

ISSN 2949-2254

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXIV Международного семинара

Воронеж 2023

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российская академия наук

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

Федеральный исследовательский центр
проблем химической физики и медицинской химии РАН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXIV Международного семинара
(г. Воронеж, 25-26 ноября 2022 г.)

Воронеж 2023

УДК 53.072:519.673(06)
ББК 22.1я4
Ф503

Физико-математическое моделирование систем: материалы XXIV Международного семинара / отв. ред. И. Л. Батаронов [Электронный ресурс]. – Электрон. текстовые и граф. данные (12,6 Мб). – Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2023. – 1 электрон. опт. диск (DVD-ROM): цв. – Систем. требования: ПК 500 и выше; 256 Мб ОЗУ; Windows XP; SVGA с разрешением 1024x768; Adobe Acrobat; CD-ROM диск-вод; мышь. – Загл. с экрана.

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

УДК 53.072:519.673(06)
ББК 22.1я4

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

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

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

К. В. Боженко (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черногловка, Россия), *председатель*
А.С. Сигов (РТУ МИРЭА, г. Москва, Россия), *сопредседатель*
С. Д. Кургалин (ВГУ, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*
В. Н. Нечаев (ВУНЦ ВВС «ВВА», г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*
Е. Г. Андреева (ОмГТУ, г. Омск, Россия)
В. Н. Глазнев (ВГУ, г. Воронеж, Россия)
В. В. Гречихин (ЮРГПУ(НПИ), г. Новочеркасск, Россия)
Е. Г. Григорьев (ИСМАН, г. Черногловка, Россия)
Дж. Зеббар (Университетский Центр г. Тиссемсильта, Алжир)
А. С. Зюбин (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черногловка, Россия)
Т.С. Зюбина (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черногловка, Россия)
С. Ю. Князев (ДГТУ, г. Ростов-на-Дону, Россия)
С. И. Курганский (ВГУ, г. Воронеж, Россия)
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

© ФГБОУ ВО «Воронежский государственный
технический университет», 2023

ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ КОМПЛЕКСНОГО ПОЛЯ ДЕФОРМАЦИИ ФРАКТАЛЬНЫХ СВЯЗАННЫХ СТРУКТУР

О.П. Абрамова

Донецкий национальный университет
oabramova171@gmail.com

Аннотация: исследовано комплексное поле деформации связанной структуры, состоящей из отдельных фрактальных структур. Методом численного моделирования на примере отдельных круговых цилиндрических структур (границы, которых не пересекаются, касаются и пересекаются) показаны особенности поведения комплексной функции смещения.

Ключевые слова: фрактальные связанные структуры, отдельные круговые цилиндрические структуры, переменная амплитуда функции смещения, комплексное поле деформации, численное моделирование.

Введение

Наноструктуры, метаматериалы, искусственные структуры, состоящие из различных отдельных элементов [1 - 3] необходимы в качестве элементной базы при создании новых материалов, обладающих многослойной фрактальной структурой. Моделирование поведения поля деформации таких структур осуществляется с помощью метода итераций. В процессе итераций реализуются различные стохастические процессы, которые зависят от начального состояния отдельных элементов связанных структур. При этом поля деформации, как отдельных элементов, так и всей связанной структуры являются комплексными [4, 5]. В результате итерационного процесса элементы матриц для поля деформации становятся случайными (появляется квантовый хаос [6]), что является характерным для фрактальных структур.

Целью данной работы является исследование особенностей комплексного поля деформации связанной фрактальной структуры (СФС), состоящей из отдельных фрактальных структур и возможности перестройки СФС.

Моделирование поля деформации связанной фрактальной структуры

Рассмотрим модельные СФС, состоящие из двух, трёх и четырёх круговых цилиндров со сдвинутыми центрами. Эти СФС находятся в объемной дискретной решетке $N_1 \times N_2 \times N_3$, узлы которой задаются целыми числами n, m, j . Поле деформации u СФС представим как сумму полей деформаций отдельных структур u_i . При этом нелинейные уравнения для безразмерной комплексной функции смещения u узла решетки имеют вид [4]

$$u = \sum_{i=1}^N R_i u_i; \quad u_i = k_{ui}^2 (1 - 2(k'_{ui})^2 \operatorname{sn}^2(u - u_{0i}, k'_{ui})); \quad (1)$$

$$k_{ui}^2 = (1 - \alpha_i) / Q_i; \quad k'_{ui} = (1 - k_{ui}^2)^{1/2}; \quad p_i = p_{0i} + p_{1i}n + p_{2i}m + p_{3i}j; \quad (2)$$

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

Для решения уравнений (1) – (3) используется метод итераций по индексу n с комплексным начальным условием $u = 0 + 0i$ (где i – мнимая единица). В процессе итераций функции u_i начинают зависеть от функции u , что связано с переменной амплитудой $2(k'_{ui})^2$. Здесь $N = 2, 3, 4$ – количество круговых цилиндров в СФС, α_i – фрактальные размерности полей деформации u_i вдоль оси Oz ($i = \overline{1, N}$); u_{0i} – постоянные (критические) смещения; модули k_{ui} являются функциями от индексов n, m, j узлов решетки. Отдельные круговые цилиндры характеризуются параметрами: $R_i, p_{0i}, p_{1i}, p_{2i}, p_{3i}, b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, j_{0i}, j_{ci}$; координатами центров в узлах решетки n_{0i}, m_{0i} и радиусами $r_i = \sqrt{n_{ci}^2 + m_{ci}^2}$ в плоскости nOm , где $n_{ci} = m_{ci}$. При этом $N_1 = 240, N_2 = 240, \alpha_i = 0.5, u_0 = 29.537, p_0 = 1.0423, p_{1i} = 0, p_{2i} = 0, b_{1i} = b_{2i} = 1, b_{3i} = 0, j_{0i} = 31.5279, j_{ci} = 11.8247$.

Сначала рассмотрим СФС, состоящую из отдельных четырех круговых цилиндров ($N = 4, R_i = 1, i = 1, 2, 3, 4$) одинаковых радиусов r_i с центрами (n_{0i}, m_{0i}) в плоскости nOm и полуосями $n_{ci} = m_{ci} = 24.3582$: первый цилиндр $n_{01} = 80.3267, m_{01} = 160.3267$; второй цилиндр $n_{02} = 160.3267, m_{02} = 160.3267$; третий цилиндр $n_{03} = 80.3267, m_{03} = 80.3267$; четвертый цилиндр $n_{04} = 160.3267, m_{04} = 80.3267$. Границы отдельных круговых цилиндров не пересекаются, расстояние между центрами сечений цилиндров $d = 80$ и комплексная функция смещения u имеет вид

$$u = R_1 u_1 + R_2 u_2 + R_3 u_3 + R_4 u_4. \quad (4)$$

На рис. 1 а, г показано поведение сечений $u \in [-0.5; 0.5]$ комплексной функции смещения такой СФС. Так для $\text{Re} u$ (рис. 1 а) характерно регулярное поведение типа мембраны вогнутой (выпуклой) во внутренней области отдельных цилиндров, для границ характерно стохастическое кольцеобразное поведение. Во внешней области каждого отдельного цилиндра наблюдается волнообразное поведение. В областях между границами отдельных цилиндров возникает эффект взаимодействия (перестройки структуры деформированных волнового и стохастического поведений). В результате для всей СФС возникают объединенные траектории деформированного волнового поведения. Мнимая часть функции смещения $\text{Im} u$ (рис. 1 г) локализована в области четырех различных стохастических колец, что свидетельствует о наличии различных механизмов эффективного затухания в каждом отдельном цилиндре. Для первого, второго и третьего цилиндров наблюдается локализация особенностей типа разрывов (где $\text{Im} u = 0$) в отличие от четвертого цилиндра, где реализуется затухание в виде сплошного стохастического кольца. Далее рассмотрим СФС, состоящие из трех ($N = 3, i = 2, 3, 4$) круговых цилиндров одинаковых радиусов сечений в плоско-

сти nOm с центрами (n_{0i}, m_{0i}) , где $n_{ci} = m_{ci} = 24.3582$. На рис. 1 б, д показано поведение сечений $u \in [-0.5; 0.5]$ комплексной функции смещения

$$u = R_2 u_2 + R_3 u_3 + R_4 u_4. \quad (5)$$

На рис. 1 в, е показано поведение сечений $u \in [-0.5; 0.5]$ комплексной функции смещения ($N = 3, i = 1, 3, 4$)

$$u = R_1 u_1 + R_3 u_3 + R_4 u_4. \quad (6)$$

На рис. 1 ж, к показано поведение сечений $u \in [-0.5; 0.5]$ комплексной функции смещения ($N = 3, i = 1, 2, 4$)

$$u = R_1 u_1 + R_2 u_2 + R_4 u_4. \quad (7)$$

На рис. 1 з, л показано поведение сечений $u \in [-0.5; 0.5]$ комплексной функции смещения ($N = 3, i = 1, 2, 3$)

$$u = R_1 u_1 + R_2 u_2 + R_3 u_3. \quad (8)$$

Основные особенности поведения комплексной функции смещения СФС из трех круговых цилиндров сохраняются, как и для структуры из четырех цилиндров. Однако, отличительной особенностью является наличие деформированного регулярного волнового поведения $\operatorname{Re} u$ и $\operatorname{Im} u = 0$ в областях, где отсутствует структура отдельного цилиндра. Объединенные траектории деформированного волнового поведения между отдельными цилиндрами становятся другими по сравнению с рис. 1 а. Далее рассматриваются СФС, состоящие из двух круговых цилиндров одинаковых радиусов сечений. На рис. 1 и, м показано поведение сечений $u \in [-0.5; 0.5]$ комплексной функции смещения одной из таких структур

$$u = R_1 u_1 + R_4 u_4. \quad (9)$$

В данном случае для СФС является наличие деформированного регулярного волнового поведения $\operatorname{Re} u$ и $\operatorname{Im} u = 0$ в областях, где отсутствуют структуры отдельных цилиндров (второго и третьего). Объединенные траектории деформированного волнового поведения между отдельными цилиндрами становятся другими. Подобные исследования были проведены и для связанных фрактальных структур, состоящих из пары круговых цилиндров с различной ориентацией расположения (диагональной, вертикальной и горизонтальной).

Далее, в отличие от варианта СФС с тремя цилиндрами (5) - (8) рис. 1, рассмотрим СФС из трех цилиндров с разными радиусами сечений в плоскости nOm , границы которых имеют точки касания (рис. 2 а-е) и пересечения (рис. 2 ж-м). Радиусы первого и третьего цилиндров r_1 и r_3 , с центрами (n_{0i}, m_{0i}) в плоскости nOm выбраны такими же, что и на рис. 1. Четвертый цилиндр имеет смещенный центр $(n_{04}, m_{04}) = (160.3267, 120.3267)$. Для варианта с точками касания радиус четвертого цилиндра определяется полуосями $n_{c4} = m_{c4} = 65.3582$. Для варианта пересечения границ радиус четвертого цилиндра имеет другое значение и определяется полуосями $n_{c4} = m_{c4} = 89.3582$. Для варианта с точками касания границ цилиндров для $\operatorname{Re} u$ и $\operatorname{Im} u$ характер-

ным является стохастическое поведение на границах отдельных цилиндров. При изменении u от $\text{Re}u \in [-10; 10]$ до $\text{Re}u \in [-0.5; 0.5]$ наблюдается уширение стохастических границ отдельных цилиндров (рис. 2 а-в). Для внутренней области четвертого цилиндра характерным является регулярное поведение типа выпуклой (вогнутой) мембраны. Во внутренних областях первого и третьего цилиндров возникает дополнительная тонкая структура. При изменении u от $\text{Im}u \in [-10; 10]$ до $\text{Im}u \in [-0.5; 0.5]$ (рис. 2 г-е) характер эффективного затухания также изменяется.

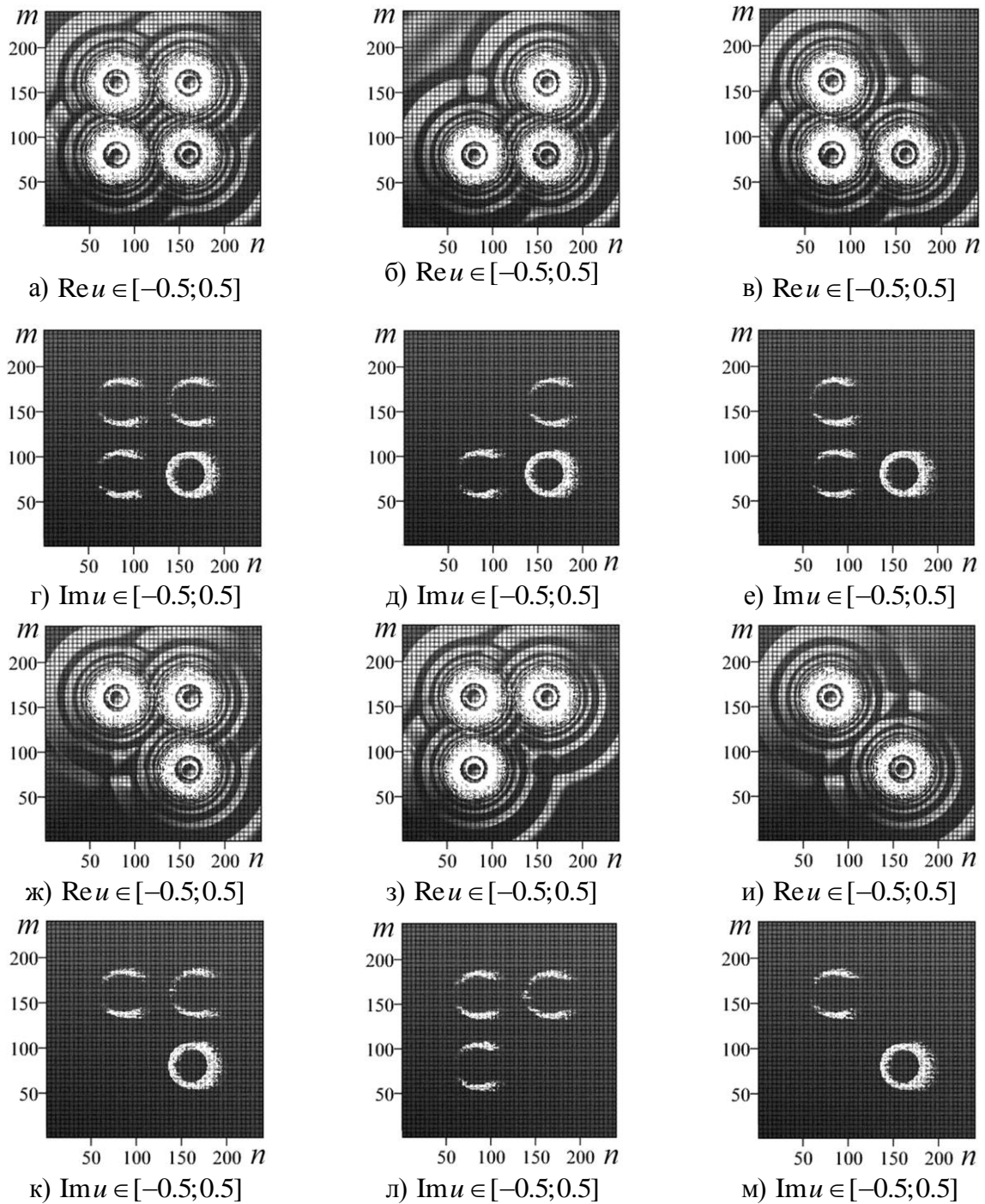


Рис. 1. Поведение сечений $\text{Re}u \in [-0.5; 0.5]$, $\text{Im}u \in [-0.5; 0.5]$ (вид сверху)

Для варианта с пересечением границ цилиндров для $\text{Re}u$ и $\text{Im}u$ характерным является уширенное стохастическое поведение на границах четвертого цилиндра (рис. 2 ж-м) по сравнению с (рис. 2 а-е). Во внутренней области четвертого цилиндра на $\text{Re}u$ появляется дополнительная тонкая структура, которая деформирует регулярное поведение типа мембраны (рис. 2 ж-и).

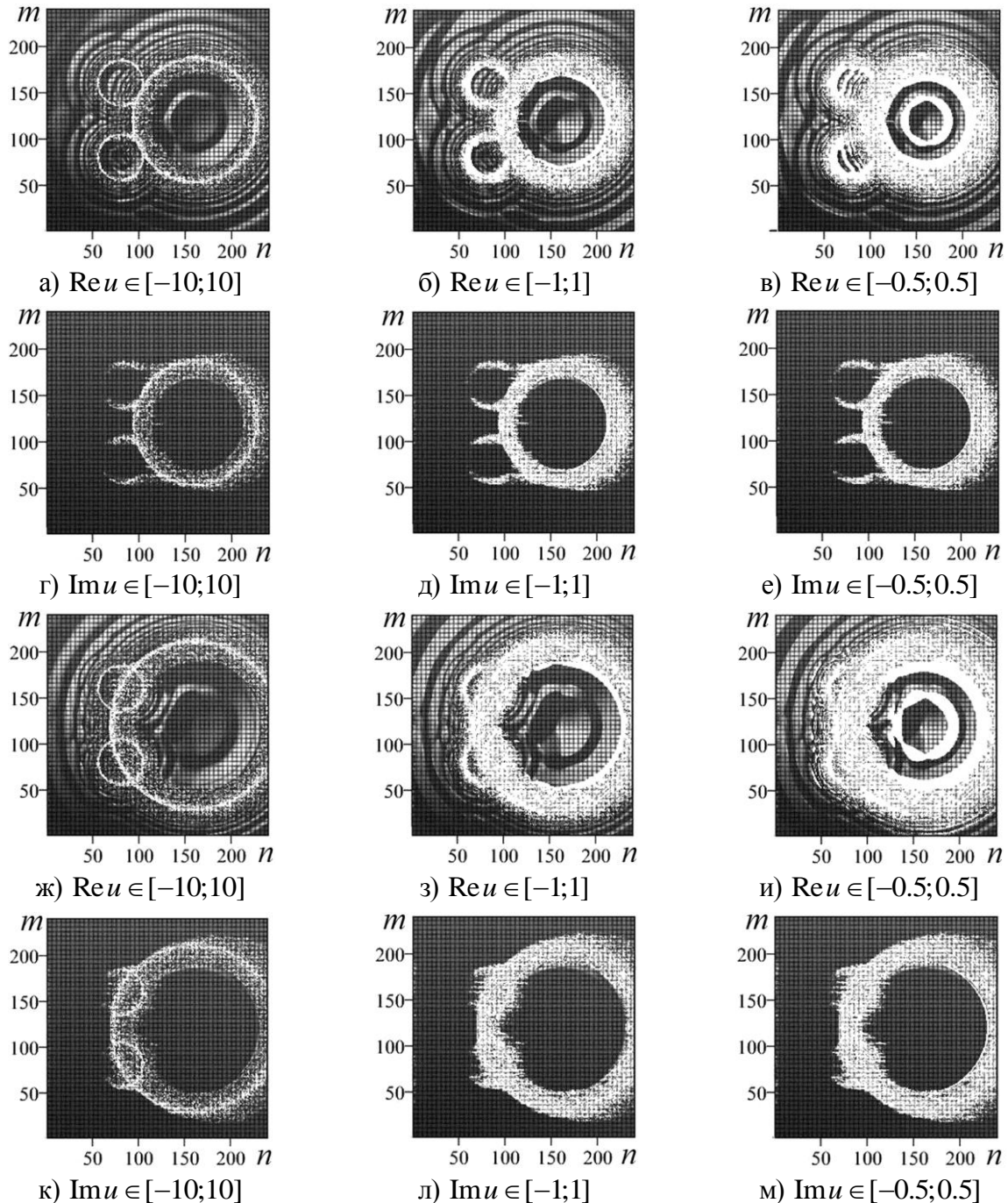


Рис. 2. Поведение сечений $\text{Re}u$, $\text{Im}u$ (вид сверху)

Выводы

Исследовано комплексное поле деформации СФС, состоящих из двух, трёх и четырёх одинаковых круговых цилиндров со сдвинутыми центрами. По-

казано, что поведение поля деформации таких структур существенно зависит от порядка следования (упорядочивания) отдельных операторов u_i в выражении (1). Между отдельными цилиндрами возникают объединенные траектории деформированного волнового поведения СФС. Для $Re u$ каждого отдельного цилиндра наблюдается регулярное поведение внутренней области типа мембраны вогнутой (выпуклой), для границ – стохастическое поведение, во внешней области – волнообразное поведение. Наличие $Im u$ свидетельствует об эффективном затухании, которое локализовано в области стохастических колец.

Исследовано поле деформации СФС, состоящих из трех круговых цилиндров с разными радиусами сечений в плоскости nOm . При этом возникают точки касания и пересечения границ цилиндров. Характерным является уширенное стохастическое поведение на границах, во внутренних областях появляются дополнительные тонкие структуры, которые деформируют регулярное поведение типа мембраны. Показано, что в зависимости от уровня сечений (среза) характер взаимодействия отдельных структур в связанной структуре изменяется, происходит перестройка СФС. Эти результаты могут быть использованы при создании новых материалов с многослойной фрактальной структурой.

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. Активные объекты, асимметрия материи, черные дыры и бозон Хиггса во фрактальных системах // Известия РАН. Сер. Физическая. 2022. Т. 86, № 7. С. 1047-1053.
3. Абрамов В.С. Активные наночастицы, агрегаты и бозон Хиггса в кварк-глюонной модели // Вестник Донецкого национального университета. Сер. А: Естественные науки. – 2022. – № 1. – С. 66-79.
4. Абрамова О.П. Поведение поля деформации структуры, состоящей из двух круговых цилиндров со сдвинутыми центрами при наличии модуляции фрактальных индексов // Вестник Донецкого национального университета. Сер. А: Естественные науки. – 2022. – № 1. – С. 53-65.
5. Abramova O.P., Abramov A.V. Memory Cell Based on Qubit States and Its Control in a Model Fractal Coupled Structure / C.H. Skiadas and Y. Dimotikalis (eds.), 14th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2022. P. 17-29.
6. Stöckmann H.-J. Quantum Chaos. An Introduction / H.-J. Stöckmann. – Philipps-Universität Marburg, Germany, 2007. – 384 p.

FEATURES OF THE BEHAVIOR OF THE COMPLEX DEFORMATION FIELD OF FRACTAL COUPLED STRUCTURES

O.P. Abramova

Donetsk National University

Abstract: the complex deformation field of a coupled structure, consisting of separate fractal structures has been studied. Using the numerical simulation method, on the example of separate circular cylindrical structures (boundaries that do not intersect, touch and intersect), the features of the behavior of the complex displacement function are shown.

Keywords: fractal coupled structures, separate circular cylindrical structures, variable amplitude of the displacement function, complex deformation field, numerical simulation.

ТЕТРАНЕЙТРОНЫ И БОЗОН ХИГГСА В КВАРК-ГЛЮОННОЙ МОДЕЛИ

В.С. Абрамов

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

Аннотация: для описания связей и основных характеристик составных частиц типа тетранейтронов с бозоном Хиггса и полем Хиггса предложена кварк-глюонная модель. Теоретически выполнены оценки положения и ширины основного пика тетранейтронного резонанса, времени жизни тетранейтрона, радиуса ядра (сердцевины) в нуклоне. Показано, что вклад релятивистского нейтрино в процессе классического распада нейтрона может приводить к изменениям космологического красного смещения, эффективного угла поляризации реликтового излучения, появлению тяжелой дырки в составной частице типа пары электрон-дырка.

Ключевые слова: активные фемточастицы, бозон Хиггса и поле Хиггса, кварк-глюонная модель, лептонные пары, составные частицы.

Введение

Для описания связей и основных характеристик активных объектов с бозоном Хиггса и полем Хиггса во фрактальных системах предложена кварк-глюонная модель [1]. Показано, что длины волн активных наночастиц [2] определяются гравитационными радиусами Шварцшильда легких кварков. Наличие поля Хиггса приводит к возможности образования тяжелых бозонов Хиггса [1]. Теоретически подтверждается возможность распада бозона Хиггса на лептонные пары (типа электрон-электронная дырка, мюон-мюонная дырка) и фотон. Поле Хиггса приводит также к появлению щелей (энергий колебательных мод) в энергетическом спектре активных нанообъектов и фемтообъектов [3, 4]. Показано, что щели, эффективные температуры зависят от состояний антинейтринного поля Хиггса, связанного с барионной плотностью материи [5]. Взаимодействие парных активных объектов через глюоны может приводить к образованию агрегатов с большими длинами волн. При этом возможно появление тетракварков [5]. В [6] приводятся результаты экспериментов по обнаружению составных частиц типа тетранейтронов.

Целью данной работы является описание ряда параметров составных частиц типа тетранейтронов в рамках кварк-глюонной модели.

Описание тетранейтронного резонанса на основе кварк-глюонной модели

С учетом параметра $N_{f2} = 1597.602554$ (числа квантов фононного поля) из [1], энергии покоя нейтрона $E_n = 946.7027435$ МэВ, числа квантов глюонов $n_g = 8$ находим энергию тетранейтронного резонанса ε_{nf2} на основе выражения

$$n_g E_n = N_{f2} \cdot 2\varepsilon_{nf2}; \quad \varepsilon_{nf2} = 2.370308538 \text{ МэВ}. \quad (1)$$

В [6] наблюдают узкий пик с максимумом при 2.37 МэВ и уширенный структурированный стохастический пик с максимумом вблизи 30 МэВ. Наша модель позволяет связать положение максимума уширенного пика с импульсом глюона $P_g = 29.79188196 \text{ МэВ}$ из [1].

Далее на основе энергии $2\varepsilon_{nf2}$ и структурных параметров S'_{0x} , S_{xu} из [2] находим энергетические ветви ε_{anx} , ε_{bnx} спектров по формулам

$$\varepsilon_{anx} = 2\varepsilon_{nf2} S'_{0x}; \quad \varepsilon_{bnx} = 2\varepsilon_{nf2} S_{xu}. \quad (2)$$

Энергии с индексами $x=3,4$ определяют оптические ветви: $\varepsilon_{an3} = 2182.858461 \text{ кэВ}$, $\varepsilon_{an4} = 2531.916174 \text{ кэВ}$; $\varepsilon_{bn3} = 2148.724629 \text{ кэВ}$, $\varepsilon_{bn4} = 2526.992019 \text{ кэВ}$. Энергии с индексами $x=1,2$ определяют акустические ветви: $\varepsilon_{an1} = 187.4500767 \text{ кэВ}$, $\varepsilon_{an2} = 161.6076361 \text{ кэВ}$; $\varepsilon_{bn1} = 221.5839086 \text{ кэВ}$, $\varepsilon_{bn2} = 156.6834813 \text{ кэВ}$. Основная энергия ε_{nf2} определяется резонансными переходами между энергетическими уровнями при сохранении условий резонанса

$$\varepsilon_{nf2} = \varepsilon_{an3} + \varepsilon_{an1} = \varepsilon_{an4} - \varepsilon_{an2}; \quad \varepsilon_{nf2} = \varepsilon_{bn3} + \varepsilon_{bn1} = \varepsilon_{bn4} - \varepsilon_{bn2}. \quad (3)$$

Отметим, что переходы между акустическими ветвями спектра с энергиями $2\varepsilon_{bn1} = 443.1678172 \text{ кэВ}$ и $\varepsilon_{bn1} + \varepsilon_{bn2} = 378.2673899 \text{ кэВ}$ отвечают за систематическую и статистическую ошибки измерений. В эксперименте [6] при определении положения максимума узкого резонансного пика с энергией ε_{nf2} наблюдают отклонения энергий $\pm 0.44 \text{ МэВ}$ и $\pm 0.38 \text{ МэВ}$, соответственно, которые согласуются с нашими оценками ошибок измерений.

Для получения оценок других характерных параметров активных фемто-объектов используем энергию $E_{g02} = 5.824953291 \text{ эВ}$ и параметр n'_{zg} (учитывающий наличие сверхбезызлучательных состояний в рамках модели Р. Дикке) из [2], параметр $A_G = 0.960836162 \text{ фм/эВ}$ из [3 - 5]. Тогда по формулам

$$E_{z02} = E_{g02} / (1 + n'_{zg}); \quad R_{g02} = A_G E_{g02}; \quad R_{z02} = A_G E_{z02} \quad (4)$$

находим энергию $E_{z02} = 5.227375242 \text{ эВ}$ и гравитационные радиусы Шварцшильда $R_{g02} = 5.596825764 \text{ фм}$, $R_{z02} = 5.022651165 \text{ фм}$. С другой стороны, используя эффективный радиус $r_{gp} = 0.6697484 \text{ фм}$ из [5] и число активных эффективных квазичастиц $N = 17.0073101$ из [2], находим оценку радиуса $R'_{z02} = (N - 2)r_{gp} / 2 = 5.027260092 \text{ фм}$. Полученные оценки согласуются с супер-радиусами 5.6 фм (модель COSMA) и 5.0 фм (эксперимент) [7].

Оценку времени жизни тетранейтрона τ_{na} находим по формулам

$$\chi_0 \tau_{4A} = N_a \tau_{na}; \quad \tau_{4A} = (1 + 2\Omega_m - S_{12u}) \tau_{1A}; \quad \tau_{1A} = t_{1A} \ln 2. \quad (5)$$

Здесь число Авагадро N_a , эффективная восприимчивость χ_0 , плотность материи Ω_m , структурный параметр S_{12u} из работ [1-5]. Если использовать

время жизни для одного нейтрона $t_{1A} = 1013$ с, то период полураспада нейтрона по классическому каналу реакции (на протон, электрон и антинейтрино) $\tau_{1A} = 702.1580938$ с [7]. В системе из четырёх нейтронов эффективное время жизни свободного нейтрона заменяется на $\tau_{4A} = 890.7585674$ с. Тогда из (5) получим оценку времени жизни тетранейтрона $\tau_{na} = 3.800848454 \cdot 10^{-22}$ с, которая согласуется с временем $3.8 \cdot 10^{-22}$ с из эксперимента [6]. В системе из четырёх нейтронов также возможны другие каналы распада нейтрона. Отметим, что радиус ядра (сердцевин) $\bar{r}_{0\nu}$ распределения электрического заряда в нуклоне (с учетом плотности релятивистского нейтрино $\bar{\Omega}_{0\nu}$) связан с классическим радиусом протона r_{0p} выражением

$$n_g \bar{r}_{0\nu} = N'_{ra} r_{0p}; \quad N'_{ra} = (1 + \sin \theta_{0\nu}) N_{ra}; \quad \bar{\Omega}_{0\nu} = (\bar{n}_{0\nu})^2; \\ 2\bar{n}_{0\nu} = \Omega_m^* - S_{2u}; \quad \sin \theta_{0\nu} = \bar{n}_{0\nu} (1 - \bar{n}_{0\nu}). \quad (6)$$

Здесь $N'_{ra} = 1094.802296$, $\bar{n}_{0\nu} = 0.054339679$, $\bar{\Omega}_{0\nu} = 0.002952801$, $r_{0p} = 1.534698568$ ам; численные значения реликтовых фотонов N_{ra} , параметров Ω_m^* , S_{2u} приведены в работах [1-5]. На основе (6) находим оценки $\sin \theta_{0\nu} = 0.051386878$, радиуса ядра $\bar{r}_{0\nu} = 210.0239394$ ам, который близок к оценке 210 ам из [7]. Двойной угол $2\theta_{0\nu} = 5.891097122^\circ$ близок к мюонному углу $\varphi_{\mu g} = 5.901862921^\circ$. Полученные оценки согласуются с оценками из [3-5]. Это указывает на необходимость теоретического исследования других каналов распада.

Для получения оценки ширины $\varepsilon_{\tau f 2}^*$ основного резонансного пика с энергией $\varepsilon_{nf 2}$ из (1) рассмотрим случайную величину $\hat{\xi}_{0\nu}$ с двумя возможными значениями $\xi_{0\nu}$, $\xi'_{0\nu}$, которым соответствуют вероятности $\bar{P}_{0\nu}$, $\bar{P}'_{0\nu}$. Тогда математическое ожидание $M(\hat{\xi}_{0\nu})$, дисперсия $D(\hat{\xi}_{0\nu})$, среднее квадратическое отклонение $\sigma(\hat{\xi}_{0\nu})$ определяем по формулам

$$M(\hat{\xi}_{0\nu}) = \bar{P}_{0\nu} \xi_{0\nu} + \bar{P}'_{0\nu} \xi'_{0\nu} = 1; \quad D(\hat{\xi}_{0\nu}) = (\xi'_{0\nu} - \xi_{0\nu})^2 \bar{P}_{0\nu} \bar{P}'_{0\nu}; \quad \sigma(\hat{\xi}_{0\nu}) = D^{1/2}(\hat{\xi}_{0\nu}); \\ \bar{P}_{0\nu} = 2 / (2 + \bar{\Omega}_{0\nu}); \quad \bar{P}'_{0\nu} = \bar{\Omega}_{0\nu} / (2 + \bar{\Omega}_{0\nu}); \quad \bar{P}_{0\nu} + \bar{P}'_{0\nu} = 1. \quad (7)$$

Здесь $\bar{P}_{0\nu} = 0.998525776$, $\bar{P}'_{0\nu} = 0.001474224$. С учетом (6) возможное значение $\xi_{0\nu}$, числа квантов N_{rb} и z_{rb} находим по формулам

$$\xi_{0\nu} = z'_{A2} / N'_{ra} = z'_{A2} r_{0p} / n_g \bar{r}_{0\nu}; \quad N'_{ra} = \bar{P}_{0\nu} N_{rb}; \quad z_{rb} = N_{rb} - z'_{A2}. \quad (8)$$

Здесь параметр (обычное красное смещение) $z'_{A2} = 1034.109294$ из [8]. На основе (8) находим численные значения $\xi_{0\nu} = 0.944562592$, $N_{rb} = 1096.429981$,

$z_{rb} = 62.320687$. На основе чисел квантов N_{rb} , z_{rb} и z'_{A2} вводим функции плотностей распределения Ферми типа f_{rb} , f'_{rb} по формулам

$$f_{rb} = z'_{A2} / N_{rb}; \quad f'_{rb} = z_{rb} / N_{rb} = \bar{P}'_{0v} \xi'_{0v}; \quad f_{rb} + f'_{rb} = 1. \quad (9)$$

Отсюда находим $f_{rb} = 0.943170095$, $f'_{rb} = 0.056829905$, второе возможное значение $\xi'_{0v} = 38.54902986$ случайной величины $\hat{\xi}'_{0v}$. Тогда на основе (7) находим $\xi'_{0v} - \xi_{0v} = 37.60446727$, $\sigma(\hat{\xi}'_{0v}) = 1.442782328$. Функция f'_{rb} позволяет далее ввести параметры $u_{\tau f2}$, $v_{\tau f2}$ (аналоги u - v преобразования в теории сверхпроводимости)

$$u_{\tau f2}^2 = 0.5 + (f'_{rb})^{1/2}; \quad v_{\tau f2}^2 = 0.5 - (f'_{rb})^{1/2}; \quad u_{\tau f2}^2 + v_{\tau f2}^2 = 1. \quad (10)$$

С учетом (10) далее находим искомые энергии $\varepsilon_{\tau f2}^*$, $\varepsilon'_{\tau f2}$ для описания ширины основного резонансного пика

$$\varepsilon_{\tau f2}^* = u_{\tau f2}^2 \varepsilon_{nf2}; \quad \varepsilon'_{\tau f2} = v_{\tau f2}^2 \varepsilon_{nf2}; \quad \varepsilon_{\tau f2}^* + \varepsilon'_{\tau f2} = \varepsilon_{nf2}. \quad (11)$$

Численные значения $\varepsilon_{\tau f2}^* = 1.750212683$ МэВ, $\varepsilon'_{\tau f2} = 620.0958549$ кэВ согласуются с данными из эксперимента [6].

