymer composite: wood in a nonuniform temperature field [Text] / N.Y. Evsikova, N.S. Kamalova, N.I. Korotkikh, N.N. Matveev // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2013. – Т. 77. – № 8. – С. 1076-1077.

## MONITORING OF THE SUPRAMOLECULAR STRUCTURE OF THE BIOCOMPOSITE USING FORMALIZED MODELING

V.I. Lisitsyn, N.N. Matveev, N.S. Kamalova

Voronezh State Forestry University n. a. G.F. Morozov

The report analyzes the response of wood layers to a constant temperature inhomogeneity in the 290-320 K range through formalized modeling. It is shown with the help of simple estimates that it is possible to analyze the change in the supramolecular structure of a composite of natural origin in the framework of this approach

Keywords: nondestructive monitoring of microstructure, fibril forming polymers, potential difference, temperature scanning, supramolecular structure, crystallites

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИМЕРНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ В СТРУКТУРЕ КЛАСТЕРОВ БЕНЗОЛА

Г.А. Мельников, Н.М. Игнатенко, В.М. Пауков, В.В. Сучилкин

Юго-Западный государственный университет, Курск  
[melnikovga@mail.ru](mailto:melnikovga@mail.ru)

В работе исследуются возможные конфигурации димеров бензола в структуре кластеров. Показано, что можно выделить четыре вида димерных конфигураций в структуре кластеров жидкого бензола. Три димерных конфигурации (L-образные, S-параллельные и Т-конфигурации) подробно изучены в обширной литературе по этому вопросу. Авторам статьи удалось доказать существование четвертой конфигурации молекул бензола, которую обозначили как СС-конфигурация (Chain-configurations – цепные конфигурации) с равновесным расстоянием между центрами масс молекул, равным радиусу первой координационной сферы

Ключевые слова: кластерная модель, димеры, энергия димеризации, конфигурации димеров, Раман спектр, жидкости, углеводороды и их галогенозамещенные

В структуре кластера создаются энергетические условия для образования устойчивого связанного состояния двух частиц вещества – димера, который становится ядром образовавшегося кластера. Димер характеризуется равновесным расстоянием между центрами масс частиц, моментом инерции конфигураций димера, энергией образования возможных конфигураций и временем жизни димера. Многоатомные молекулы способны формировать различные конфигурации. Разработано большое число методов оценки параметров димерных образований, которые дают результаты отличающиеся друг от друга в несколько раз. В работах [1–4] приводятся данные для характеристик различных димерных конфигураций молекул бензола, полученные на основе различных потенциалов взаимодействия в рамках различных моделей.

Структура молекулы бензола является довольно специфической, хорошо изучена различными методами, моделируется в рамках твердых и мягких геометрических фигур при условии, что объем модели совпадает с размерами и объемом реальной молекулы. В нашем случае условием выбора модели молекулы бензола является равенство главных моментов инерции реальной молекулы и предлагаемой модели. В силу высокой симметрии молекулы бензола ее главные моменты инерции имеют значения:  $I_z = 2,926 \cdot 10^{-45} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$ ,  $I_x = I_y = 1,475 \cdot 10^{-45} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$  [5].

Будем моделировать молекулу бензола неоднородным упругим диском, плотность вещества в котором изменяется вдоль радиуса по степенному закону [6]

$$\rho(R) = \rho_0 \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^n \right], \quad (1)$$

тогда момент инерции диска относительно оси  $Z$  будет равен

$$I_Z = 2m_0R^2 \left( \frac{1}{4} + \frac{1}{n+4} \right) = \frac{1}{3}m_0R^2, \quad (2)$$

где  $n = 8$  – показатель степени в формуле (1),  $m_0$  – масса цилиндра, равная массе реальной молекулы.

Радиус такого эффективного диска согласно формуле (2) с использованием экспериментального значения момента инерции [5] составляет величину  $R = 2,60 \text{ \AA}$ , что по данным рентгеноструктурного анализа структуры жидкого бензола соответствует радиусу первой координационной сферы:  $R_1 = 1,122D = 5,84 \text{ \AA}$  [7].

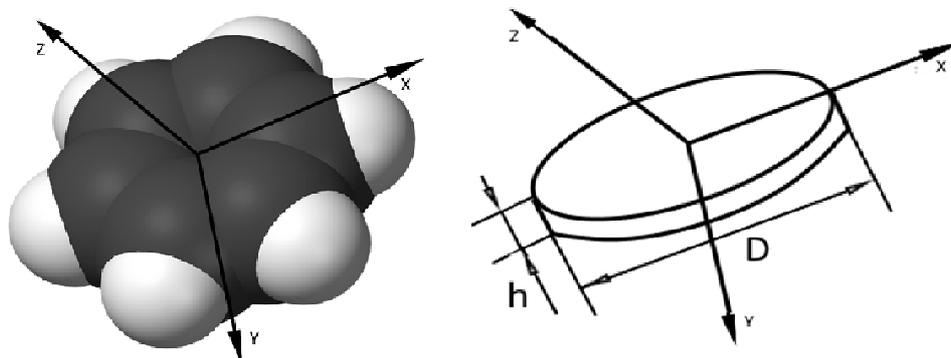


Рис. 1. Моделирование молекулы бензола неоднородным упругим диском диаметром  $D = 5,2 \text{ \AA}$

Выбранная модель молекулы бензола в виде неоднородного диска позволяет построить любую конфигурацию димерного образования молекул и рассчитать главные моменты инерции димера (см. рис. 2).

В работах [8–10, 13] получены соотношения, позволяющие вычислить минимальные частоты либрационных колебаний димеров различных конфигураций в структуре кластеров:

$$\omega_{\min.i}'' = 0,3820 \sqrt{\frac{2\Delta H_{\dim.i}}{J_{\dim.i}}}, \quad \omega_{\min.i}' = 0,2138 \sqrt{\frac{2\Delta H_{\dim.i}}{J_{\dim.i}}}. \quad (3)$$

где  $\Delta H_{\dim.i}, J_{\dim.i}$  – энергия образования и момент инерции димерной конфигурации.

Полный набор частот будет определяться соотношениями [9–11]

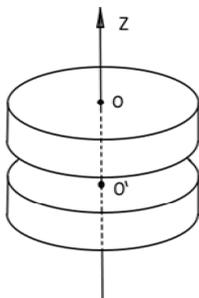
$$\omega_{\dim.i}'' = 0,3820 \sqrt{\frac{2\Delta H_{\dim.i}}{J_{\dim.i}}} \cdot \sqrt{F_i}, \quad \omega_{\min.i}' = 0,2138 \sqrt{\frac{2\Delta H_{\dim.i}}{J_{\dim.i}}} \cdot \sqrt{F_i}, \quad (4)$$

где  $F_i = 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 144, \dots$  – числа Фибоначчи.

Расположив значения минимальных частот либрационных колебаний димеров различной конфигурации, полученные по соотношениям (3) в порядке воз-

растания, можно провести сравнение с экспериментальными данными [11, 12]. В таблице приведены результаты расчетов минимальных частот и экспериментальные данные ИК-спектров, которые показывают хорошее согласие между собой с относительной погрешностью в 10%.

### 1. Sandwich (S)



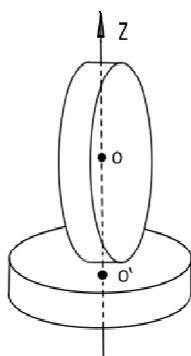
$$J_{O,z} = 2,93 \cdot 10^{-45} \text{ кг} \cdot \text{м}^2,$$

$$J_{S,z} = 2J_{O,z} = 5,86 \cdot 10^{-45} \text{ кг} \cdot \text{м}^2,$$

$$\Delta H_{\text{dim.,s}} = 2,02 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} = 8,46 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = 1019K,$$

$$\omega_{\text{min.,s}} = 73 \text{ cm}^{-1}; \quad \omega' = 27,9 \text{ cm}^{-1}; \quad \omega'' = 15,6 \text{ cm}^{-1}.$$

### 2. T-Shaped

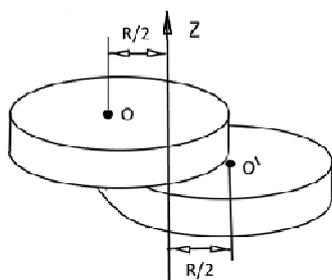


$$J_{T,z} = 1,5J_{O,z} = 4,395 \cdot 10^{-45} \text{ кг} \cdot \text{м}^2,$$

$$\Delta H_{\text{dim.,T}} = 2,82 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} = 11,81 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = 1422K,$$

$$\omega_{\text{min.,T}} = 99,5 \text{ cm}^{-1}; \quad \omega' = 38,0 \text{ cm}^{-1}; \quad \omega'' = 21,2 \text{ cm}^{-1}.$$