По аналогии с (2) на основе энергии $\varepsilon'_{\tau f2}$ запишем релаксационный спектр $\varepsilon'_{b\tau x} = \varepsilon'_{\tau f2} S_{xu}$, для которого выполняются резонансные условия типа

$$0.5\varepsilon'_{\tau f2} = \varepsilon'_{b\tau 3} + \varepsilon'_{b\tau 1} = \varepsilon'_{b\tau 4} - \varepsilon'_{b\tau 2}. \quad (12)$$

Энергии оптических ($\varepsilon'_{b\tau 4} = 330.6652309$ кэВ, $\varepsilon'_{b\tau 3} = 281.1676967$ кэВ) и акустических ($\varepsilon'_{b\tau 1} = 28.99498445$ кэВ, $\varepsilon'_{b\tau 2} = 20.50254972$ кэВ) ветвей релаксационного спектра позволяют выполнить оценку систематической ($\delta\varepsilon_{\tau}$) и статистической ($\delta\varepsilon'_{\tau}$) ошибок измерений при определении ширины наблюдаемого резонанса

$$\delta\varepsilon_{\tau} = \varepsilon'_{b\tau 3} + \varepsilon'_{b\tau 2} = \varepsilon'_{b\tau 4} - \varepsilon'_{b\tau 1}; \quad \delta\varepsilon'_{\tau} = \varepsilon'_{b\tau 3} - 2\varepsilon'_{b\tau 1}. \quad (13)$$

Численные значения $\delta\varepsilon_{\tau} = 301.6702464$ кэВ и $\delta\varepsilon'_{\tau} = 223.1777278$ кэВ согласуются с данными из эксперимента [6], соответственно, ± 0.30 МэВ и ± 0.22 МэВ.

Отметим, что параметр z_{rb} из (8), (9) учитывает вклад от плотности релятивистского нейтрино $\bar{\Omega}_{0v}$ из (6), (7), что приводит к изменению космологического красного смещения $z'_{\mu} = 7.18418108$ на эффективное космологическое красное смещение $z'_{\mu b} = 6.957429673$ и допускает представления вида

$$z_{rb} = z'_{\mu b}(z'_{\mu b} + 2); \quad a_{0b}^2 = a_m^2 + z_{rb} / 4; \quad J_{mb} / J(0) = (a_{0b} + a_m)(a_{0b} - a_m + 1). \quad (14)$$

Здесь параметры $a_{0b} = 32.39891149$, $a_m^2 = z'_{A2}$ описывают состояния источника излучения с $J_{mb} / J(0) = 80.13665285$, где максимальная J_{mb} и начальная $J(0)$ интенсивности излучения в рамках модели сверхизлучения Р. Дикке [8].

На основе функций f_{rb} , f'_{rb} из (9) и температуры $T'_A = 2635.582153$ мкК из [8] находим связи характерных температур T_{rb} , T'_{rb} с температурой реликто-

вого излучения $T_r = 2.72548\text{К}$ по формулам

$$T'_A = T_r / z'_{A2}; \quad T_{rb} = f_{rb} T'_A; \quad T'_{rb} = f'_{rb} T'_A; \quad T_{rb} + T'_{rb} = T'_A. \quad (15)$$

Температуры $T_{rb} = 2485.776609 \text{ мкК}$, $T'_{rb} = 149.8055442 \text{ мкК}$. С другой стороны, параметр $(f'_{rb})^{1/2}$ из (10) допускает представление через угол Кабибо θ_W [1, 9] и учитывает изменения угла поляризации излучения $\varphi_{0g} = 0.409715696^\circ$ [5] на эффективный угол поляризации $\varphi'_{0g} = 0.412156677^\circ$ по формулам

$$(f'_{rb})^{1/2} = \sin^2 \theta_W + \sin \varphi'_{0g}; \quad (E_e + E'_{eh}) / E_{H0} = f_{gA} \sin^2 \varphi'_{0g}. \quad (16)$$

С учетом $\sin^2 \theta_W = 0.231196808$ находим $\sin \varphi'_{0g} = 0.007193429$. Используя энергии покоя для электрона $E_e = 0.51099907 \text{ МэВ}$, бозона Хиггса $E_{H0} = 125.03238 \text{ ГэВ}$, функцию распределения $f_{gA} = 0.159850895$ из [5] находим энергию эффективной тяжелой дырки $E'_{eh} = 0.523212741 \text{ МэВ}$, которая входит в состав пары электрон-дырка с энергией $E_e + E'_{eh} = 2\varepsilon_0$, где $\varepsilon_0 = 0.517105906 \text{ МэВ}$. Далее на основе энергии тяжелой ($E'_{eh} > E_e$) дырки, плотности релятивистского нейтрино $\bar{\Omega}_{0\nu}$ и параметра ξ_{gS} по формулам

$$(E'_{eh} - E_e)^2 = \bar{\Omega}_{0\nu} 4(\Delta'_{eh})^2; \quad (\Delta'_{eh})^2 S_{012} = n_g \Delta_{\xi\varepsilon}^2; \quad \xi_{gS} = S_{012} / n_g \quad (17)$$

находим энергетические щели $\Delta'_{eh} = 112.3826146 \text{ кэВ}$, $\Delta_{\xi\varepsilon} = 2.933616794 \text{ кэВ}$. Здесь основной параметр $\xi_{gS} = 0.00068141$ из нашей кварк-глюонной модели [1] связан со структурным параметром S_{012} и числом квантов глюонов n_g . Тогда для энергетического спектра новых элементарных возбуждений составных частиц (типа суперпозиции электрона и дырки) характерно появление двух расщепленных ветвей энергий $\varepsilon_{1\xi} = 523.8808265 \text{ кэВ}$, $\varepsilon_{2\xi} = 510.3309855 \text{ кэВ}$, которые определяются по формулам

$$\varepsilon_{1\xi} = \varepsilon_0 + \Delta_{\gamma\xi}; \quad \varepsilon_{2\xi} = \varepsilon_0 - \Delta_{\gamma\xi}; \quad 4\Delta_{\gamma\xi}^2 = (E'_{eh} - E_e)^2 + 4\Delta_{\xi\varepsilon}^2. \quad (18)$$

Здесь $\Delta_{\gamma\xi} = 6.774920466 \text{ кэВ}$. Такие составные частицы и антинейтрино появляются в процессе классического распада нейтрона [5].

Выводы

Показано, что энергия тетранейтронного резонанса в системе из четырех нейтронов связана с числом квантов фоновго поля, глюонов, энергией покоя нейтрона. Ширина резонансного пика определяется релаксационным энергетическим спектром.

Процессы распада и слияния в системе из четырех нейтронов могут сопровождаться появлением релятивистского нейтрино. Учет вклада от плотности релятивистского нейтрино приводит к появлению эффективного космологического красного смещения, эффективного угла поляризации реликтового из-

лучения, эффективной тяжелой дырки и пары электрон-дырка. Оценки основных характеристик составных частиц типа тетранейтронов в рамках кварк-глюонной модели согласуются с экспериментом [5]. При этом возникает задача создания, перевода таких составных частиц из начального состояния в резонансное состояние, что требует дальнейших теоретических исследований.

Литература

1. Абрамов В.С. Активные наночастицы, агрегаты и бозон Хиггса в кварк-глюонной модели / В.С. Абрамов // Вестник Донецкого национального университета. Сер. А: Естественные науки. – 2022. – № 1 – С. 66-79.
2. Abramov V.S. Active Nanoobjects, Neutrino and Higgs Boson in a Fractal Models of the Universe / V.S. Abramov // C.H. Skiadas, Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. – Springer Nature Switzerland AG, 2020. – P. 1-14.
3. Abramov V.S. Active Femto- and Nano-Objects in Relation to the Solar and Interstellar Winds in Anisotropic Models / V.S. Abramov // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2020. – No 84(12). – P. 1505-1510.
4. Абрамов В.С. Черные дыры, релятивистские джеты, корональные дыры на Солнце, активные микрообъекты во фрактальных моделях // Вестник Донецкого национального университета. Сер. А: Естественные науки. – 2021. – № 3 – с. 16-29.
5. Абрамов В.С. Активные объекты, асимметрия материи, черные дыры и бозон Хиггса во фрактальных системах / В.С. Абрамов // Известия РАН. Сер. Физическая. – 2022. – № 86(7). – С. 1047-1053.
6. Duer M. Observation of a correlated free four-neutron system / M. Duer, T. Aumann, R. Gernhäuser et al. // Nature. – 2022. – V. 606. – P. 678-682.
7. Вонсовский С.В. Магнетизм микрочастиц / С.В. Вонсовский. – Москва: Наука, 1973. – 280 с.
8. Абрамов В.С. Анизотропная модель и переходные сигналы от бинарных космологических объектов: черных дыр, нейтронных звезд // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2018. – № 1. – С. 55-68.
9. Вайнберг С. Квантовая теория поля. Т. 2. Современные приложения / С. Вайнберг. – Москва, Физматлит, 2015. – 528 с.

TETRANEUTRONS AND THE HIGGS BOSON IN THE QUARK-GLUON MODEL

V.S. Abramov

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

Abstract: a quark-gluon model is proposed to describe the relationships and main characteristics of composite particles of the tetra-neutron type with the Higgs boson and the Higgs field. The position and width of the main peak of the tetra-neutron resonance, the lifetime of the tetra-neutron, and the radius of the core in the nucleon are theoretically estimated. It is shown that the contribution of the relativistic neutrino in the process of classical neutron decay can lead to changes in the cosmological redshift, the effective polarization angle of the cosmic microwave background radiation, and the appearance of a heavy hole in a compound particle such as an electron-hole pair.

Keywords: active femtoparticles, Higgs boson and Higgs field, quark-gluon model, lepton pairs, compound particles.

ИССЛЕДОВАНИЕ АЛГОРИТМА МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ПОТОКЕ

И.Л. Батаронов¹, С.В. Бородкин², А.В. Иванов², В.И. Рязских¹

¹Воронежский государственный технический университет

²Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
borodkinstanislav@yandex.ru

Аннотация: на основе уравнений RANS сформулирована система одномерных уравнений тепломассопереноса в потоке сверхкритического флюида. Система включает уравнение переноса массы и уравнение переноса энергии. Уравнения записаны в терминах среднемассовой энтальпии и массового расхода флюида по сечению потока. Методом баланса для полученной системы разработана разностная схема второго порядка точности, решаемая методом бегущего счета. Для нелинейной задачи расчета решения на одном шаге предложен алгоритм численного решения, включающий решение неявного уравнения для температуры стенки. Сформулированы условия отсутствия разрывов решения и проявления немонотонности схемы. Численным исследованием алгоритма установлены оптимальные по точности условия его реализации.

Ключевые слова: моделирование, турбулентный тепломассоперенос, сверхкритический флюид, разностная схема.

Введение

Традиционные методы расчета тепломассопереноса [1-3] непригодны для потоков сверхкритических флюидов (СКФ) вследствие сильной немонотонной зависимости их теплофизических свойств от температуры. В то же время, применяемые на сегодняшний день уравнения и алгоритмы [4-9] имеют дело только со стационарными потоками и вычислительными схемами низкой точности. В связи с этим имеется потребность в разработке эффективных нестационарных моделей расчета тепломассопереноса в СКФ и устойчивых высокоточных алгоритмов их численного решения.

1. Формулировка задачи тепломассопереноса в сверхкритическом флюиде

Будем исходить из осредненных по Рейнольдсу уравнений переноса (RANS). Ввиду малой (по сравнению со скоростью звука) скорости движения СКФ и больших значений давления в среде влиянием вариации давления на физические свойства среды можно пренебречь. Тогда уравнение переноса импульса можно исключить из усредненной системы уравнений, полагая давление постоянным вдоль потока. Также для простоты будем пренебрегать гравиинерциальными эффектами, закручиванием потока и диссипацией турбулентной энергии, а поток будем считать прямолинейным. Тогда у нас остаются два уравнения, которые в дивергентной форме имеют вид:

– уравнение переноса массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1.1)$$

– уравнение переноса энергии

$$\frac{\partial(\rho \eta)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \eta \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\mathbf{k}) = 0. \quad (1.2)$$

Здесь ρ , η , \mathbf{v} – плотность, удельная энтальпия и средняя скорость элемента СКФ, \mathbf{k} – плотность кондуктивного потока тепла.

Проинтегрируем уравнения (1.1-2) по поперечному сечению потока, вынося производную по координате x вдоль потока и времени t за знак интеграла:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dS + \frac{\partial}{\partial x} \int \rho v_x dS + \int \operatorname{div}_{\perp}(\rho \mathbf{v}) dS = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \eta dS + \frac{\partial}{\partial x} \int v_x \rho \eta dS + \int \operatorname{div}_{\perp}(\mathbf{v} \rho \eta) dS + \frac{\partial}{\partial x} \int \kappa_x dS + \int \operatorname{div}_{\perp}(\mathbf{k}) dS = 0,$$

где $\operatorname{div}_{\perp}$ – двумерная дивергенция в поперечном сечении потока. Преобразуем далее интегралы от дивергенции в поперечном сечении по теореме Остроградского-Гаусса в интегралы по контуру сечения, обнуляющиеся при наличии в подынтегральном выражении скорости потока вследствие условия прилипания:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dS + \frac{\partial}{\partial x} \int \rho v_x dS = 0, \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \eta dS + \frac{\partial}{\partial x} \int v_x \rho \eta dS + \frac{\partial}{\partial x} \int \kappa_x dS + \oint \kappa_n dl = 0. \quad (1.4)$$

Далее учтем, что в большинстве моделей тепломассопереноса в потоках пренебрегается продольным кондуктивным потоком тепла κ_x , последнее же слагаемое в левой части уравнения (1.4) с обратным знаком численно равно внешней плотности потока тепла q , поступающего в рассматриваемый поток СКФ через контур поперечного сечения (в силу непрерывности потока тепла через границу СКФ). Также заметим, что интеграл во втором слагаемом в уравнении (1.3) представляет собой массовый расход потока СКФ в данном сечении:

$$M = \int \rho v_x dS.$$

В результате уравнения (1.3-4) принимают вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} \int \rho dS + \frac{\partial M}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \int \rho \eta dS + \frac{\partial}{\partial x} \int v_x \rho \eta dS = q. \end{array} \right. \quad (1.5)$$

В полученной системе уравнений сформировались три усредненных параметра:

– средняя по сечению плотность СКФ

$$\bar{\rho} = \frac{1}{S} \int \rho dS,$$

– средняя по сечению удельная энтальпия

$$\bar{h} = \frac{1}{S \bar{\rho}} \int \rho \eta dS,$$

– среднemasсовая энтальпия [1-3] потока СКФ

$$h = \frac{1}{M} \int v_x \rho \eta dS,$$

где S – площадь поперечного сечения потока, которая в общем случае предполагается зависящей от координаты x и времени.

С использованием этих параметров система (1.5) переписывается как

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (S \bar{\rho}) + \frac{\partial M}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (S \bar{\rho} \bar{h}) + \frac{\partial (M h)}{\partial x} = q. \end{array} \right. \quad (1.6)$$

Система (1.6) содержит четыре зависимые переменные, связь между которыми должна быть установлена соответствующими критериальными уравнениями. Основными переменными являются M и h , поскольку именно они остаются в квазистационарном пределе.

С другой стороны, термодинамическое описание среды позволяет использовать любые два термодинамических параметра в качестве независимых переменных, каковыми выберем среднemasсовую энтальпию h и давление P (которое в данной задаче считается квазистационарным). Тогда все другие параметры определяются по уравнению состояния как функции h и P (для простоты зависимость от P опускаем): температура $T(h)$, плотность $\rho(h)$, которые принимаем в качестве усредненных значений параметров в данном сечении потока. Определенные таким образом величины называются среднemasсовыми [1-3]. Отметим, что через них же определяется и среднemasсовая скорость потока

$$V(T(h)) = \frac{M}{S\rho(h)}, \quad (1.7)$$

а через нее и число Рейнольдса для потока СКФ [4-9]

$$\text{Re} = \frac{D_3 V(T)}{\nu(T)} = \frac{4M}{p\mu(h)}. \quad (1.8)$$

Здесь ν , μ – кинематическая и динамическая вязкости СКФ, $D_3 = 4S/p$ – эквивалентный гидродинамический диаметр потока, p – периметр поперечного сечения потока.

Критериальные уравнения должны устанавливаться с учетом характерных особенностей течения и типа среды. Для закритической области СКФ с удовлетворительной точностью выполняются равенства [12]

$$\bar{h} = h, \quad \bar{\rho} = \rho(h),$$

что позволяет замкнуть уравнения (1.6):

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(S\rho(h)) + \frac{\partial M}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(Sh\rho(h)) + \frac{\partial}{\partial x}(Mh) = q. \end{cases} \quad (1.9)$$

Для тепловой мощности q , принимаемой данным потоком СКФ, обычно используется соотношение Ньютона-Рихмана

$$q = \frac{T_w - T}{R_t(T, T_w, M)}, \quad (1.10)$$

где T_w – температура поверхности потока («температура стенки»), а тепловое сопротивление R_t , определяющее способность потока СКФ принять заданную тепловую мощность, для сложных сред, таких как СКФ, зависит не только от температуры потока, но и температуры стенки, а также от массового расхода через среднюю скорость (1.7) или число Рейнольдса (1.8). В общем случае величина R_t включает также и тепловое сопротивление стенки.

В итоге система уравнений тепломассопереноса в СКФ принимает вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(S\rho(h)h) + \frac{\partial}{\partial x}(Mh) = \frac{T_w - T(h)}{R_t(T(h), T_w, M)}, \\ \frac{\partial}{\partial t}(S\rho(h)) + \frac{\partial}{\partial x}M = 0 \end{cases}. \quad (1.11)$$

Граничными условиями к уравнениям (1.11) служат температура в начальной точке потока $T_0(t)$, по которой рассчитывается граничная энтальпия $h_0(t)$, и входной массовый расход потока:

$$h(0, t) = h_0(t), \quad M(0, t) = M_0(t), \quad (1.12)$$

а начальными условиями являются начальное распределение температуры $T_1(x)$ (и, соответственно, энтальпии $h_1(x)$) и начальное распределение массового расхода вдоль потока

$$h(x,0) = h_1(x), \quad M(x,0) = M_1(x), \quad (1.13)$$

Условия (1.12-13) предполагаются согласованными по непрерывности:

$$h_0(0) = h_1(0), \quad M_0(0) = M_1(0), \quad (1.14)$$

Для температуры стенки T_w используются три типа условий:

– постоянный внешний поток тепла $q = \text{const}$, в этом случае решается непосредственно система уравнений (1.9), а температура стенки находится независимо из уравнения (1.10),

– постоянная температура стенки $T_w = \text{const}$, в этом случае уравнение (1.10) определяет отбираемый внешний поток тепла,

– общее условие теплообмена с внешней средой по закону Ньютона-Рихмана

$$q = \alpha \cdot (T_{ex} - T_w), \quad (1.15)$$

где T_{ex} – температура внешней среды, α – коэффициент теплоотдачи во внешнюю среду. Далее используется уравнение (1.15), которое совместно с (1.10) дает нелинейное уравнение

$$\frac{T_w - T}{\alpha R_t(T, T_w, M)} + T_w = T_{ex}. \quad (1.16)$$

для определения температуры стенки для заданной температуры потока T . Зависимость термического сопротивления от температур является довольно слабой, поэтому уравнение (1.16) целесообразно переписать в виде:

$$T_w = T_{ex} - \frac{T_{ex} - T}{1 + \alpha R_t(T, T_w, M)}. \quad (1.17)$$

Уравнение (1.16) добавляется в систему (1.11), делая ее полностью замкнутой.

2. Построение разностной схемы для решения системы уравнений переноса в СКФ

Будем искать решение на прямоугольной равномерной сетке с шагом по координате ξ и шагом по времени τ . Для уравнения переноса свойством монотонности обладают только схемы первого порядка точности [10, 11]. Имея целью получение схемы повышенной точности, будем устранять влияние немонотонности дополнительными средствами [11]. Разностную схему второго порядка точности можно получить на шаблоне, представленном на рис. 1.

Гарантированный порядок точности можно получить только для линейного уравнения. Для нелинейной задачи (1.11) итоговый порядок необходимо проверить вычислительным экспериментом.

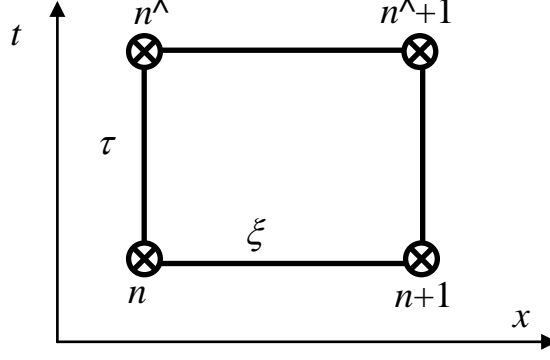


Рис. 1. Шаблон для построения разностного уравнения

Воспользуемся интегро-интерполяционным методом [11], дающим консервативную разностную схему, для чего проинтегрируем уравнения (1.11) по ячейке, представленной на рис. 1.

$$\begin{cases} \int_{x_n}^{x_n+\xi} \int_{t_m}^{t_m+\tau} \frac{\partial}{\partial t} (S\rho(h)h) dt dx + \int_{x_n}^{x_n+\xi} \int_{t_m}^{t_m+\tau} \frac{\partial}{\partial x} (Mh) dt dx = \int_{x_n}^{x_n+\xi} \int_{t_m}^{t_m+\tau} \frac{T_w(T(h), M) - T(h)}{R_t(T(h), T_w, M)} dt dx, \\ \int_{x_n}^{x_n+\xi} \int_{t_m}^{t_m+\tau} \frac{\partial}{\partial t} (S\rho(h)) dt dx + \int_{x_n}^{x_n+\xi} \int_{t_m}^{t_m+\tau} \frac{\partial}{\partial x} M dt dx = 0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Здесь учтено, что T_w согласно (1.16) есть неявно заданная функция переменных T и M , которую будем обозначать как $T_w(T, M)$.

Интегралы от производных в (2.1) вычисляются непосредственно:

$$\begin{aligned} & \int_{x_n}^{x_n+\xi} \left((S\rho(h)h) \Big|_{t_m+\tau} - (S\rho(h)h) \Big|_{t_m} \right) dx + \int_{t_m}^{t_m+\tau} \left((Mh) \Big|_{x_n+\xi} - (Mh) \Big|_{x_n} \right) dt = \\ & = \int_{x_n}^{x_n+\xi} \int_{t_m}^{t_m+\tau} \frac{T_w(T(h), M) - T(h)}{R_t(T(h), T_w, M)} dt dx, \\ & \int_{x_n}^{x_n+\xi} \left((S\rho(\hat{h})) \Big|_{t_m+\tau} - (S\rho(h)) \Big|_{t_m} \right) dx + \int_{t_m}^{t_m+\tau} \left(M \Big|_{x_n+\xi} - M \Big|_{x_n} \right) dt = 0. \end{aligned}$$

Оставшиеся одномерные интегралы оценим по формуле трапеций, что, как известно, дает второй порядок аппроксимации.

$$\begin{aligned} & \frac{\xi S}{2} \left(\rho(\hat{h}_{n+1})\hat{h}_{n+1} + \rho(\hat{h}_n)\hat{h}_n - \rho(h_{n+1})h_{n+1} - \rho(h_n)h_n \right) + \\ & + \frac{\tau}{2} \left(\hat{M}_{n+1}\hat{h}_{n+1} + M_{n+1}h_{n+1} - \hat{M}_n\hat{h}_n - M_n h_n \right) = \int_{x_n}^{x_n+\xi} \int_{t_m}^{t_m+\tau} \frac{T_w(T(h), M) - T(h)}{R_t(T(h), T_w, M)} dt dx, \\ & \frac{\xi S}{2} \left(\rho(\hat{h}_{n+1}) + \rho(\hat{h}_n) - \rho(h_{n+1}) - \rho(h_n) \right) + \frac{\tau}{2} \left(\hat{M}_{n+1} + M_{n+1} - \hat{M}_n - M_n \right) = 0. \quad (2.2) \end{aligned}$$

Здесь используются стандартные обозначения для значений сеточной функции в узлах шаблона: со шляпкой – для переменной в узлах на новом слое по времени $t = t_m + \tau$, без шляпки – на текущем слое $t = t_m$.

Для аппроксимации двойного интеграла заметим, что он выражает зависящую от переменных задачи плотность источников в уравнении переноса. В таком случае для получения устойчивой схемы необходимо включать в аппроксимацию этого члена искомую переменную бегущего счета [11]. Для сохранения второго порядка аппроксимации используем для этого обобщенную формулу трапеций по узлам шаблона:

$$\begin{aligned} & \int_{x_n}^{x_n + \xi} \int_{t_m}^{t_m + \tau} \frac{T_w(T(h), M) - T(h)}{R_t(T(h), T_w, M)} dt dx = \\ & = \frac{\xi \tau}{4} \left(\frac{T_{w,n} - T_n}{R_{t,n}} + \frac{\hat{T}_{w,n} - \hat{T}_n}{\hat{R}_{t,n}} + \frac{T_{w,n+1} - T_{n+1}}{R_{t,n+1}} + \frac{\hat{T}_{w,n+1} - \hat{T}_{n+1}}{\hat{R}_{t,n+1}} \right), \end{aligned} \quad (2.3)$$

где для удобства введены обозначения для вспомогательных переменных, вычисляемых по нелинейным функциям от основных переменных задачи:

$$\begin{aligned} T &= T(h_n), \hat{T}_n = T(\hat{h}_n), \dots \\ T_{w,n} &= T_w(T(h_n), M_n), \hat{T}_{w,n} = T_w(T(\hat{h}_n), \hat{M}_n), \dots \\ R_{t,n} &= R_t(T(h_n), T_{w,n}, M_n), \hat{R}_{t,n} = R_t(T(\hat{h}_n), \hat{T}_{w,n}, \hat{M}_n), \dots \end{aligned} \quad (2.4)$$

При подстановке выражения (2.3) в систему (2.2) получим систему разностных уравнений, аппроксимирующую задачу со вторым порядком точности:

$$\begin{aligned} & \frac{\xi S}{2} \left(\rho(\hat{h}_{n+1}) \hat{h}_{n+1} + \rho(\hat{h}_n) \hat{h}_n - \rho(h_{n+1}) h_{n+1} - \rho(h_n) h_n \right) + \\ & + \frac{\tau}{2} \left(\hat{M}_{n+1} \hat{h}_{n+1} + M_{n+1} h_{n+1} - \hat{M}_n \hat{h}_n - M_n h_n \right) = \\ & = \frac{\xi \tau}{4} \left(\frac{T_{w,n} - T_n}{R_{t,n}} + \frac{\hat{T}_{w,n} - \hat{T}_n}{\hat{R}_{t,n}} + \frac{T_{w,n+1} - T_{n+1}}{R_{t,n+1}} + \frac{\hat{T}_{w,n+1} - \hat{T}_{n+1}}{\hat{R}_{t,n+1}} \right), \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\frac{\xi S}{2} \left(\rho(\hat{h}_{n+1}) + \rho(\hat{h}_n) - \rho(h_{n+1}) - \rho(h_n) \right) + \frac{\tau}{2} \left(\hat{M}_{n+1} + M_{n+1} - \hat{M}_n - M_n \right) = 0.$$

Система (2.5) эффективно решается по методу бегущего счета, в котором в каждом уравнении (2.5) переменные на трех узлах известны с предыдущих шагов расчета, а неизвестными являются только переменные в четвертом узле шаблона, а именно \hat{h}_{n+1} и \hat{M}_{n+1} . Для линейной задачи при этом получается явная схема расчета [11]. Для рассматриваемой нелинейной задачи получается система из двух нелинейных уравнений, которая может быть записана в виде:

$$\begin{cases} Q_2 \hat{h}_{n+1} - \frac{\tau}{2S} \frac{T_w(T(\hat{h}_{n+1}), \hat{M}_{n+1}) - T(\hat{h}_{n+1})}{R_t(T(\hat{h}_{n+1}), T_w(T(\hat{h}_{n+1}), \hat{M}_{n+1}), \hat{M}_{n+1})} = Q_1, \\ \rho(\hat{h}_{n+1}) + \frac{\tau}{\xi S} \hat{M}_{n+1} = Q_2. \end{cases} \quad (2.6)$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{\tau}{\xi S} (\hat{M}_n \hat{h}_n + M_n h_n - M_{n+1} h_{n+1}) + \\ &+ \frac{\tau}{2S} \left(\frac{T_{w,n} - T_n}{R_{t,n}} + \frac{\hat{T}_{w,n} - \hat{T}_n}{\hat{R}_{t,n}} + \frac{T_{w,n+1} - T_{n+1}}{R_{t,n+1}} \right) + \\ &+ \rho(h_{n+1}) h_{n+1} + \rho(h_n) h_n - \rho(\hat{h}_n) \hat{h}_n, \\ Q_2 &= \rho(h_{n+1}) + \rho(h_n) - \rho(\hat{h}_n) + \frac{\tau}{\xi S} (\hat{M}_n + M_n - M_{n+1}) \end{aligned}$$

для величин, не зависящих от искомым переменных.

Нетрудно заметить, что второе уравнение в (2.6) легко разрешается относительно переменной \hat{M}_{n+1} :

$$\hat{M}_{n+1} = \frac{\xi S}{\tau} (Q_2 - \rho(\hat{h}_{n+1})). \quad (2.7)$$

Это позволяет переписать (2.6) в форме одного уравнения для одной переменной \hat{h}_{n+1}

$$\hat{h}_{n+1} = \frac{Q_1}{Q_2} + \frac{\tau}{2SQ_2} \frac{T_w \left[T(\hat{h}_{n+1}), \frac{\xi S}{\tau} (Q_2 - \rho(\hat{h}_{n+1})) \right] - T(\hat{h}_{n+1})}{R_t \left\{ T(\hat{h}_{n+1}), T_w \left[T(\hat{h}_{n+1}), \frac{\xi S}{\tau} (Q_2 - \rho(\hat{h}_{n+1})) \right], \frac{\xi S}{\tau} (Q_2 - \rho(\hat{h}_{n+1})) \right\}}, \quad (2.8)$$

после решения которого вторая переменная \hat{M}_{n+1} находится непосредственно из соотношения (2.7).

Отметим, что при отсутствии второго слагаемого в правой части равенства (2.8) получаем обычную схему бегущего счета для линейной системы уравнений переноса без источников и стоков.

3. Разработка алгоритма решения разностной схемы системы уравнений переноса в СКФ

Для решения нелинейного уравнения бегущего счета (2.8) используются два итерационных метода [11].

1) в линейном методе правая часть уравнения (2.8) вычисляется по значениям, полученным с предыдущей итерации, что сразу дает значение \hat{h}_{n+1} на те-

кущей итерации. Такой метод фактически эквивалентен методу простых итераций и поэтому нуждается в проверке сходимости.

2) при использовании нелинейного метода итерации находятся по методу Ньютона, примененного для уравнения (2.8).

Для выбора метода решения определим локальное число Куранта Cur , для чего рассмотрим переносную часть уравнения (2.5)

$$\frac{\xi S}{2} \rho(\hat{h}_{n+1}) \hat{h}_{n+1} + \frac{\tau}{2} \hat{M}_{n+1} \hat{h}_{n+1}.$$

Отсюда следует, что число Cur в рассматриваемой задаче равно

$$Cur = \frac{\tau \hat{M}_{n+1}}{\xi S \rho(\hat{h}_{n+1})}. \quad (3.1)$$

Для оценки значений выражения (3.1) примем величины шагов $\xi = 10$ см, $\tau = 1$ с, плотность расхода массы 300 кг/(м²·с), плотность $\rho(T)$ – по данным для кислорода в сверхкритической области. Результаты расчета с этими параметрами приведены на рис. 2.

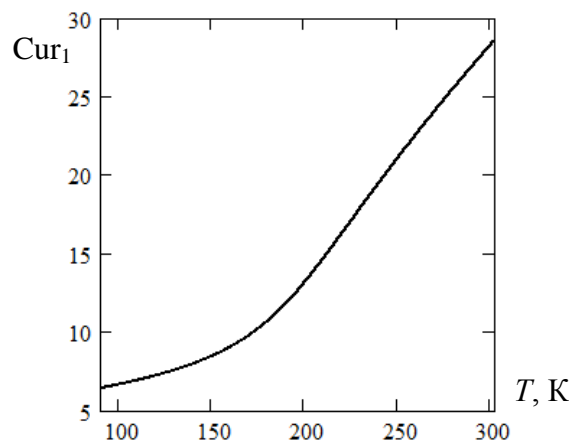


Рис. 2. Рассчитанная зависимость числа Куранта от температуры

Из результатов рис. 2 следует, что число Куранта для СКФ изменяется в широких пределах и может значительно превышать критическое значение – единицу. Хотя построенная схема безусловно устойчива, но не является монотонной, то она может приводить к разболтке решения. В таком случае рекомендуется применять линейный метод для решения уравнения переноса [11].

В результате предлагается следующий итерационный алгоритм решения уравнения (2.8):

$$M_{n+1}^{(s)} = \frac{\xi S}{\tau} \left(Q_2 - \rho(\hat{h}_{n+1}^{(s)}) \right), \quad T_{w.n+1}^{(s)} = T_w \left[T(\hat{h}_{n+1}^{(s)}), M_{n+1}^{(s)} \right],$$

$$\hat{h}_{n+1}^{(s+1)} = \frac{\tau}{2S Q_2} \frac{T_{w.n+1}^{(s)} - T(\hat{h}_{n+1}^{(s)})}{R_t \left[T(\hat{h}_{n+1}^{(s)}), T_{w.n+1}^{(s)}, M_{n+1}^{(s)} \right]} + \frac{Q_1}{Q_2}. \quad (3.2)$$

Для повышения устойчивости и ускорения сходимости начальное значение для итерационной схемы выбирается в виде линейной экстраполяции по трем точкам с известным значением переменной:

$$\hat{h}_{n+1}^{(0)} = \hat{h}_n + h_{n+1} - h_n.$$

Блок-схема алгоритма (3.2) приведена на рис. 3.

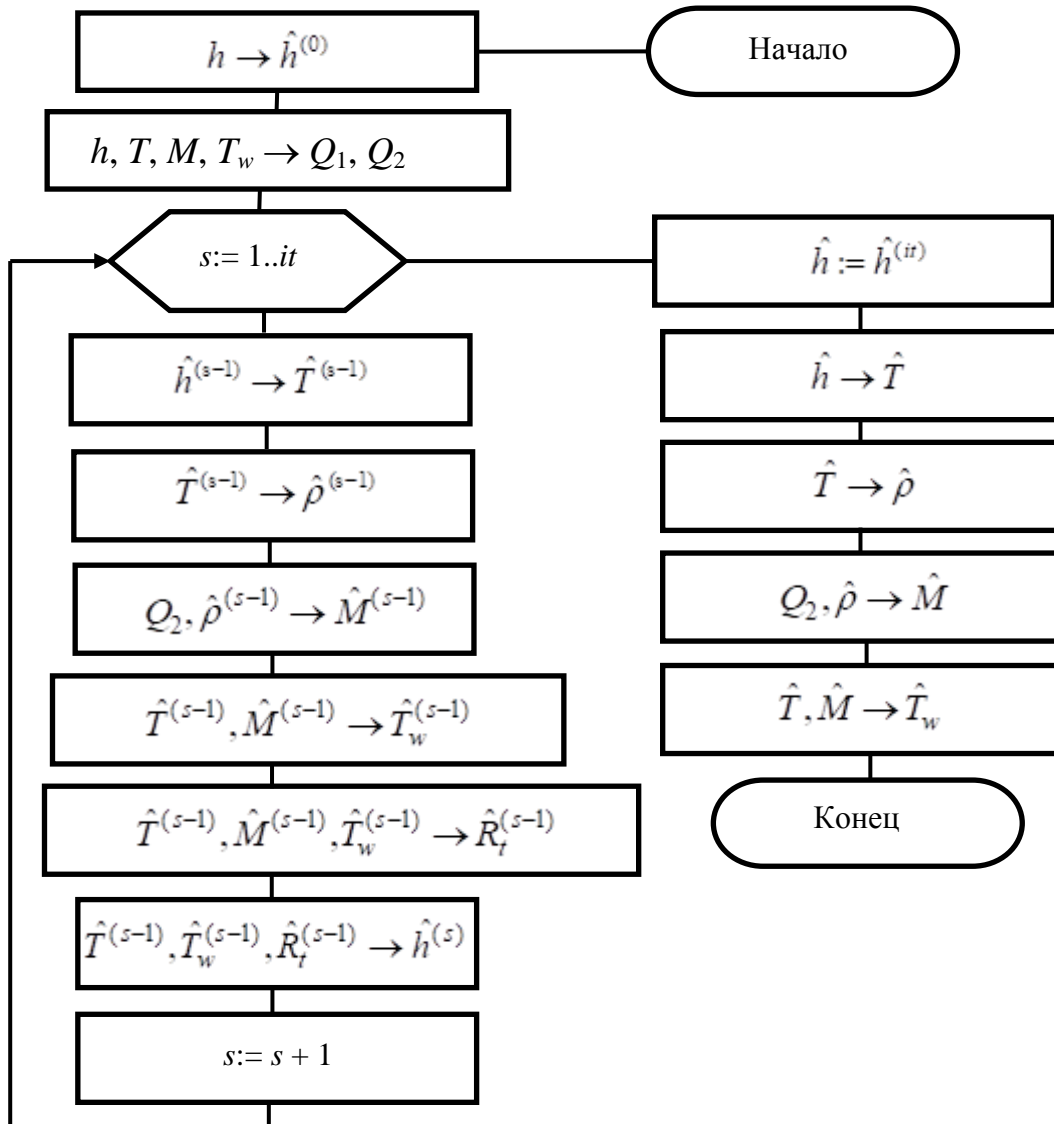


Рис. 3. Блок-схема итерационного алгоритма линейного метода

В блок-схеме на рис. 3 шляпкой обозначены искомые переменные, для удобства решения используются вспомогательные переменные (2.4). Все выражения алгоритма рис. 3 вычисляются по явным формулам, кроме температуры стенки T_w , которая находится решением нелинейного уравнения (1.17).