### 3. Parallel-displaced configurations (PD)



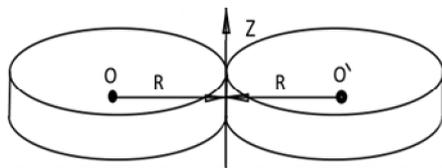
$$J_{PD,z} = 3,0J_{O,z} = 8,79 \cdot 10^{-45} \text{ кг} \cdot \text{м}^2,$$

$$\Delta H_{\text{dim.,PD}} = 3,04 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} = 12,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = 1529K,$$

$$\omega_{\text{min.,PD}} = 73,2 \text{ cm}^{-1}; \quad \omega' = 27,9 \text{ cm}^{-1};$$

$$\omega'' = 15,6 \text{ cm}^{-1}.$$

### 4. Chain-configuration (CC):



$$J_{CC,z} = 6J_{O,z} = 17,58 \cdot 10^{-45} \text{ кг} \cdot \text{м}^2,$$

$$\Delta H_{\text{dim.,CC}} = 3,5 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} = 14,66 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = 1765K,$$

$$\omega_{\text{min.,CC}} = 55,5 \text{ cm}^{-1}; \quad \omega' = 21,2 \text{ cm}^{-1};$$

$$\omega'' = 11,83 \text{ cm}^{-1}.$$

Рис. 2. Модели возможных конфигураций димеров молекул бензола

Минимальные частоты либрационных колебаний димеров  
различной конфигурации

| № | Конфигурация       | $\Delta H_{\text{dim.i}}$ ,<br>kcal/mol | $J_{\text{dim.i}} \cdot 10^{45}$<br>kg · m <sup>2</sup> | $\omega_{\text{min}}^{\prime}, \omega_{\text{min}}^{\prime\prime}$ ,<br>cm <sup>-1</sup> | $\omega_{IR}$ , cm <sup>-1</sup><br>[11, 12] |
|---|--------------------|---|---|--|--|
| 1 | Chain-Config. (CC) | -3,50                                   | 17,58   | 11,8   | 11   |
| 2 | Sandwich (S)       | -2,02                                   | 5,86  | 15,6   | 15   |
| 3 | Paral.-disp. (PD)  | -2,44                                   | 8,79  | 15,6   | 15   |
| 4 | T-shaped (T)       | -2,82                                   | 4,40  | 21,2   | 22   |
| 5 | Chain-Config. (CC) | -3,50                                   | 17,58   | 21,2   | 22   |
| 6 | Sandwich (S)       | -2,02                                   | 5,86  | 27,9   | 27   |
| 7 | Paral.-disp. (PD)  | -2,44                                   | 8,79  | 27,9   | 30   |
| 8 | T-shaped (T)       | -2,82                                   | 4,40  | 38,0   | 40   |

Проведенные расчеты всего ИК-спектра бензола по соотношениям (2) и сравнение с экспериментальными измерениями [11–13] позволяют сделать вывод о применимости предложенной модели образования спектральных полос и их взаимного расположения в ИК-спектрах жидкостей.

Литература

- Schauer M., Bernstein E.R. Calculation of the geometry and binding energy of aromatic dimer: Benzene, toluene and toluene-benzene // *J. Chem. Phys.* 1985. **82(8)**. – P. 2722–2727.
- Зоркий П.М., Лапшина Л.В., Богдан Т.В. Компьютерное моделирование и дифракционные исследования структуры жидкого бензола: (Обзор) // *Журн. структ. химии.* 2008. – Т. 49. – № 6. – С. 541–566.
- Prakash Chandra Jha and all Searching of potential energy curves for the benzene dimer using dispersion-corrected density functional theory // *Phys. Chem.* 2008. **10**. P. 2715–2721.
- Park Y. Ch., Lee J. Sh. Accurate ab Initio Binding Energies of the Benzene Dimer // *J. Phys. Chem. A.* 2006. **110**. – P. 5091–5095.
- Ronne C., Jensly K., Longhane B.J. et al. Temperature dependence of the dielectric function of C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> (1) and of C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>3</sub> (1) measured with THz spectroscopy // *J. Chem. Phys.* 2000. **113(9)**. – P. 3749.
- Мельников Г.А., Игнатенко Н.М. Димерные образования в структуре кластерных систем // Компьютерное моделирование электромагнитных процессов в физических, химических и технических системах (КМЭП-7). Материалы VII Международного семинара (Воронеж, 23 сентября 2016 г.). 2016. – С. 61–64.
- Скрышевский А.Ф. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. М.: Высшая школа. 1980. – 328 с.
- ИК-спектры и магические числа в кластерных системах / Г.А. Мельников, Н.М. Игнатенко, В.Г. Мельников и др. // *Известия Юго-западного государственного университета. Серия Техника и технологии.* 2014. – №4. – С. 96–101.

9. Melnikov G.A., Ignatenko N.M., Melnikov V.G., Cherkasov E.N., Manzhos O.A. Structure of Small Clusters and IR Spectrum Condensed Matters // Journal of Nano- and Electronic Physics. 2015. **7**, **4(2)**. 04087(3pp).

10. Melnikov G.A., Ignatenko N.M., Melnikov V.G., Cherkasov E.N., Manzhos O.A. The melting of cluster systems and nanoparticles models pair potential with an effective potential well // Journal of Nano- and Electronic Physics, 2016. **8**, **3**.03006(4cc).

11. Chelli R., Cardini G., Procacci P., et al. Simulated structure, dynamics, and vibrational spectra of liquid benzene // J. Chem. Phys. 2000. **113(16)**. P. 6851.

12. Bertie J. E., Keefe C. D. Infrared intensities of liquids XXIV: optical constants of liquid benzene-h6 at 25 C extended to  $11.5 \text{ cm}^{-1}$  and molar polarizabilities and integrated intensities of benzene-h6 between 6200 and  $11.5 \text{ cm}^{-1}$  // Journal of Molecular Structure. 2004. **695-696**. P. 39-57.

13. Bertoldi D.S., Millan E.N., Guillermet A.F. Thermodynamics of the melting process in Au nano-clusters: phenomenology, energy, entropy and quasi-chemical modeling // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2017. **111**. P. 286–293.

## SIMULATION OF DIMERIC EDUCATION IN THE STRUCTURE OF BENZENE CLUSTERS.

G.A. Melnikov, N.M. Ignatenko, V.M. Paukov, V.V. Suchilkin

Southwest State University, Kursk

The possible configurations of benzene dimers in the structure of clusters are investigated. It is shown that four types of dimer configurations can be distinguished in the structure of liquid benzene clusters. Three dimeric configurations (L-shaped, S-parallel and T-configurations) are extensively studied in extensive literature on this subject. The authors of the paper succeeded in proving the existence of the fourth configuration of benzene molecules, which was designated as the CC-configuration (Chain-configurations) with an equilibrium distance between the centers of mass of molecules equal to the radius of the first coordination sphere

Keywords: cluster model, dimers, dimerization energy, dimer configurations, Raman spectrum, liquids, hydrocarbons and their halogenated ones

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВРАЩАЮЩИХСЯ МАШИН СИСТЕМ ЭЛЕКТРОСНАБЖЕНИЯ С МАЛОЙ РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ГЕНЕРАЦИЕЙ В ТРЕХФАЗНЫХ КООРДИНАТАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ УРАВНЕНИЙ ПАРКА-ГОРЕВА

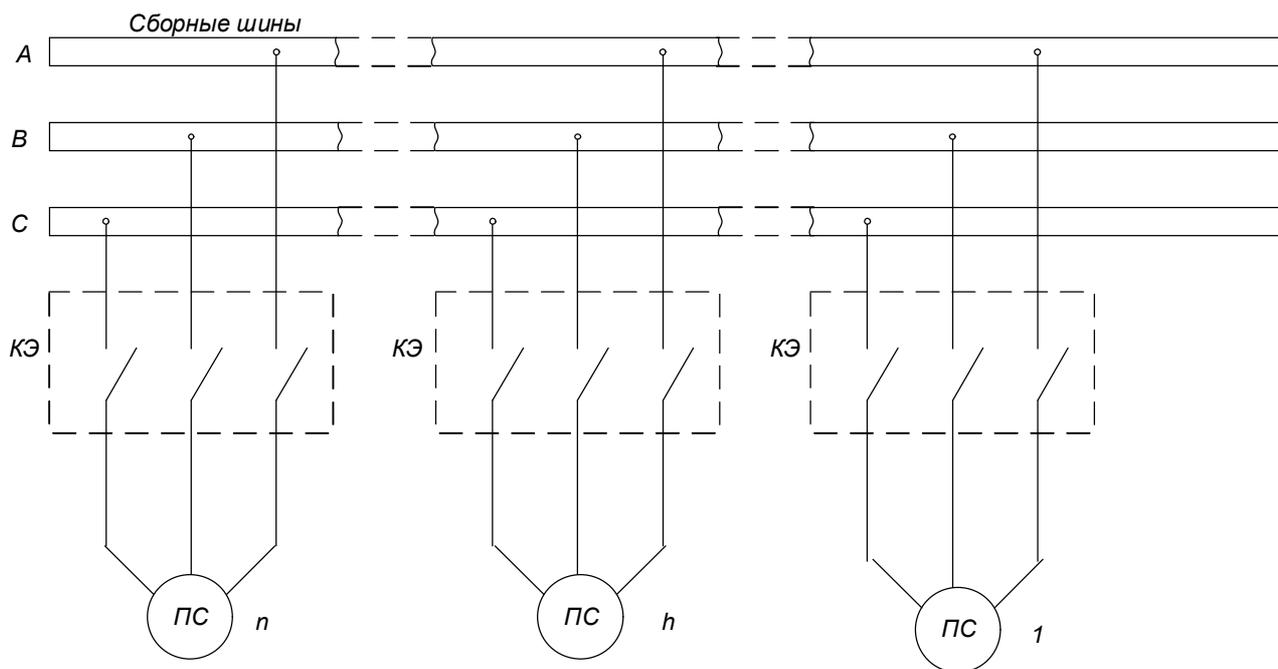
Ю.И. Дёмин, В.Д. Чернокнижников

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь  
[vasik2517@gmail.com](mailto:vasik2517@gmail.com)

Приведена декомпозиция расчетной схемы системы электроснабжения с малой распределенной генерацией на подсистемы и математическое описание подсистем с индуктивностями во всех компонентах. Предложены преобразования уравнений Парка – Горева, описывающие переходные процессы во вращающихся машинах переменного тока, к канонической трехфазной системе координат, удобной для моделирования на ЭВМ в рамках принятой декомпозиции

Ключевые слова: декомпозиция, переходные процессы, система электроснабжения, уравнения Парка-Горева, малая распределенная генерация

К 2016 г. около 70% генерирующих мощностей российских электростанций исчерпали свой ресурс, вопрос об эффективности небольших энергоисточников становится наиболее актуальным для многих строящихся и функционирующих объектов. Одним из путей решения названной проблемы является развитие малой распределенной генерации, включаемой с «низкой» стороны системы электроснабжения 6 – 10 кВ. Рассмотрим расчетную схему такой системы (см. рисунок), на основе которой может быть сформирована имитационная модель, подлежащая исследованию.



Расчетная схема СЭГ

Применим декомпозицию расчетной схемы системы электроснабжения с малой распределенной генерацией (СЭГ), не нарушающей ее естественного физического деления и позволяющей получить ее математическое описание в трехфазной системе координат, понятной специалистам-электроэнергетикам. Кроме того, любая СЭГ из рассмотренного класса схем может быть получена на основе 3-полюсников, включаемых через коммутационные элементы (КЭ) к сборным шинам. Такая декомпозиция осуществляет единообразное деление расчетных схем СЭГ на всех уровнях их детализации, без применения дополнительных условий.

Как уже отмечено подсистемы (ПС), из которых состоит эквивалентная схема СЭГ, имеют структуру 3-полюсников (см. рис.) и подразделяются по наличию либо, отсутствию индуктивных элементов в каждой компоненте. Рассмотрим описание подсистем, содержащих индуктивности во всех компонентах. В общем виде для 3-полюсных подсистем оно имеет вид (см. рис.) [1, 2 и др.]:

$$\frac{dI}{dt} = \Gamma \cdot U^{\gamma+1} + V; \quad (1)$$

где  $U = [U_r^h]$ ,  $\frac{dI}{dt} = \left[ \frac{di_k^h}{dt} \right]$  – векторы линейных напряжений и производных тока  $h$

подсистем соответственно,  $\Gamma = [\Gamma_{kr}^h]$ ,  $V = [V_k^h]$  – матрицы коэффициентов, зависящих от структуры и параметрам подсистем,  $h \in M \subseteq P\{0,1,2 \dots n\}$  – множество номеров подсистем, подключенных к системе сборных шин,  $r, k \in Q \subseteq \{1, 2, 3\}$ ; здесь и далее введены обозначения:  $U_r^h = U_{kk+1}^h$ ,  $U_{r+1}^h = U_{k+1k+2}^h$ ,  $U_{r+2}^h = U_{k+2k}^h$ ;  $[\{k, k+1, k+2\} \in Q \subseteq \{1, 2, 3\}]$ .

Получим описание для 3-полюсных подсистем, являющихся вращающимися машинами. Математическое описание процессов в этих подсистемах осуществляется с помощью уравнений Парка-Горева, полученных в "системе  $x_{ad}$ " для случая, когда ось  $d$  направлена вдоль полюса, а ось  $q$  опережает  $d$  на  $90^\circ$  [3]. Запишем данные уравнения в относительных единицах в виде, удобном для моделирования на ЭВМ (верхний индекс, обозначающий номер подсистемы, опускается для всех величин, участвующих в выводе уравнении вращающихся машин) [1-4]:

$$p\psi_d = -U_d - \psi_q \cdot (1 + S) - r_a \cdot i_d, \quad (2)$$

$$p\psi_q = -U_q + \psi_d \cdot (1 + S) - r_a \cdot i_q, \quad (3)$$

$$p\psi_f = U_f - r_f \cdot i_f, \quad (4)$$

$$p\psi_{\varepsilon d} = -r_{\varepsilon d} \cdot i_{\varepsilon d}, \quad (5)$$

$$p\psi_{\varepsilon q} = -r_{\varepsilon q} \cdot i_{\varepsilon q}, \quad (6)$$

$$pS = \frac{M - (\psi_q \cdot i_d - \psi_d \cdot i_q)}{Hj}, \quad (7)$$

$$p\gamma = 1 + S, \quad (8)$$

где

$$i_q = y_q \cdot \Psi_q + y_{a\dot{e}q} \cdot \Psi_{\dot{e}q}, \quad (9)$$

$$i_{\dot{e}q} = y_{a\dot{e}q} \cdot \Psi_q + y_{\dot{e}q} \cdot \Psi_{\dot{e}q}, \quad (10)$$

$$i_d = y_d \cdot \Psi_d + y_{afd} \cdot \Psi_f + y_{aed} \cdot \Psi_{\dot{e}d}, \quad (11)$$

$$i_f = y_{afd} \cdot \Psi_d + y_f \cdot \Psi_f + y_{\dot{e}d} \cdot \Psi_{\dot{e}d}, \quad (12)$$

$$i_{\dot{e}d} = y_{aed} \cdot \Psi_d + y_{f\dot{e}d} \cdot \Psi_f + y_{\dot{e}d} \cdot \Psi_{\dot{e}d}, \quad (13)$$

$$p = \frac{d}{d\tau}, \quad (14)$$

$$U_d = \frac{2}{3} \left[ U_{BC} \cdot \cos(\gamma - \frac{\pi}{3}) + U_{AB} \cdot S'_{c1} \right], \quad (15)$$

$$U_q = \frac{2}{3} \left[ U_{AB} \cdot \sin(\gamma - \frac{\pi}{3}) + U_{CA} \cdot S_{c2} \right], \quad (16)$$

$$i_k = i_d \cdot S'_{ck} - i_q \cdot S_{ck}, \quad (17)$$

$$\left. \begin{aligned} S'_{ck} &= \cos \gamma_{zk}, \quad S_{ck} = \sin \gamma_{zk}, \quad k \in Q, \\ \gamma_{zk} &= \gamma + (-k + 1) \cdot \frac{2\pi}{3}, \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

$$\left\{ \begin{aligned} y_q &= \frac{x_{\dot{e}q}}{\Delta q}, \quad y_{a\dot{e}q} = -\frac{x_{a\dot{e}q}}{\Delta q}, \quad \Delta q = x_q \cdot x_{\dot{e}q} - x_{a\dot{e}q}^2, \\ y_d &= \frac{x_f \cdot x_{\dot{e}d} - x_{f\dot{e}d}^2}{\Delta d}, \quad y_{afd} = \frac{x_{aed} \cdot x_{f\dot{e}d} - x_{afd} \cdot x_{\dot{e}d}}{\Delta d}, \\ y_{aed} &= \frac{x_{afd} \cdot x_{f\dot{e}d} - x_f \cdot x_{afd}}{\Delta d}, \quad Y_f = \frac{x_d \cdot x_{\dot{e}d} - x_{aed}^2}{\Delta d}, \\ y_{f\dot{e}d} &= \frac{x_{aed} \cdot x_{afd} - x_d \cdot x_{f\dot{e}d}}{\Delta d}, \quad y_{\dot{e}d} = \frac{x_d \cdot x_f - x_{afd}^2}{\Delta d}, \\ \Delta d &= x_d \cdot x_f \cdot x_{\dot{e}d} + 2x_{aed} \cdot x_{afd} \cdot x_{f\dot{e}d} - x_f \cdot x_{aed}^2 - x_{\dot{e}d} \cdot x_{afd}^2 - x_d \cdot x_{f\dot{e}d}^2, \end{aligned} \right. \quad (19)$$