Алгоритм решения уравнения (1.17) образует отдельный итерационный блок. Фактически запись уравнения в виде (1.17) формирует схему простых итераций со сжимающим отображением, которая тем самым устойчиво сходится. Однако коэффициент сжатия $1/(1 + \alpha R)$ может оказаться близким к единице,

что приведет к медленной сходимости алгоритма. Поэтому для обеспечения быстрой сходимости для решения уравнения (1.17) был применен метод Ньютона, алгоритм которого выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} R_t^{(s)} = R_t(T, T_w^{(s)}, M), \\ R_t^{(+)} = R_t(T, T_w^{(s)} + \delta, M), \\ R_t^{(-)} = R_t(T, T_w^{(s)} - \delta, M), \\ T_w^{(s+1)} = T_w^{(s)} - \frac{T_{ex} - T - (T_{ex} - T_w^{(s)})(1 + \alpha R_t^{(s)})}{1 + \alpha R_t^{(s)} - \alpha \frac{R_t^{(+)} - R_t^{(-)}}{2\delta} (T_{ex} - T_w^{(s)})}. \end{cases} \quad (3.3)$$

Здесь параметр δ численного нахождения производной функции R_t выбирается достаточно малым для обеспечения квадратичной скорости сходимости алгоритма. Поскольку для аппроксимации производной в (3.3) использована формула второго порядка, то достаточно выбрать δ равным требуемой точности расчета по алгоритму.

Так как число Куранта пропорционально скорости переноса, то кривую на рис. 2 также можно рассматривать как температурную зависимость нормированной скорости переноса. При возрастающем характере этой зависимости могут появляться слабые и сильные разрывы решения [10, 11]. Во избежание этого эффекта предполагаются выполненными специальные требования на начально-краевые условия задачи:

- начальное распределение температуры (соответственно, энтальпии (1.13)) должно быть неубывающей функцией координаты вдоль потока,
- изменение граничной температуры (и энтальпии (1.12)) во входной точке со временем должно описываться невозрастающей функцией.

Алгоритм рис. 3 определяет решение системы (2.6) на одном шаге по координате в слое по времени, последовательное его применение образует схему бегущего счета. Построенная консервативная схема имеет порядок точности выше первого, следовательно, по теореме Годунова не является монотонной, то есть может приводить к разболтке численного решения. Уменьшение этого эффекта можно добиться выбором гладких и согласованных начально-граничных условий [11]. С целью формулировки таких условий будем считать, что до начальной точки движение потока осуществляется без теплообмена с окружающей средой, то есть описывается однородным вариантом системы уравнений (1.11), и заметим, что такой системе удовлетворяет решение в форме волны, движущейся с постоянной скоростью V_0

$$\begin{aligned} h(x, t) = \psi\left(\frac{x - V_0 t}{d}\right), \quad T(x, t) = h(\psi) = \varphi\left(\frac{x - V_0 t}{d}\right), \\ M(x, t) = SV_0 \rho(T(x, t)), \quad x < 0, \end{aligned} \quad (3.4)$$

где d – характеристическая длина вариации решения. Определение гранично-начальных условий через дважды дифференцируемое решение (3.4) автомати-

чески удовлетворяет условию согласования граничных и начальных условий в точке стыка, а также условию (1.14). Дополнительно требуется ограничение на шаг расчета ξ по координате [11]:

$$\xi \frac{T''_{xx}}{T'_x} < 1. \quad (3.5)$$

Для удовлетворения поставленным условиям выберем функцию φ в виде сигмоиды

$$\varphi(\zeta) = T_0 + \frac{T_1 - T_0}{1 + e^{-\zeta - \zeta_0}}. \quad (3.6)$$

Здесь T_0 – входная температура СКФ, T_1 – начальная температура, $\zeta_0 \geq 5$ – начальный сдвиг профиля. Решение (3.6) удовлетворяет условию (3.5) при $\xi < d$. В результате начально-граничные условия (1.12-13) будут

$$\begin{aligned} h_0(t) &= \psi\left(-\frac{V_0 t}{d}\right), M_0(t) = V_0 S \rho(h_0(t)), \\ h_1(x) &= \psi\left(\frac{x}{d}\right), M_1(x) = V_0 S \rho(h_1(x)). \end{aligned} \quad (3.7)$$

При этом скорость V_0 будем определять входным массовым расходом $M_{\text{вх}}$ при температуре T_0 : $V_0 = M_{\text{вх}} / (S \rho(T_0))$.

4. Вычислительный эксперимент по исследованию разработанного алгоритма решения задачи переноса

Для численного исследования разработанных алгоритмов решения нелинейной системы уравнений переноса был проведен вычислительный эксперимент. В качестве СКФ был выбран кислород при давлении 20 Мпа. Массовый расход варьировался в пределах $M_{\text{вх}} = 0,03 \div 0,05$ кг/с, входная температура потока $T_0 = 90$ К, начальная температура $T_1 = 300$ К, коэффициент теплоотдачи во внешнюю среду $\alpha = 500 \div 2000$ Вт/(м²К). Термодинамические зависимости свойств были взяты по аппроксимирующим формулам, построенным в [13], а коэффициент теплового сопротивления R_t – по критериальному уравнению, полученному в [12]. Площадь сечения потока составляла $S = 0,785$ см², длина расчетной области $L = 10$ м, число шагов по координате $50 \div 200$, шаг по времени варьировался в диапазоне $0,25 \div 1$ с. За контролируемый расчетный параметр выбрано поле температур, так как именно оно представляет непосредственный практический интерес.

Численные результаты исследования алгоритма (3.2) по итерациям на одном шаге при различных числах Куранта приведены в табл. 1. Результаты показывают устойчивую сходимость алгоритма в широком диапазоне чисел Куранта за $3 \div 5$ итераций.

Исследование сходимости алгоритма (3.2)

$T_n = 150 \text{ К}, M_{0,n} = 0,04 \text{ кг/с}, M_{0,n+1} = 0,03 \text{ кг/с}, \hat{M}_{1,n} = 0,05 \text{ кг/с}$							
Cur_1	5,68	1,0	0,28	1,14	5,68	5,68	62,47
$T_{n+1}, \text{ К}$	155	155	155	175	155	175	175
$\hat{T}_n, \text{ К}$	145	145	145	145	125	125	125
$s = 0$	150.098	150.098	150.098	170.437	130.358	152.086	152.086
1	152.676	155.123	157.786	154.55	140.626	131.941	125.037
2	152.662	155.104	157.772	154.62	140.573	132.052	125.197
3	152.662	155.104	157.772	154.62	140.573	132.052	125.197
4	152.662	155.104	157.772	154.62	140.573	132.052	125.197
5	152.662	155.104	157.772	154.62	140.573	132.052	125.197

Исследование разностной схемы в целом должно осуществляться на расчете, проводимом по методу бегущего счета на расчетной длине, пример которого показан на рис. 4 с шагом в 1 с.

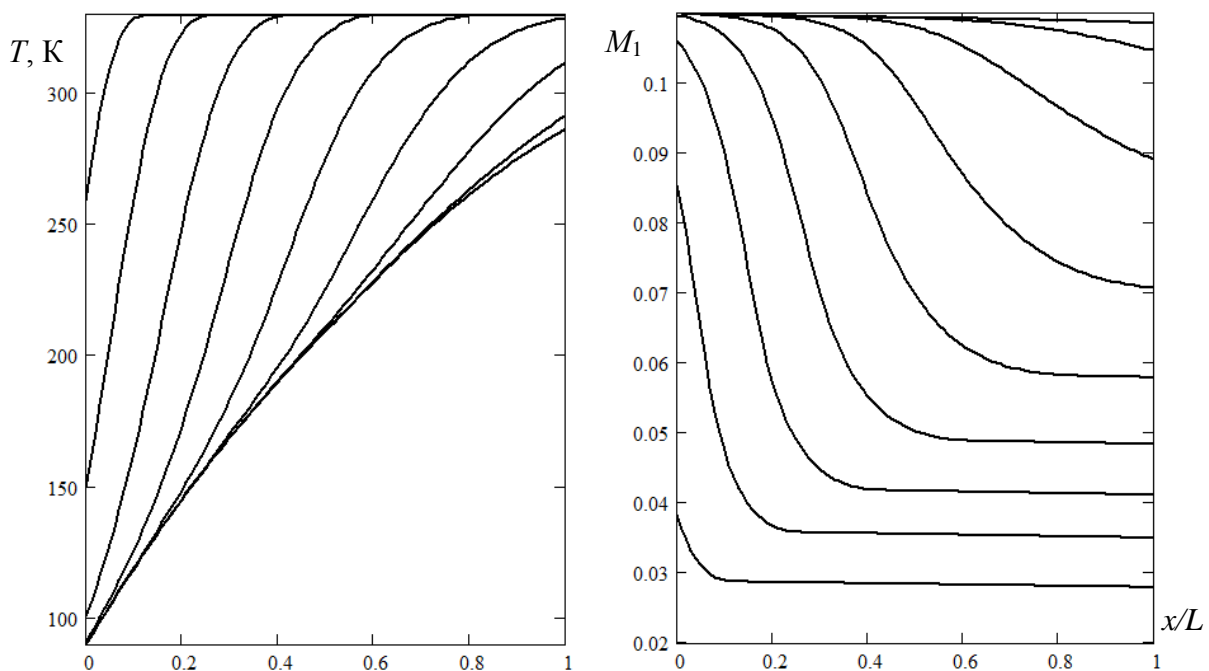


Рис. 4. Пример решения бегущего счета

Здесь использован массовый расход 0,11 кг/с, а максимальное значение числа Куранта составило $Cur_{\max} = 2,7$.

Как следует из рис. 4, за время, оцениваемое значением

$$t_{st} = \frac{SL\rho_{\max}}{M_{\text{вх}}} \quad (4.1)$$

рассматриваемый процесс переходит в стационарный режим, не зависящий от начальных условий.

При исследовании было обнаружено, что когда число Куранта становилось больше трех, в профилях массового расхода появлялась черезшаговое изменение угла наклона профиля, решение для энтальпии при этом сохраняло возрастающий характер. Таким образом, условием отсутствия подобной разболтки при использовании схемы (3.2) является

$$\text{Cur}_{0,\max} < 3. \quad (4.2)$$

Скорость сходимости n и ошибка Δ численной модели (3.2) оценивалась по формуле:

$$\Delta = A\tau^n, \quad (4.3)$$

параметры которой определялись расчетом на сгущающихся сетках с использованием метода Рунге-Ромберга [11]. Для этого выполнен расчет с шагами по времени $\tau, 2\tau, 4\tau$ и получены решения на одном временном слое Z_1, Z_2, Z_4 . Затем в некоторой норме вектора $\|\bullet\|$ находятся разности $\Delta_{xy} = \|Z_x - Z_y\|$, из которых вычисляются параметры выражения (4.3):

$$n = \log_2 \frac{\Delta_{42}}{\Delta_{21}}, \quad A = \frac{\Delta_{21}}{\tau^n (2^n - 1)}. \quad (4.4)$$

Для расчета использованы евклидова норма $\|\bullet\|_2$, равномерная (чебышевская) норма $\|\bullet\|_C$. Ошибка (4.3) при переходе между слоями по времени вначале нарастает, а по мере приближения к стационарному решению асимптотически убывает. Поэтому для оценки сверху возьмем средний слой, который, согласно рис. 4, соответствует времени 5 с, минимальный шаг выберем равным $\tau = 0,05$ с. Результаты расчета по формулам (4.4) приведены в табл. 2, где также приведена абсолютная ошибка по формуле (4.3) для минимального шага и относительная ошибка δ для минимального и максимального из выбранных шагов по времени.

Результаты табл. 2 показывают, что во всех рассмотренных случаях показатель скорости сходимости n близок к двум, что соответствует второму порядку аппроксимации схемы (3.2), а относительная ошибка на минимальном шаге составляет сотые доли процента. Максимальная абсолютная ошибка по температуре составила менее 1 К, что вполне приемлемо для технических расчетов.

Таблица 2

Исследование ошибки схемы (3.2)

	$\ \Delta T\ _2$	$\ \Delta T\ _C$	$\ \Delta M\ _2$	$\ \Delta M\ _C$
$\Delta_{42} \cdot 10^3$	442	1035	1,0	1,75
$\Delta_{21} \cdot 10^3$	102	251	0,24	0,437
n	2,113	2,044	2,06	2,0
A	17,24	36,66	0,036	0,058
$\Delta_\tau \cdot 10^3$	31	80	0,076	0,146
$\delta_\tau, \%$	0,013	0,033	0,096	0,18
$\delta_{4\tau}, \%$	0,23	0,557	1,663	2,952

Аналогичный анализ на сгущающихся сетках по координате x дал следующие выражения для ошибки расчета температуры от шага ξ в разных нормах:

$$\Delta_2 = 16,7 \xi^2, \quad \Delta_C = 55,2 \xi^2. \quad (4.5)$$

В количественном выражении эти оценки близки к результатам табл. 2, что позволяет записать оптимальное соотношение шагов для расчета с одинаковой точностью по координате и времени. Для этого заметим, что шаг по времени должен соотноситься с временем переходного режима (4.1), а шаг по координате – с длиной расчетной области L , в результате получаем:

$$\frac{\tau}{t_{st}} \approx \frac{\xi}{L}. \quad (4.6)$$

Это условие, как нетрудно убедиться из формул (3.1) и (4.1), соответствует минимальному значению числа Куранта, равному единице.

Таким образом, построен алгоритм повышенной точности для расчета задачи переноса СКФ, характеризующийся устойчивостью в широком диапазоне чисел Куранта, и установлены оптимальные по точности расчета условия реализации алгоритма.

Литература

1. Кутателадзе С.С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 367 с.
2. Авдеевский, В.С. Основы теплопередачи в авиационной и ракетно-космической технике / В.С. Авдеевский, Б.М. Галицейский, Г.А. Глебов и др.: под ред. акад. В.С. Авдеевского и проф. В.К. Кошкина. М.: Машиностроение, 1992. – 528 с.
3. Петухов Б.С., Генин Л.Г., Ковалев С.А. Теплообмен в ядерных энергетических установках. М.: Атомиздат, 1974. 408 с.
4. Hisada, N. Design and analysis of open rack LNG vaporized / N. Hisada, M. Sekiguchi. // Design and analysis of pressure vessels, heat exchangers and piping components – 2004. San Diego, 2004. – V. 477. – P. 2004-2602.
5. Jin, T. Simulation and performance analysis of a heat transfer tube in SuperORV / T. Jin, M. Wang, K. Tang // Cryogenics. – 2014. – V. 61. – P. 127–132.
6. Pan, J. Thermal performance calculation and analysis of heat transfer tube in super open rack vaporizer / J. Pan, R. Li, T. Lv, G. Wu, Z. Deng // Applied Thermal Engineering. – 2016. – V. 93. – P. 27–35.
7. Pan, J. Thermal performance analysis of SuperORV heat transfer tube at supercritical pressure / J. Pan, R. Li, T. Lv, G. Wu // Journal of Natural Gas Science and Engineering. – 2016. – V. 29. – P. 488–496.
8. Qi, C. Thermal performance analysis and the operation method with low temperature seawater of super open rack vaporizer for liquefied natural gas / C. Qi, C. Yi, B. Wang, W. Wang, J. Xu // Applied Thermal Engineering. – 2019. – V. 150. – P. 61–69.
9. Deng, Z. Numerical simulation analysis of the flow field and convective heat transfer in new super open rack vaporizer / Z. Deng, K.i Hui, Y. Zhang, Y.C. // Applied Thermal Engineering. – 2016. – V. 106. – P.721–730.
10. Годунов, С.К. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов. М.: Наука, 1976. – 400 с.

11. Калиткин, Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
12. Borodkin, S.V. Simulation of heat transfer in a flow of over-critical nitrogen and oxygen in a horizontal circular tube / S.V. Borodkin, I.L. Bataronov, A.V. Ivanov, V.I. Ryazhskikh // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2021. – V. 1155. – P. 012011.
13. Бородкин, С.В. Аппроксимация теплофизических параметров закритических азота и кислорода / С.В. Бородкин, И.Л. Батаронов, А.В. Иванов // Физико-математическое моделирование систем: материалы XXII Междунар. семинара. Воронеж: ВГТУ, 2021. – 2021 – С. 60-69.

INVESTIGATION OF THE SIMULATION ALGORITHM OF HEAT AND MASS TRANSFER IN A SUPERCRITICAL FLOW

S.V. Borodkin¹, I.L. Bataronov², A.V. Ivanov², V.I. Ryazhskikh¹

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

²Voronezh State Technical University

Abstract: based on the RANS equations, a system of one-dimensional equations of heat and mass transfer in a supercritical fluid flow is formulated. The system includes a mass transfer equation and an energy transfer equation. The equations are written in terms of the average mass enthalpy and the mass flow rate of the fluid over the flow section. The balance method for the resulting system has developed a difference scheme of the second order of accuracy, solved by the method of running counting. For the nonlinear problem of calculating the solution at one step, a numerical solution algorithm is proposed, including the solution of an implicit equation for the wall temperature. The conditions for the absence of discontinuities of the solution and the manifestation of non-monotonicity of the scheme are formulated. Numerical study of the algorithm has established optimal conditions for its implementation in terms of accuracy.

Keywords: simulation, turbulent heat and mass transfer, supercritical fluid, difference scheme.

к-ε-МОДЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПРОФИЛЯ ВДОЛЬ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО МОДУЛЯ ПРИ ОХЛАЖДЕНИИ ТУРБУЛЕНТНЫМ ПОТОКОМ

О.А. Дорохова

Воронежский государственный технический университет
dezhinaksu@mail.ru

Аннотация: была рассмотрена задача теплообмена между плоскопараллельным турбулентным потоком теплоносителя и термоэлементом, работающем в режиме охлаждения. Расчет проводился в к-ε модели турбулентности с пристеночными функциями. Показано, что температура на поверхности термоэлемента складывается из фиксированного скачка температуры на пристеночном слое и непрерывного профиля температуры на границе теплоносителя. Установлено, что распределение безразмерной температуры зависит только от чисел Прандтля и Рейнольдса, а зависимость от критериальных параметров термоэлемента входит в безразмерную мощность тепловых источников. Найдены аппроксимирующие выражения для температурного профиля и скачка температуры.

Ключевые слова: турбулентный тепломассоперенос, термоэлектрический модуль, к-ε модель.

Термоэлектрические элементы широко применяются в качестве быстродействующих охладительных устройств в теплонапряженных участках различных систем [1-3]. К настоящему времени предложен целый ряд моделей расчета термоэлектрических охладителей [4-13]. Однако эти модели не учитывают реальных процессов теплопередачи в проточном теплоносителе, для чего нужен подход, основанный на законах теплотехники [14-17]. Основная сложность в этом случае состоит в том, что термоэлектрический охладитель имеет достаточно малые размеры, поэтому функционирует в переходной области теплообмена, так что стационарные соотношения теплообмена для него, вообще говоря, неприменимы [18-20]. Исследование данной задачи для ламинарного потока [21] подтверждает этот вывод и выявляет ряд особенностей, присущих термоэлектрическому охлаждению. В настоящей работе данный подход развивается, применительно к турбулентному потоку в рамках к-ε модели, обладающий удовлетворительной точностью и хорошей эффективностью в плане вычислительных затрат.

Постановка задачи

Рассматривается задача теплообмена между плоскопараллельным турбулентным потоком теплоносителя (ТН) и термоэлементом (ТЭ), на который поступает однородный внешний поток тепла с плотностью q_0 (рис. 1). ТЭ преобразует этот поток и передает в ТН тепловой поток с плотностью q_1 .

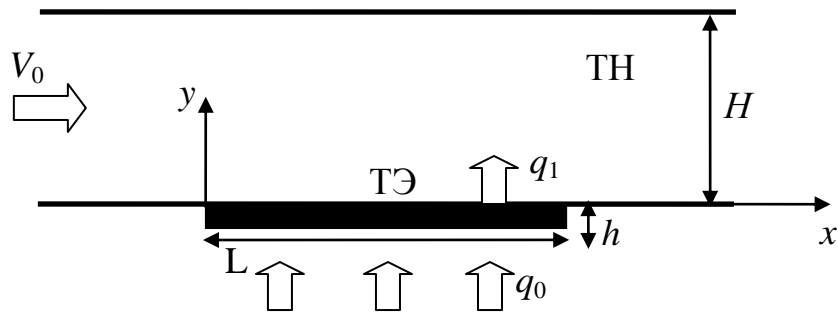


Рис. 1. Схема теплообмена

Теплоотдача в поток ТН осуществляется по механизму турбулентного теплопереноса и описывается уравнением:

$$\rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \text{div}(\lambda \nabla T) + Q, \quad (1)$$

где ρ – плотность ТН, C_p – удельная теплоемкость, \mathbf{u} – усредненное по Рейнольдсу поле скоростей ТН, λ – турбулентный коэффициент теплопроводности, принимаемый на основе турбулентного числа Прандтля в рамках модели Кейса-Кроуфорда, Q – скорость диссипации турбулентной энергии.

Для расчета поля скоростей ТН использовалась k-ε модель с пристеночными функциями. При этом задаваемым параметром была средняя скорость течения ТН, что позволило непосредственно определять число Рейнольдса.

Теплоперенос в термоэлементе описывался в модели средних значений физических параметров [1, 2]. В этом случае выражения для входящего и выходящего потоков тепла в ТЭ имеют вид [1, 2]:

$$q_0 = \alpha j T_0 - \frac{j^2 h}{2\sigma} - \frac{\Lambda}{h} (T_1 - T_0), \quad (2)$$

$$q_1 = \alpha j T_1 + \frac{j^2 h}{2\sigma} - \frac{\Lambda}{h} (T_1 - T_0). \quad (3)$$

Здесь α – коэффициент Зеебека, σ – удельная электропроводность, Λ – коэффициент теплопроводности термоэлектрического материала, j – плотность электрического тока в ТЭ, h – толщина ТЭ.

Входная температура потока считается однородной, равной $T_{\text{вх}}$, участки стенок, кроме ТЭ, – теплонепроницаемыми. Выходным граничным условием для гидродинамической задачи было задано давление, для тепловой задачи – отсутствие кондуктивного переноса тепла. Для выполнения последнего условия выходная граница располагалась на достаточном удалении от зоны теплообмена, т.е. ТЭ. Также входное распределение скоростей задавалось в форме автомоделного турбулентного профиля и предусматривалась буферная зона для гидродинамической стабилизации течения.

Для установления критериальных параметров, от которых зависит распределение температуры на термоэлементе задача исследовалась в рамках теории подобия. Для этого был осуществлен переход в уравнениях (1–3) к безразмерным переменным.

$$j = j_m \zeta, \quad q = q_m \tilde{q}, \quad T = T_{\text{вх}}(1 + \theta), \quad x = H \xi, \quad y = H \eta, \quad (4)$$

где использованы обозначения для масштабов плотности электрического тока и плотности потока тепла

$$j_m = \frac{\Lambda}{\alpha h}, \quad q_m = \frac{\lambda T_{\text{вх}}}{H}. \quad (5)$$

В результате преобразования переменных (4) уравнение (1) принимает вид:

$$\text{Pe } \mathbf{v} \cdot \nabla \theta = \text{div} \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \nabla \theta \right) + \tilde{Q}, \quad (6)$$

а соотношение (2) и (3) дают граничное условие [21].

$$-\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(\xi, 0) = Q + \Upsilon \theta(\xi, 0), \quad 0 < \xi < \xi_0. \quad (7)$$

Здесь $\xi_0 = L/H$,

$$\text{Pe} = \frac{V \rho C_p H}{\lambda} \quad (8)$$

– число Пекле для ТН,

$$Q = \frac{\tilde{q}_0}{1 + \zeta} + \Upsilon \left(1 + \frac{2 + \zeta}{2z} \right), \quad \Upsilon = \frac{\zeta^2}{\chi(1 + \zeta)} \quad (9)$$

– безразмерные параметры ТЭ, как теплового источника, z – коэффициент Иоффе,

$$\chi = \frac{\lambda h}{\Lambda H} \quad (10)$$

– симплекс геометрических и физических параметров ТЭ и ТН.

Как следует из уравнения (6) и граничного условия (7), решение пропорционально однородной плотности источников Q . Также в задаче формируются два критериальных отношения Pe и Υ , от которых зависит решение. Также на решение влияет профиль безразмерной скорости, определяемый числом Рейнольдса Re . В практике описание теплопереноса в турбулентном потоке с использованием числа Рейнольдса вместо числа Пекле обычно используют число Прандтля. Тогда общая структура решения рассматриваемой задачи будет иметь вид:

$$T = T_{\text{вх}} + T_{\text{вх}} Q \Phi \left(\frac{x}{H}, \frac{y}{H}; \text{Re}, \text{Pr}, \Upsilon \right). \quad (11)$$

Из выражения (11) следует, что температура вдоль поверхности ТЭ со стороны ТН будет описываться выражением: Υ

$$\theta = Q \Phi_0 \left(\frac{x}{H}; \text{Re}, \text{Pr}, \Upsilon \right). \quad (12)$$

Для установления вида функции Φ_0 и её зависимости от критериальных параметров был проведен вычислительный эксперимент.

Вычислительный эксперимент

Геометрические параметры модельной системы: толщина охлаждающего потока $H = 5$ мм, охлаждаемая длина ТЭ $L = 150$ мм. Вид расчетной сетки представлен на рис. 2. Сетка модели k - ε недостаточно хорошо подходит для решения задачи, поэтому потребовалось дополнительное сгущение сетки.

Число узлов сетки составило около 260 тыс., число степеней свободы – 927 тыс., время решения задачи на 6-ядерном процессоре – 8÷15 мин. Численный расчет производился в конечно-элементном комплексе программ Ansys [22].

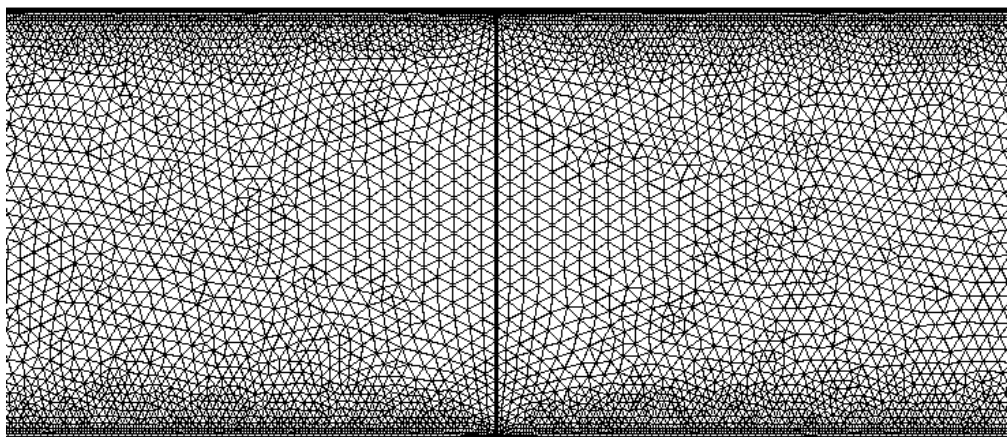


Рис. 2. Вид сетки расчетной области

Пример решения для распределения температуры по поверхности T представлен на рис. 3. Как видно, прирост температуры складывается из двух составляющих: скачка температуры T' в поверхностном слое, описываемом пристеночными функциями, и плавного непрерывного изменения температуры T'' .

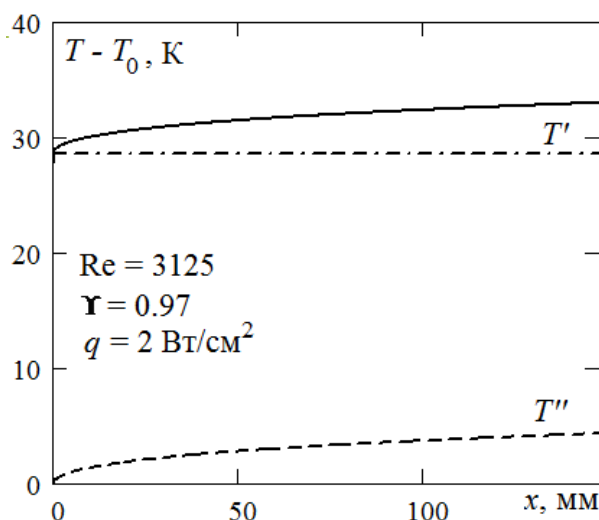


Рис. 3. Температурная зависимость

Анализ величины скачка T' показал, что он не зависит от координаты x , т.е. постоянен вдоль поверхности ТЭ. Поэтому далее будем рассматривать эти две составляющие отдельно.

Графики зависимости скачка температуры на пристеночном слое T' от параметров Υ и Re представлены на рис. 4. Зависимость распределения температуры T'' вдоль поверхности ТЭ от чисел Re и Υ показана на рис. 5. На этом рисунке верхняя кривая, показанная точечной линией, соответствует максимальным значениям температур, полученным в использованных расчетах. Для простоты на рисунках не приведена зависимость от числа Прандтля. Она также имеет место и исследуется далее при анализе результатов.

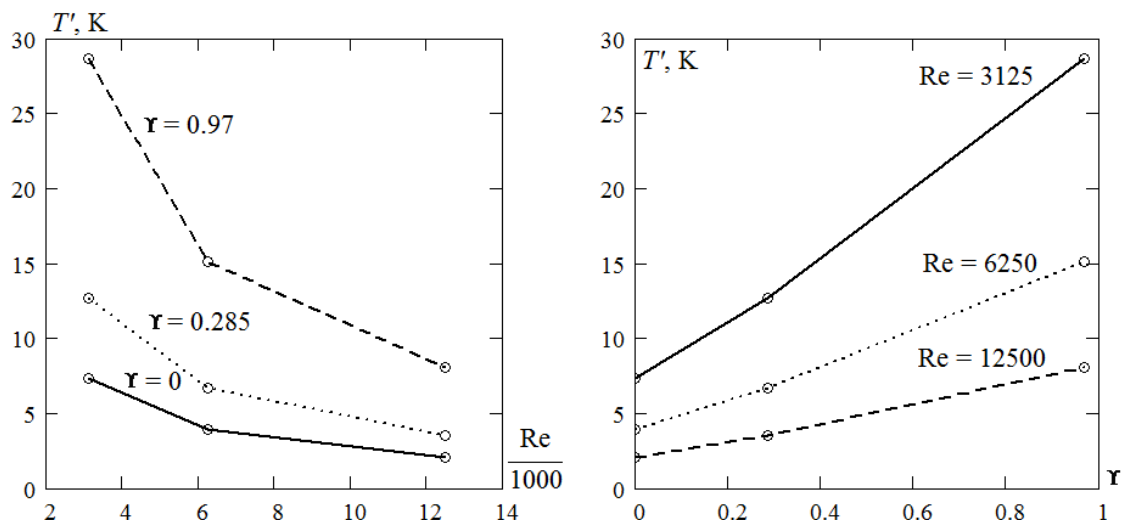


Рис. 4. Графики зависимости температуры от Υ и Re

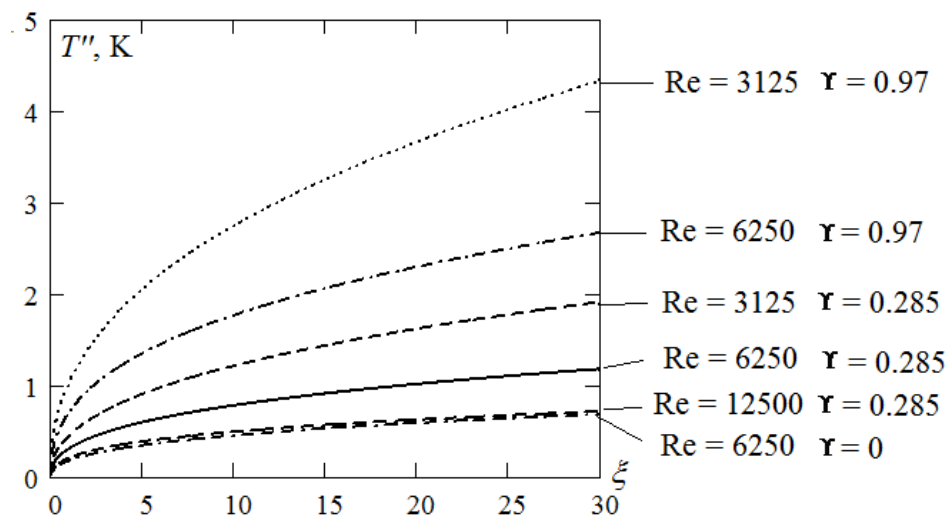


Рис. 5. График зависимости T'' от Re и Υ

Для выявления явного вида зависимости распределения температуры на ТЭ полученные результаты были подвергнуты обработке в соответствии со структурой решения (11).

Обработка результатов эксперимента

Рассмотрим в начале температурный скачок T' . Преобразуем исходные данные к безразмерным координатам:

$$\Phi_0 = \frac{T - T_{\text{вх}}}{T_{\text{вх}} Q}, \quad \xi = \frac{x}{H} \quad (13)$$

Обработка зависимостей рис. 4 в координатах (13) показала (рис. 6), что скачок температуры не зависит от параметра γ явно, эта зависимость целиком включается в величину Q . Это обстоятельство выразилось в совмещении трех линий с рис. 4 в одну линию, зависящую только от числа Рейнольдса.

Для выявления аналитического вида зависимости, представленной на рис. 6, преобразуем ее в двойные логарифмические координаты (рис. 7).

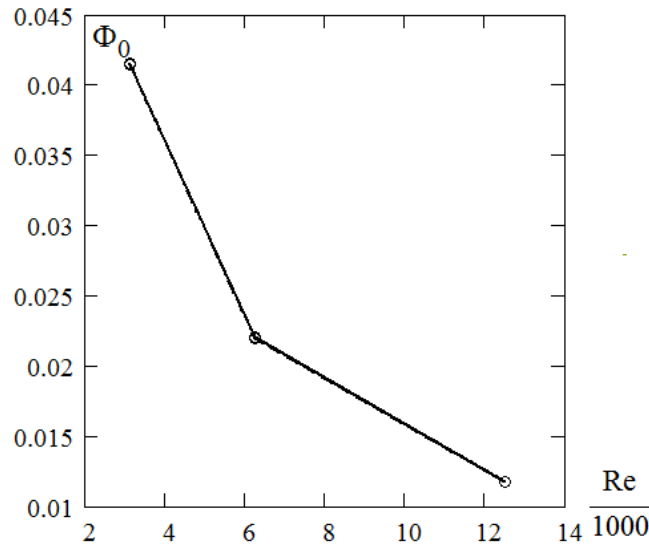


Рис. 6. Температурный скачок в нормированных координатах

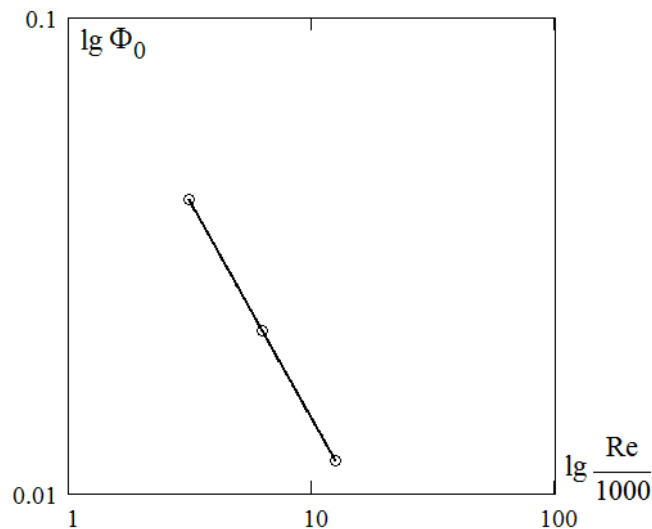


Рис. 7. Нормированный температурный скачок в двойных логарифмических координатах

Спрямление графика в двойных логарифмических координатах (рис. 7) свидетельствует о степенной зависимости между переменными.

Обработка по методу наименьших квадратов линеаризованной модели дала следующую зависимость:

$$\Phi_0 = \frac{63}{\text{Re}^{0,91}}. \quad (14)$$

Данная зависимость не учитывает влияния числа Прандтля Pr , поскольку расчет производился при фиксированном значении этого числа $\text{Pr} = 6$. Для выявления зависимости от этого числа были проведены дополнительные расчеты с варьированием числа Прандтля путем изменения вязкости ТН на двух уровнях: $\text{Pr} = 3$ и $\text{Pr} = 12$. Предполагаемая модификация формулы (14) рассматривалась в виде:

$$\Phi_0 = \frac{63}{\text{Re}^{0,91}} \left(\frac{\text{Pr}}{6} \right)^b. \quad (15)$$

Результаты расчета при варьировании числа Прандтля представлены на рис. 8.

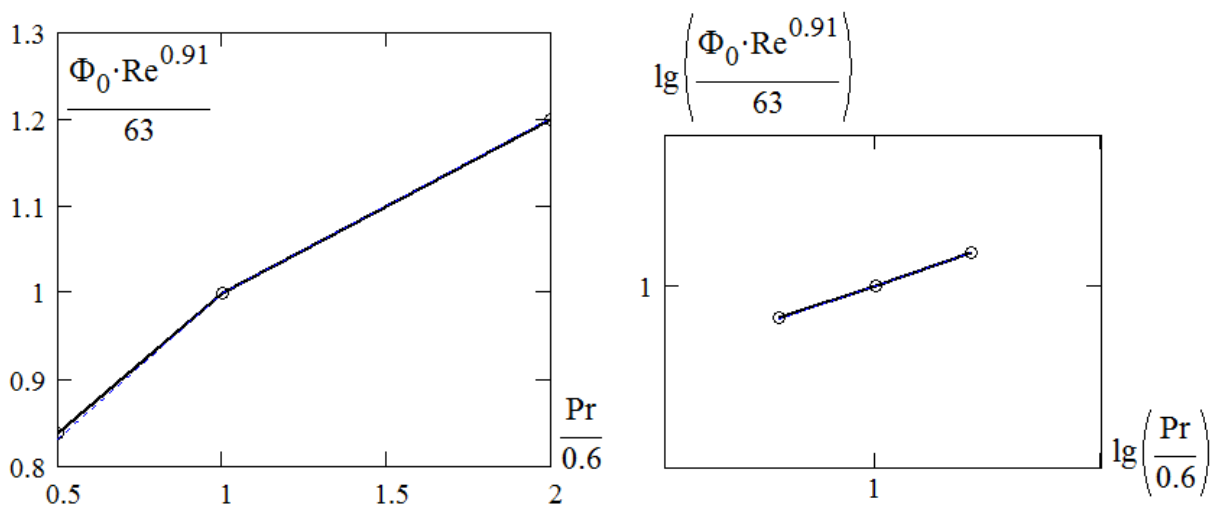


Рис. 8. Зависимость температурного скачка от числа Прандтля

Обработка в двойных логарифмических координатах подтвердила предполагаемую зависимость (15), а обработка по методу наименьших квадратов дала показатель $b = -0,265$.

В итоге получен окончательный вид зависимости (15).

$$\Phi_0 = \frac{101}{\text{Re}^{0,91} \text{Pr}^{0,265}}. \quad (16)$$

Используя соотношение для числа Нуссельта по отношению к входной температуре, построенное на основании формул (7) и (12)

$$\text{Nu} = \Upsilon + \frac{1}{\Phi_0}, \quad (17)$$

получим критериальное уравнение, коррелирующее с формулой Михеева. Однако числовые коэффициенты здесь получились другими, поскольку учитывается только часть разностей температур, а также рассматривается задача при фиксированной плотности теплового потока.

Для проверки соотношения (16) было проведено 10 расчетов с варьированием чисел Рейнольдса, Прандтля и Υ путем изменения скорости потока ТН, его вязкости и плотности электрического тока. Полученные значения температурных скачков сравнивались с рассчитанными по формуле (16). Найденная относительная ошибка формулы (16) показана на рис. 9, где по оси абсцисс отложен номер расчета в серии.

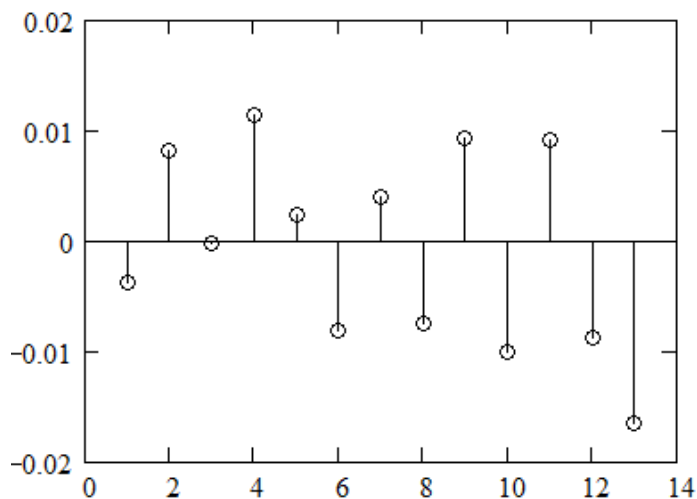


Рис. 9. Проверка критериального соотношения (16) в серии расчетов

Как следует из рисунка, разброс имеет однородный характер, что свидетельствует об отсутствии систематической погрешности, а величина относительной ошибки находится в пределах одного процента, что соответствует точности, использованной при получении формулы (16).

Для анализа слагаемого T'' преобразуем полученный профиль распределения температур к координатам (13). Результат преобразования показан на рис. 10. Как следует из рисунка, профиль не зависит от параметра Υ явно, что выразилось в совмещении всех кривых, полученных при разных значениях плотности электрического тока, но одинаковых других параметрах. Аналогичная ситуация имела место и для скачка температуры. Следует отметить, что за-

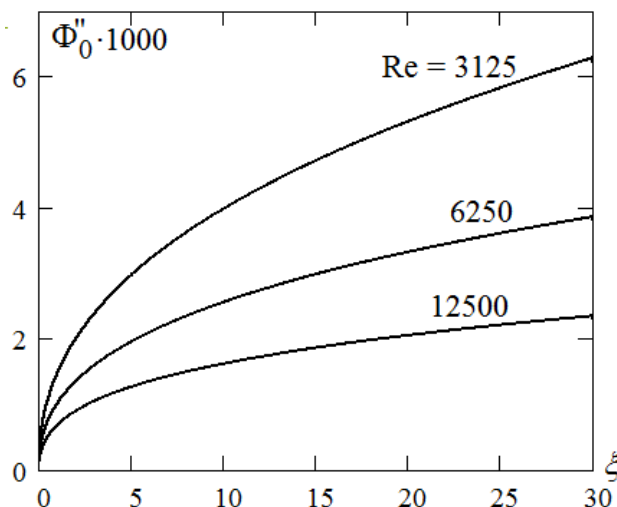


Рис. 10. Проверка критериального соотношения (16)

зависимость от параметра γ имеет место, но целиком включается в плотность источников Q согласно формуле (9). Таким образом, в турбулентном потоке (в отличие от ламинарного [21]) второе слагаемое в правой части граничного условия (7) практически не оказывает влияния на решение в пределах переходной области. Это связано с тем, что теплоотдача в турбулентном потоке значительно выше, что приводит к эффективному охлаждению поверхности ТЭ.

В отличие от скачка температуры, для слагаемого T'' нужно рассматривать совместное влияние чисел Рейнольдса и Прандтля. Для этого была проведена серия расчетов с варьированием чисел Рейнольдса на пяти уровнях и чисел Прандтля на трех уровнях. Анализ профилей, показанных на рис. 10, в рамках нелинейного метода наименьших квадратов в различных моделях показал, что, с удовлетворительной точностью в основной части, профили аппроксимируются простой степенной зависимостью:

$$\Phi_0 = b_0 \xi^{b_1}. \quad (18)$$

Результаты обработки исходных данных по формуле (18) приведены в табл. 1.

Таблица 1

Коэффициенты аппроксимирующей зависимости (18)

№ расчета	Re	Pr	$b_0 \cdot 1000$	b_1
1	1562,5	12	1,0729	0,449
2	3125	6	1,5482	0,411
3	3125	12	0,7746	0,411
4	6250	3	2,1910	0,370
5	6250	6	1,0973	0,370
6	6250	12	0,5488	0,370
7	12500	3	1,5099	0,333
8	12500	6	0,7557	0,333
9	25000	3	1,035	0,293

Как следует из последнего столбца таблицы, коэффициент b_1 не зависит от числа Прандтля, а его зависимость от числа Рейнольдса спрямляется в полупологарифмических координатах (рис. 11).

Обработка зависимости рис. 11 по методу наименьших квадратов дала формулу:

$$b_1 = 0,863 - 0,0563 \ln(\text{Re}). \quad (19)$$

Затем, из данных таблицы нетрудно заметить, что при одинаковом числе Рейнольдса зависимость коэффициента b_0 от числа Прандтля является обратно пропорциональной:

$$b_0 = \frac{f(\text{Re})}{\text{Pr}}. \quad (20)$$

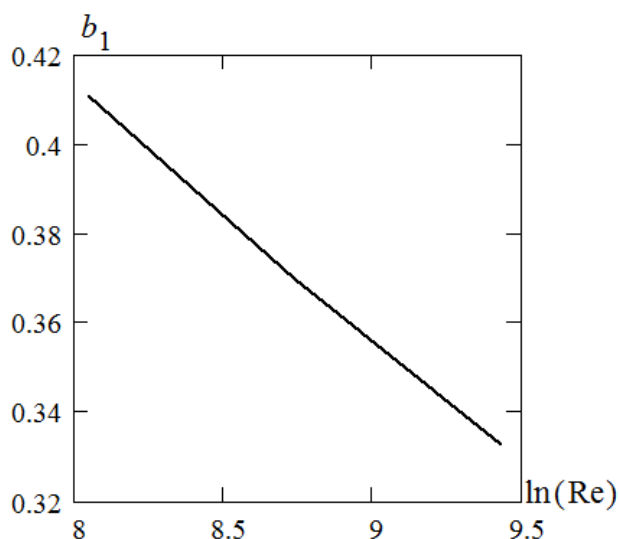


Рис. 11. Зависимость коэффициента b_1 от числа Рейнольдса

Расчет функции $f(\text{Re})$ на основе данных табл. 1 по формуле (20) дал результаты, представленные в табл. 2.

Таблица 2

Зависимость коэффициента b_0 от числа Рейнольдса

Re	3125	6250	12500
$f(\text{Re}) \cdot 1000$	9,292	6,568	4,532

График зависимости, представленный в табл. 2, спрямляется в координатах $f(\text{Re}) \div 1/\sqrt{\text{Re}}$. В результате получена следующая зависимость для коэффициента b_0 :

$$b_0 = \frac{0,531}{\sqrt{\text{Re}} \text{Pr}}. \quad (21)$$

В итоге формула для температурного профиля T'' имеет вид:

$$\Phi_0 = \frac{0,531}{\sqrt{\text{Re}} \text{Pr}} \xi^{0,863-0,0563 \ln(\text{Re})}. \quad (22)$$

Формула (22) качественно согласуется с характером формулы (16). Общий температурный профиль по нагретой стороне поверхности ТЭ определяется суммой выражений (16) и (22), которую следует подставить в формулу (12).

Заключение

Полученные зависимости распределения температуры на поверхности ТЭ позволяют рассчитать температурный режим работы ТЭ в качестве охладителя и служат основой для моделирования термоэлектрических охладителей.

В тоже время следует отметить, что использованная k-ε-модель имеет ограниченную применимость для описания пристеночных явлений, поэтому полученные результаты требуют экспериментальной проверки адекватности.

Вместе с тем, методический подход к анализу распределения температуры на ТЭ, развитый в настоящей работе, применим и к результатам, полученных при использовании других моделей турбулентности.

Литература

1. Мартыновский В.С. Циклы, схемы и характеристики термотрансформаторов. М.: Энергия, 1979. 288 с.
2. Анатычук Л.И. Термоэлементы и термоэлектрические устройства. Киев: Наукова Думка, 1979. 768 с.
3. Perspectives on thermoelectrics: from fundamentals to device applications / M. Zebarjadi, K. Esfarjani, M.S. Dresselhaus, Z.F. Ren, G. Chen // *Energy & Environmental Science*. 2012. V.5. No 1. P. 5147–5162.
4. Аналитическая оценка влияния термоэлектрических эффектов на интенсификацию теплоотдачи от охлаждаемой ребренной поверхности / И.М. Илюхин, А.В. Кретинин, М.И. Кирпичев, В.Г. Стогней // *Вестник Воронежского государственного технического университета*. 2014. Т. 10. № 1. С. 44-46.
5. Горобец Н.В., Охрем В.Г. Термоэлектрический охладитель Пельтье с дополнительным проводящим элементом // *Прикладная физика*. 2007. № 4. С. 124-127.
6. Моделирование режима Q_{max} термоэлектрического охладителя с учетом тепловых сопротивлений на холодной и горячей стороне / А.А. Мельников, А.М. Пири, И.В. Тарасова, Н.В. Батрамеев // *Физика и техника полупроводников*. 2017. Т. 51. № 7. С. 896–899.
7. Zaykov V., Mescheryakov V., Zhuravlov Yu. Analysis of Relationship Between the Dynamics of a Thermoelectric Cooler and Its Design and Modes Of Operation // *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2018. V. 1/8. No 91. Pp. 12-23.
8. Анализ режимов функционирования замкнутого циркуляционного контура охлаждения с промежуточным теплоносителем / В.И. Ряжских, Ю.Ю. Громов, А.В. Ряжских, А.А. Хвостов // *Прикладная физика и математика*. 2017. №4. С.20-26.
9. Lee H. Optimal design of thermoelectric devices with dimensional analysis // *Applied Energy*. 2013. V. 106. P. 79-88.
10. Zhu L., Tan H., Yu J. Analysis on optimal heat exchanger size of thermoelectric cooler for electronic cooling applications // *Energy Conversion and Management*. 2013. V. 76. P. 685–690.
11. Optimum design and experimental study of a thermoelectric ventilator / T. Han, G. Gong, Z. Liu, L. Zhang // *Applied Thermal Engineering*. 2014. V.67. P. 529-539.
12. Pearson, M.R., Lents C.E. Dimensionless optimization of thermoelectric cooler performance when integrated within a thermal resistance network // *Journal of Heat Transfer*. 2016. V. 38. No 8. P. 081301–081301-11.
13. Mathematical modeling of hydrodynamics and heat ex-change in liquid channels of the thermoelectric cooling module / A.V. Kretinin, S.L. Podvalny, D.P. Shmatov, E.E. Spitsyna // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. Vol. 1203. P. 012049.
14. Модель теплопередачи в проточном теплообменнике с термоэлектрическим охлаждающим элементом / И.Л. Батаронов, А.В. Кретинин, В.Ф. Селиванов, Е.Е. Спицына, Т.А. Надеина // *Альтернативная и интеллектуальная энергетика: материалы Междунар. науч.-практ. конф. Воронеж: ВГТУ, 2018. С. 119-120.*
15. A model of heat transfer in counter-current heat ex-changer with a thermoelectric cooling element / I.L. Bataronov, A.V. Kretinin, V.F. Selivanov, E.E. Spysina, T.A. Nadeina // *2018 International Theoretical and Practical Conference on Alternative and Smart Energy (TPCASE 2018): Proc. Lancaster: DESTech Publication inc., 2019. P. 30-36.*
16. Анализ методик расчета теплопередачи в системах термоэлектрического охлаждения теплонапряженных элементов / С.В. Бородкин, А.В. Иванов, И.Л. Батаронов, А.В. Кре-

тинин // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2021. Т. 17. № 1. С. 21-31.

17. Dezhina O.A., Bataronov I.L. Finite-element stationary model of heat transfer in systems with thermoelectric elements // Антропоцентрические науки в образовании: материалы XVI Междунар. научно-практич. конф. Воронеж, 2022. С. 345-349.

18. Кутателадзе С.С. Основы теории теплообмена. М.: Атомиздат, 1979. 416 с.

19. Кутателадзе С.С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. М.: Энергоатомиздат, 1990. 367 с.

20. Петухов Б.С. Теплообмен и сопротивление при ламинарном течении жидкости в трубах. М.: Энергия, 1967, 412 с.

21. Дорохова О.А. Моделирование распределения температуры на термоэлементе при охлаждении ламинарным потоком / О.А. Дорохова, И.Л. Батаронов, Т.А. Надеина, Н.А. Ююкин // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2023. Т. 19. № 6.

22. Басов К. А. ANSYS и LMS Virtual Lab. Геометрическое моделирование. М.: ДМК Пресс, 2006. 240 с.

k-ε-MODEL CALCULATION OF THE TEMPERATURE PROFILE ALONG THE THERMOELECTRIC MODULE WHEN COOLED BY A TURBULENT FLOW

O.A. Dorohova

Voronezh State Technical University

Abstract: the problem of heat exchange between a plane-parallel turbulent flow of a coolant and a thermoelement operating in cooling mode was considered. The calculation was carried out in a k-ε turbulence model with wall functions. It is shown that the temperature on the surface of the thermoelectric element consists of a fixed temperature jump on the wall layer and a continuous temperature profile at the boundary of the coolant. It is established that the distribution of dimensionless temperature depends only on the Prandtl and Reynolds numbers, and the dependence on the criterion parameters of the thermoelectric element is included in the dimensionless power of heat sources. Approximating expressions for the temperature profile and temperature jump are found.

Keywords: turbulent heat and mass transfer, thermoelectric cell, k-ε model.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОХРУПЧЕННОГО СЛОЯ НА ТИТАНЕ В УСЛОВИЯХ АВТОВАКУУМНОГО ОТЖИГА

Г.В. Селиванов, И.Л. Батаронов, А.Б. Булков

Воронежский государственный технический университет
bulkov_ab@mail.ru

Аннотация: в статье рассмотрен процесс очистки поверхностей титана от охрупченной части оксидного слоя в условиях безокислительного отжига. Получены аналитические зависимости, позволяющие оценивать время и температуру безокислительного отжига, обеспечивающие очистку поверхностей титана от охрупченных слоев различной толщины.

Ключевые слова: титан, безокислительный отжиг, охрупченный слой, пластичность.

Качество образования соединения титановых заготовок при их термодиффузионном сращивании напрямую связано с физико-химическим состоянием их поверхности и поверхностных слоев. Так наличие оксидов является практически значимым фактором для развития процесса образования соединений [1]. Однако, если задача удаления оксидных пленок Ti в процессе термодиффузионного сращивания хорошо изучена и есть проверенные опытом рекомендации по активации поверхности титановых заготовок [2], охрупченный слой, являющийся частью газонасыщенного слоя, образующегося как в процессе взаимодействия титана с остаточным кислородом технологической среды, так и при растворении оксидной пленки представляет не менее значимый фактор, влияющий как на развитие процесса ТДС, так и на качество соединения титановых деталей.

Исследование растворения охрупченного слоя является самостоятельной задачей и лежит в основе выработки рекомендаций по оптимизации технологической схемы процесса термодиффузионного сращивания титана.

Экспериментальные исследования процесса растворения охрупченного слоя или восстановления его пластичности сопряжено с большими сложностями и не позволяет получать точных количественных характеристик изменения толщины этого слоя при термодиффузионном сращивании. Поэтому оптимальным подходом для изучения вопроса и количественных оценок представляется моделирование этого процесса.

По коэффициенту диффузии кислорода в титане имеется большое количество разнородных данных [3], в том числе отмечается зависимость от концентрации кислорода [4]. Поэтому целесообразно использование эффективного коэффициента диффузии, определяемого в условиях, соответствующих процессу растворения охрупченного слоя. Наиболее адекватными представляются результаты по растворению оксидного слоя на титане, полученные методом ин-

терференционной индикации [5, 6]. По этим измерениям, изменение y толщины оксидного слоя во времени описывается зависимостью

$$y^2 = k_{\text{раст}} \cdot t, \quad (1)$$

где $k_{\text{раст}}$ – константа растворения, зависящая от температуры.

С другой стороны, из решения задачи о диффузионном фазовом переходе [7] следует, что

$$y = \alpha \sqrt{4D_3 t}, \quad (2)$$

где D_3 – эффективный коэффициент диффузии, а параметр скорости перехода α находится из решения трансцендентального уравнения

$$\frac{C_2}{C_1} \sqrt{\pi} \alpha (1 + \operatorname{erf}(\alpha)) e^{\alpha^2} = 1. \quad (3)$$

Здесь C_1, C_2 – равновесные концентрации кислорода в окисле и твердом растворе, $\operatorname{erf}(x)$ – функция ошибок.

В случае титана согласно диаграмме фазовых состояний и типу наблюдаемых в интерференционном эксперименте окислов следует положить в качестве C_1 растворимость кислорода в α – Ti: $C_1 = 34$ % ат, а в качестве C_2 – границу фазы α – TiO: $C_2 = 50$ % ат. Тогда решение уравнения (3) дает $\alpha = 0,3724$, и для коэффициента диффузии согласно уравнениям (1) и (2) получаем

$$D_3 = \frac{k_{\text{раст}}}{4\alpha^2} = 1,803 \cdot k_{\text{раст}}. \quad (4)$$

Тогда с учетом этого выражения $k_{\text{раст}} = 4,8 [\text{см}^2/\text{с}] e^{-\frac{247 [\text{КДж}]}{RT}}$ получим

$$D_3 = 8,654 [\text{см}^2/\text{с}] e^{-\frac{247 [\text{КДж}]}{RT}},$$

где R – универсальная газовая постоянная.

С использованием полученного коэффициента диффузии рассмотрим задачу диффузионного перераспределения кислорода из охрупченного слоя в объем титана. Пусть начальный профиль концентрации кислорода у поверхности описывается формулой $C_0(x)$, где x – координата, отсчитываемая от поверхности в объем титана. Тогда решение задачи диффузии методом функции Грина с условием диффузионной непроницаемости поверхности имеет вид [7]

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_3 t}} \int_0^{\infty} C_0(\xi) \cdot \left[e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4D_3 t}} + e^{-\frac{(x+\xi)^2}{4D_3 t}} \right] d\xi.$$

Отсюда для концентрации в поверхностном слое (при $x = 0$) имеем выражение

$$C_{\text{II}}(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi D_3 t}} \int_0^{\infty} C_0(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{4D_3 t}} d\xi. \quad (5)$$

Для диффузионного отжига представляет интерес промежуток времени, значительно превышающий диффузионное время для толщины охрупченного слоя λ . Тогда для промежутка $\xi < \lambda$, определяющего основной вклад в интеграл (5), имеет место соотношение $4D_3t \gg \xi^2$, и в этом асимптотическом пределе можно заменить экспоненциальную функцию в подынтегральном выражении в (5) на единицу. В результате будем иметь

$$C_{\Pi}(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi D_3 t}} \int_0^{\infty} C_0(\xi) d\xi. \quad (6)$$

Интерес в полученном выражении представляют собой общее количество кислорода (на единицу площади поверхности), содержащееся в охрупченном слое к моменту начала отжига. Обозначив эту величину за Q , окончательно из выражения (6) получим

$$C_{\Pi}(t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi D_3 t}}. \quad (7)$$

Отсюда время, необходимое для уменьшения приповерхностной концентрации кислорода до порогового значения $C_{кр}$, обеспечивающего возврат пластичности поверхностным слоям титана [8], будет составлять

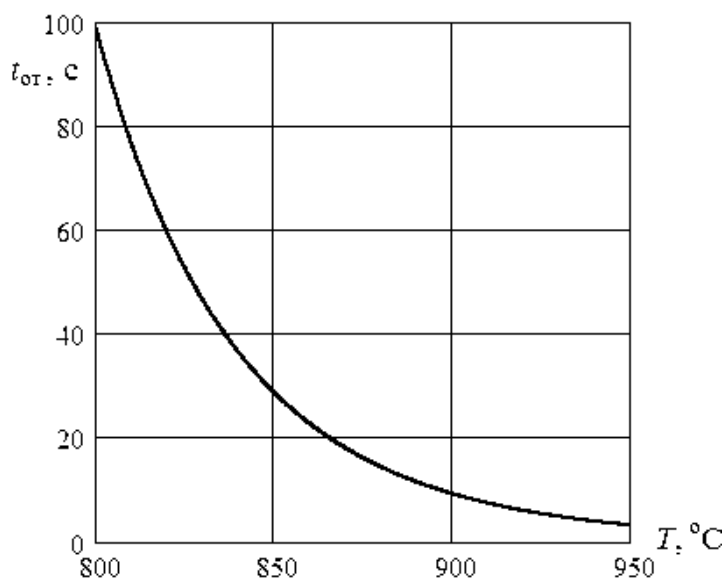
$$t_{от} = \frac{1}{\pi D_3} \left(\frac{Q}{C_{кр}} \right)^2. \quad (8)$$

В условиях ограниченного доступа кислорода толщина сформированного охрупченного слоя будет фиксированной. По экспериментальным данным для оценки развития процесса можем принять $\delta_{охр} \approx 0,2$ мкм [1]. Тогда величину Q можно определить как

$$Q = C_{охр} \delta, \quad (9)$$

где $C_{охр}$ – средняя концентрация кислорода в охрупченном слое, которую принимаем на основе полученных экспериментальных данных микроспектрального анализа равной 2 %.

Пороговое значение $C_{кр}$, согласно данным [8], составляет 0,8 % масс. Результирующая зависимость времени отжига $t_{от}$ от температуры процесса T , построенная по зависимостям (4), (8), (9) представлена на рисунке.



Зависимость времени отжига $t_{от}$ от температуры T

Литература

1. Пешков В.В. Диффузионная сварка титановых слоистых конструкций аэрокосмической техники / В.В. Пешков, А.Б. Булков, И.Л. Батаронов, В.Ф. Селиванов, А.И. Стрыгин., под ред. В.С. Рачука, В.Р. Петренко. – Воронеж: ФГБОУ ВПО “Воронежский государственный технический университет”, 2012. – 312 с.
2. Пешков В.В. Диффузионная сварка титановых тонкостенных слоистых конструкций / В.В. Пешков, А.Б. Булков. – М.: Изд-во «РИТМ», 2016. – 242 с.
3. Смитлз К. Дж. Металлы: справ. изд. / Пер. с англ. 5-е изд. – М.: Metallurgia, 1980. – 447с.
4. Выходец В.Б. Диффузия кислорода в α -Ti методами ВИМС и ядерных реакций / В.Б. Выходец, И.К. Голубков, С.М. Клоцман, Т.Е. Куренных и др. – ФММ, 1988, т. 66, вып. 2. – С. 303-306.
5. Горшков М.М. Эллипсометрия / М.М. Горшков. – М.: Советское радио, 1974. – 164 с.
6. Пешков В.В. Влияние парциального давления кислорода воздуха на кинетику окисления титана/ В.В. Пешков, М.Н. Подоприхин, Е.С. Воронцов // Изв. вузов. Сер. Цветная металлургия. – 1982. №6. – С. 49–52.
7. Самарский А.А. Вычислительная теплопередача / А.А. Самарский, П.Н. Вабишевич. – М: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
8. Цвикер У. Титан и его сплавы / У. Цвикер. – М.: Металлургия, 1979. – 511 с.

MODELING THE PROCESS OF RESTORATION OF AN EMBRITTLED LAYER ON TITANIUM DURING AUTOVACUUM ANNEALING

G.V. Selivanov, I.L. Bataronov, A.B. Bulkov

Voronezh State Technical University

Abstract: the article describes the process of cleaning titanium surfaces from the embrittled part of the oxide layer under conditions of non-oxidative annealing. Analytical dependences have been obtained that allow us to estimate the time and temperature of non-oxidative annealing, ensuring the cleaning of titanium surfaces from embrittled layers of various thicknesses.

Keywords: titanium, oxidation-free annealing, embrittled layer, plasticity.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕМПЕРАТУРНОГО ГИСТЕРЕЗИСА В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

В.Н. Нечаев, А.В. Шуба, Е.Ю. Неудахин, К.Н. Гаврилов

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

Аннотация: предложена математическая модель температурного гистерезиса в ферроиках с фазовым переходом первого рода, основанная на теории марковских случайных процессов для образования и нарастания зародышей новой фазы. На основе данной модели построена петля температурного гистерезиса в кристалле титаната бария.

Ключевые слова: поляризация, температурный гистерезис, марковский случайный процесс.

Введение

Одним из наиболее распространенных экспериментальных методов исследования фазовых переходов первого рода является изучение особенностей (формы, ширины, высоты) петель гистерезиса. Этот метод применим во всех тех случаях, когда при изменении управляющего параметра система переходит из метастабильного состояния в стабильное. Особенно подробно экспериментально исследованы процессы перемагничивания ферромагнитных кристаллов и реполяризации сегнетоэлектриков. Для их объяснения предложено большое количество как математических моделей [1–11], учитывающих физику конкретного явления, так и абстрактных теоретических, принимающих во внимание только общие закономерности, присущие любым гистерезисным явлениям. Так в модели Стонера – Вольфарта [1], разработанной для поликристаллических ферромагнетиков, предполагается, что причиной гистерезиса при перемагничивании в каждом отдельном зерне является нелинейность энергии магнитной анизотропии. Поликристалличность материала учитывается путем введения функции распределения осей легкого намагничивания в зернах. Модель проста, физична, но расчетные значения параметров гистерезисной петли оказываются существенно выше наблюдаемых. Это говорит о том, что связывать гистерезис со случайным распределением осей легкого намагничивания не совсем корректно. В модели Джилса – Атертона [3] считается, что процесс перемагничивания в зернах поликристалла осуществляется путем движения доменных границ в поле случайных стопоров. В результате модель существенно усложняется и в ней появляются трудно оцениваемые параметры (распределение разных типов стопоров доменных границ по объему ферромагнетика, их взаимодействие с доменными границами, взаимодействие доменов между собой и т.д.), выбор которых обеспечивает согласие с экспериментом. В модели Прейзаха [5] предполагается, что материал состоит из частиц, каждая из которых имеет прямоугольную петлю гистерезиса с индивидуальными параметрами (длиной и шириной). Функция распределения этих параметров в этой модели

имеет ключевое значение, давая возможность описать реальные гистерезисные петли. Модель Прейзаха, изначально разработанная для объяснения процессов перемагничивания, широко применяется к любым гистерезисным явлениям, например, к процессам переполяризации сегнетоэлектриков, переключения в мультиферроиках, упругому гистерезису и т.д. Однако физического обоснования у этого метода нет.

Приведенный здесь краткий обзор указывает на необходимость построения физически обоснованных, простых математических моделей гистерезисных явлений, содержащих минимальное количество подгоночных параметров, в рамках которых можно было бы интерпретировать экспериментальные данные. В таких моделях, на наш взгляд, обязательно должен быть учтен процесс образования критического зародыша и его последующий рост. В статье [12] обсуждаются различные аспекты зародышеобразования. Второй этап дальнейшего увеличения новой фазы путем роста и объединения закритических зародышей определяется кинетикой соответствующего процесса. Чисто статистико-геометрический механизм разрастания новой фазы рассмотрен А.Н. Колмогоровым [13]. И.М. Лифшицем и В.В. Слезовым [14] смоделирована коалесценция пересыщенных твердых растворов. В случае ферромагнитных и сегнетоэлектрических материалов основной вклад в приращение новой фазы вносит динамика доменных или межфазных границ.

Целью данного сообщения является построение математической модели температурного гистерезиса в сегнетоэлектриках с фазовым переходом первого рода в рамках теории марковских случайных процессов, учитывающей кинетику разрастания закритических зародышей новой фазы.

Математическая модель процесса

Предположим, что случайный процесс нарастания образовавшейся фазы при изменении температуры есть марковский процесс и используем феноменологическую модель, графическое изображение которой представлено на рис. 1.

На рис. 1 состоянию «0» отвечает отсутствие зародышей новой фазы; состоянию «1» – наличие зародышей с размером, не превышающим критический; состоянию «2» – присутствие новой фазы по всему объему образца. Графическая модель описывается системой уравнений Колмогорова:

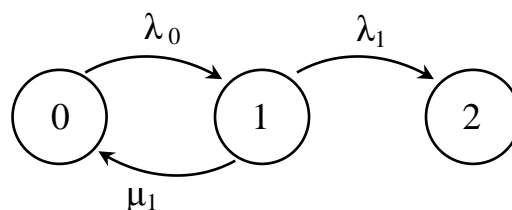


Рис. 1. Граф процесса нарастания новой фазы

$$\begin{cases} \frac{dp_0}{dt} = -\lambda_0 p_0 + \mu_1 p_1, \\ \frac{dp_1}{dt} = \lambda_0 p_0 - (\lambda_1 + \mu_1) p_1, \\ \frac{dp_2}{dt} = \lambda_1 p_1, \end{cases} \quad (1)$$

где p_i – вероятности нахождения системы соответственно в состояниях $i = 0, 1, 2$; $\lambda_0, \lambda_1, \mu_1$ – интенсивности переходов, определяемые выражениями

$$\lambda_0(t) = \omega_0 e^{-\frac{\Delta F(t)}{k_B T(t)}}, \quad \lambda_1 = \omega_0 \xi; \quad \mu_1 = \omega_0. \quad (2)$$

В формулах (2) величина $\omega_0 = \omega / N_{cr}$ есть число попыток образования зародыша новой фазы в единицу времени, где ω – частота колебаний атома, N_{cr} – число атомов в зародыше критического радиуса R_{cr} ; $\Delta F(t)$ – высота энергетического барьера, равная работе образования зародыша радиусом R_{cr} ; k_B – постоянная Больцмана; $T(t)$ – температура; ξ – скорость движения межфазной границы.

Система дифференциальных уравнений (1) линейно зависима и одно из ее уравнений можно заменить условием нормировки

$$p_0 + p_1 + p_2 = 1.$$

В итоге система (1) сводится к неоднородному дифференциальному уравнению с переменными коэффициентами в безразмерном виде

$$\frac{d^2 p_2}{d\tilde{t}^2} + \left(e^{-\frac{\Delta F}{k_B T}} + \xi + 1 \right) \frac{dp_2}{d\tilde{t}} + \xi e^{-\frac{\Delta F}{k_B T}} p_2 = \xi e^{-\frac{\Delta F}{k_B T}}, \quad (3)$$

где $\tilde{t} = t\omega_0$ – приведенное время.

Температура образца зависит от выбора скорости охлаждения (нагрева) и в нашем случае имеет вид

$$T(\tilde{t}) = T_{g2} - \frac{T_{g2} - T_C}{\tilde{t}_{общ}} \tilde{t} \quad \left(T(\tilde{t}) = T_C + \frac{T_{g2} - T_C}{\tilde{t}_{общ}} \tilde{t} \right),$$

где T_{g2} – верхняя точка температурного гистерезиса фазового перехода; T_C – температура Кюри, являющаяся нижней точкой гистерезиса; $\tilde{t}_{общ}$ – время охлаждения (нагрева) образца в интервале температур $[T_C, T_{g2}]$.