$S(\gamma)$  – скольжение (угол между осью обмотки базы  $a$  и осью  $d$ ),  $H_j(\tau)$  – инерционная постоянная ротора (синхронное время:  $\tau = W_s \cdot t$ ,  $t$  – время,  $W_s$  – угловая синхронная скорость),  $i_{инд}, r_{инд}, y_{инд}, x_{инд}, \Psi_{инд}$  – соответственно токи, активные сопротивления, индуктивные проводимости и сопротивления, потокосцепления для следующих "инд":  $\dot{e}d$  и  $\dot{e}q$  – индексы эквивалентных продольного и поперечного демпферных контуров,  $f, d, q$  – индексы обмотки возбуждения и величин по осям  $d$  и  $q$  соответственно, а  $(k)$  – индексы (мгновенных значений) фазных величин,  $afd, aed$  и т.д. и т.п. соответствуют сочетаниям всех приведенных индексов,  $U_{AB}, U_{BC}, U_{AC}$  – линейные напряжения на полюсах вращающейся машины,  $M$  – механический момент, действующий на вал ротора.

Для получения математического описания процессов в виде (1) необходимо произвести следующие операции:

а) продифференцируем по  $\tau$  уравнение (17);

б) подставим в полученное уравнение выражения для  $i_d$  и  $i_q$ , выведенные из (9)-(13);

в) заменим все  $U_d$  и  $U_q$  в этом уравнении выражениями из (15) и (16) и сгруппируем полученное к виду, применяемому для напряжений в трехфазной системе;

г) переведем все выходные переменные (ток и время) уравнения в именованные единицы путем умножения на базисные величины [3, 4].

В этом случае элементы матриц коэффициентов из (1) применительно к вращающейся машине, описанной уравнениями (2)-(19), будут иметь вид:

$$\left. \begin{aligned} \left[ \Gamma_{kr} \right] &= (B_{ck} - B') \cdot \left[ \delta_{kr} \right] + B_{ck} \left[ \tilde{n}_{kr} \right] + (B_{ck+2} - B') \cdot \left[ \eta_{kr} \right], \\ \left[ V_{kr} \right] &= B_1 \cdot S_{ck}^1 + B_2 \cdot S_{ck}, \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

$$E = \left[ \delta_{kr} \right] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad N = \left[ \eta_{kr} \right] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{n} = \left[ \tilde{n}_{kr} \right] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где

$$\left. \begin{aligned} B_{ck} &= \frac{\Omega \cdot \sqrt{3} \cdot A}{9L_{\bar{\sigma}}} \cdot \sin \left[ 2\gamma + (1 - \Omega) \cdot \frac{\pi}{6} \right], \quad A = Y_d - Y_q, \\ B' &= \frac{1}{3L_{\bar{\sigma}}} (Y_d + Y_q), \quad k, r \in Q; \quad \Omega = \begin{cases} 1, & \text{если } k = 1, \\ -1, & \text{если } k = 2, 3, \end{cases} \\ B_1 &= \left[ F_d - i_q \cdot (1 + S) \right] \cdot W_S \cdot i_{\bar{\sigma}}, \quad B_2 = \left[ F_q - i_d \cdot (1 + S) \right] W_S \cdot i_{\bar{\sigma}}, \\ F_d &= Y_d \cdot \left[ \psi_q \cdot (1 + S) - r_a \cdot i_d \right] + Y_{afd} \cdot \left[ U_f - r_f i_f \right] - Y_{aed} \cdot r_{эд}, \\ F_q &= Y_q \cdot \left[ \psi_d (1 + S) + r_a \cdot i_q \right] + Y_{aeq} \cdot r_{эq} \cdot i_{эq}, \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

$L_{\bar{\sigma}}, i_{\bar{\sigma}}$  – соответственно базисные индуктивности и ток.

Уравнения (2)-(21) являются математическим описанием процессов во вращающихся машинах (подсистемах) в канонической трехфазной системе координат, удобной для моделирования на ЭВМ.

#### Литература

1. 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.

2. Демин Ю.И., Альперович В.Р., Рубашов Г.М. Математическая модель и алгоритм определения напряжений в системе электроснабжения с тиристорными выключателями // Исследования и разработка в области технологии электромонтажного производства и промышленной электроэнергетики: Тр. ВНИИПЭМ. – 1981. – Вып. 8. – С. 87-93.

3. Важнов А.И. Основы теории переходных процессов синхронной машины. – Л.: Госэнергоиздат, 1960.

4. Важнов А.И. Переходные процессы в машинах переменного тока. – Л.: Энергия, 1980. – 256 с.

## SIMULATION OF ROTATING MACHINES OF ELECTRICAL SUPPLY SYSTEMS WITH SMALL DISTRIBUTED GENERATION IN THREE-PHASE COORDINATES WITH APPLICATION OF PARQUE-HOREV EQUATIONS

Yu.I. Dyomin, V.D. Chernoknizhnikov

North-Caucasian Federal University, Stavropol

Decomposition of the design scheme of a power supply system with a small distributed generation into subsystems and a mathematical description of subsystems with inductances in all components. The transformations of the Parque-Horev equations describing the transient processes in rotating AC machines are proposed to the canonical three-phase coordinate system, convenient for computer simulation in the framework of the accepted decomposition

Keywords: decomposition, transients, power supply system, Parque-Horev equations, small distributed generation

## АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛЕВИТАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ВТСП

И.М. Шушлебин, В.М. Кармазин

Воронежский государственный технический университет  
[shushlebin@mail.ru](mailto:shushlebin@mail.ru)

Изучалась возможность применения неодимовых магнитов для левитации ВТСП

Ключевые слова: ВТСП, левитация, постоянный магнит, остаточное намагничивание

ВТСП считаются перспективными для создания устройств, использующих явление левитации. К ним относятся магнитные подшипники, маховики – накопители механической энергии.

Сверхпроводящие подшипники обладают свойствами, которые существенно отличают их от механических подшипников. К ним относятся крайне низкая сила трения и отсутствие соприкасающихся движущихся поверхностей. Из этого автоматически следует отсутствие потребности в смазке, возможность работать в вакууме или в сверхчистых помещениях, при низких температурах, а также при высоких скоростях движения. По сравнению с другими типами бесконтактных подшипников, наиболее распространенными из которых являются системы с активной обратной связью, сверхпроводящие подшипники обладают крайне простой конструкцией и хорошей способностью подавлять колебания [1].

Существуют проекты и отдельные попытки использовать сверхпроводящие подшипники (и просто подвесы) в следующих приборах: маховиковые накопители энергии, поезда на магнитном подвесе, подшипники для крионасосов и для турбинных расходомеров криогенных жидкостей, чувствительные детекторы давления газа, чувствительные гироскопы и гравиметры, высокоскоростные машины.

Среди перечисленных применений наибольшее развитие получила технология сверхпроводящих подшипников для применения в маховиковых накопителях энергии. В сверхпроводящих подшипниках удастся получить коэффициент трения (определяемый как отношение силы трения к весу ротора) лучше  $10^{-7}$ , в то время как для роликовых подшипников типичен коэффициент трения порядка  $10^{-3}$ . Сейчас технология позволяет изготавливать компактные ВТСП подшипники с предельной несущей способностью до 1 тонны.

С другой же стороны в последние десятилетие прошлого века появились постоянные магниты нового типа, способные изменить сам подход к конструированию сверхпроводящих левитационных систем. Редкоземельные магниты – это магниты, произведенные с добавлением элементов группы лантана. Двумя элементами этой группы, наиболее часто используемыми при производстве по-

стоянных магнитов, являются неодим и самарий. Существует большое количество смесей и сплавов с использованием этих элементов, но наиболее часто используются сплавы неодим-железо-бор (NdFeB) и самарий-кобальт (SmCo). Магниты NdFeB охватывают различные области применения. Неодимовый магнит, как правило, это сплав неодима, бора и железа, образующий  $Nd_2Fe_{14}B$  тетрагональную кристаллическую структуру. Величина их магнитной энергии способна более чем в 18 раз превысить таковую у обычных магнитов.

Для исследований левитации в системе ВТСП – NdFeB разработан стенд, схематически представленный на рис. 1.

Установка включает в себя азотную ванну 1, представляющую собой параллелепипед длиной 350 мм, шириной 240 мм, высотой 183 мм и толщиной 45 мм, выполненный из ламинированного пенопласта. Постоянный магнит 3 является спечённым редкоземельным магнитом NdFeB, диаметром 30 мм, длиной 50 мм, находящийся между двумя равными полосками ламинированного пенопласта, фиксирующими его положение.

Трубка 5 выполнена из нержавеющей стали диаметром 10 мм, длиной 240 мм, в которую входит зонд 6 с меньшим диаметром 6 мм, длиной 290 мм, с закреплённым на конце датчиком Холла и медь константановой термопарой. С помощью креплений 8 трубка с измерительной частью непосредственно подаётся к поверхности образца. Электрические выводы, расположенные внутри зонда 6, проходят через вакуумный разъем к контактам измерительной схемы. Через заливные отверстия 9 криоагент 2 (азот) подаётся в пространство азотного резервуара.

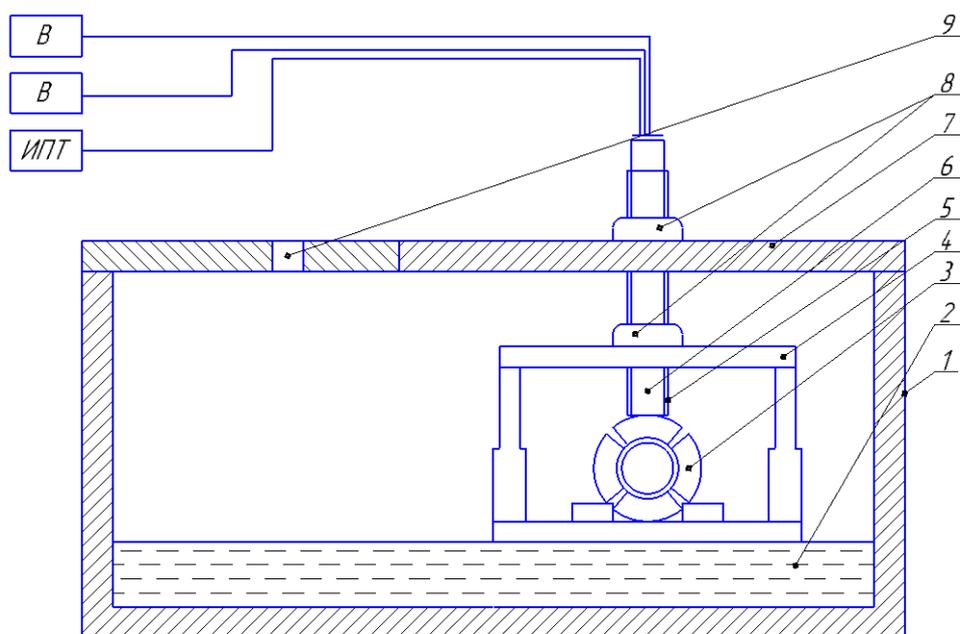


Рис. 1. Стенд для исследований левитации в системе ВТСП – NdFeB: 1 – азотная ванна; 2 – криоагент; 3 – магнит; 4 – экспериментальная камера; 5 – трубка из нержавеющей стали; 6 – зонд; 7 – крышка; 8 – крепление; 9 – заливное отверстие; В – вольтметр; ИПТ – источник постоянного тока

При контроле магнитной системы чувствительным элементом является датчик Холла, который подключен к источнику питания АКПП – 1123. Номинальный управляющий ток 100 мА. Сигнал с датчика Холла поступает на универсальный вольтметр В7 – 78/1. Регистрация результатов измерения производится автоматически через интерфейс вольтметра с компьютером, на котором установлена специализированная программа В7 – 78РВ–Tool. Компьютерная обработка результатов измерений проводилась с помощью программ OriginPro 8 и Excel. Регистрация данных каждые 5 сек.

Применение неодимового магнита требует знания температурной зависимости его остаточной индукции. При её определении погрешность составляла по температуре  $\pm 1^\circ\text{C}$ , по индукции 0,24 %.

Были выявлены достаточно типичные для сильномагнитных сплавов и соединений аномалии температурной зависимости намагничивания – рис. 2. При охлаждении (кривая 1) первоначально имеем ожидаемое для ферромагнетика увеличение намагничивания – область температур от комнатной до  $-100^\circ\text{C}$ . В интервале же температур от  $-100^\circ\text{C}$  до  $-120^\circ\text{C}$  наблюдается существенное уменьшение величины индукции (порядка 20 %). В дальнейшем вплоть до  $-196^\circ\text{C}$  намагничивание оставалось постоянным.

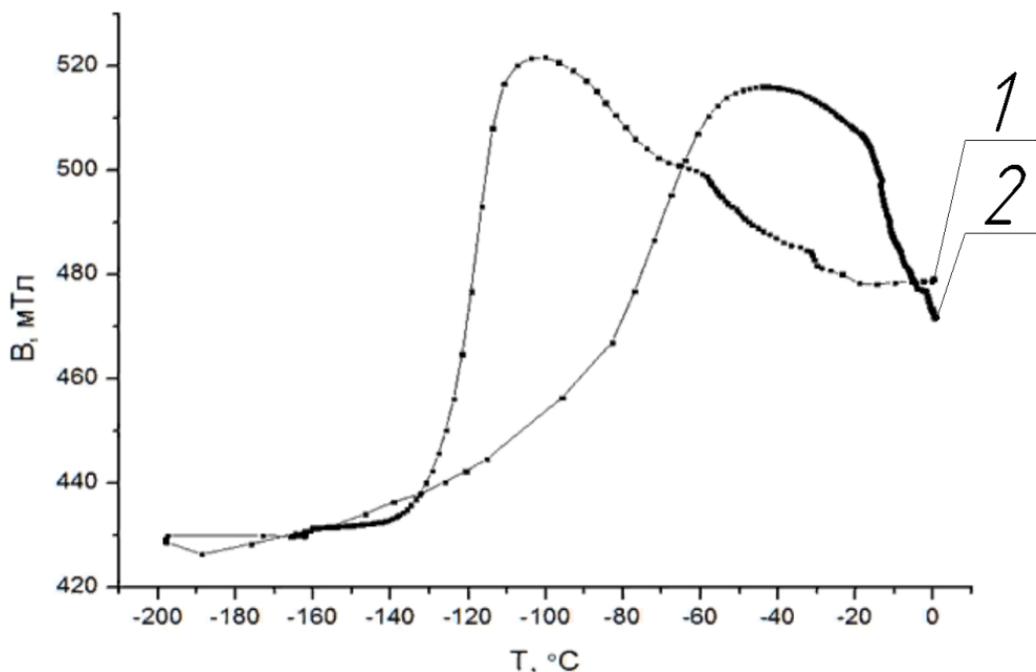


Рис. 2

Такие аномалии обычно объясняют фазовыми преобразованиями в сложных соединениях, например [2]. В таком соединении имеется две магнитные фазы с противоположными ориентациями магнитных моментов и разными температурами Кюри. Тогда можно предположить, что в области  $-120^\circ\text{C}$  лежит температура Кюри низкотемпературной фазы. Разупорядочивание этой системы спинов влечёт усиление влияния высокотемпературной фазы.

На обратном ходе (кривая 2) выявилось такая аномалия температурной зависимости намагничивания, как несовпадение обратного с прямым. В теории ферромагнетизма такие явления объясняют упорядочиванием магнитной системы при охлаждении с последующим разрушением возникающих сверхструктур при нагревании [2].

Многократное повторение термоциклов сопровождалось определёнными изменениями деталей зависимостей, но отмечается сохранение общего вида.

Таким образом, умеренное уменьшение и слабая зависимость остаточного намагничивания неодимового магнита в азотной области температур позволяет рассчитывать на его применение для левитации ВТСП.

#### Литература

1. Ермолаев Ю.С. Применение высокотемпературных сверхпроводников в подшипниках и бесконтактных опорах / Ю.С. Ермолаев, И.А. Руднев // В кн.: Труды научной сессии МИФИ-2007. – Т. 4. – С. 177-179.

2. Дорфман Я.Г. Магнитные свойства и строение вещества / Я.Г. Дорфман. – М.: ЛКИ, 2010. – 376 с.

## AUTOMATED EQUIPMENT FOR INVESTIGATION OF LEVITATIONAL PROPERTIES OF HTSC

I.M. Shushlebin, V.M. Karmazin

Voronezh State Technical University

The possibility of using neodymium magnets for levitation of high-temperature superconductors was studied

Keywords: HTSC, levitation, permanent magnet, residual magnetization

## ДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ТРАНСПОРТНЫХ ХОЛОДИЛЬНЫХ УСТАНОВКАХ

И.М. Шушлебин, Е.В. Дворецкая

Воронежский государственный технический университет  
[shushlebin@mail.ru](mailto:shushlebin@mail.ru)

В целях оптимизации потребления электрической энергии предложена модель, позволяющая определять периодичность включения системы охлаждения холодильных установок

Ключевые слова: тепловая защита, охлаждение, температура охлаждаемого помещения

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.