Работа образования зародыша критического размера определяется разностью свободных энергий контактирующих фаз при охлаждении $\Delta F_{охл} = F(P_{max}) - F(0)$ или нагреве $\Delta F_{нагр} = F(P_{min}) - F(0)$, где P – поляризация. Удельная свободная энергия согласно теории Ландау [15] имеет вид

$$f(P) = \frac{\alpha}{2} P^2 - \frac{\beta}{4} P^4 + \frac{\gamma}{6} P^6, \quad (4)$$

где $\alpha = \alpha_0(T - T_C)$, $\beta, \gamma > 0$ – коэффициенты разложения. Для функции (4) точки минимума $P_1 = 0$; $P_{3,5} = \pm \sqrt{\beta + \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}} / (2\gamma)$ определяют равновесные значения поляризации, точки максимума $P_{2,4} = \pm \sqrt{\beta - \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}} / (2\gamma)$ – положения энергетических барьеров. Тогда работа образования зародыша

$$\Delta F_{охл} = f(P_2) \frac{4\pi}{3} R_{cr}^3 \quad \left(\Delta F_{нагр} = (f(P_2) - f(P_3)) \frac{4\pi}{3} R_{cr}^3 \right), \quad (5)$$

где его критический радиус R_{cr} определяется положением максимума приращения полной энергии зародыша

$$\Delta F_{полн} = f \frac{4\pi}{3} R_{cr}^3 + \sigma 4\pi R^2,$$

равным

$$R_{cr} = \frac{96\gamma^2\sigma}{\left(\beta + \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}\right)^2 \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma} - \left(\beta + \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}\right) 4\alpha\gamma}. \quad (6)$$

Для нахождения удельной поверхностной энергии $\sigma \sim (\nabla P)^2$ отдельно решалась краевая задача о распределении поляризации в межфазной границе:

$$\begin{cases} \alpha P - \beta P^3 + \gamma P^5 - \kappa \Delta P = 0, \\ P(-\infty) = P_0 \\ P(\infty) = 0, \end{cases}$$

где $\kappa \approx a^2$ – корреляционная постоянная, a – параметр решетки.

Результаты и обсуждение

Дифференциальное уравнение (3) решалось численно методом Рунге-Кутты. Расчет вероятностей состояний позволил определить зависимость средней поляризации от температуры $\bar{P}(T) = P_3(T) p_2(t)$ и построить петлю температурного гистерезиса (рис. 2). Для оценок были взяты параметры модельного кристалла титаната бария (BaTiO_3): $T_C = 393$ К, $\beta = 6.8 \cdot 10^{-13}$ ед. СГСЭ, $\gamma = 2.3 \cdot 10^{-22}$ ед. СГСЭ [16], $\omega_0 \approx 10^2$ с; $t_{общ} = 10$ мин, $\xi \approx 0.1$.

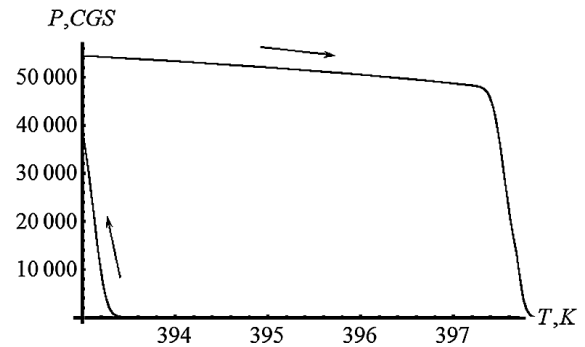


Рис. 2. Петля температурного гистерезиса для BaTiO_3

Как видно из рис. 2, существенный рост новой фазы происходит в достаточно узком температурном интервале, что свидетельствует о высоких значениях энергии критического зародыша.

Заключение

На практике зародыши новой фазы могут образовываться на различного рода дефектах, границах зерен и других несовершенствах кристалла, не рассматриваемых в данной статье. Отметим, что в рамках предложенной модели можно описывать процессы реполяризации и перемагничивания в сегнетоэлектриках и ферромагнетиках.

Литература

1. Stoner, E.C. A Mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys / E.C. Stoner, E.P. Wohlfarth // *Phil. Trans. Roy. Soc.* 1948. V. 240, № 826. P. 599–642.
2. Liorzou, F. Macroscopic models of magnetization / F. Liorzou, B. Phelps, D.L. Atherton // *IEEE Trans. Magn.* 2000. V. 36, № 2. P. 418–428.
3. Jiles, D.C. Theory of ferromagnetic hysteresis / D.C. Jiles, D.L. Atherton // *J. Magn. Magn. Mater.* 1986. V. 61. P. 48–60.
4. Globus, A. Universal hysteresis loop for soft ferromagnetic material / A. Globus // *Proc. Europ. Physical Society, Conference on Soft Magnetic Material 2.* 1975. P. 322.
5. Preisach, F. Uber die magnetische nachwirkung / F. Preisach // *Zeitschrift fur Physik.* 1935. V. B94. P. 277–302.
6. Tagantsev, A.K. Domains in ferroic crystals and thin films / A.K. Tagantsev, L.E. Cross, J. Fousek // N.-Y., Dordrecht, Heidelberg, London: Springer. 2010, 813 p. DOI: 10.1007/978-1-4419-1417-0.
7. Mayergoyz, I.D. Mathematical models of hysteresis / I.D. Mayergoyz // *IEEE Transactions of Magnetics.* V. 22, № 5. P. 603–608. DOI: 10.1109/TMAG.1986.1064347.
8. Mayergoyz, I.D. Mathematical models of hysteresis and their applications / I.D. Mayergoyz // Amsterdam, Boston et. al.: Elsevier. 2003, 469 p. DOI:10.1016/b978-0-12-480873-7.x5000-2
9. Stolichnov, I. Crossover between nucleation-controlled kinetics and domain wall motion kinetics of polarization reversal in ferroelectric films / I. Stolichnov, A. Tagantsev, N. Setter, J.S. Cross, M. Tsukada // *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 83, № 16. P. 3362–3364. DOI: 10.1063/1.1621730.
10. Tagantsev, A.K. Non-Kolmogorov-Avrami switching kinetics in ferroelectric thin films / A.K. Tagantsev, I. Stolichnov, N. Setter, J.S. Cross, and M. Tsukada // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. Art No 214109.
11. Feng Yang. A model for the polarization hysteresis loops of the perovskite-type ferroelectric thin films / Feng Yang, M.H. Tang, Y.C. Zhou, and X.C. Zheng // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 91, № 14. Art No 142902. DOI: 10.1063/1.2794421.
12. Нечаев, В.Н. Влияние размерных эффектов на фазовые переходы в ферроиках / В.Н. Нечаев, А.В. Шуба // *Известия РАН. Сер. физ.* 2023. Т. 87. № 9. С. 1229–1236.
13. Колмогоров, А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов // А.Н. Колмогоров // *Изв. АН СССР. Сер. матем.* Т. 1, №3. 1937. С. 355–359.
14. Лифшиц, И.М. О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов / И.М. Лифшиц, В.В. Слезов // *ЖЭТФ* . 1958. Т. 35, №2. С. 479–492.
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.8. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2005, 656 с.
16. Холоденко Л.П. Термодинамическая теория сегнетоэлектриков типа титаната бария / под ред. Ролова Б.Н. Рига: Зинатие, 1971, 227 с.

MATHEMATICAL MODEL OF TEMPERATURE HYSTERESIS IN FERROELECTRICS

V.N. Nechaev, A.V. Shuba, E.Yu. Neudakhin, K.N. Gavrilov

MERC AF «AFA named after N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin», Voronezh

Abstract: a mathematical model of temperature hysteresis in ferroics with a first order phase transition is proposed, based on the theory of Markov random processes for the formation and growth of a new phase nuclei. Based on this model, a hysteresis loop temperature in a barium titanate crystal was constructed.

Keywords: polarization, temperature hysteresis, Markov process.

ОБ ОПИСАНИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ С НЕСОРАЗМЕРНЫМИ ФАЗАМИ

В.Н. Нечаев, А.В. Шуба, М.В. Кузнецов, А.А. Евстратов

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

Аннотация: обсуждаются особенности фазовых переходов в сегнетоэлектриках с несоизмерными фазами. Представление о том, что фазовый переход второго рода несоизмерная – соизмерная сегнетоэлектрическая фаза в объемном материале происходит в интервале температур, качественно согласуется с экспериментальными данными.

Ключевые слова: фазовый переход, несоизмерная фаза, температурный гистерезис.

Введение

В сегнетоэлектриках (СЭ) с несоизмерными (НС) фазами диэлектрические измерения показывают аномальный температурный гистерезис, диэлектрическая проницаемость $\epsilon(T)$ при нагреве и охлаждении описывается разными функциями, причем профиль этих зависимостей демонстрирует наличие двух разных температур Кюри-Вейсса для нагрева и охлаждения [1-5] (рис. 1).

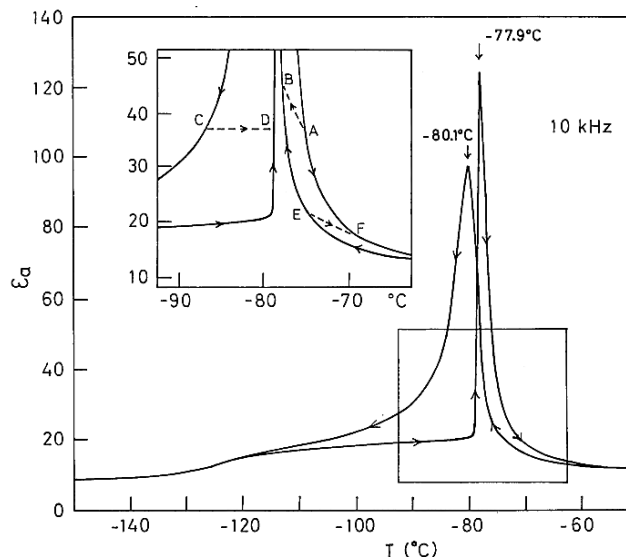


Рис. 1. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости вдоль полярной оси Rb_2ZnCl_4 вблизи точки T_C фазового перехода несоизмерная – соизмерная полярная фаза (на вставке показано увеличенное изображение окрестности T_C) [1]

Для понимания подобного поведения СЭ материалов необходимо детально разобраться в иерархии фазовых переходов (ФП) в них.

Особенности фазовых переходов в сегнетоэлектриках с несоизмерными фазами

Будем рассматривать наиболее часто встречающиеся фазовые состояния материалов в порядке их следования при охлаждении: параэлектрическая (ПЭ) фаза, характеризующаяся параметрами $\overline{P} = 0, \overline{P^2} = 0$, где P – поляризация, а черта сверху над буквой означает усреднение соответствующей величины по физически бесконечно малому объему; НС фаза ($\overline{P} = 0, \overline{P^2} \neq 0$); СЭ фаза ($\overline{P} \neq 0, \overline{P^2} \neq 0$).

Предположим, что высокотемпературная ПЭ фаза и низкотемпературная СЭ фаза связаны по симметрии, как группа с подгруппой. Другими словами, симметрия разрешает ФП второго рода между этими фазами. Для упрощения расчетов будем также считать, что НС волна может возникать только вдоль одного направления. Свободная энергия, допускающая возникновение НС фазы, в этом случае хорошо известна [6-9]. Воспользуемся этими выражениями и представим разложение плотности свободной энергии в ряд по степеням параметра порядка η в виде

$$F = F_0 + F_1 + F_2. \quad (1)$$

Здесь F_0 – часть свободной энергии, не связанная с ФП;

$$F_1 = \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{4}\eta^4 \quad (2)$$

есть однородный вклад в свободную энергию;

$$F_2 = \frac{\kappa}{2}\left(\frac{d\eta}{dz}\right)^2 + \frac{g}{2}\left(\frac{d^2\eta}{dz^2}\right)^2 \quad (3)$$

есть неоднородный вклад в свободную энергию. Структура плотности свободной энергии (1)-(3) такова, что позволяет описывать ФП между состояниями с $\eta = 0$ и $\eta \neq 0$, поэтому, если параметром порядка является поляризация, то эти выражения применимы для описания ФП: ПЭ фаза – СЭ фаза, НС фаза – СЭ фаза.

Если коэффициент $\kappa > 0$ и не зависит от температуры, то в материале возможен только ФП второго рода между ПЭ и СЭ фазой. В этом случае второе слагаемое в выражении (3) можно опустить как несущественную малую поправку. Параметр порядка $\eta = P = \overline{P}$ имеет смысл поляризации единицы объема вещества и в СЭ фазе он отличен от нуля. Константы α, β в выражении (2) определяются из диэлектрических измерений, например, из закона Кюри-Вейсса:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{C}{T - T_C} = \varepsilon_0 + \frac{1}{4\pi\alpha} = \varepsilon_0 + \frac{1}{4\pi\alpha_0(T - T_C)},$$

где ε_0 – значение диэлектрической проницаемости вдали от точки ФП, T_C – температура Кюри – Вейсса.

Если $\kappa < 0$, то в материале возможен ФП в НС фазу ($\overline{P} = 0, \overline{P^2} \neq 0$) [6-9], занимающую промежуточное положение по температуре между ПЭ и СЭ фазой. Плотность свободной энергии сохраняет вид (1), (2), но параметр порядка η

в этом случае уже не есть поляризация вещества и в выражении (2) коэффициенты α , β будут другими: $\alpha \rightarrow \alpha^* = \alpha_0^*(T - T_i)$, $\beta \rightarrow \beta^*$, где T_i – температура ФП в НС фазу. Параметры α^* , β^* будут определяться другими методами структурного анализа, например, оптическими или рентгеноструктурными, а на зависимости $\varepsilon(T)$ при переходе в НС фазу наблюдается излом, подтверждаемый также феноменологической теорией [10, 11]. В качестве параметра порядка η для такого ФП второго рода можно выбрать амплитуду u_{k_0} статической волны смещений атомов $u(z) = u_{k_0} \cos(k_0 z)$, где k_0 – волновой вектор. Важно отметить, что этот ФП не связан непосредственно с ФП в СЭ фазу. При охлаждении НС фазы, характеризующаяся волновым вектором k_0 , существует вплоть до температур (рис. 2), когда $\Delta(k) = gk^4 + \kappa k^2 + \alpha = 0$.

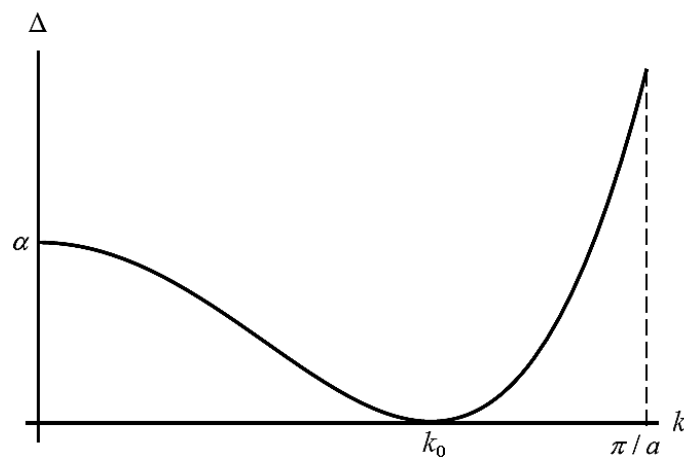


Рис. 2. Зависимость эффективной жесткости Δ от волнового вектора k , где a – межатомное расстояние

Этой ситуации отвечает температура (верхняя точка потери устойчивости НС фазы)

$$T_C^h = T_C + \frac{\kappa^2}{4\alpha_0 g}.$$

Статические волны с волновым вектором $k < k_0$ при этом по-прежнему устойчивы и отвечают минимуму свободной энергии. Они начинают терять устойчивость только при дальнейшем понижении температуры. Процесс заканчивается при температуре $T_C^l = T_C$ (T_C^l – нижняя точка потери устойчивости НС фазы), когда однородная ПЭ фаза полностью теряет устойчивость и материал переходит в СЭ состояние ($\bar{P} \neq 0$, $\bar{P}^2 \neq 0$). На рис. 1 этой температуре отвечает нижний пик на кривой $\varepsilon(T)$. Если процесс вести в обратном направлении, нагревая образец, то СЭ фаза будет сохраняться вплоть до температуры T_C^h , при которой она теряет устойчивость относительно перехода в НС фазу. На рис. 1 этой температуре отвечает верхний пик на кривой $\varepsilon(T)$. Таким образом, экспериментально наблюдаемый температурный гистерезис представляет собой

температурный интервал (T_C^l, T_C^h) . Причина температурного гистерезиса в том, что НС фаза теряет устойчивое состояние не в отдельной точке температурной шкалы, а в температурном интервале (T_C^l, T_C^h) , ширина которого равна $\kappa^2 / (4\alpha_0 g)$. Подтверждением предложенной гипотезы может служить проведенный в работе [4] анализ, указывающий на явную корреляцию ширины температурного гистерезиса $T_C^h - T_C^l$ и температурной ширины области существования НС фазы $T_i - T_C$ (см. таблицу [4]).

Вещество	$T_C^h - T_C^l$, К	$T_i - T_C$, К	$(T_C^h - T_C^l) / (T_i - T_C)$
Rb ₂ ZnCl ₄	2.8	100	$2.8 \cdot 10^{-2}$
Rb ₂ ZnBr ₄	10	160	$6.3 \cdot 10^{-2}$
K ₂ ZnCl ₄	5	150	$3.3 \cdot 10^{-2}$
K ₂ SeO ₄	1.1	37	$3.0 \cdot 10^{-2}$
TMATC-Zn	0.45	16.6	$2.7 \cdot 10^{-2}$
(NH ₄) ₂ BeF ₄	0.18	6.3	$2.9 \cdot 10^{-2}$

Альтернативные варианты объяснения температурного гистерезиса [12-14] связывают его с дефектной структурой материала и образованием обусловленных ею метастабильных состояний, природа которых недостаточно понятна.

Заключение

Подводя итоги, можно сделать следующие выводы.

1. Если высокотемпературная ПЭ фаза и низкотемпературная СЭ фаза связаны по симметрии как группа с подгруппой и $\kappa < 0$ в выражении (3) (между ними по температуре существует НС фаза), то потеря устойчивости НС фазы происходит в интервале температур (T_C^l, T_C^h) , в отличие от потери устойчивости ПЭ фазы.

2. Если высокотемпературная ПЭ фаза и низкотемпературная СЭ фаза не связаны друг с другом по симметрии и между ними возможен только ФП первого рода, то возникновение промежуточной НС фазы будет увеличивать ширину а priori имеющегося температурного гистерезиса на величину температурного интервала неустойчивости НС фазы, смещать температуру ФП первого рода, оказывать воздействие на кинетику ФП, через посредство влияния на размеры критического зародыша.

Литература

1. Hamano, K. Critical phenomena and anomalous thermal hysteresis accompanying the normal – incommensurate – commensurate phase transitions in Rb₂ZnCl₄ / K. Hamano, Y. Ikeda, T. Fujimoto, K. Ema, and S. Hirotsu // J. Phys. Soc. Jpn. 1980. V. 49, No 6. P. 2278–2286. DOI: 10.1143/JPSJ.49.2278.

2. Струков, Б.А. Аномальный температурный и диэлектрический гистерезис при фазовом переходе несоизмерная – соизмерная полярная фаза в кристаллах $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ (ФБА) / Б.А. Струков, И. Уесу, В.М. Артюнова // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 35, вып. 10. С. 424–427.
3. Леманов, В.В. Диэлектрическая проницаемость K_2SeO_4 при фазовом переходе из несоизмерной в полярную фазу / В.В. Леманов, Б. Бржезина, С.Х. Есяян, А. Караев // ФТТ. 1984. Т. 26, вып. 5. С. 1331–1333.
4. Струков, Б.А. Диэлектрические свойства кристаллов ТМАТС-Zn в области фазового перехода соизмерная – несоизмерная фаза / Б.А. Струков, Е.П. Куруленко // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 3, Физика. Астрономия. 1988. Т. 29, № 1. С. 58–62.
5. Гриднев, С.А. Сюрпризы несоизмерной фазы в сегнетоэлектриках / С.А. Гриднев // Природа. 2003. № 8. С. 52–58.
6. Michelson, A. Phase diagrams near the Lifshitz point. I. Uniaxial magnetization. / A. Michelson // Phys. Rev. B. 1977. V. 16. № 1. P. 577–584. DOI: 10.1103/PhysRevB.16.577.
7. Изюмов, Ю.А. Фазовые переходы и симметрия кристаллов / Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников. М.: Наука, 1984, 247 с.
8. Высочанский, Ю.М. Точка Лифшица на диаграммах состояний сегнетоэлектриков / Ю.М. Высочанский, В.Ю. Сливка // УФН. 1992. Т. 162, № 2. С. 139–160.
9. Ктиторov, С.А. Неоднородные состояния тонкопленочного несоизмерного сегнетоэлектрика / С.А. Ктиторov, О.С. Погорелова, Е.В. Чарная // ФТТ. 2003. Т. 45, вып. 11. С. 2062–2066.
10. Коротков, Л.Н. Структура, диэлектрические и тепловые свойства тетрахлорцинка рублидия в пористых стеклах / Л.Н. Коротков, Л.С. Стекленева, И.Н. Флеров, Е.А. Михалева, Е. Рысякевич-Пасек, М.С. Молокеев, В.С. Бондарев, М.В. Горев, О.И. Сысоев // Изв. РАН. Сер. Физ. 2019. Т. 83, № 9. С. 1179–1183.
11. Unruh, H.-G. Spectroscopic and dielectric investigations of K_2SeO_4 / H.-G. Unruh, W. Eller, and G. Kirf // Phys. Stat. Sol. (a). 1979. V. 55. P. 173–180. DOI: 10.1002/pssa.2210550119.
12. Hamano, K. Thermal hysteresis accompanying the incommensurate – commensurate phase transitions in Rb_2ZnBr_4 and Rb_2ZnCl_4 / K. Hamano, T. Hishinuma, and K. Ema // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. V. 50, № 8. P. 2666–2671. DOI: 10.1143/JPSJ.50.2666.
13. Strukov, B.A. Comprehensive study of incommensurate phase transitions in $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ II / B. A. Strukov, J. Kobayashi, and Y. Uesu // Ferroelectr. 1985. V. 64. P. 57–64. DOI: 10.1080/00150198508018698.
14. Saint-Gregoire, P. Hysteresis phenomena in the incommensurate phase of $(\text{TMA})_2\text{ZnCl}_4$, and at the lock-in transition / P. Saint-Gregoire and D. Mezzane // Ferroelectr. 1988. V. 79. P. 343–346. DOI: 10.1080/00150198808229465.

ON THE DESCRIPTION OF PHASE TRANSITIONS IN FERROELECTRICS WITH INCOMMENSURABLE PHASES

V.N. Nechaev, A.V. Shuba, M.V. Kuznetsov, A.A. Yevstratov

MERC AF “AFA named after N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin”, Voronezh

Abstract: the features of phase transitions in ferroelectrics with incommensurate phases are discussed. The intention that a second order phase transition incommensurate – commensurate ferroelectric phase in a bulk material occurs in the temperature range is qualitatively consistent with experimental data.

Keywords: phase transition, incommensurate phase, temperature hysteresis.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ КЛАСТЕРОВ Fe_2O_n С МОЛЕКУЛАМИ H_2 И O_2

К.В. Боженко¹, А.Н. Утенышев¹, Л.Г. Гуцев¹, С.М. Алдошин¹, Г.Л. Гуцев²

¹Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии РАН, Черноголовка
bogenko@icp.ac.ru

²Факультет физики, Флоридский университет А&М, Таллахасси, Флорида, США

Аннотация: выполнены квантово-химические расчеты кластеров Fe_2O , Fe_2O_3 , Fe_2O_5 и продуктов их взаимодействия с молекулами водорода, и кислорода в газовой фазе. Использован метод теории функционала плотности (DFT-GGA) по программе GAUSSIAN-09 и базис 6-311+G*. Показано, что исходный полный спиновый магнитный момент в реакции $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3\text{H}_2$ не сохраняется, и антиферромагнитные состояния реагентов трансформируются в ферромагнитное состояние продукта реакции.

Ключевые слова: азосоединения, металлохелаты, квантово-химические расчеты.

Суперпарамагнитные наночастицы оксидов железа находят применение в такой современной области медицины, как тераностика. Они интересны тем, что могут использоваться для адресной доставки противораковых препаратов [1]. Такие частицы соединяются определенными линкерами с антителами, которые восприимчивы к специфическим клеткам, после чего их движение в потоке крови может управляться магнитным полем. К сожалению, взаимодействие суперпарамагнитных наночастиц оксидов железа с окружающей средой мало изучено из-за сложности моделирования их магнитных свойств. Адсорбция молекул на поверхности наночастицы может приводить к изменению ее полного магнитного момента. Особый интерес представляют наночастицы оксидов переходных металлов, которые не имеют магнитного момента в основном состоянии и приобретают его при взаимодействии с определенными молекулами. Интересны также наночастицы оксидов переходных металлов, изменяющие магнитный момент при взаимодействии с определенными молекулами. Оба типа частиц могут служить в качестве сенсоров для обнаружения данных молекул.

Расчеты выполнены методом теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении (DFT GGA) по программе GAUSSIAN-09 [2] с использованием базиса 6-311+G* [3]. В качестве обменно-корреляционного функционала выбран функционал BPW91, состоящий из обмена по Беке [4] и корреляции по Пердью-Вангу [5].

Показано, что для реакции $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3\text{H}_2$ наблюдается переход от антиферромагнитного синглетного состояния реагента к ферромагнитному состоянию продукта. Полный спиновый магнитный момент продукта этой реакции равен 6 μB , тогда как сумма полных спиновых магнитных моментов основ-

ных состояний реагентов Fe_2O_3 и H_2 равна нулю. Таким образом, эта реакция ведет к кардинальному изменению полного спинового момента реагентов. В реакции $\text{Fe}_2\text{O}_5 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_5\text{H}_2$, наоборот, присоединение H_2 ($2S + 1 = 1$) к Fe_2O_5 ($2S + 1 = 3$) ведет к синглетному основному состоянию продукта реакции. Таким образом, результаты расчетов позволяют утверждать, что наночастицы на основе кластеров Fe_2O_3 и Fe_2O_5 могут быть использованы в качестве сенсоров для обнаружения молекул водорода при условии, что они сохраняют свойства изменения полного магнитного момента при взаимодействиях с молекулами водорода.

Литература

1. Gobbo O.L., Sjaastad K., Radomski M.W. et al. // *Theranostics*. 2015. V. 5. № 11. P. 1249.
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. *Gaussian 09, Revision C.01*. Gaussian, Inc. Wallingford CT, 2009.
3. Curtiss L.A., McGrath M.P., Blaudeau J.-P. et al. // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 103. P. 6104.
4. Becke A.D. // *Phys. Rev. A*. 1988. V. 38. P. 3098.
5. Perdew J.P., Wang Y. // *Phys. Rev. B*. 1992. V. 45. P. 13244.

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF CLUSTER INTERACTIONS Fe_2O_n WITH H_2 AND O_2 MOLECULES

**K.V. Bozhenko¹, A.N. Utenyshev¹, L.G. Gutsev¹, S.M. Aldoshin¹,
G.L. Gutsev²**

¹Federal Research Center of Problems of Chemical Physics and Medical Chemistry
of the Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

²Department of Physics, Florida State University, Tallahassee, Florida, USA

Abstract: quantum chemical calculations of Fe_2O , Fe_2O_3 , Fe_2O_5 clusters and products of their interaction with hydrogen and oxygen molecules in the gas phase have been performed. The method of density functional theory (DFT-GGA) according to the GAUSSIAN-09 program and the 6-311+G* basis were used. It is shown that the initial total spin magnetic moment in the reaction and $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3\text{H}_2$ is not preserved, and the antiferromagnetic states of the reagents are transformed into the ferrimagnetic state of the reaction product.

Keywords: azo compounds, metal chelates, quantum chemical calculations.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕНЗОРА ОБРАТНОЙ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ В ФОСФОРЕНЕ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, Е.С. Сивашова

Волгоградский государственный технический университет
polin.badicova@gmail.com

Аннотация: в работе из закона дисперсии электронов в зоне проводимости фосфорена, рассчитанного с помощью теории функционала плотности, получен его тензор обратной эффективной массы.

Ключевые слова: фосфорен, проводимость, эффективная масса.

Фосфорен, однослойная форма черного фосфора, привлекает внимание исследователей необычными физическими свойствами (высокая подвижность зарядов, оптическое и УФ-поглощение) и возможностью практического приложения в оптоэлектронике.[1, 2] В отличие от графена, у фосфорена есть запрещенная зона. Ширина запрещенной зоны фосфорена находится в Γ -точке зоны Бриллюэна при этом вершина валентной зоны почти плоская. С точки зрения применения в оптоэлектронике наличие запрещенной зоны с прямыми переходами представляет собой преимущество, поскольку легче изготавливать стабильные устройства. [1] На рис. 1 показана кристаллическая структура фосфорена [3].

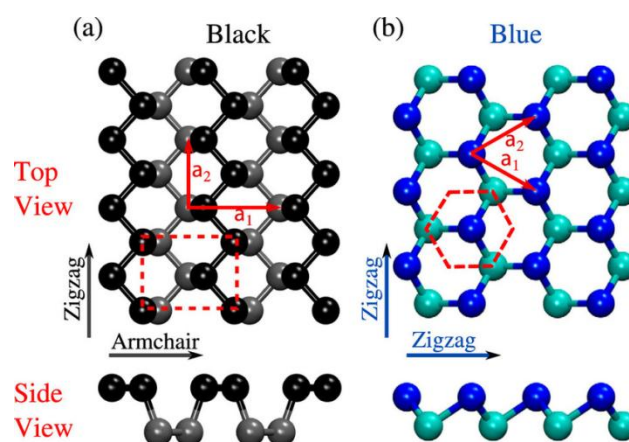


Рис. 1. Кристаллическая структура: *a*) черного фосфорена; *b*) синего фосфорена [3]

В данной работе был рассчитан тензор эффективной массы черного фосфорена в Γ -точке зоны Бриллюэна. Это поможет в дальнейшем более детально изучить отклик носителей поля на внешние поля в его зоне проводимости.

Исследование зонной структуры фосфорена проводилось с использованием пакета OpenMX (Open source package for Material eXplorer) – программы для моделирования наноразмерных материалов на основе теории функционала плотности [density functional theories (DFT)] [4]. Программа позволяет эффективно рассчитывать периодические системы, состоящие из сотен и тысяч атомов за время, существенно меньшее, чем программы, основанные на базисных

функциях, представленных в виде плоских волн.

На рис. 2 показан закон дисперсии носителей тока в зоне проводимости фосфорена вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна, рассчитанный с помощью пакета OpenMX в рамках теории функционала плотности.

Проинтерполировав полученную с помощью DFT-расчета зависимость, показанную на рис. 1, был рассчитан тензор обратной эффективной массы (в единицах обратной массы свободного электрона):

$$\left(\frac{1}{m_{eff}}\right)_{x,y} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_x \partial k_y} = \begin{pmatrix} 5.217 & 0.0 \\ 0.0 & 0.322 \end{pmatrix}.$$

Из формулы видно, что эффективные массы во взаимно перпендикулярных направлениях в фосфорене сильно отличаются, что означает резкую анизотропию его кинетических коэффициентов. Полученные результаты будут использованы в дальнейших исследованиях циркулярного фотогальванического эффекта в фосфорене.

Работа выполнена при поддержке гранта молодым ученым и магистрам (Приоритет 2030) № 54/470-22.

Литература

1. Carvalho, A., Wang, M., Zhu, X. et al. Phosphorene: from theory to applications. *Nat Rev Mater* 1, 16061 (2016). <https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.61>
2. Vivek Chaudhary et al. Phosphorene – an emerging two-dimensional material: recent advances in synthesis, functionalization, and applications *2D Mater.* 9 032001 (2022) DOI 10.1088/2053-1583/ac6dc2
3. Jain, A., McGaughey, A. Strongly anisotropic in-plane thermal transport in single-layer black phosphorene. *Sci Rep* 5, 8501 (2015). <https://doi.org/10.1038/srep08501>
4. T. Ozaki, Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures, *Phys. Rev. B.* 67 (2003) 155108. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155108>

CALCULATION OF THE REVERSE EFFECTIVE MASS TENSOR IN PHOSPHORENE BY THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

P. V. Badikova, D. V. Zav'yalov, E. S. Sivashova

Volgograd State Technical University

Abstract: in this work, from the law of dispersion of electrons in the conduction band of phosphorene, calculated using the density functional theory, its inverse effective mass tensor is obtained.

Keywords: phosphorene, conductivity, effective mass.

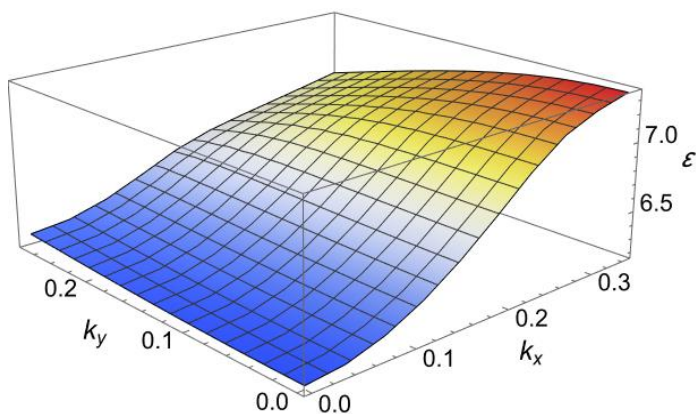


Рис. 2. Закон дисперсии носителей тока в зоне проводимости фосфорена вблизи Γ -точки

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФУЛЛЕРЕНА С КОМПЛЕКСНЫМ БОРОГИДРИДОМ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

А.С. Зюбин, Т.С. Зюбина, В.Д. Махаев, Ю.М. Шульга

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии РАН, Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

Аннотация: с помощью квантово-химического моделирования в рамках V3LYP/6-31G* и wB97XD/6-311G(d,p) рассмотрена трансформация структуры комплексов борогидрида с объемными катионами (тетраметил- или тетрабутил аммония, TXA^+) и фуллереном. Найдено, что в безводной среде формируются комплексы $\text{TXA}^+\text{C60H}^-$, а в присутствии воды возможно образование гидрофильных комплексов $\text{TXA}^+\text{C60OH}^-$. Высвобождающиеся при этом молекулы BH_3 улетучиваются в виде диборана, а комплексы типа $\text{TXA}^+\text{C60H}^-$ или $\text{TXA}^+\text{C60OH}^-$ объединяются в олигомеры, образуя осадок.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, комплексные борогидриды, фуллерены, функционализация.

Введение

Синтез фуллеренов (полиэдрических кластеров углерода) инициировал появление и интенсивное развитие исследований их реакционной способности. Разрабатывается широкий набор методов и подходов, позволяющих присоединять к фуллеренам самые разные функциональные группы, существенно меняющие их физические и химические свойства (функционализация фуллеренов, см. обзор [1]). Одно из активно развивающихся направлений – получение аддуктов фуллеренов с целью использования их для синтеза биологически активных соединений. Для биологических применений необходимо получать функциональные производные, растворимые в воде или полярных средах, причем стабилизирующий фрагмент должен быть присоединен к фуллерену прочной ковалентной связью [1]. Одними из простейших представителей таких производных являются фуллеролы $\text{C60}(\text{OH})_n$, которые могут быть получены в жестких условиях при кипячении в растворах сильных кислот (H_2SO_4 , HNO_3) или щелочей (KOH) [2, 3]. Однако в [2, 3] было найдено, что при взаимодействии растворенных в бензоле борогидрида тетрабутиламмония $\text{BH}_4\text{N}(\text{C}_4\text{H}_9)_4$ и C60 практически сразу образуется темно-коричневый осадок, в составе которого отсутствует бор. Строение этого вещества не установлено, но предполагается, что при взаимодействии BH_4^- с C60 в инертной среде формируется анион C60H^- и BH_3 , а при контакте с водой и воздухом – C60OH^- и BH_3 . Следов бора не обнаружено, предполагается, что BH_3 улетает в виде диборана. Целью данной работы является проверка реальности таких возможностей с помощью квантово-химического моделирования.