Экономичность работы холодильной установки зависит от системы охлаждения, типа машин, состояния оборудования, степени автоматизации производственных процессов и др. В рефрижераторных вагонах могут быть использованы компрессионные, абсорбционные и другие холодильные машины. Однако в существующих поездах, секциях и автономных вагонах применяют только компрессионные машины. Решающим преимуществом использования компрессионных машин в транспортных установках является относительно малый расход электроэнергии. Электрический обогрев, необходимый для работы абсорбционной машины, приводит к пятикратному увеличению расхода электроэнергии, что значительно усложняет применение ее в условиях подвижного состава [1].

В целях оценки времени подготовки к рейсу рефрижераторного вагона использована следующая модель. Скорость изменения температуры помещения (аппарата)  $t_{пм}$  определяется разностью между теплопритоком  $Q_{п}$  и теплоотводом  $Q_{о}$ :

$$dt_{пм}/d\tau = (Q_{п} - Q_{о})/C.$$

Теплоприток  $Q_{п} = k_1 F_1(t_{н} - t_{пм})$ , где  $k_1$  – коэффициент теплопередачи ограждения,  $F_1$  – площадь ограждения,  $t_{н}$  – температура наружного воздуха (окружающей среды).

При включении системы охлаждения возникает теплоотвод  $Q_0 = k_2 F_2 (t_{\text{пм}} - t_0)$ , где  $k_2$  – коэффициент теплообмена системы охлаждения,  $F_2$  – площадь испарителя системы охлаждения,  $t_0$  – температура хладагента в испарителе.

Для температуры аппарата  $t_{\text{пм}}$  получаем уравнение

$$C dt_{\text{пм}}/d\tau = k_1 F_1 (t_{\text{н}} - t_{\text{пм}}) - k_2 F_2 (t_{\text{пм}} - t_0).$$

Приходим к уравнению

$$C dt_{\text{пм}}/d\tau = M_1 - M_2 t_{\text{пм}},$$

где  $M_1 = k_1 F_1 t_{\text{н}} + k_2 F_2 t_0$ ,  $M_2 = k_1 F_1 + k_2 F_2$ .

Решение уравнения имеет вид

$$Y = A \exp\{-\tau/\tau_0\},$$

где  $A = Y(0) = k_2 F_2 (t_{\text{н}} - t_0)$  – 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  $t_{\text{пм.рав.}} = M_1/M_2 = (k_1 F_1 t_{\text{н}} + k_2 F_2 t_0)/(k_1 F_1 + k_2 F_2)$ , а  $B = k_2 F_2 (t_{\text{н}} - t_0)/(k_1 F_1 + k_2 F_2)$ .

Сравнивались процессы при различной температуре окружающей среды в условиях наиболее прогрессивной тепловой защиты из пенополиуретана – см. рис. 1 (35<sup>0</sup>С), рис. 2 (25<sup>0</sup>С), рис. 3 (20<sup>0</sup>С).

Результаты позволяют сделать вывод, что колебания температуры окружающей среды в летнем диапазоне значений от 20 до 35<sup>0</sup>С изменяет время подготовки вагона на 4 – 5 часов. В этой связи представляется нецелесообразным поддерживать в холодильном вагоне низкую температуру при его длительных (более четырех суток) стоянках между рейсами.

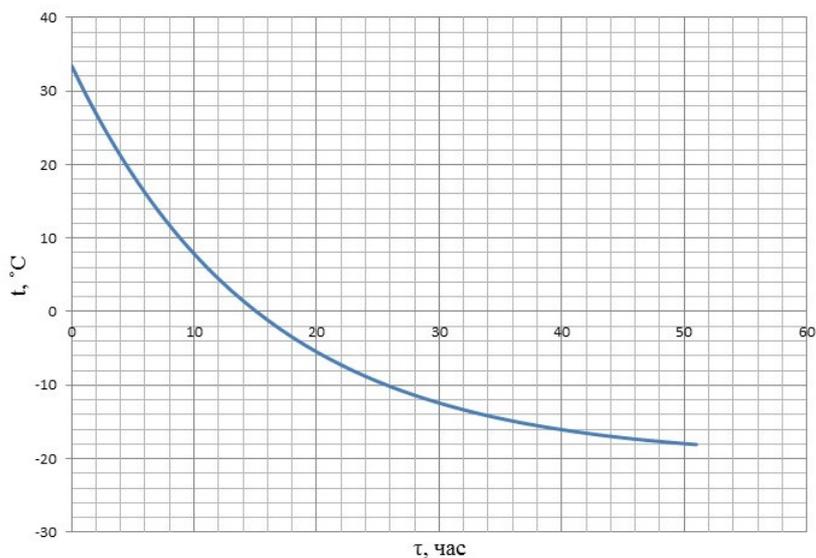


Рис. 1

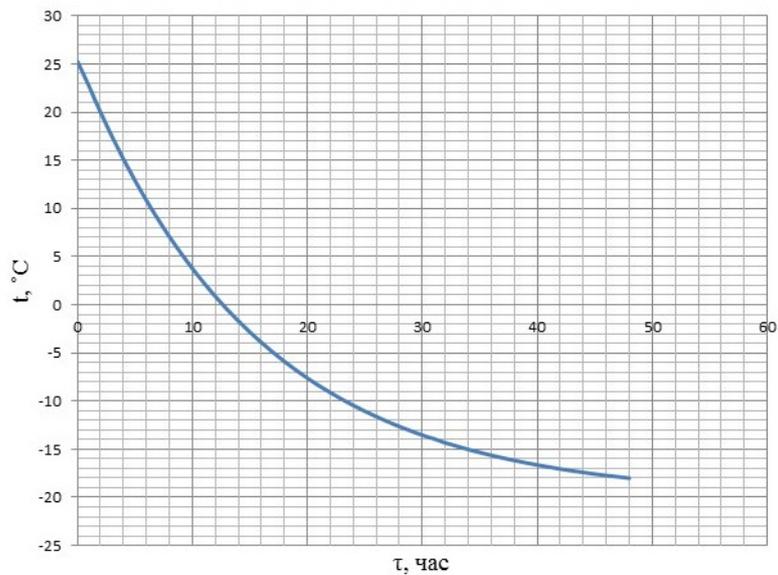


Рис. 2

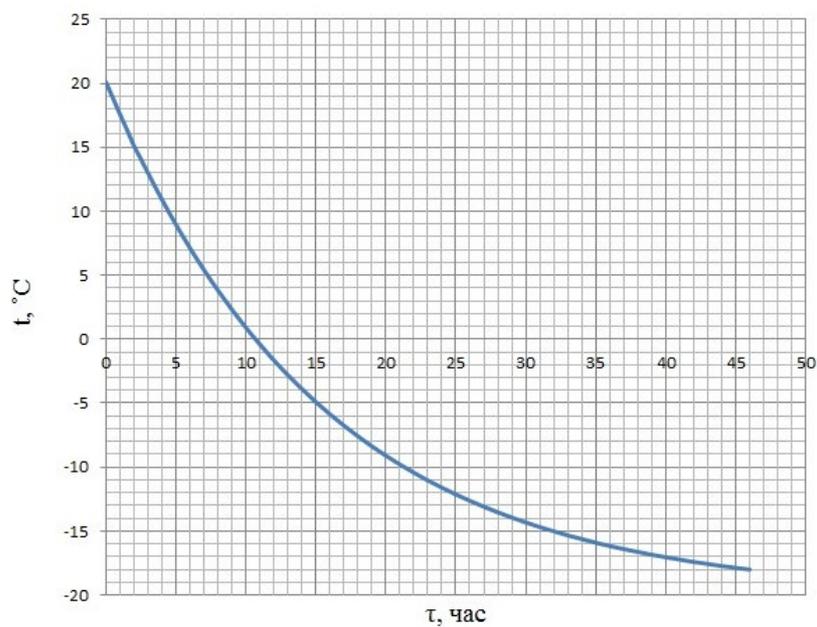


Рис. 3

Литература

1. Постольски Я., Груда З. Замораживание пищевых продуктов / Я. Постольски, З. Груда. – М.: Пищевая промышленность, 1978. – 607 с.