Методика расчетов

Для изучаемых систем моделирование было выполнено в рамках кластерного приближения с использованием гибридного функционала плотности B3LYP [4, 5] с валентно-двухэкспонентным базисом 6-31G*, включающим поляризационные функции, с помощью программного комплекса GAUSSIAN [6]. На первом этапе для выяснения качественной картины была рассмотрена более маленькая система C60-борогидрид тетраметиламмония (ТМА1, рис. 1). К сожалению, исследовать такую систему экспериментально не удастся вследствие отсутствия растворимости комплекса с ТМА в бензоле. Но даже комплекс с ТМА тяжел для расчета, поэтому поиск переходных состояний был выполнен только приближенно, с помощью сканирования потенциальных поверхностей, поскольку процедура opt=ts для данных систем работает слишком медленно. Затем для наиболее существенных точек потенциальной поверхности на аналогичном уровне моделирования была выполнена оптимизация более сложной системы C60-борогидрид тетрабутиламмония (ТВА1, рис. 1). Недостатком использованного приближения в данном случае является то, что в его рамках не учитываются дисперсионные взаимодействия, а для рассматриваемых систем они могут быть существенными. Поэтому структурные и энергетические характеристики найденных структур были уточнены с использованием более сложного функционала wB97XD [7], учитывающего дисперсионные взаимодействия, с более полным базисом 6-311G(d,p), и с учетом эффекта суперпозиции базисов (BSSE).

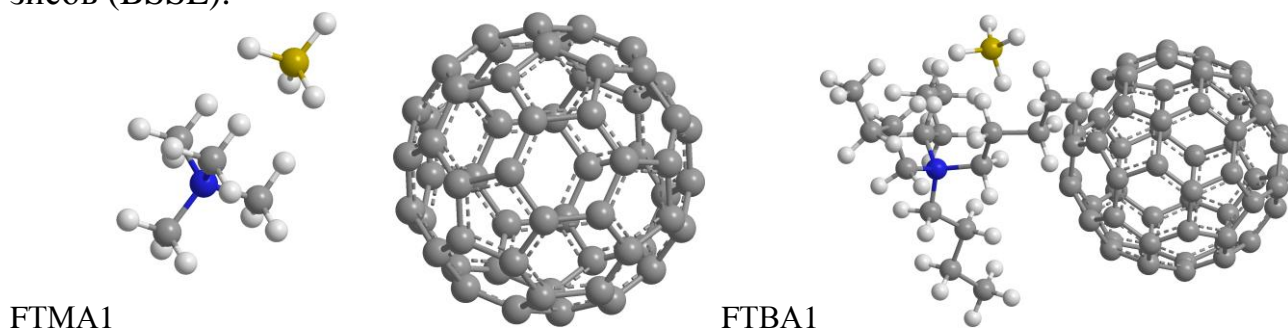


Рис. 1. Исходные структуры C60*ТМА*ВН₄⁻ и C60*ТВА*ВН₄⁻

Обсуждение результатов

При рассмотрении взаимодействия между фуллереном и ТМА или ТВА в качестве начала отсчета были использованы энергии изолированных частиц. При объединении ТМАВН₄ и C60 в рамках B3LYP формируется слабо связанный комплекс FTMA1 (рис. 1) с энергией взаимодействия ~ 0.3 эВ. В этом комплексе ион Н⁻ может отщепляться от ВН₄⁻ (через FTMAts1), формируя менее выгодную структуру FTMA2 (рис. 1, 2). В этой структуре молекула ВН₃ может скользить по ребрам шестиугольника C6 через конфигурации FTMAts2, FTMA3, FTMAts3 со сравнительно небольшими затратами энергии, попадая в конечном итоге в FTMA4, которая оказывается наиболее энергетически выгодной (рис. 1, 2, таблица). В этой конфигурации молекула ВН₃ связана с противо-

положным от СН- фрагмента углом шестиугольника С6, в результате чего образуется комплекс $\text{TMA}^+ \cdot \text{HC60}^- \cdot \text{BH}_3$. При замене катиона ТМА более объемным ТВА характер ключевых структур и их относительные энергии меняются слабо (см. таблицу). Энергия связи молекулы BH_3 с фуллереном в наиболее стабильном комплексе FTMA4 на ССП-уровне составляет 1.27 эВ, а рассчитанная в этом же приближении энергия объединения BH_3 в диборан – 1.7 эВ, т.е. формирование диборана требует затрат энергии ~ 0.4 эВ на каждую BH_3 . Однако при переходе к энергии Гиббса эта разница снижается до 0.16 эВ уже при 20 С°, поэтому следует ожидать, что при отсутствии насыщенных паров диборана он будет быстро улетучиваться. В результате в растворе должны остаться солеобразные комплексы $\text{TMA}^+ \cdot \text{C60H}^-$ или $\text{TVA}^+ \cdot \text{C60H}^-$, которые будут объединяться в кластеры (например, энергия димеризации кластеров $\text{FTMA} \cdot \text{C60H}$ составляет на ССП- уровне ~ 0.8 эВ) и в конечном итоге формировать осадок.

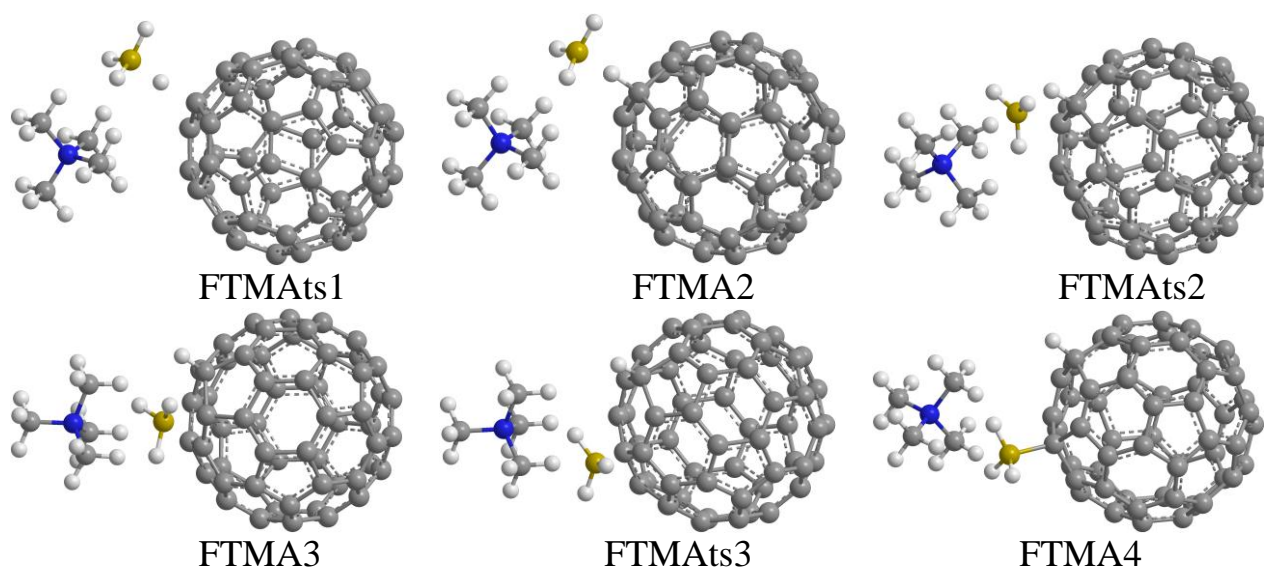


Рис. 2. Трансформация комплекса $\text{C60} \cdot \text{TMA} \cdot \text{BH}_4^-$ в $\text{TMA}^+ \cdot \text{HC60}^- \cdot \text{BH}_3$

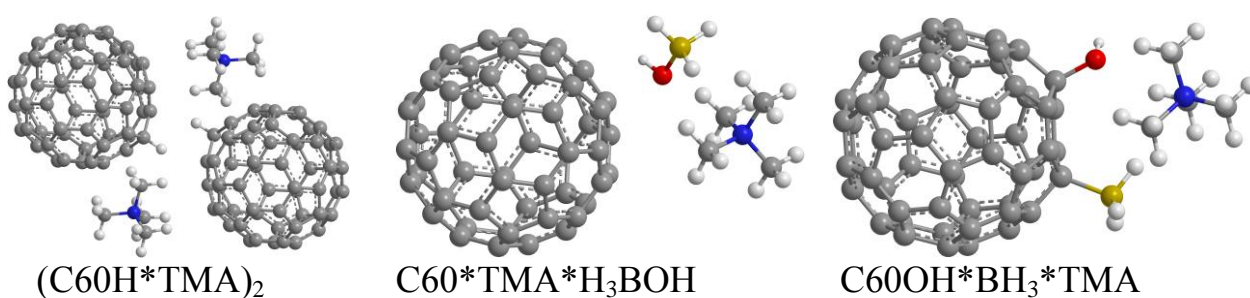


Рис. 3. Димер комплекса $\text{C60H} \cdot \text{TMA}$ и комплексы с переходом ОН-группы из борогидрида на фуллерен

Переход от приближения $\text{V3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*$ к более точному $\text{wB97XD}/6\text{-}311\text{G(d,p)}$ не приводит к качественным изменениям картины, но относительные энергии понижаются, причем для ТВА сильнее, чем для ТМА (см. таблицу), поскольку количество Ван-дер-Ваальсовых контактов для более объемного катиона больше. Поправка BSSE мала (~ 0.04 эВ) и на относительные энергии

влияет слабо. В результате комплекс ТВА+ВН₄-*С₆₀ должен переходить в более выгодный ТВА+*НС₆₀ВН₃- (ТВА4) с понижением энергии примерно на 1 эВ (см. таблицу). Энергия олигомеризации ионных пар и формирования наночастиц, способных выпадать в осадок, тоже должна увеличиться, но провести подобное моделирование нам пока не удалось.

Энергии различных борогидридных комплексов ТМА и ТВА с фуллереном относительно невзаимодействующих комплексов ВН₄*ТМА или ВН₄*ТВА и С₆₀ (в эВ). В1 – приближение В3LYP/6-31G*, В2 – wB97XD/6-311G(d,p), в скобках приведены энергии с учетом поправок на эффект суперпозиции базисов (BSSE)

Система	SCF	ΔH	ΔG	Система	SCF
FTMA1/B1	-0.10	-0.07	0.34	FTMA3/B1	-0.02
FTMA2/B1	0.28	0.28	0.81	FTMAts1/B1	0.29
FTMA4/B1	-0.77	-0.64	-0.12	FTMAts2/B1	0.53
FTMA1/B2	-0.42 (-0.38)	-0.38 (-0.34)	0.08 (0.12)	FTMAts3/B1	0.28
FTMA2/B2	-0.18 (-0.14)			FTVA1/B1	-0.07
FTMA3/B2	-0.82 (-0.78)			FTVA2/B1	0.14
FTMA4/B2	-1.52 (-1.48)	-1.36 (-1.32)	-0.80 (-0.76)	FTVA4/B1	-0.87
ТМА*				FTVA1/B2	-0.78 (-0.68)
С ₆₀ *Н ₃ ВОН	-0.13	-0.07	0.28	FTVA2/B2	-0.60 (-0.50)
НОС ₆₀ ВН ₃	0.52	0.58	1.16	FTVA4/B2	-1.89 (-1.79)

Следует отметить, что полученные комплексы могут оказаться не слишком подходящими для биологических применений, поскольку для формирования гидрофильных свойств фуллерены должны иметь полярные поверхностные группы, например ОН. Моделирование показывает, что системы С₆₀Н + Н₂О и С₆₀ОН + Н₂ имеют близкие энергии, но нам пока не удалось найти такой путь перехода между этими системами, который не требовал бы преодоления высокого потенциального барьера (более двух эВ). Однако существует и другая возможность получения структуры с С₆₀ОН – сначала преобразовать комплекс ВН₄*ТМА + Н₂О в Н₃ВОН*ТМА + Н₂, а затем подвергнуть систему Н₃ВОН*ТМА*С₆₀ такой же трансформации, как и ВН₄*ТМА*С₆₀, рассмотренной выше. Мы промоделировали взаимодействие ВН₄*ТМА с водой в рамках того же подхода, что и для борогидрида натрия [8], и получили, что в данном случае барьер получается немного ниже, ~ 0.9 эВ. Из этого результата следует, что получение гидрофильного комплекса на основе С₆₀*ТМА*Н₃ВОН возможно, однако при использовании наиболее простого приближения В3LYP/6-31G* структура ТМА*НОС₆₀ВН₃ получается менее энергетически выгодной, чем ТМА*С₆₀*Н₃ВОН (см. таблицу), поэтому ее формирование мо-

жет не реализоваться. Тем не менее можно ожидать, что если сохранятся тенденции изменений относительных энергий, полученные на предыдущем этапе для систем с BH_4 при увеличении размеров катиона и точности приближения, то формирование фуллерена с OH -группой может оказаться возможным, что требует дальнейших исследований.

Данная работа выполнена на ВЦ ФГБУН ФИЦ ПХМ и МХ РАН по теме Государственного задания, № государственной регистрации АААА-А19-119061890019-5.

Литература

1. Караулова Е.Н., Багрий Е.И. // Успехи химии. 1999. Т. 68. С. 979.
2. Makhaev V.D., Shul'ga Yu.M., Lobach A.S., Vasilets V.N., Roshchupkina O.S., Moravsky A.P. // Russ. Chem. Bull. 1993. V. 42. P. 772.
3. Borisov A.P., Makhaev V.D., Shul'ga Yu.M., Volkov G.A., Lagodzinskaya G.V., Piven V.A. // Synthetic Metals. 1995. V. 70. P. 1461.
4. Becke A.D. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P. 5648.
5. Johnson B.J., Gill P.M.W., Pople J.A. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P.5612.
6. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et al., Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.
7. Chai Jeng-Da, Head-Gordon M. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2008, 10, 6615–6620.
8. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Добровольский Ю.А. // Ж. Неорг. Химии. 2016. Т. 61. С. 767.

INTERACTION OF FULLERENE WITH COMPLEX BOROHYDRIDE: QUANTUM CHEMICAL MODELING

A.S. Zyubin, T.S. Zyubina, V.D. Makhaev, Yu.M. Shulga

Federal Research Center for Problems of Chemical Physics
and Medicinal Chemistry, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

Abstract: the transformation of the structure of complex borohydrides with large cations (tetramethyl- or tetrabutyl ammonium, TXA^+) and fullerene is considered using quantum-chemical modeling in the framework of B3LYP/6-31G* and wB97XD/6-311G(d,p). It was found that $\text{TXA}^+\text{C}_6\text{OH}^-$ complexes are formed in an anhydrous medium, while hydrophilic $\text{TXA}^+\text{C}_6\text{OH}^-$ complexes are possible in the presence of water. The BH_3 molecules released in this process volatilize in the form of diborane, and complexes of the $\text{TXA}^+\text{C}_6\text{OH}^-$ or $\text{THA}^+\text{C}_6\text{OH}^-$ type coalesce to form oligomers, forming a precipitate.

Keywords: quantum chemical modeling, density functional theory, complex borohydrides, fullerenes, functionalization.

ИК-МАРКЕР ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИПИРРОЛЬНЫХ ЦЕПОЧЕК В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛИПИРРОЛА С АКЦЕПТОРАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ВИДЕ BF_4 И PF_6 . КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, О.И. Истакова, Н.В. Талагаева,
Е.В. Золотухина, М.А. Воротынцев, Д.В. Конев

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

Аннотация: рассмотрено взаимодействие между цепочками олигопиррольных комплексов с сильными акцепторами (BF_4 , PF_6) в тонких пленках вблизи электрода. Расчеты выполнены на уровнях PBE/PAW, $\omega\text{B97XD}/6\text{-}31\text{G}(\text{d},\text{p})$, M062X/6-311+G(2d,p) с учетом периодических условий и в кластерном приближении. На основании расчетов обозначен ИК-маркер взаимодействия полипиррольных цепочек между собой – это интенсивный пик в области $1700\text{-}1740\text{ см}^{-1}$. Полученный результат коррелирует с появлением этого пика в экспериментальных ИК спектрах тонких пленок.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, электроактивные материалы, сопряженный полимер, электрополимеризация, полипиррол, структура олигопиррольных комплексов.

Рассматриваемые нами соединения относятся к классу проводящих полимеров и являются квазиодномерными проводниками. Благодаря этим свойствам они актуальны в качестве основного компонента электрохимических сенсоров, химических источников энергии, электрохромных устройств, светодиодных дисплеев LED, актуаторов, протекторов коррозии, адсорбентов и биомедицинских устройств, осуществляющих доставку лекарственных веществ в организм.

Для изучаемых систем моделирование было выполнено в рамках кластерного приближения с использованием гибридного функционала плотности с учетом дисперсионного взаимодействия на уровне ωB97XD , с валентно-двухэкспонентным базисом 6-31G(d,p), включающим поляризационные функции с помощью программного комплекса GAUSSIAN-9. В этом подходе полипиррол моделировался цепочками $(\text{NC}_4\text{H}_3)_m$ (далее для сокращения называемыми PРum), включающими от $m=4$ до $m=16$ пятичленных циклических фрагментов NC_4H_3 . Сравнительные расчеты в присутствии растворителя (ацетонитрила, CH_3CN .) проведены методом SCRF используя модель поляризуемой сплошной среды PCM в рамках формализма интегрального уравнения IEFPCM. Однако, качественных изменений структуры и относительной энергии изомеров учет растворителя не дал (данные с учетом растворителя ниже отмечены индексом "s"). Расчеты проводили с полной оптимизацией геометрии без ограничений по симметрии. При анализе относительных энергий отрицательные значения ΔSCF , ΔZPE , $\Delta\text{H}298$ свидетельствуют о том, что образование комплекса является экзотермическим. Отрицательное значение $\Delta\text{G}298$ подтверждает, что реакция объединения термодинамически выгодна при нормальных усло-

виях. Приведенные в работе расчеты ИК-спектров не претендуют на количественное совпадение с экспериментом. Различия между экспериментальными и смоделированными частотами в первую очередь связаны с тем, что экспериментальные значения относятся к конденсированной фазе, а расчеты – к газофазному моделированию. Однако, можно ожидать, что относительные изменения частот при изменении структуры будут описываться правильно за счет компенсации ошибок


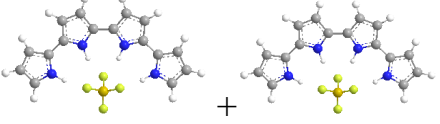
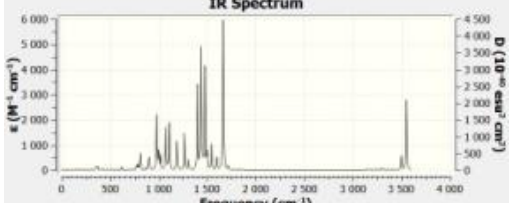
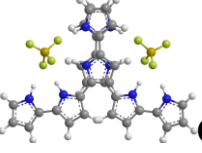
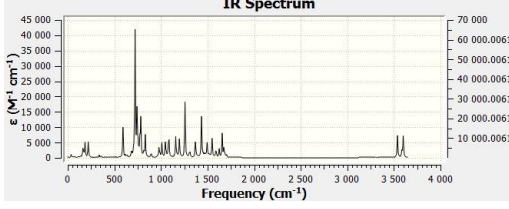
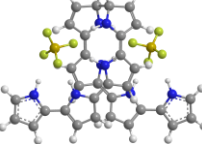
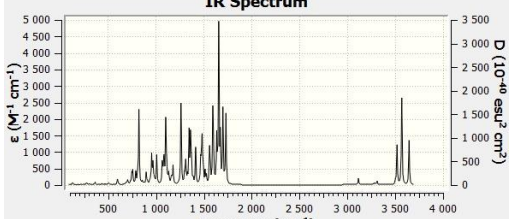

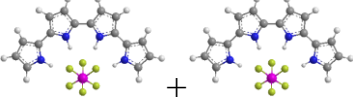
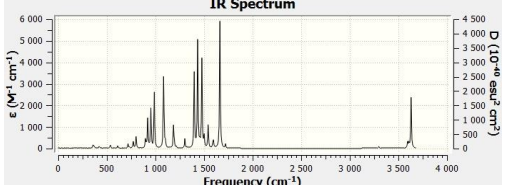
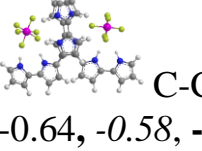
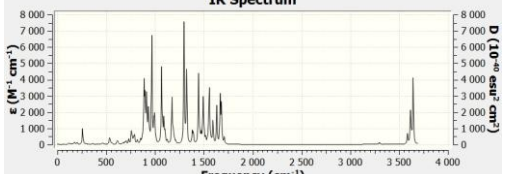
Полипиррольная цепочка является очень гибкой, и под воздействием тепловых колебаний может существовать в виде широкого набора различных конфигураций. Однако структуры с расположением циклов в цис-положениях в соседних позициях более эффективно взаимодействуют с анионами. В таких комплексах энергетически выгодно переориентирование ближайших к аниону пиррольных колец из транс- в цис-положение, что приводит к формированию, например, меандров, включающих 3 – 5 пиррольных колец на один анион.

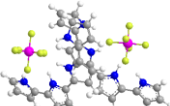
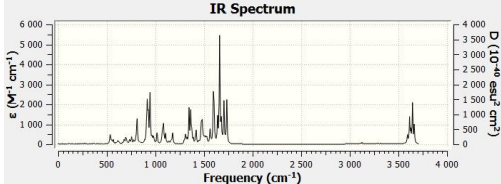
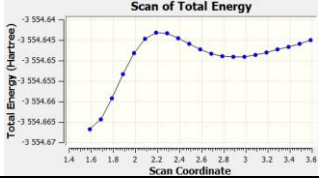
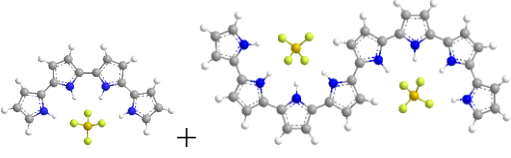
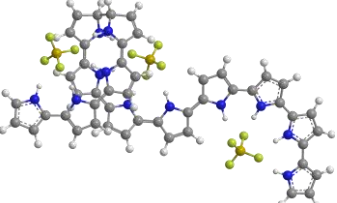
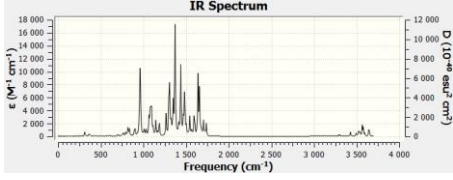
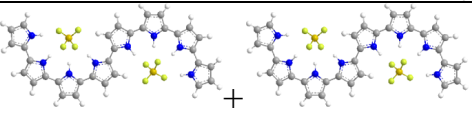
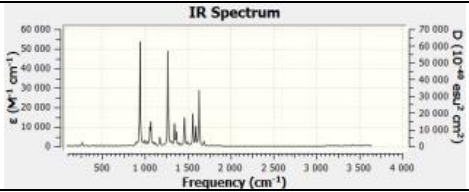
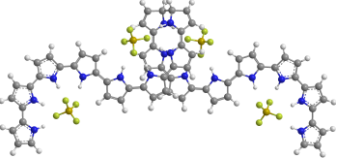
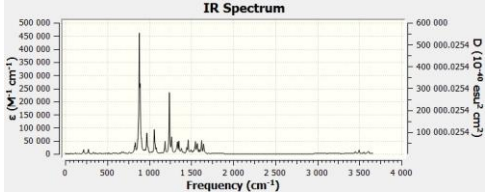
Расчеты показывают, что анионы VF_4 и PF_6 сохраняют свою структуру в полимерной матрице и находятся в плоскости слоев между цепями PPy , что соответствует экспериментальным результатам. Расстояния между плоскостями зависят от взаимной ориентации цепей и равны 3.0-3.5 Å. Эти значения коррелируют со средними значениями 0.341 нм, найденными экспериментально для расстояний между слоями планарных цепей PPy . Наличие слоистой структуры может служить предпосылкой к слипанию соседних плоских цепей. Рассмотрим подробно три варианта: слипание концами цепей, лежащих в параллельных плоскостях, слипание неконцевыми фрагментами цепей, и слипание концевых фрагментов одной и той же цепи.

Рассмотрим комплексы, полученные из цепочек, которые лежат в соседних параллельных плоскостях, но повернуты на 180° относительно друг друга. В таблице приведены относительные энергии различных структур в реакции объединения $(\text{PPy}_4_A) + (\text{PPy}_4_A) \rightarrow (\text{PPy}_4_A) \cdot (\text{PPy}_4_A) \rightarrow (\text{PPy}_4_A)_2$, где $A = \text{VF}_4$ и PF_6 и расстояния (С-С) между связывающимися (соседними с азотом) атомами углерода концевых фрагментов цепочки PPy_4 . Согласно расчетам на уровне SCF две цепочки-мономера PPy_4_A ($A = \text{VF}_4$ и PF_6) со структурами **5** и **8** могут практически безбарьерно образовать комплексы $(\text{PPy}_4_A) \cdot (\text{PPy}_4_A)$ определенного вида (структуры **6** и **9**). Преодолевая барьеры 0.3 и 0.2 эВ комплексы со структурами **6** и **9** переходят в структуры **7** и **10** димера $(\text{PPy}_4_A)_2$, лежащие на энергетической шкале ниже на 0.3(VF_4) и 0.4(PF_6) эВ, соответственно.

В комплексах $(\text{PPy}_4_A) \cdot (\text{PPy}_4_A)$, со структурами **6** и **9** рассчитанные наименьшие расстояния между атомами углерода С-С равны 3.0 Å и 2.9 Å, соответственно. При замыкании двух цепей с образованием димера $(\text{PPy}_4_A)_2$ (структуры **7** и **10**) расстояние между ближайшими к азоту атомами углерода краевых фрагментов PPy -цепочки уменьшается до 1.59 Å. При этом из трехкоординированных (sp^2) образуются четырехкоординированные (sp^3) атомы углерода, что отражается в спектре появлением заметных полос в области 1700-1740 cm^{-1} , отвечающих С-С и С-Н колебаниям соседних с образовавшейся связью фрагментов NC_4H_3 . Интенсивность этих полос составляет 40-45% от максимального значения интенсивности спектра.

Структуры, относительные энергии (в эВ), расстояния (в Å) между контактирующими атомами углеродов, ИК спектры поглощения для изолированных фрагментов PPy4_A, комплекса и сшитой цепи полимеров (PPy4_A) и (PPy4_A), (PPy4_A) и (PPy8_2A), (PPy8_2A) и (PPy8_2A), где A= BF₄ и PF₆. Минимальный энергетический путь дан в зависимости от расстояния C-C между контактирующими атомами углерода концевых фрагментов цепи^{*)}

N	(PPy4_A) + (PPy4_A) 	
2(PPy4_BF ₄)		
5	 0, 0, 0, <u>0</u> 0 _s , 0 _s , 0 _s , <u>0_s</u>	
(PPy4_BF ₄)•(PPy4_BF ₄)		
6	 C-C=3.01, 2.93 _s -0.63, -0.62, -0.61 , <u>0.11</u> -0.50 _s , -0.42 _s , -0.43_s , <u>0.37_s</u>	
(PPy4_BF ₄) ₂		
7	 C-C=1.59, 1.59 _s -1.06, -0.96, -0.98 , <u>-0.22</u> -1.05 _s , -0.85 _s , -0.89_s , <u>-0.02_s</u>	
(PPy4_BF ₄)•(PPy4_BF ₄) → (PPy4_BF ₄) ₂		
6→7	TS= -0.35, C-C=2.19	
2(PPy4_PF ₆)		
8	 0, 0, 0, <u>0</u> 0 _s , 0 _s , 0 _s , <u>0_s</u>	
(PPy4_PF ₆)•(PPy4_PF ₆)		
9	 C-C=2.90, 2.93 _s -0.64, -0.58, -0.58 , <u>0.18</u> -0.47 _s , -0.36 _s , -0.34_s , <u>0.35_s</u>	

	$(\text{PPy4_PF}_6)_2$	
10	 <p>C-C=1.59, 1.59_s -1.08, -1.05, -1.05, -0.22 -1.09_s, -0.93_s, -0.95_s, -0.16_s</p>	
	$(\text{PPy4_PF}_6) \cdot (\text{PPy4_PF}_6) \rightarrow (\text{PPy4_PF}_6)_2$	
9→10	TS=-0.44, C-C=2.19	
	$(\text{PPy4_A}) + (\text{PPy8_2A})$	
	$(\text{PPy4_BF}_4) + (\text{PPy8_2BF}_4)$	
11	 <p>0, 0, 0, 0</p>	
	$(\text{PPy4_BF}_4)(\text{PPy8_2BF}_4)$	
12	 <p>C-C=1.59 -1.27, -1.14, -1.16, -0.44</p>	
	$(\text{PPy8_2A}) + (\text{PPy8_2A})$	
	$2(\text{PPy8_2BF}_4)$	
13	 <p>0, 0, 0, 0</p>	
	$(\text{PPy4_BF}_4)(\text{PPy8_2BF}_4)$	
14	 <p>C-C=1.59 0.16, 0.26, 0.24, 0.93</p>	

*) SCF – энергия самосогласования (простой шрифт), ZPE – энергия нулевых колебаний (курсив), H – тепловая энтальпия (полужирный шрифт), G – тепловая свободная энергия при нормальных условиях (1 атм., 20°C, полужирный подчеркнутый). Индексом "s" отмечены расчеты с учетом влияния растворителя.

Межцепное сцепление для $A = PF_6$ энергетически немного более выгодно, чем для $A = BF_4$. Разница между комплексами $(PPy4_A) \cdot (PPy4_A)$ и димерами $(PPy4_A)_2$ для PF_6 на 0.1 эВ больше, чем для BF_4 , а барьер – на 0.1 эВ меньше.

Следует отметить, что сцепление как коротких, так и длинных цепей энергетически менее выгодно по сравнению с присоединением коротких полимеров к длинным. Например, присоединение $(PPy4_A)$ к $(PPy8_2A)$ (структуры **11-12**) на 0.20(G) эВ более выгодно, чем объединение двух полимеров $(PPy4_A)$ (структуры **5-7**). В тоже время объединение двух длинных полимеров $PPy8_2A$ (структуры **13-14**), энергетически не выгодно на 0.9(G) эВ (см. таблицу), поскольку энтальпийный вклад в этом случае весьма существенен.

После сцепления катион-радикалы теряют два протона, при этом расстояния между сцепленными атомами углерода уменьшаются с 1.59 до 1.42-1.45 Å. Полимеры $PPy8_2A$, $PPy12_3A$, $PPy16_4A$, которые образованы сцеплением фрагментов $(PPy4_A)$ и $(PPy4_A)$, $(PPy4_A)$ и $(PPy8_2A)$, $(PPy8_2A)$ и $(PPy8_2A)$ с последующей потерей двух протонов, образуют изогнутые квазиплоские структуры, лежащие на энергетической шкале близко (в пределах 0.5 эВ) или даже ниже (на 0.6-1.0 эВ) структур в форме меандра. Чем длиннее цепь, тем энергетически выгоднее ее изогнутый вариант по сравнению с меандром.

Учет влияния ацетонитрила в качестве растворителя повышает на энергетической шкале относительное положение комплекса $(PPy4_A) \cdot (PPy4_A)$ по сравнению с димером $(PPy4_A)_2$ лишь на 0.06-0.10 и 0.20-0.11 эВ для $A = BF_4$ и PF_6 , соответственно (см. таблицу). Заметного смещения характерных полос в области 1700-1740 cm^{-1} не происходит, однако, интенсивность этих полос уменьшается в присутствии растворителя на 20% и составляет 20-25% от максимального значения интенсивности спектра.

По сравнению с Ван-дер-Ваальсовым комплексом из двух фрагментов $(PPy4_BF_4)$ со структурами типа **6** и **9** димер $(PPy4_BF_4)_2$, образованный за счет связи углеродов неконцевых фрагментов, существенно менее выгоден (на ~1 эВ). Достаточно легко (с барьером 0.3 эВ) этот димер разрывает углеродную связь и переходит в комплекс, поэтому вероятность появления такого димера очень мала. Заметим, что аналогично ведут себя и димеры, полученные за счет слипания концевых фрагментов PPy в комплексах, где цепочки $PPy4_A$ лежат в соседних параллельных плоскостях, но повернуты на 0° относительно друг друга.

Однако, замыкание концами небольших цепочек вполне возможно.

Таким образом, цепи структурно могут переходить из одного слоя в другой, что может обеспечить увеличение проводимости не только вдоль, но и поперек слоя. Энергетически наиболее выгодны сцепления между концами коротких и длинных цепей, менее выгодны – короткий с короткими и длинные с длинными. Можно сказать, что среди рассмотренных вариантов только для цепочек, ориентированных определенным образом и цепей, сцепленных концевыми фрагментами, наблюдается ярко выраженный высокоинтенсивный характерный пик в области 1700-1740 cm^{-1} (который исчезает при потере двух протонов). Этот пик является ИК-маркером сцепления полипиррольных цепочек с

анионами BF_4^- и PF_6^- . Он обусловлен образованием четырехкоординированного атома углерода (sp^3), и эти колебания могут быть отнесены к колебаниям водородов и углеродов во фрагментах цепи, прилегающих к четырехкоординированным атомам углерода. Подобные условия возникают на поверхности тонких упорядоченных пленок вблизи электрода, где они и наблюдаются экспериментально.

Работа выполнена на ВЦ ФГБУН ФИЦ ПХФ и МХ РАН согласно № государственной регистрации АААА-А19-119061890019-5.

INTERACTION BETWEEN POLYPYRROL CHAINS WITH EACH OTHER IN THIN POLYPYRROL FILMS WITH BF_4 AND PF_6 ACCEPTERS. QUANTUM CHEMICAL SIMULATION

**T.S. Zyubina, A.S. Zyubin, O.I. Istakova, N.V. Talagaeva,
E.V. Zolotukhina, M.A. Vorotyntsev, D.V. Konev**

Federal Research Center of Problems of Chemical Physics
and Medicinal Chemistry, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

Abstract: the interaction between chains of oligopyrrole complexes with strong acceptors (BF_4 , PF_6) in thin films near the electrode is considered. The calculations were performed at the levels PBE/PAW, $\omega\text{B97XD}/6\text{-}31\text{G(d,p)}$, $\text{M062X}/6\text{-}311\text{+G(2d,p)}$ taking into account periodic conditions and in the cluster approximation. Based on the calculations, the IR marker of the interaction of polypyrrole chains with each other is indicated, which is an intense peak in the region of 1700-1740 cm^{-1} . The calculation result correlates with the appearance of this peak in the experimental IR spectra obtained in the study of thin films.

Keywords: quantum chemical modeling, density functional, electroactive materials, conjugated polymer, electropolymerization, polypyrrole, oligopyrrole complexes.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ VO₂**М.Д. Манякин, С.И. Курганский**

Воронежский государственный университет

manyakin@phys.vsu.ru

Аннотация: методом линеаризованных присоединенных плоских волн с помощью программного пакета Wien2k проведено моделирование электронного строения объемного кристалла диоксида ванадия. Рассчитаны зонная структура, плотности электронных состояний, спектр рентгеновского поглощения вблизи V К-края.

Ключевые слова: диоксид ванадия, электронная структура, моделирование, Wien2k, ЛППВ, поглощение рентгеновского излучения.

Поиск новых функциональных материалов для создания устройств твердотельной электроники с улучшенными характеристиками является важным направлением современного материаловедения. Оксиды переходных металлов с пространственной кристаллической структурой рутила (группа симметрии $R4_2/mnm$) являются группой материалов, привлекающей к себе заметный исследовательский интерес. Одним из наиболее интересных материалов семейства рутилоподобных оксидов переходных металлов является диоксида ванадия. Кристаллический объемный диоксид ванадия претерпевает фазовый переход первого рода при $t \sim 68^\circ\text{C}$ [1], который отделяет низкотемпературную моноклинную (искаженная кристаллическая фаза рутила) от тетрагональной фазы рутила при высоких температурах. Этот структурный фазовый переход сочетается с электронным переходом полупроводник–металл, при котором электропроводность изменяется на несколько порядков величины, что используется в критических термисторах и пороговых переключателях. Кроме этого VO₂ рассматривается как материал, потенциально пригодный к использованию для создания нейроморфных аппаратных устройств, позволяющих имитировать деятельность мозга.