DYNAMIC PROCESSES IN TRANSPORT REFRIGERATION PLANTS

I.M. Shushlebin, E.V. Dvoretzkaya

Voronezh State Technical University

In order to optimize the consumption of electric energy, a model is proposed that allows to determine the frequency of the cooling system cooling system activation

Keywords: thermal protection, cooling, temperature of the cooled room

## СИСТЕМА КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ВОЛНОВОМ ТВЕРДОТЕЛЬНОМ ГИРОСКОПЕ

И.Л. Батаронов, Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков, В.В. Пешков, С.В. Писарев

Воронежский государственный технический университет  
[vmfmm@mail.ru](mailto:vmfmm@mail.ru)

Описаны структура и функциональные возможности системы компьютерного моделирования гравиинерциальных датчиков и вычислительные эксперименты со сверхпроводящими конструктивными элементами датчиков

Ключевые слова: метод конечных элементов, комплексы программ, компьютерное моделирование, гравиинерциальный датчик, сверхпроводящие подвесы

Волновые твердотельные гироскопы (ВТГ) – это перспективные устройства навигационной техники, не имеющие вращающихся частей, обладающие долговечностью работы, малыми массо-габаритными параметрами и энергопотреблением, слабой чувствительностью к вибрациям и перегрузкам [1]. 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 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 [2]. Однако в случае цилиндрического ВТГ с более сложной формой подвеса резонатора и использующего пьезоэлектрические преобразователи для раскачки и съёма сигнала, аналитические методы теряют свою эффективность. Необходим численный анализ математических моделей ВТГ. Так в работе [3] методом конечных элементов были рассчитаны формы и частоты собственных колебаний цилиндрических резонаторов ВТГ, а также термоупругие потери в них.

Физико-механические процессы в ВТГ можно описать в рамках общих теорий электротермоупругости сплошных сред [4-7], введя объёмные инерционные силы, обусловленные вращением и вибрациями объекта, на котором установлен ВТГ [8].

Система связанных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающая эти процессы, имеет вид:

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + 2\rho \boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\rho \mathbf{W} + \rho \mathbf{r} \times \dot{\boldsymbol{\Omega}} + \rho \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} \times \boldsymbol{\Omega},$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) + T_0 \boldsymbol{\alpha} : \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = 0,$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0,$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0},$$

где  $\rho$  – плотность материала,  $c_p$  – удельная теплоёмкость,  $T_0$  – заданная температура,  $T$  – скалярное температурное поле,  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор,  $\mathbf{W}$  – линейное ускорение,  $\boldsymbol{\Omega}$  – угловая скорость,  $\mathbf{u}$  – векторное поле смещений,  $\mathbf{E}$  – вектор напряжённости электрического поля,  $\mathbf{D}$  – вектор индукции электрического поля,  $\boldsymbol{\sigma}$  – тензор напряжений второго ранга,  $\mathbf{k}$  – тензор коэффициентов теплопроводности второго ранга,  $\boldsymbol{\alpha}$  – тензор коэффициентов теплового расширения.

Используются линейные материальные соотношения

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : (\mathbf{s} + \beta \dot{\mathbf{s}}) - \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{E},$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{e} : \mathbf{s} + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{E},$$

$$\boldsymbol{\epsilon} = \epsilon_0 \boldsymbol{\epsilon}_r.$$

Электрическое поле выражается через скалярный потенциал  $\varphi$ :

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi.$$

Здесь  $\mathbf{c}$  – тензор модулей упругости 4-го ранга,  $\mathbf{s} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^*)$  – тензорное поле деформаций 2-го ранга,  $\mathbf{e}$  – тензор пьезоэлектрических модулей 3-го ранга,  $\epsilon_0$  – абсолютная диэлектрическая проницаемость,  $\boldsymbol{\epsilon}_r$  – тензор относительной диэлектрической проницаемости материала 2-го ранга,  $\beta$  – коэффициент демпфирования в модели вязкости Рэлея.

Для нахождения собственных частоты и форм колебаний решается краевая задача для уравнения

$$-\rho \omega^2 \mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0,$$

с граничными условиями

$$\mathbf{u} = \mathbf{0},$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0.$$

Здесь  $\omega = 2\pi f$ ,  $f$  – собственная частота,  $\mathbf{n}$  – единичный вектор нормали к границе области решения задачи.

Демпфирование вводится путём модификации соотношения для тензора напряжений:

$$\boldsymbol{\sigma} = (1 + iQ^{-1})\mathbf{c} : \mathbf{s},$$

где  $Q^{-1}$  – безразмерный коэффициент демпфирования.

Для определения отклика ВТГ на моногармоническое электромеханическое возбуждение и термоупругих потерь решается краевая задача для системы уравнений при разных значениях параметра  $\omega$ :

$$-\rho\omega^2\mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0},$$

$$i\omega\rho_0c_pT - \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) + Q + i\omega T_0\boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{\sigma} = 0$$

с граничными условиями

$$\mathbf{u} = \mathbf{0},$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0,$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = F_A,$$

$$-\mathbf{n} \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) = 0.$$

Здесь  $F_A$  – амплитуда гармонической нагрузки действующей на границу.

Временная зависимость отклика ЧЭ на электромеханическое возбуждение даётся решением смешанной краевой задачи для системы уравнений

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0},$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0,$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0$$

с начальными условиями

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{0},$$

$$\dot{\mathbf{u}}_0 = 0$$

и граничными условиями

$$\mathbf{u} = \mathbf{0},$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0,$$

$$\varphi = 0,$$

$$\varphi = \varphi_{\sim},$$

$$\int_{\partial S} \rho_s dS = 0,$$

где  $\varphi_{\sim}$  – заданная функция времени,  $\partial S$  – часть границы области решения задачи  $V$ .

Для решения рассмотренных краевых задач используется интегрированная система компьютерного моделирования физических процессов в гравиинерциальных датчиках, разработанная на кафедре высшей математики и физико-математического моделирования ВГТУ. С её помощью проводились вычислительные эксперименты со сверхпроводящими подвесами пробных тел гравиинерциальных датчиков (акселерометров, гравиметров, гравитационных градиентометров и гироскопов) [9-20].

В состав системы входит постоянно расширяемая электронная база данных, содержащая информацию о существующих разработках и исследованиях гравиинерциальных датчиков, а также о физико-математических моделях и комплексах программ которые могут использоваться для компьютерного моделирования физических процессов в конструктивных элементах датчиков.

Используемая программная среда состоит из систем компьютерной математики Maple 14 (лицензионная) [21] и Scilab (свободно распространяемая) [22], конечно-элементного комплекса программ Elmer (свободно распространяемый) [23], конечно-элементной системы Comsol Multiphysics 4.2 (лицензионная) [24] и конечно-элементного пакета программ FEMPD Solver (свободно распространяемый) [12, 13, 16, 18].

FEMPD Solver предназначен для численного решения дифференциальных уравнений эллиптического и параболического типов в двухмерных и трёхмерных многосвязных областях сложной формы с разрезами. Его отличительной особенностью является возможность учета скачка зависимой переменной на разрезе и заданного потока её градиента через поверхность (линию) разреза. Это позволяет учесть специфику электродинамики сверхпроводящих токонесущих систем в мейсснеровском состоянии и производить расчёт распределения создаваемого ими магнитного поля, используя магнитный скалярный потенциал, что существенно уменьшает число степеней свободы по сравнению с расчётом на основе векторного магнитного потенциала.

В состав интегрированной программной среды также входят программный модуль для численного решения системы интегральных уравнений Фредгольма 1-го и 2-го рода с логарифмической сингулярностью ядра [17], написанный на внутреннем языке Maple 14, и программа, реализованная средствами Scilab, предназначенная для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих динамику левитирующего в неоднородном магнитном поле сверхпроводящего тела [19].

Разработанная система компьютерного моделирования может быть использована для расчёта параметров конструктивных элементов вибрационных акселерометров и гироскопов, использующих пьезоэлектрические преобразователи.

#### Литература

1. Лунин Б.С., Матвеев В.А., Басараб М.А. Волновой твердотельный гироскоп. Теория и технология. М.: Радиотехника, 2014. 176 с.
2. Басараб М.А., Кравченко В.Ф., Матвеев В.А. Математическое моделирование физических процессов в гироскопии. М.: Радиотехника, 2005. – 176 с.
3. 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.
4. Партон В.З., Кудрявцев Б.А. Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и проводящих тел. М.: Наука, 1988. – 472 с.
5. Можен Ж. Механика электромагнитных сплошных сред. М.: Мир, 1991. – 560 с.
6. Карнаухов В.Г., Михайленко В.В. Нелинейная термомеханика пьезоэлектрических неупругих тел при гармоническом нагружении. Житомир: ЖДТУ, 2005. – 428 с.
7. Наседкин А.В., Наседкина А.А. Конечно-элементное моделирование связанных задач. Ростов-на-Дону. ЮФУ, 2015. – 178 с.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1973. – 208 с.
9. Шунин Г.Е. Возможности датчиков гравиинерциальных систем / Г.Е. Шунин, В.Н. Ястребков // Приборы и системы управления. – 1990. – № 4. – С. 29-31.
10. Шунин Г.Е. Моделирование чувствительного элемента криогенного гравивариометра / Г.Е. Шунин, В.Н. Ястребков // Известия Академии наук. Серия Физическая. – 1997. – Т. 61. – № 5. – С. 886-892.