В настоящей работе мы представляем результаты компьютерного моделирования электронного строения кристаллического VO₂ с тетрагональной пространственной структурой рутила. Расчеты электронной структуры были выполнены методом линеаризованных присоединенных плоских волн с использованием программного пакета Wien2k. Кристаллические параметры и координаты неэквивалентных атомных позиций в элементарной ячейке объемного кристалла приведены в таблице. Для учета обменно-корреляционной энергии использовалось обобщенное градиентное приближение (Generalized Gradient Approximation – GGA). Это универсальный функционал, позволяющий получить надежный результат при расчете электронного строения металлов. Радиусы muffin-tin сфер были равны 1.89 а.е. для атома ванадия и 1.71 а.е. для атома кислорода.

Кристаллические параметры VO₂

группа симметрии	P4 ₂ /mmm		
параметр a, b, Å	4.5546		
параметр c, Å	2.8514		
координаты атомов	x/a	y/b	z/c
V	0.0	0.0	0.0
O	0.3	0.3	0.0

На рис. 1 представлены первая зона Бриллюэна VO₂, с обозначением точек высокой симметрии и рассчитанная зонная структура VO₂. Видно, что валентная область VO₂ состоит из двух групп энергетических зон, разделенных запрещенной щелью. Нижняя группа из 12 зон, происходящих преимущественно из 2p-состояний кислорода, имеет ширину ~ 6.3 эВ. Выше потолка этой группы зон присутствует щель запрещенных энергий, шириной ~ 1 эВ. Далее расположена группа из 10 зон, происходящих от d-состояний атомов ванадия.

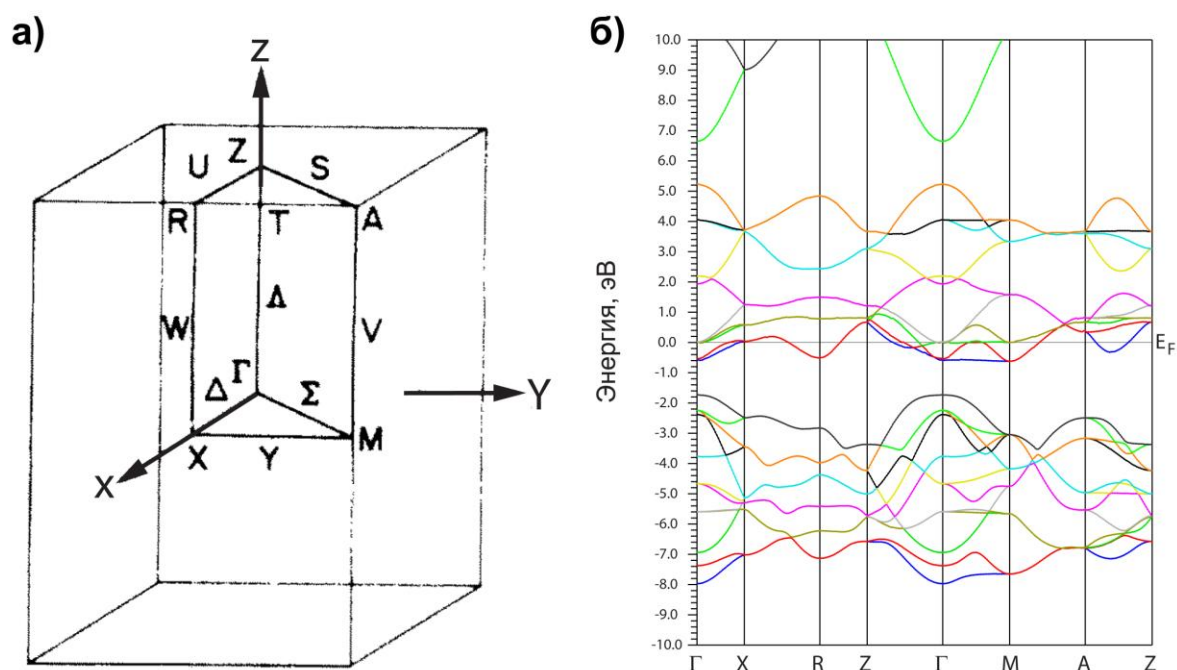


Рис. 1. Первая зона Бриллюэна и зонная структура VO₂

При кристаллизации в структуру рутила электроны из валентной оболочки ванадия переходят к более электроотрицательным атомам кислорода. У свободного атома ванадия на валентной оболочке имеется пять электронов с конфигурацией 3d³4s². В структуре рутила атом ванадия имеет формальную степень окисления V⁺⁴, заполнение d-подоболочки равно 3d¹. В результате энергетические зоны, образованные из d-состояний атомов ванадия, оказываются частично занятыми электронами. Уровень Ферми пересекает группу зон, образо-

ванную d-состояниями атома ванадия, которая выступает в роли зоны проводимости, а VO_2 проявляет металлический тип электропроводности.

На рис. 2 приведены спектры полной плотности электронных состояний (ПЭС) объемного кристалла диоксида ванадия. В области энергий от -8 до -1.7 эВ доминируют $2p$ состояния кислорода, а в области от -0.7 до 5.2 эВ – d-состояния атома ванадия. Уровень Ферми располагается вблизи локального максимума ПЭС, что может свидетельствовать о нестабильности такой структуры и влиять на происходящий в VO_2 переход металл–полупроводник.

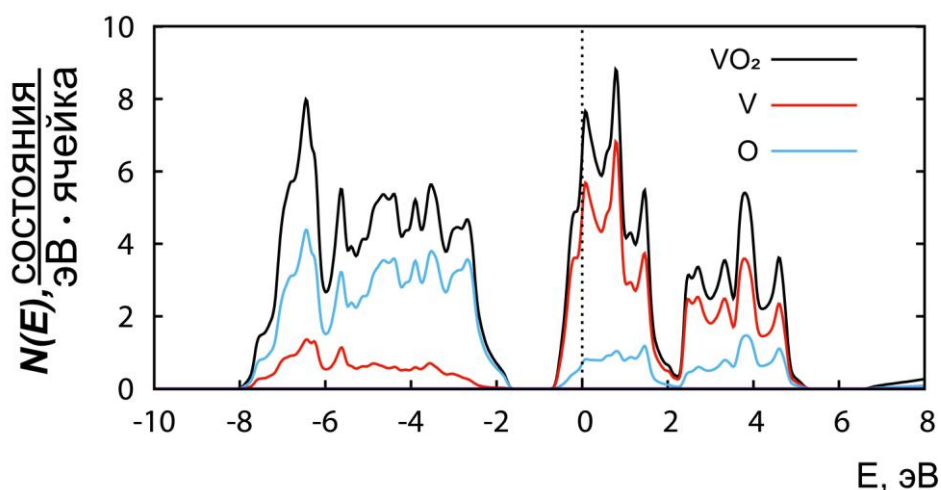


Рис. 2. Плотность электронных состояний VO_2

Сравнение результатов выполненных нами расчетов с известными литературными данными [2] показывает высокое согласие, что свидетельствует в пользу их достоверности. Полученная картина зонной структуры и спектров ПЭС является типичной рутилоподобных оксидов переходных металлов и заметно отличается от вида зонной структуры рутилоподобных оксидов элементов 14 группы Периодической таблицы [3].

Теперь рассмотрим особенности электронного строения зоны проводимости VO_2 . С этой целью нами было проведено моделирование спектра рентгеновского поглощения вблизи V К-края. Расчет проводился в двух приближениях: для элементарной ячейки в основном энергетическом состоянии и для суперъячейки размера $2 \times 2 \times 3$ с применением приближения $Z+1$. В последнем случае один из атомов ванадия в суперъячейке был заменен на атом хрома. На рис. 3 показано совмещение рассчитанных V К спектров рентгеновского поглощения (обозначены "Эл. ячейка" и " $Z+1$ ") с экспериментально полученными в работе [4] спектрами порошкообразного образца VO_2 , зарегистрированными при двух различных температурах: ниже и выше температуры фазового перехода. Видно, что между модельными спектрами, рассчитанными в двух разных приближениях фактически отсутствуют различия. При этом модельные спектры содержат все наблюдаемые особенности тонкой структуры, присущие экспериментальным спектрам.

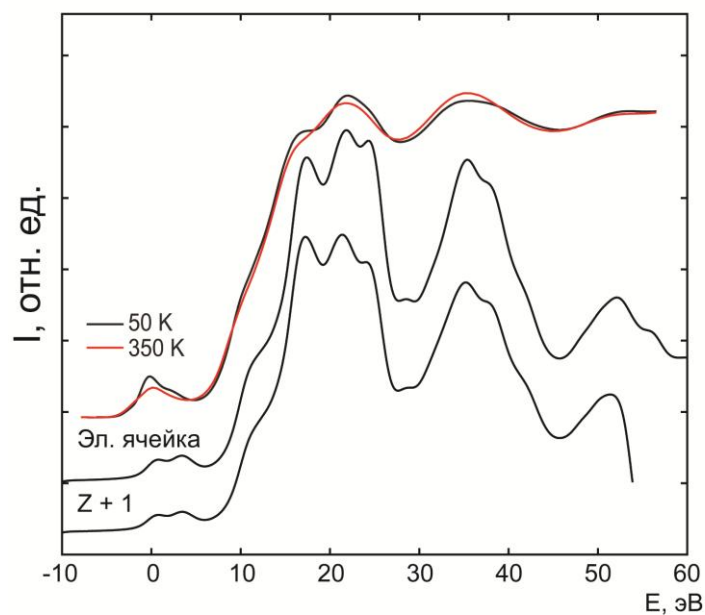


Рис. 3. Спектры рентгеновского поглощения V K-края в сравнении с экспериментальными спектрами порошкообразного образца VO_2 из работы [4]

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках научного проекта № 22-72-00145.

Литература

1. Березина, О.Я. Влияние вольфрама на температурный гистерезис сопротивления пленок диоксида ванадия / О.Я. Березина, П.П. Борисков, Е.А. Тутов, В.П. Зломанов, Н.А. Авдеев // Неорганические материалы. – 2022. – Т. 58. – № 7. – С. 750 – 756.
2. Николаев, А.В. Электронная структура металлической фазы и переход металл–изолятор в VO_2 / А.В. Николаев, Ю.Н. Кострубов, Б.В. Андреев // Физика твердого тела. – 1992. – Т. 34. – №. 10. – С. 3011 – 3018.
3. Manyakin M.D. Electronic structure of stishovite SiO_2 / M.D. Manyakin, S.I. Kurganskii // J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. – V. 1352. – P. 012032.
4. Marini, C. Probing the electronic and local structural changes across the pressure-induced insulator-to-metal transition in VO_2 / C. Marini, M. Bendele, B. Joseph, I. Kantor, M. Mitrano, O. Mathon, M. Baldini, L. Malavasi, S. Pascarelli, P. Postorino // EPL. – 2014. – V. 108. – P. 36003.

SIMULATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF VO_2

M.D. Manyakin, S.I. Kurganskii

Voronezh State University

Abstract: the electronic structure of a bulk vanadium dioxide crystal was simulated by the linearized augmented plane-wave method using the Wien2k package. The band structure, densities of states, and X-ray absorption spectrum near the V K-edge were calculated.

Keywords: vanadium dioxide, electronic structure, simulation, Wien2k, LAPW, X-ray absorption.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПЕРСПЕКТИВНОГО ТЕРМОЭЛЕКТРИКА СКУТТЕРУДИТА CoSb_3

В.А. Смирнов¹, Н.А. Борщ², Н.С. Переславцева²,
М.Д. Манякин¹, С.И. Курганский¹

¹Воронежский государственный университет

²Воронежский государственный технический университет
smirnov@office365.vsu.ru

Аннотация: обобщенное градиентное приближение для обменно-корреляционного потенциала имеет недостаток при расчете ширины запрещенной зоны полупроводников – оно систематически занижает ее величину. Приближение mVJ решает эту проблему, расширяя запрещенную зону. Помимо уточнения ширины запрещенной зоны, этот потенциал также дает существенное уменьшение величины параметра $\text{CB}_2\text{-CB}_\Gamma$, во многом определяющего термоэлектрические свойства скуттердитов.

Ключевые слова: скуттердит, термоэлектрик, эффект Зеебека, электронная структура, зонная структура, конвергенция зон, WIEN2k.

Введение

В связи с ограниченностью углеводородного сырья, которое используется для получения электрической энергии, все большее развитие получают альтернативные источники энергии. Одним из перспективнейших направлений альтернативной энергетики является прямое преобразование тепловой энергии в электрическую, которое отличается рядом преимуществ по сравнению со стандартными методами генерации электрической энергии: простотой конструкции энергоустановок, использующих этот метод преобразования, отсутствием движущихся частей, что обеспечивает высокие надежность и продолжительность эксплуатации. Устройства и материалы, преобразующие тепловую энергию в электрическую и наоборот посредством эффекта Зеебека называют термоэлектрическими. Среди перспективных термоэлектрических материалов выделяют скуттердиты.

Термоэлектрическая добротность

Согласно А.Ф. Иоффе [1], коэффициент полезного действия η термоэлектрического генератора можно рассчитать по формуле:

$$\eta = \frac{T_1 - T_0}{T_1} \times \frac{M - 1}{M + \frac{T_0}{T_1}}. \quad (1)$$

Здесь T_1 – температура горячего конца установки, T_0 – температура холодного конца установки, M – оптимальное отношение сопротивления нагрузки к внутреннему сопротивлению нагревательного элемента.

Обозначим среднюю температуру генератора как T

$$T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{T_1 + T_0}{2}. \quad (2)$$

Тогда для M справедливо выражение:

$$M = \left(\frac{R}{r}\right)_{opt} = \sqrt{1 + Z \times T}, \quad (3)$$

где ZT – безразмерная термоэлектрическая добротность, зависящая исключительно от рода материала, используемого для изготовления генератора. Эту физическую величину рассчитывают по формуле:

$$ZT = \frac{\sigma S^2}{\kappa} T. \quad (4)$$

В представленной выше формуле σ – это удельная электропроводность вещества, κ – его теплопроводность, S – коэффициент Зеебека. При этом теплопроводность вещества равна сумме его решеточной и электронной теплопроводности:

$$\kappa = \kappa_L + \kappa_e, \quad (5)$$

а коэффициент Зеебека определяется, как отношение сгенерированной термо-ЭДС к разности температур, вызвавшей этот эффект:

$$S \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dE}{dT}. \quad (6)$$

Тогда увеличение произведения ZT повлечет за собой увеличение M и, как следствие, увеличение η . Таким образом, исходя из необходимости отыскания материала, который обеспечит термоэлектрическому генератору высокий коэффициент полезного действия, основная задача исследователей в рамках данной тематики сводится к отысканию и синтезу материалов с наиболее высокой термоэлектрической добротностью.

Скуттерудиты. Кристаллическая структура, тепло- и электропроводность

Скуттерудиты — группа перспективных термоэлектриков со структурой типа CoAs_3 . Среди скуттерудитов выделяется подгруппа материалов, основанных на CoSb_3 – группа, включающая сам CoSb_3 и материалы с общей формулой A_xCoSb_3 , где A – это щелочной, щелочноземельный или редкоземельный металл, а x – число, принадлежащее отрезку от 0 до 0.25. Дополнительные атомы металлов сорта A заполняют икосаэдрические пустоты, существующие в кристаллической решетке CoSb_3 . Эти атомы поглощают энергию тепловых колебаний кристаллической решетки, уменьшая тем самым теплопроводность материала κ в формуле (3). При этом электроны проводимости этих дополнительных атомов металла участвуют в электропроводности, увеличивая электрическую проводимость σ в (3) без уменьшения коэффициента Зеебека. В итоге за-

полнение икосаэдрических пустот решетки увеличивает термоэлектрическую добротность Z за счёт сразу двух механизмов.

CoSb_3 – это соединение со структурой типа CoAs_3 , то есть со структурой скуттерудита, кристаллизующееся в кубической сингонии, в пространственной группе $\text{Im}\bar{3}$ (рис. 1). Кристаллическую структуру скуттерудита можно представить как совокупность расположенных под углом друг к другу октаэдров, в вершинах которых находятся атомы Sb, а в центре – атомы Co. В вершинах элементарного куба и в его центре находятся икосаэдрические пустоты, сформированные атомами сурьмы. Эти пустые пространства могут быть полностью или частично заполнены различными атомами, такими как K, Sr и другие, для получения родственного семейства соединений, называемых заполненными скуттерудитами. Заметим, что кристаллическая структура другого класса перспективных термоэлектриков – кремниевых клатратов – также может быть представлена в виде совокупности незаполненных [2] и заполненных атомами металлов [3] кремниевых сфероидов.

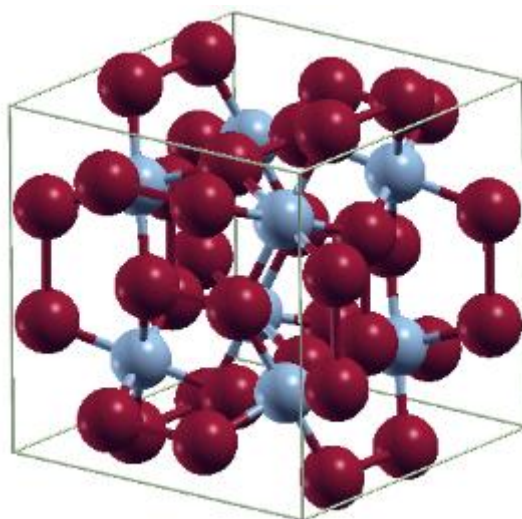


Рис. 1. Атомная структура незаполненного скуттерудита (коричневые шарики – атомы Sb, серые – атомы Co)

Заполненный скуттерудит представляет собой тристибид (антимонид) кобальта, икосаэдрические пустоты которого заполнены атомами, называемыми атомами-наполнителями. Молекулярная формула такого материала в общем виде будет записана следующим образом: R_xCoSb_3 , где R – атом щелочного, щелочноземельного, либо редкоземельного металла, а x – вещественное число, такое, что $x \in [0; 0.25]$. В качестве атома-наполнителя R в экспериментальных исследованиях и расчетах часто используют Yb, Y, K, Li, Ba и т.д.

Повышение электропроводности σ и добротности ZT при заполнении пустот в скуттерудитах описывается в рамках концепции эффективной конвергенции энергетических зон [4]. Необходимым условием существования конвергенции зон [4] является наличие помимо собственно дна зоны проводимости нескольких минимумов нижней по энергии зоны. Соответственно, чем ниже по

энергии дополнительные минимумы и чем их больше, тем выше электропроводность σ и термоэлектрическая добротность ZT материала.

Метод расчета

Вычисления проведены в рамках теории функционала плотности DFT с помощью программного пакета WIEN2k [5] с использованием обменно-корреляционного потенциала в обобщенном градиентном приближении и так называемом приближении mBJ [6]. Применялся полнопотенциальный метод линейаризованных присоединенных плоских волн без использования muffin-tin приближения, что особенно важно для полупроводников [7].

Результаты и их обсуждение

На рис. 2(a) изображена зонная структура CoSb_3 в диапазоне энергий от -1 до 1 эВ относительно энергии Ферми, полученная в приближении GGA. Как видно из этого рисунка, помимо дна зоны проводимости, находящегося в точке Γ , имеются минимумы (долины), расположенные на двух высокосимметричных направлениях Γ -H и Γ -N зоны Бриллюэна. С учетом симметрии, на одну зону Бриллюэна приходится 6 направлений Γ -H и 12 направлений Γ -N. Таким образом, всего на одну зону Бриллюэна приходится 18 дополнительных минимумов (долин). Энергетический уровень более низкого по энергии из этих минимумов обозначен как CB_2 . Энергетический уровень дна зоны проводимости обозначен как CB_Γ .

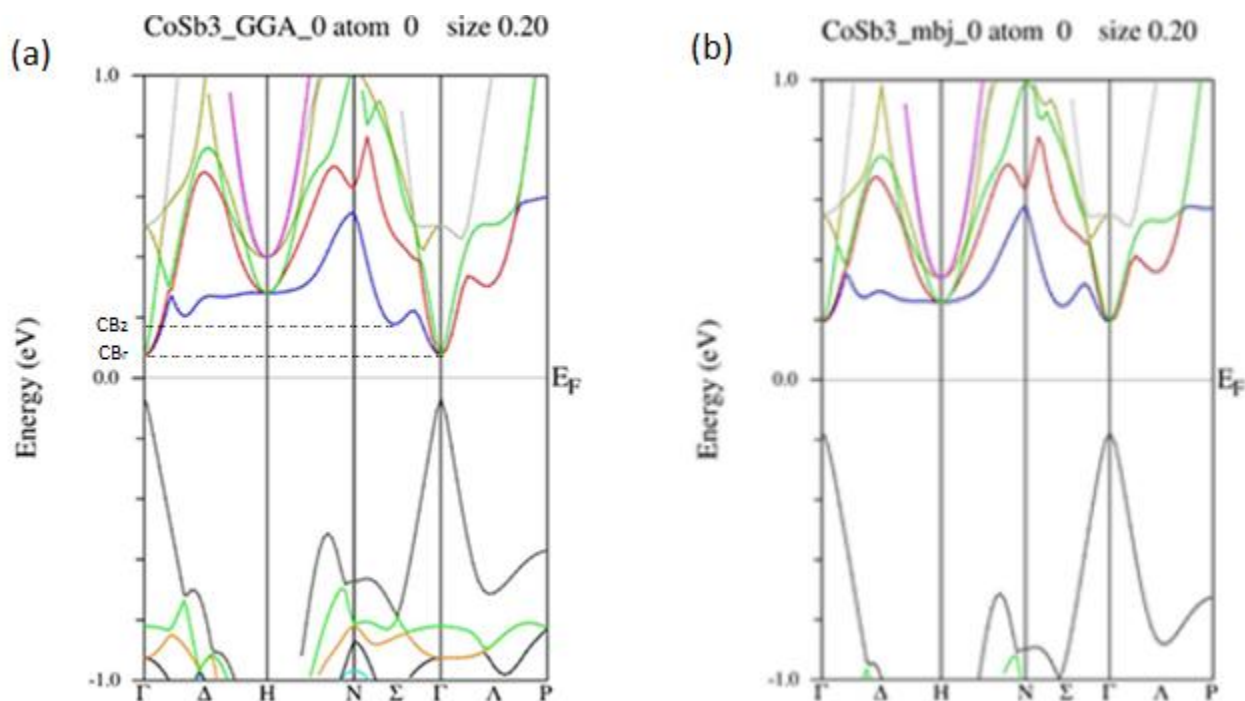


Рис. 2. Зонная структура CoSb_3 в диапазоне энергий от -1 до 1 эВ относительно энергии Ферми при расчете с (а) GGA потенциалом и (б) mBJ потенциалом

На рис. 2(б) изображена зонная структура CoSb_3 в диапазоне энергий от -1 до 1 эВ относительно энергии Ферми, полученная в приближении mBJ. Как видно из этого рисунка, использование потенциала mBJ не привело к качественным изменениям в зонной структуре. CoSb_3 по-прежнему остался прямозонным полупроводником с локализацией экстремумов в центре Γ зоны Бриллюэна. Также можно видеть дополнительные минимумы зоны проводимости, расположенные в тех же точках, что и при использовании потенциала в приближении GGA.

В таблице приведены основные энергетические параметры зонной структуры – ширина запрещенной зоны E_g и энергетический зазор между дном зоны проводимости и наиболее низким дополнительным минимумом зоны проводимости $\text{CB}_2\text{-CB}_\Gamma$, рассчитанные в двух указанных выше приближениях для потенциала. Для сравнения приведены результаты из работы [4], полученные в приближении GGA.

Энергетические зазоры в зонной структуре CoSb_3 (eV)

Метод расчета	E_g	$\text{CB}_2\text{-CB}_\Gamma$
GGA	0,143	0,102
mBJ	0,372	0,053
GGA [4]	0,163	0,089

Значения, полученные нами в приближении GGA, сопоставимы с результатами, полученными в [4] в том же приближении. Отклонение же в значениях может быть вызвано рядом причин. Наиболее очевидными причинами является использование данных о параметрах кристаллической структуры (постоянной решетки и координатах атомов Sb) с разных XRD карт – известно, что расчеты скаттерудитов крайне чувствительны к данным величинам.

Благодаря существованию дополнительных минимумов в зоне проводимости, плотность электронных состояний в этой зоне значительно увеличивается. Увеличивается она тем больше, чем больше количество наблюдаемых минимумов, и чем меньше разность между энергетическим уровнем этого минимума CB_2 и энергией дна зоны проводимости CB_Γ . Повышение плотности электронных состояний в зоне проводимости приводит к увеличению электрической проводимости, вследствие чего увеличивается термоэлектрическая добротность ZT материала.

Как видно из данных таблицы, использование потенциала mBJ ожидаемо привело к заметному увеличению ширины запрещенной зоны – это одна из основных особенностей mBJ приближения. Кроме того, рассчитанная в приближении mBJ величина энергетического зазора $\text{CB}_2\text{-CB}_\Gamma$ оказалась существенно меньше, чем при расчете методом GGA. Другими словами использование приближения GGA приводит к занижению термоэлектрической добротности ZT материала.

Литература

1. Ioffe A.F. Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling / A.F. Ioffe. – London Infosearch limited, 1957. – P. 36-40.
2. Курганский С.И., Борщ Н.А. Геометрическая структура и спектральные характеристики электронных состояний кремниевых наночастиц // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38, № 5. – С. 580-584.
3. Борщ Н.А., Переславцева Н.С., Курганский С.И. Пространственная структура и электронный спектр кластеров TiSi_n^- ($n = 6 - 18$) // Журнал физической химии. – 2014. – Т. 88, № 10. – С. 1523-1529.
4. Hanus R., Guo R., Tang Y., Li G, Snyder G.J., Zeier W.G. A chemical understanding of the band convergence in thermoelectric CoSb_3 skutterudites: influence of electron population, local thermal expansion and bonding interactions / Hanus R. // Chemistry of Materials – 2017. – V. 29. – P. 1156-1164.
5. Blaha P., Schwarz K., Tran F., Laskowski R., Madsen G.K.H., Marks L.D. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. P. 074101.
6. Becke A.D., Johnson E.R. A simple effective potential for exchange // The journal of chemical physics. – 2006. – V 124.
7. Farberovich O.V., Kurganskii S.I., Domashevskaya E.P. Problems of the OPW method. II. Calculation of the band structure of ZnS and CdS // Physica status solidi (b). – 1980. – V. 97, N 2. – P. 631-640.

MODELING OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF A PROMISING SCUTTERUDITE CoSb_3

V.A. Smirnov¹, N.A. Borshch², N.S. Pereslavitseva²,
M.D. Manyakin¹, S.I. Kurganskii¹

¹Voronezh State University

²Voronezh State Technical University

Abstract: the generalized gradient approximation for the exchange-correlation potential has a disadvantage when calculating the band gap of semiconductors – it systematically underestimates its value. The mBJ approximation solves this problem by expanding the band gap. In addition to clarifying the band gap width this potential also gives a significant decrease in the value of the $\text{CB}_2\text{-CB}_\Gamma$ parameter which largely determines the thermoelectric properties of skutterudites.

Keywords: skutterudite, thermoelectric, Seebeck effect, electronic structure, band structure, convergence of bands, WIEN2k.

МОДЕЛИРОВАНИЕ $L_{2,3}$ СПЕКТРА РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ КРЕМНИЯ В α - SiO_2 С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА QUANTUM ESPRESSO

Р.В. Волвенков, О.И. Дубровский

Воронежский государственный университет
dubrovskiy@phys.vsu.ru

Аннотация: с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO выполнен расчет $L_{2,3}$ XANES спектра кремния в α -кварце. Проведено сравнение с соответствующими экспериментальными результатами.

Ключевые слова: диоксид кремния, электронная структура, плотность электронных состояний, программный пакет Quantum ESPRESSO, спектр XANES.

В микроэлектронике диоксид кремния является одним из основных материалов, и широкое использование SiO_2 делает этот материал крайне важным для текущих экспериментальных и теоретических исследований. Несмотря на то, что электронная структура этого соединения достаточно интенсивно изучалась и изучается как экспериментально, так и теоретически, некоторые ее особенности остаются не вполне ясными, так что подобные исследования не потеряли своей актуальности. Одним из экспериментальных методов, позволяющих получать информацию об электронном строении материала, является метод рентгеновской спектроскопии ближней тонкой структуры края поглощения (XANES). С его помощью можно экспериментально определить распределение локальных парциальных плотностей свободных электронных состояний в зоне проводимости. Естественно, для анализа и надёжной интерпретации имеющихся экспериментальных результатов необходимо проведение компьютерных расчетов исследуемых спектров «из первых принципов».

В данной работе для моделирования XANES-спектров использовался программный пакет Quantum ESPRESSO [1]. С его помощью был выполнен соответствующий расчет для наиболее близкой к природному оксиду модификации диоксида кремния – α -кварца (α - SiO_2). Необходимые для расчёта параметры кристаллической структуры α - SiO_2 были взяты из базы данных проекта МИНКРИСТ [2]. Элементарная ячейка α - SiO_2 приведена на рис. 1, она содержит 3 атома Si и 6 атомов O. В работе был рассчитан XANES спектр $L_{2,3}$ -края для кремния в α -кварце. Как известно, в дипольном приближении XANES $L_{2,3}$ -спектр отражает распределение локальной парциальной плотности состояний s - и d -симметрии в зоне проводимости и представляет собой наложение двух спектров – L_3 и L_2 , соответствующих переходам из $2p_{3/2}$ и $2p_{1/2}$ состояний, соответственно. При этом L_2 смещен относительно спектра L_3 в направлении более высоких энергий на значение энергии спин-орбитального расщепления Si $2p$ -основного уровня. Кроме того, из-за двойного заполнения $2p_{3/2}$ уровня по сравнению с уровнем $2p_{1/2}$, соотношение интенсивностей L_3 и L_2 спектра должно

быть 2:1. Отметим, что для расчета XANES-спектра использовалось приближение «остовой дырки», описанное в [3]. При этом вычисления проводились для суперъячейки размера $2 \times 2 \times 2$, один из атомов кремния в которой содержал «остовную дырку» на уровне $2p$.

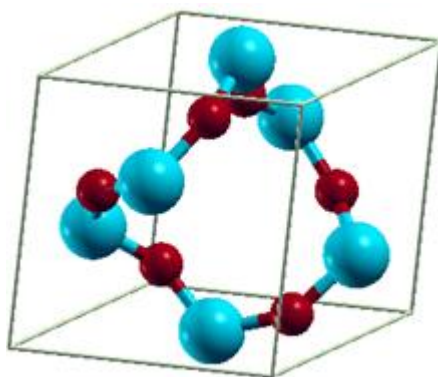


Рис. 1. Элементарная ячейка α - SiO_2 (синим цветом обозначены атомы Si, красным – атомы O)

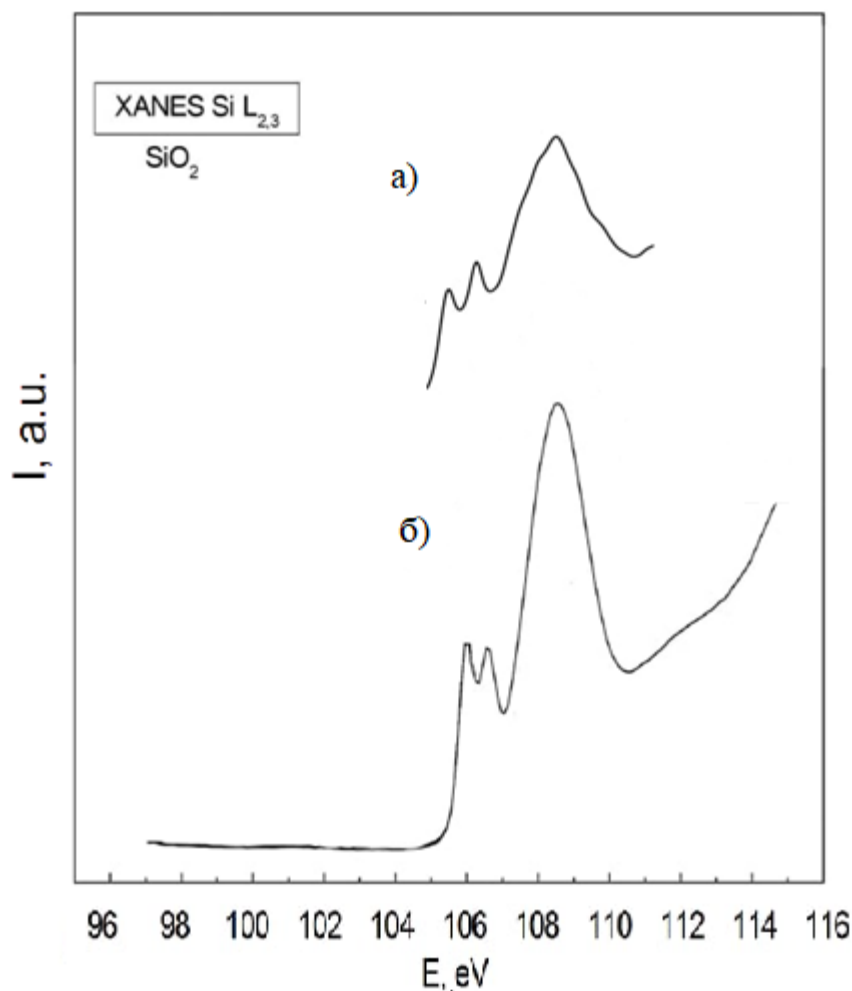


Рис. 2. XANES спектр $L_{2,3}$ -края поглощения кремния в α - SiO_2 :
а) наш расчет; б) эксперимент [4]

Рассчитанный спектр представлен на рис. 2, он совмещен с соответствующим экспериментальным спектром [4], также представленным на том же

рисунке, по положению главного максимума. Спектр имеет характерную структуру, состоящую из выраженного главного максимума и двух дополнительных в более низкоэнергетической области. Можно отметить достаточно хорошее согласие между результатами нашего расчета и экспериментальным спектром, что свидетельствует о высокой достоверности результатов моделирования, предпринятого в данной работе.

Литература

1. Gianozzi P. Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini [etc.] // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2009. – Vol. 21, № 39. – P. 395502 (19).
2. <http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/index.php>
3. Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры диоксида олова / С.И. Курганский, М.Д. Манякин, О.И. Дубровский [и др.] // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, Вып. 9. – С. 1690-1695.
4. Kurganskii S.I. Natural surface oxidation consideration in first principles modeling of the X-ray absorption near edge fine structure of silicon / S.I. Kurganskii, O.A. Dezhina, M.D. Manyakin, E.V. Parinova, D.A. Koyuda, S.Yu. Turishchev // Results in Physics. – 2020. – P.1-6.

MODELING OF THE $L_{2,3}$ X-RAY ABSORPTION SPECTRUM OF SILICON IN THE α -SiO₂ USING THE SOFTWARE PACKAGE QUANTUM ESPRESSO

R.V. Volvenkov, O.I. Dubrovskii

Voronezh State University

Abstract: the $L_{2,3}$ XANES spectrum of silicon in α -quartz has been calculated using the Quantum ESPRESSO software package. A comparison is made with the corresponding experimental results.

Keywords: silicon dioxide, electronic structure, density of electronic states, software package Quantum ESPRESSO, XANES spectrum.

ПАРАМЕТР ПОРЯДКА И ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИМПУЛЬСА В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ В УСЛОВИЯХ НАКАЧКИ

Н.Н. Конобеева, В.В. Бумагин, М.Б. Белоненко

Волгоградский государственный университет
yana_nn@volsu.ru

Аннотация: в работе проводится физико-математическое моделирование динамики трехмерного предельно короткого оптического импульса в среде, испытывающей фазовый переход, и содержащей углеродные нанотрубки. Параметр порядка рассматривается в двух моделях: скалярной и векторной. Проведено сравнение их влияния на распространение импульса в условиях накачки внешней электромагнитной волной.

Ключевые слова: параметр порядка, углеродные нанотрубки, электромагнитный импульс.