11. Моделирование магнитомеханических процессов в сверхпроводниковых гравиинерциальных датчиках / С.А. Кострюков, М.В. Матвеева, В.В. Пешков, Г.Е. Шунин // Известия Академии наук. Серия Физическая. – 2000. – Т. 64. – № 9. – С. 1705-1711.
12. Шунин Г.Е. Компьютерные системы конечно-элементного анализа электромагнитных процессов / Г.Е. Шунин // Известия Академии наук. Серия физическая. – 2004. – Т. 68. – № 7. – С. 1012-1018.
13. Пакет программ FEMPDESolver 2.0 для конечно-элементного анализа сверхпроводящих токонесущих систем / Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков, В.В. Пешков и др. // Известия Академии наук. Серия физическая. – 2004. – Т. 68. – № 7. – С. 1038-1044.
14. Компьютерное моделирование сферического сверхпроводящего подвеса / Л.И. Батаронов, С.А. Кострюков, В.В. Пешков, Г.Е. Шунин // Известия Академии наук. Серия Физическая. – 2006. – Т. 70. – № 8. – С. 1138-1140.
15. Батаронова М.И. Компьютерное моделирование левитации мезоскопической сверхпроводящей сферы в неоднородном магнитном поле/ М.И. Батаронова, С.А. Кострюков, Г.Е. Шунин // Системы управления и информационные технологии. – 2009. – № 4(38). – С. 52-53.
16. Кострюков С.А. Конечно-элементный комплекс программ FEMPDESolver/ Кострюков С.А., Пешков В.В., Шунин Г.Е. и др. // Системы управления и информационные технологии. – 2010. – № 4(42). – С. 52-57.
17. Батаронова М. И., Шунин Г.Е. Интегральная формулировка математической модели распределения плотности тока в осесимметричных сверхпроводящих телах в лондоновском приближении и её дискретизация. // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий (ПМТУКТ-2013): материалы 5 Международной конференции. Воронеж: Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2013. С. 39-42.
18. 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.
19. Кудряш А. А., Шунин Г. Е., Ястребков В. Н. Моделирование движения пробного тела криогенного гравиметра // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2015. – Т. 11. – № 3. – С. 91-93.
20. Кудряш А.А. Конечно-элементный анализ взаимодействия сверхпроводящих шаров в однородном магнитном поле / А.А. Кудряш, Г.Е. Шунин // Системы управления и информационные технологии. – 2015. – № 4.1 (62) – С. 131-138.
21. Описание программы Maple [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. Режим доступа: <http://www.maplesoft.com>
22. Описание программы Scilab [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. Режим доступа: <http://www.scilab.org>
23. Описание программы Elmer [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. Режим доступа: <http://www.csc.fi>
24. Описание программы Comsol Multiphysics [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. Режим доступа: <http://www.comsol.com>

## SYSTEM OF PHYSICAL-MECHANICAL PROCESSES COMPUTER SIMULATION IN A WAVE SOLID-STATE GYROSCOPE

I.L. Bataronov, G.E. Shunin, S.A. Kostryukov, V.V. Peshkov, S.V. Pisarev

Voronezh State Technical University

Structure and functional capabilities of the system of gravity-inertial sensors computer simulation and computational experiments with superconducting structural elements of sensor have been described

Keywords: finite element method, program complexes, computer simulation, gravity-inertial sensor, superconducting suspensions

## СОДЕРЖАНИЕ

|  |    |
|--|----|
| Абрамова О.П., Абрамов С.В. Влияние упорядочения операторов полей смещений отдельных квантовых точек на поле деформации связанной фрактальной структуры  | 3  |
| Абрамов В.С. Поле деформации отдельного слоя в многослойной фрактальной наносистеме с переменными параметрами  | 11 |
| Аликов С.А., Шеин А.Г. Влияние пространственного заряда на электронные потоки в скрещенных полях для цилиндрической системы в окрестности стационарных орбит                                     | 19 |
| Белов А.Н., Захаров П.А., Туровцев В.В. Особенности вычисления интегралов от произведения двух функций Матье   | 26 |
| Белов А.Н. Аппроксимация структурной функции и потенциала внутреннего вращения в действительном базисе функций Матье   | 30 |
| Газанова Н.Ш. Зависимость поверхностного давления от температуры, размера и формы нанокристалла вольфрама  | 33 |
| Гетманова Е.Е. Формирование устойчивых энергетических областей в цепочке несвязанных линейных осцилляторов   | 40 |
| Глазкова А.М., Завьялов Д.В. Исследование температурно-частотных характеристик кварцевого резонатора методом компьютерного моделирования   | 47 |
| Глотов В.В., Сапрыкин И.И., Остроумов И.В. Математические модели виброакустических сигналов  | 51 |
| Завьялов Д.В., Крючков С.В., Сивашова Е.С. Моделирование эффекта увлечения носителей тока электромагнитной волной в двумерной сверхрешетке методом Монте-Карло                                   | 53 |
| Зюбин А.С. Квантово-химическое моделирование перехода водорода в металлическое состояние   | 58 |
| Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Добровольский Ю.А., Евщик Е.Ю., Волохов В.М. Квантово-химическое моделирование взаимодействия кремниевых стержней с литием  | 65 |
| Зюбина Т.С., Джабиев Т.С. Формирование озона при гидролизе гексагональных кластеров $(\text{MnO}_2)_{3,6}$ и $(\text{MnO}_2(\text{H}_2\text{SO}_4)_2)_{3,6}$ . Квантово-химическое моделирование | 74 |
| Завьялов Д.В., Камбарова Ш.Ш. Моделирование образования пор в DRPC мембранах под действием электрического поля   | 81 |
| Кирпиченкова Н.В., Крыжановский К.В. Математическая модель электродинамики неупорядоченного $S-I-S$ контакта со случайными квантовыми закоротками в $I$ -слое                                    | 85 |

|   |     |
|---|-----|
| Кирпиченкова Н.В., Кирпиченкова В.Я., Крыжановский К.В. Конечно-разностная схема для стохастически возмущенного линеаризованного стационарного уравнения $\sin$ -Gordon                 | 93  |
| Адонин В.А., Корнеев С.А., Корнеев В.С. Результаты экспериментальных исследований нагрузочных характеристик пневмоэлемента с резинокордной оболочкой модели Н-50                        | 99  |
| Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Структурные функции внутреннего вращения в 1,1,1 – трифторгексане   | 107 |
| Маркина К.В., Мещеряков И.А., Солопов Д.А., Дьяков И.А. Программно-аппаратная защита инженерных систем «Умного дома»  | 110 |
| Медакин П.О., Шеин А.Г., Потапов А.М. Моделирование движения ионного пучка в лазерном масс-спектрометре ЭМАЛ-2  | 113 |
| Рапаков Г.Г., Горбунов В.А., Абдалов К.А. Исследование подбора распределения в анализе выживаемости   | 117 |
| Серкова В.И. Нейросетевое прогнозирование дебита нефти  | 122 |
| Смирнов Ю.Г., Баткин И.С. Математическое моделирование проводимости нефтяной эмульсии в переменном электрическом поле в модели Коул-Коула для контроля содержания воды в нефти          | 127 |
| Беляев С.Н., Алиев Т.Т., Федоров А.А., Богданов Н.П. Моделирование распределения потока газа через блок пылеуловителей  | 133 |
| Колычев С.А. Стратификация задачи предсказания угрозы лесных пожаров методами системного анализа  | 137 |
| Лисицын В.И., Матвеев Н.Н., Камалова Н.С. Мониторинг надмолекулярной структуры биокompозита с помощью формализованного моделирования  | 141 |
| Мельников Г.А., Игнатенко Н.М., Пауков В.М., Сучилкин В.В. Моделирование димерных образований в структуре кластеров бензола   | 145 |
| Дёмин Ю.И., Чернокнижников В.Д. Моделирование вращающихся машин систем электроснабжения с малой распределенной генерацией в трехфазных координатах с применением уравнений Парка-Горева | 150 |
| Шушлебин И.М., Кармазин В.М. Автоматизированная установка для исследования левитационных свойств ВТСП   | 155 |
| Шушлебин И.М., Дворецкая Е.В. Динамические процессы в транспортных холодильных установках   | 159 |
| Батаронов И.Л., Шунин Г.Е., Кострюков С.А., Пешков В.В., Писарев С.В. Система компьютерного моделирования физико-механических процессов в волновом твердотельном гироскопе              | 162 |

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XIX Международного семинара  
(г. Воронеж, 24 ноября 2017 г.)

В авторской редакции

Подписано в печать 19.02.2018.

Формат 60×84/16. Бумага писчая.

Усл. печ. л. \_\_\_\_\_. Уч.-изд. л. \_\_\_\_\_. Тираж 350 экз.

Заказ № \_\_\_\_\_.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

394026 Воронеж, Московский проспект, 14

Отдел оперативной полиграфии ВГТУ

394006 Воронеж, ул. 20-лет Октября, 84