Общий подход к описанию фазовых переходов, в котором вводится понятие параметра порядка предложен Л.Д. Ландау [1]. Под параметром порядка понимается величина, отличная от нуля при температуре меньше критической, и стремящаяся к нулю при температуре, превышающей критическую. Как известно, параметр порядка – это величина, которая характеризует наличие в материальной среде упорядочения, возникающего при определенных физических условиях. В анизотропном случае параметр порядка может быть векторным, а также многокомпонентным и, вообще говоря, пространственно-неоднородным. В качестве параметра порядка в зависимости от среды могут выступать следующие величины: спонтанная намагниченность (векторный параметр порядка) – у ферромагнетика, волновая функция куперовских пар (комплексный параметр порядка) – у сверхпроводника. Основным параметром порядка, используемым для характеристики сегнетоэлектрических свойств, это спонтанная поляризация. Она и будет выбрана в качестве параметра, характеризующего фазовый переход в данной работе.

Целью настоящего исследования является изучение возможности использования электромагнитных импульсов для определения параметра порядка, как скалярного, так и векторного, в средах с углеродными нанотрубками [2]. При этом важно обеспечить стабильное распространение импульсов, что может быть достигнуто путем введения в систему накачки внешним полем [3], которая выбирается в следующем виде:

$$\Gamma(r) = Q_{\Gamma} \cdot \exp\left(-\frac{r^6}{l_{\Gamma}^6}\right). \quad (1)$$

Здесь l_{Γ} – ширина усиливающей среды в перпендикулярном распространению поля направлению, Q_{Γ} – амплитуда усиливающего поля, r – поперечная координата ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$).

Амплитуда усиления выбиралась согласно результатам ранее проведенных расчетов без учета параметра порядка [3].

Динамика импульса описывается с помощью уравнений Максвелла, дополненных уравнением движения на параметр порядка [4]. При этом плотность функционала свободной энергии Φ выбирается в стандартном виде:

$$\Phi = \Phi_0 + a \cdot \mathbf{P}^2 + b \cdot \mathbf{P}^4 - \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}, \quad (2)$$

где \mathbf{E} – вектор напряженности электрического поля, \mathbf{P} – параметр порядка, который в общем случае может быть и векторным, a и b – коэффициенты разложения Φ по степеням P .

Отметим, что в работе мы используем переход к цилиндрической системе координат, а также учитываем симметричность поля импульса относительно оси z [5]. Поэтому производная по углу не рассматривается.

Эволюция предельно короткого оптического импульса в среде с полупроводниковыми углеродными нанотрубками для двух моделей параметра порядка представлена на рис. 1.

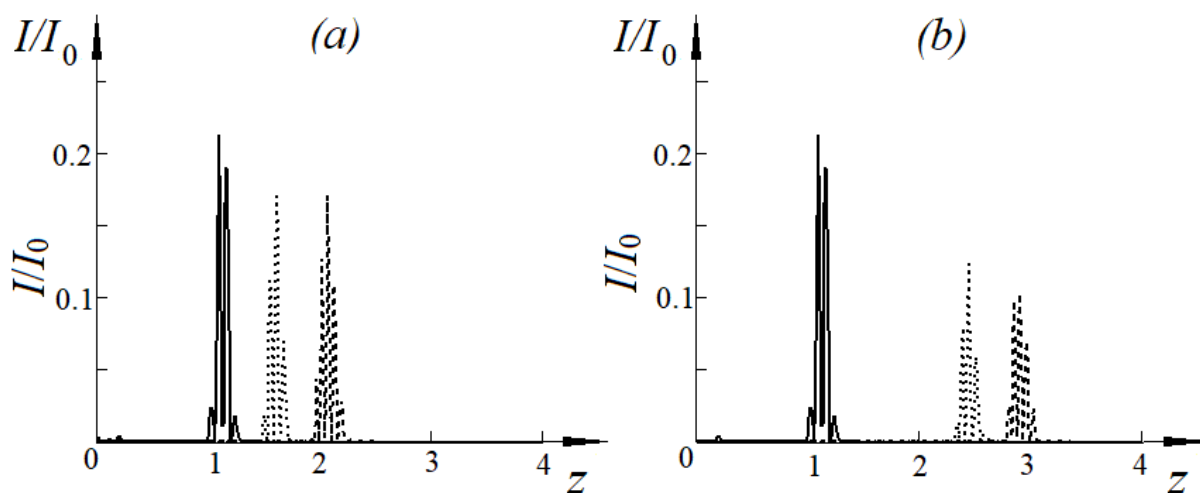


Рис. 1. Эволюция интенсивности электрического поля импульса от продольной координаты ($r=0$): (a) – скалярный параметр порядка; (b) – векторный параметр порядка. Сплошная кривая соответствует $t=3$ ед., точечная – $t=6$ ед., пунктирная – $t=9$ ед. I_0 – максимум интенсивности при $t=0$. Единица по оси z соответствует 10^{-5} м

Влияние типа параметра порядка (скалярный или векторный) на форму предельно короткого оптического импульса показана на рис. 2.

Рисунки 1 и 2 позволяют заключить, что в случае скалярного параметра порядка импульс распространяется с сохранением своей амплитуды. Для векторного же – интенсивность импульса с течением времени падает. При этом мы отмечаем, что в среде со скалярным параметром порядка импульс распространяется медленнее, чем с векторным.

Проведенное исследование показало, что энергетические и пространственные характеристики электромагнитного импульса позволяют определить тип и величину параметра порядка.

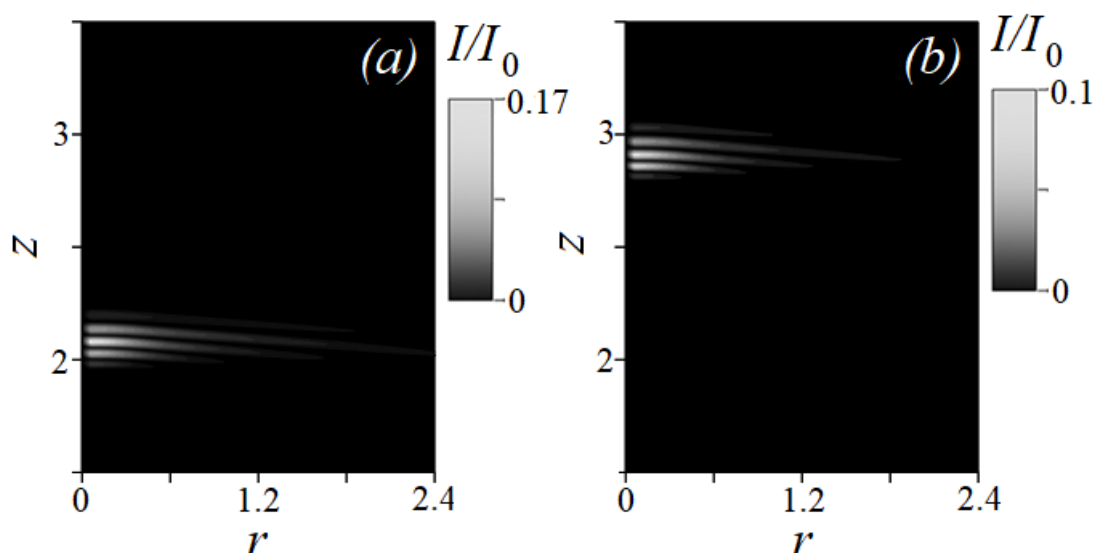


Рис. 2. Зависимость интенсивности электрического поля импульса от координат при $t=9$ ед.: (a) – скалярный параметр порядка; (b) – векторный параметр порядка. I_0 – максимум интенсивности при $t=0$. Единицы по осям r и z соответствуют 10^{-5} м

Конобеева Н.Н. и Белоненко М.Б. выражают благодарность Министерству науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания за поддержку численного моделирования (проект № 0633-2020-0003).

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Физматлит, 2002. 616 с.
2. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки, Успехи физических наук. 1997, Т. 167, № 9, С. 945-972.
3. Konobeeva N.N., Fedorov E.G., Rosanov N.N., Zhukov A.V., Bouffanais R., Belonenko M.B. Stabilization of ultrashort pulses by external pumping in an array of carbon nanotubes subject to piezoelectric effects. Journal of Applied Physics. 2019. V. 126. P. 203103.
4. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. 381 с.
5. Zhukov A.V., Bouffanais R., Fedorov E.G., Belonenko M.B. Three-dimensional electromagnetic breathers in carbon nanotubes with the field inhomogeneity along their axes. J Journal of Applied Physics. 2013. V. 114. P. 143106.

AN ORDER PARAMETER AND DYNAMICS OF ELECTROMGNETIC PULSES IN CARBON NANOTUBES UNDER PUMP CONDITIONS

N.N. Konobeeva, V.V. Bumagin, M.B. Belonenko

Volgograd State University

Abstract: in this work, physical and mathematical modeling of the dynamics of a three-dimensional extremely short optical pulse in a medium undergoing a phase transition and containing carbon nanotubes is carried out. The order parameter is considered in two models: scalar and vector. Their effect on pulse propagation under conditions of pumping by an external electromagnetic wave is compared.

Keywords: order parameter, carbon nanotubes, electromagnetic pulse.

О СИММЕТРИЧНОСТИ СИСТЕМ ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ

А.Г. Буховец¹, Т.Я. Бирючинская¹, А.К. Горностаев²

¹Воронежский государственный аграрный университет имени Императора Петра I
abuhovets@mail.ru

²Российский технологический университет (МИРЭА), Москва

Аннотация: рассматриваются модели систем, представленных фрактальными множествами. Показывается, что состояния таких систем, соответствующие точкам фрактала, обладают большим числом симметрий по сравнению с другими точками фазового пространства. Аналитически данный факт соответствует наличию доминирующего элемента среди всех элементов, генерируемых рандомизированными системами итерированных функций.

Ключевые слова: рандомизированные системы итерированных функций, фрактальные множества, замкнутые системы, число симметрий состояния системы.

Введение

Будем рассматривать модель системы, внешние границы которой задаются некоторым множеством точек $Z = \{Z_j\}$, а множество внутренних состояний определяется действием рандомизированной системы итерированных функций (РСИФ) [1, 2]. Система итерированных функций задаётся уравнениями $X_n = \xi X_{n-1} + (1 - \xi)Z_j^{(n-1)}$, где $Z_j^{(n-1)} \in Z$, ($j = 1, 2, \dots, K; n = 1, 2, \dots, N$), $X_n \in R^m$, $0 < \xi < 1$ – параметр системы. Такой вариант реализации РСИФ будем обозначать F1. Другой вариант, обозначаемый F2, будет заключаться в построении множества кортежей $A_\xi^K = \{A_i\}$, где $A_i = (a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{iK})$, при этом координаты a_{ij} получаются путём случайного отнесения членов абсолютно сходящегося ряда $\mu \sum \xi^n = 1$ (μ – нормирующий множитель) в ячейки, соответствующие координатам кортежа. Сформированная в результате матрица $A = \|a_{ij}\|_{N \times K}$ позволяет получить множество состояний системы $X = AZ$. Результаты выполнения процедур F1 и F2, являющиеся фракталами [4,5], можно видеть в [1, 4].

Геометрическая интерпретация задачи

Рассмотрим следующую задачу, позволяющей дать геометрическую интерпретацию процедур построения фрактальных множеств. Стержень единичной длины – отрезок $[0; 1]$, обозначим его как I, случайным образом делится на три части. Разбиением отрезка I будем называть его представление в виде суммы других меньших отрезков. В каких случаях из полученных разбиений можно будет составить треугольник?

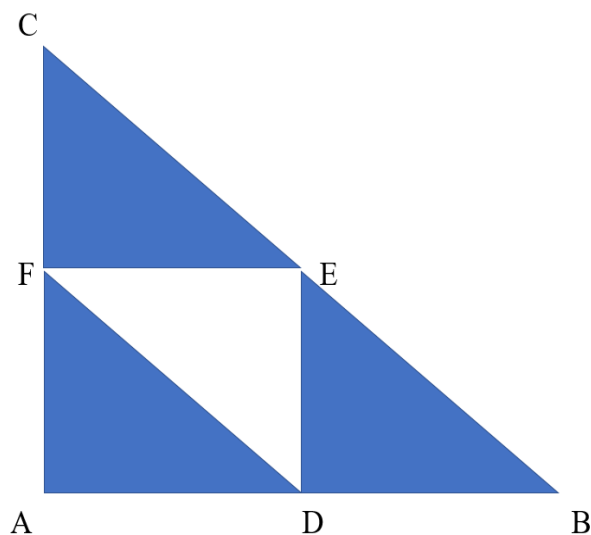
Для геометрического решения этой задачи введём три неотрицательных величины: $x > 0$; $y > 0$ и дополнительную $z = 1 - x - y$. Очевидно, что будет выполняться условие $x + y + z = 1$. Величины x, y, z представляют длины по-

лучившихся при делении отрезков. Для того, чтобы из этих отрезков можно было составить треугольник, необходимо и достаточно выполнение следующих условий (неравенства треугольника)

$$\begin{cases} x + y > z, \\ x + z > y, \\ y + z > x, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x < 1/2, \\ y < 1/2, \\ x + y > \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (1)$$

Геометрически это выглядит следующим образом. Координаты точек треугольника ABC соответствуют длинам отрезков, полученных при делении единичного отрезка, причём в $\triangle DEF$ (см. рисунок) неравенства (1) выполняются, в других оставшихся фигурах – нарушаются, т.е.

$$\begin{cases} z > x + y & (\triangle ADF), \\ y > x + z & (\triangle ECF), \\ x > y + z & (\triangle DBE). \end{cases} \quad (2)$$



$\triangle DEF$ – графическое решение систем (1)

Таким образом, в точках $\triangle DEF$ выполняются требования условий (1). В то время как в $\triangle ADF$, $\triangle ECF$, $\triangle DBE$ условия (1) нарушены, т.е. выполняется хотя бы одно из неравенств (2). Причём неравенство $z > x + y$ выполняется в $\triangle ADF$, $y > x + z$ в $\triangle ECF$, $x > y + z$ в $\triangle DBE$. Эти неравенства имеет место почти для всех точек указанных треугольников, а случаи равенства, относящиеся к граничным точкам, имеющих нулевую меру, не будем принимать во внимание. Фактически это означает, что в каждом из вновь полученных треугольников $\triangle ADF$, $\triangle ECF$, $\triangle DBE$ имеется в наличии доминирующая величина среди переменных x, y и z , т.е. величина, превышающая сумму двух других. В дальнейшем процесс выделения сторон треугольников путём разбиения доминирующего отрезка можно продолжить, практически неограниченно.

Задание отношений эквивалентности в фрактальных множествах

Рассмотрим задание отношений эквивалентности в фрактальных множествах, генерируемых РСИФ (на примере треугольника Серпинского). Оценим полученные результаты с топологической точки зрения. Для этого введём следующие отношения эквивалентности на множестве точек ΔABC . Пусть α – отношение эквивалентности, соответствующие точкам разбиения отрезка $[0; 1]$, из которых можно составить треугольник. Используя терминологию теории графов [8], можно сказать, что эти точки образуют простой цикл. Эти множества можно рассматривать как гомеоморфный образ простой замкнутой кривой. Точки, образующие эти множества, при построении треугольника Серпинского итерационным методом удаляются из дальнейшего рассмотрения. На рисунке эти точки отмечены белым цветом. Можно показать, что суммарная площадь всех выброшенных в результате выполнения процедуры треугольников равняется площади исходного треугольника ΔABC . (Границы, имеющие нулевую меру, как было отмечено ранее, во внимание не принимаются). Заметим также, что среди сторон этих треугольников нет доминирующих (преобладающих) элементов. Для этого достаточно сравнить соотношения (1) и (2). Другие точки, оставшиеся после удаления точек множества α будут соответствовать отношению β -эквивалентности. Эти точки образуют предфрактал треугольника/салфетки Серпинского.

Подсчёт числа вариаций состояний системы

Множества, отвечающие классам α и β отношениям эквивалентности, образуют дизъюнктивное покрытие всего множества точек ΔABC . Основное отличие объектов от β отношений эквивалентности заключается в следующем. Подсчитаем число способов, которыми можно упорядочить получившиеся при делении I отрезки x, y и z . Очевидно, что это число будет равняться числу перестановок из 3, т.е. $3! = 6$. Однако, в силу цикличности множеств α -эквивалентности, сочетания xuz, uxz, zxu , полученные путём циклических перестановок, не будут считаться различными. Тогда, множества α -эквивалентности будут иметь только два способа упорядочения: xuz и xzy – в зависимости от выбранного направления обхода контура. (Заметим, что если в группу преобразований ввести ещё операцию изменения направления обхода контура, то число симметрий уменьшится вдвое.)

Для объектов класса α -эквивалентности число способов упорядочивания составит 6, поскольку эти множества не являются циклически замкнутыми, в отличие от множеств β -эквивалентности. Будем упорядочивать эти сочетания по величине отрезков, их составляющих. Так, для точек ΔADF , где доминирующим элементом является z , упорядочения будут zxy и zyx , для ΔECF – uxz и uzx , ΔDBE – xuz и xzy . Как видим, поскольку объекты α -эквивалентности соответствуют незамкнутому пути в графе, т.е. цепи [8], их упорядочения представлены множеством линейных перестановок.

Точки -эквивалентности можно получить с помощью процедуры РСИФ при задании определённых значений управляющих параметров процедур F1 и F2. Было показано [3], что множество этих точек является не связным (вполне несвязным), и на этом множестве, если его перечислять с помощью процедуры F2, можно ввести ультраметрику, т.е. построить ультраметрическое пространство.

Можно считать, что точки -эквивалентности обладают наибольшим значением числа диссиметрии, что, как было показано [9] может служить критерием, а точнее – необходимым условием системности заданного множества. С точки зрения этого принципа можно полагать, что совокупность этих точек соответствует состояниям внешней системы. Собственно, эти точки и образуют фрактальное множество. При обобщении этой процедуры на случай $K > 3$, среди отрезков, соответствующих делениям этими точками единичного отрезка I, как было геометрически продемонстрировано выше, имеется доминирующий и поэтому из этих отрезков нельзя составить замкнутый многоугольник. Топологически полученная из этих отрезков фигура будет гомеоморфна некоторому интервалу, а, следовательно, и прямой [7]. (Напомним ещё раз, что границы, имеющие нулевую меру, как было отмечено ранее, во внимание не принимаются). Для множества с -эквивалентности полученные при делении части единичного отрезка образуют в общем случае замкнутый многоугольник.

Заключение

Среди всех возможных состояний замкнутой внешней системы имеются классы состояний, которые обладают большим числом вариаций/диссиметрий, чем другие состояния. Очевидно, что система будет чаще пребывать в таких состояниях, нежели в других возможных. Именно эти состояния системы и будут наблюдаться в проводимых экспериментах, поскольку эти состояния соответствуют, как было показано, фрактальным структурам.

Ещё одно замечание. Как известно, мера Лебега фрактального множества равняется нулю [6]. Поэтому связывать вероятность пребывания системы в данной точке фрактала с мерой было бы некорректно. Но для оценки вероятности пребывания системы в заданном объёме фазового пространства предлагается использовать любую фрактальную размерность – Хаусдорфа-Безековича или Реньи [5], нормированную соответствующим образом. Однако эти предположения требуют отдельного дальнейшего обоснования.

Литература

1. Barnsley M.F. Superfractals / M.F. Barnsley – Cambridge: Cambridge University Press, 2006. – 464 p.
2. Bukhovets, A. G. Modeling of fractal data structures / A. G. Bukhovets, E. A. Bukhovets // Automation and Remote Control. – 2012. – Vol. 73. – No 2. – P. 381-385. – DOI 10.1134/S0005117912020154.
3. Bukhovets, A. G. Ultrametric properties of the attractor spaces for random iterated linear function systems / A. G. Bukhovets, P. V. Moskalev // Journal of Physics: Conference Series, Vo-

ronezh, 18–20 декабря 2017 года. – Voronezh: Institute of Physics Publishing, 2018. – P. 012028. – DOI 10.1088/1742-6596/973/1/012028.

4. Буховец, А. Г. Моделирование состояний замкнутых систем посредством рандомизированных систем итерированных функций / А. Г. Буховец, А. К. Горностаев // Физико-математическое моделирование систем: Материалы XXI Международного семинара, Воронеж, 30 ноября 2019 года. – Воронеж: Воронежский государственный технический университет, 2020. – С. 27-30. – EDN FVMCSE.

5. Буховец, А. Г. Моделирование структур данных в задачах классификации: математические модели классификационных задач – теория и практика / А. Г. Буховец. – Saarbrücken : Palmarium Academic Publishing, 2012. – 247 с. – ISBN 9783659981074.

6. Буховец, А. Г. Структура аттрактора рандомизированных систем итерированных линейных функций / А. Г. Буховец, Т. Я. Бирючинская // Вестник ВГУ, Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2016. – № 2. – С. 5-10.

7. Введение в топологию: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности "Математика" / Ю. Г. Борисович, Н. М. Близняков, Я. А. Израилевич, Т. Н. Фоменко. – 2-е издание, дополненное. – Москва: Наука, 1995. – 414 с. – ISBN 5-02-014118-6. – EDN ZERCER.

8. Борзунов, С. В. Задачи по дискретной математике / С. В. Борзунов, С. Д. Кургалин. – Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2016. – 528 с. – ISBN 978-5-9775-3672-1. – EDN VJMYNB.

9. Шрейдер Ю.А. Системы и модели/ Ю.А. Шрейдер, А.А. Шаров //М.: Радио и связь, 1982. – 152 с.

ON THE SYMMETRY OF FRACTAL STRUCTURE SYSTEMS

A.G. Bukhovets¹, T.Y. Biryusinskaya¹, A.K. Gornostaev²

¹Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter I

²Russian Technological University (MIREA), Moscow

Abstract: models of systems represented by fractal sets are considered. It is shown that the states of such systems corresponding to the points of the fractal have a large number of symmetries compared to other points of the phase space. Analytically, this fact corresponds to the presence of a dominant element among all elements generated by randomized systems of iterated functions.

Keywords: randomized systems of iterated functions, fractal sets, closed systems, stable states of the system.

ОБМЕН ЭНЕРГИЕЙ МЕЖДУ МАЯТНИКАМИ В ЦЕПОЧКЕ НЕСВЯЗАННЫХ ЛИНЕЙНЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Е.Е. Гетманова

ООО “Дистанционный репетитор”, Москва
elge@mail.ru

Аннотация: в работе определены временные интервалы обмена энергией между различными парами маятников в цепочке линейных несвязанных осцилляторов. Установлено, какие осцилляторы выполняют обмен в определенных временных интервалах. Показано, как максимальная энергия, которой обладает некоторое число маятников, перемещается по цепочке, в область низких частот.

Ключевые слова: волны в системе несвязанных линейных осцилляторов, длительность интервала обмена, перемещение максимум энергии.

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

Предположения о существовании

1) волн-групп – совокупностей осцилляторов, формирующих волну в момент $t_{S, 2\pi n}$ (середина временного интервала существования ансамбля с числом волн S , включенные в волну-группу маятники имеют одинаковую фазу, энергия каждого, как элемента волны, равна сумме потенциальных энергий маятников);

2) энергетических групп – совокупности осцилляторов, которые обмениваются (получают или отдают энергию), при достижении максимального смещения (максимального значения потенциальной энергии) осцилляторы, включенные в волну-группу, переходят в следующие энергетические группы позволяют рассматривать колебания маятников не как совокупность отдельных волн ансамбля, а как единый волновой процесс, охватывающий все осцилляторы. Данное допущение возможно, поскольку спектр формирования ансамблей волн плотный и, по сути, в любой момент времени можно определить момент времени $t_{S, 2\pi n}$ для некоторого ансамбля волн.

Цель данного исследования состоит в построении модели передачи энергии в цепочке несвязанных линейных осцилляторов, как модели обмена энергией между внутренними органами человека, которые имеют кратные частоты.

Аналитические и численные результаты позволили определить временные интервалы, обмена энергией между парой низкочастотных маятников, один

из которых $5, c^{-1}, s=1$, частота второго увеличивается от $10, c^{-1}, s=2$. Установлено возникновение в данных временных интервалах определенных сопутствующих (обменных) пар маятников. Показано, что максимальная энергия любой обменной пары меняется, что визуально наблюдается как передача энергии маятникам определенной частоты.

Обмен между двумя произвольными фиксированными парами осуществляется четыре раза за время $20,5T$ периода формирования ансамблей волн. Период включает четыре временных диапазона, Образование совокупностей волн выполняется в прямом и обратном порядке одинаково в диапазонах 1) $(1-5,5)T$ и $(15,5-20)T$, 2) $(5,5-10,5)T$ и $(10,5-15,5)T$. В $(1-5,5)T$ и $(10,5-15,5)T$ в каждой энергетической группе происходит передача энергии от низкочастотного маятника к высокочастотному. При этом уменьшается число осцилляторов в группах и увеличивается их число. В диапазонах $(5,5-10,5)T$ и $(15,5-20)T$ происходит обратный процесс передачи от высокочастотных маятников к низкочастотным, увеличивается число осцилляторов в группах и уменьшается их количество.

В каждом диапазоне обмен энергией между фиксированной парой маятников имеет одинаковую длительность. Меняется направление передачи энергии. Длительности обмена (в каждом диапазоне) между парой 1) $5, c^{-1}, s=1$ и $10, c^{-1}, s=2$, составляет $1,67T$, 2) $5, c^{-1}, s=1$ и $15, c^{-1}, s=3$ – $0,83T$, 3) $5, c^{-1}, s=1$ и $20, c^{-1}, s=4$ – $0,5T$, 4) $5, c^{-1}, s=1$ и $25, c^{-1}, s=5$ – $0,33T$, 5) $5, c^{-1}, s=1$ и $30, c^{-1}, s=6$ – $0,24T$, 6) $5, c^{-1}, s=1$ и $35, c^{-1}, s=7$ – $0,18T$, 7) $5, c^{-1}, s=1$ и $40, c^{-1}, s=8$ – $0,14T$. Из приведенных данных следует, что чем меньше частота второго маятника отличается от частоты первого, тем длительнее интервал обмена.

Одновременно во временном интервале обмена энергией между парой низкочастотных осцилляторов формируются сопутствующие (дополнительные) пары высокочастотных маятников, между которыми тоже выполняется обмен (передача энергии) Чем длительнее время обмена между маятниками в первой группе, тем больше возникает сопутствующих обменных пар маятников. Обменные пары появляются только при определенных частотах осцилляторов в первой энергетической группе и не наблюдаются во временных интервалах обмена других низкочастотных маятников.

Энергия каждого в любой обменной паре маятника меняется при создании последовательного ансамбля волн, в результате изменения числа энергетических групп и число элементов в волне-группе. В результате, в фиксированном временном интервале существования некоторой пары низкочастотных элементов, где создаются обменные пары, максимум энергии связывается то с одной, то с другой парой и перемещается по цепочке, увеличивая смещение (энергию) некоторого числа осцилляторов с меньшей частотой.

На рис. 1 показан обмен энергией между парами осцилляторов, созданных в интервале $0,83T$, между моментами $3T$ (ансамбль из восьми волн) и $3,83T$ (шесть волн). В первой энергетической группе наблюдается обмен между $5,с^{-1}, s=1$ и $15,с^{-1}, s=3$ ($s=1$ передает энергию $s=3$, соответственно, учитываются и обмен между маятниками волны-группы). Подобный обмен выполняется между 1) $17,17T$ и $18T$ ($s=1$ получает энергию от $s=3$), 2) $7,17T$ и $8T$ ($s=1$ получает энергию от $s=3$), 3) $13,83T$ и $13T$ ($s=1$ передает энергию $s=3$). В момент $3T$ наблюдается одинаковое распределение энергии (рис. 1 и 2.1) для оригинальной и тождественных групп, что означает максимальную энергию группы. Одна оригинальная группа создается в моменты появления ансамблей из семи ($3,36T$) и шести ($3,83T$) волн. Образование одной энергетической группы сопровождается максимум энергии группы.

На рис. 1 показано изменение энергии осцилляторов в рассмотренном интервале. В интервале обмена энергией между данной парой низкочастотных маятников выявляется сопутствующая пара (вторая энергетическая группа) обменных маятников $20,с^{-1}, s=4$ и $35,с^{-1}, s=7$, которая существует до момента $3,36T$ (7 волн в ансамбле). После чего пара трансформируется в $20,с^{-1}, s=4$ и $30,с^{-1}, s=6$. Третья энергетическая группа включает осцилляторы 8-11, и отдает $s=11$ и $s=10$ ($3,23T$, двадцать две волны и $3,5T$, двадцать волн), приобретая $s=7$ ($3,36T$, семь волн). В результате пара включает маятники 7–9 (и маятники волн-групп). Аналогичные изменения происходят с каждой группой. Поскольку окончание интервала определяется моментом образования ансамбля из шести волн, то осцилляторы, кратные трем, переводятся (в каждой группе) в состояние максимального смещения. Энергия пары маятников с максимальной в данный момент энергией (при ансамблях числом волн 39, 38, 37, 36, 34, 33) также представлена на рис. 1 и отмечается кружками, которые возникают в определенные моменты времени.

Чем меньше маятников в энергетических группах, тем в более узкой последовательности маятников происходит увеличение энергии при росте волн в ансамбле. И далее именно такая совокупность маятников начинает последовательно увеличивать свою энергию, проявляясь в области низких частот. Чем меньше энергетических групп, тем явственнее движение сгустка энергии, поскольку данное энергетическое образование включает небольшое число маятников, и его передвижение выполняется в течение длительного временного промежутка. На рис. 2 показано, как происходит передача энергии последовательному ряду низкочастотных маятников при увеличении числа волн. Отмечены номера маятников, как составляющих оригинальные группы, так и тождественные. В общем случае, в тождественные группы включаются осцилляторы, составляющие оригинальные группы в предыдущий момент времени. Данное замечание означает, что в определенных интервалах в процессах обмена принимают участие только ограниченное число осцилляторов.

Обмен энергией между парами маятников в энергетических группах
 В первой энергетической группе выполняется обмен между первым $s = 1,5c^{-1}$ и третьим $s = 3,15c^{-1}$ маятниками. Длительность обмена $0,83T$

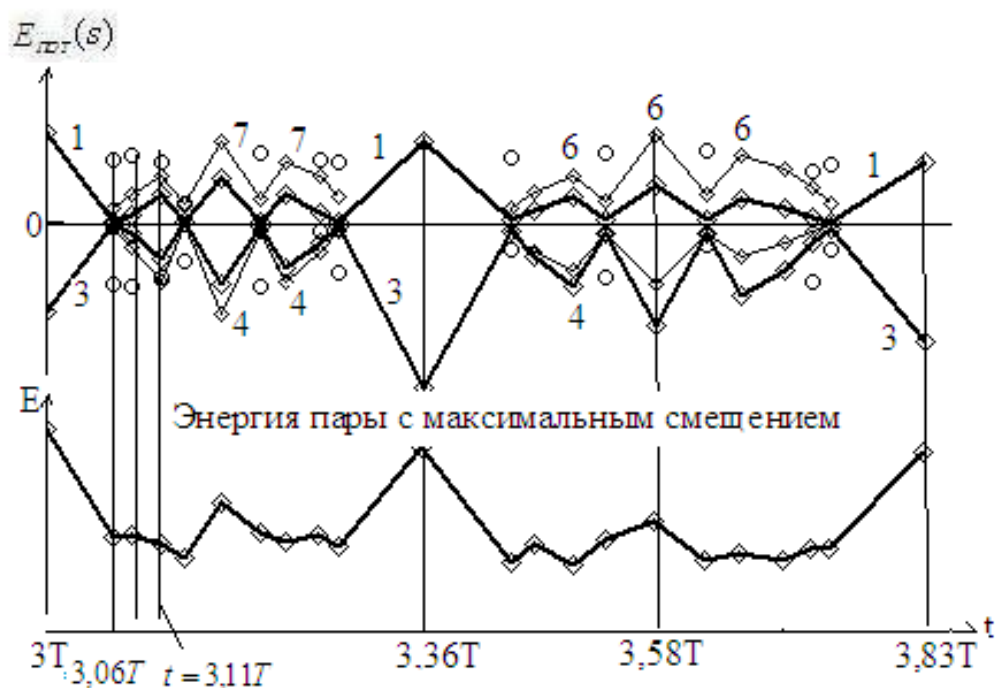


Рис. 1

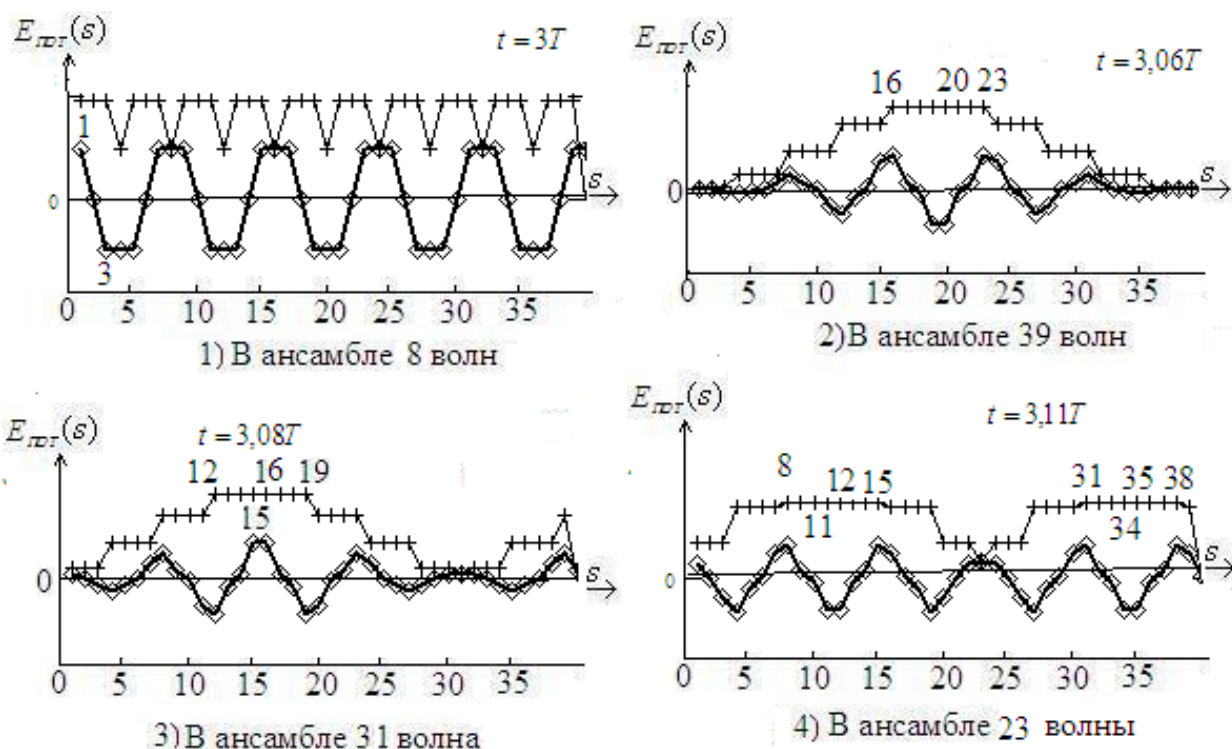


Рис. 2

Выводы

1. Обмен энергией между парой осцилляторов $5, c^{-1}$, $s = 1$ и $s \geq 2$ (первая энергетическая группа) выполняется в одинаковом временном интервале в любом временном диапазоне. При возникновении каждого последующего интервала процесс передачи энергии для $5, c^{-1}$, $s = 1$ сменяется процессом получения энергии. Чем ближе частота второго маятника к $5, c^{-1}$, $s = 1$, тем длительнее интервал обмена.

2. В интервалах обмена между фиксированном парой маятников первой энергетической группы появляются дополнительные пары высокочастотных маятников, выполняющие обмен в более коротком интервале. Данные пары и время их существования также одинаковы во всех временных диапазонах.

3. Энергия пары маятников, выполняющих обмен, меняется при последовательном формировании ансамблей волн и может достигать максимальной энергии. Максимальная энергия связывается с различными парами маятников. Переход максимума энергии от одной пары маятников к другой рассматривается как волновой процесс по передаче энергии. Осцилляторы не участвующие в процессе обмена в данном интервале, рассматривают как имеющие смещение близкое к равновесному. Таким образом, можно предположить, что в любом временном интервале в процессе передачи энергии принимает участие ограниченное число маятников.

Литература

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

FEATURE OF ENERGY TRANSFER IN A CHAIN OF UNCOUPLE LINEAR OSCILLATIONS

E.E. Getmanova

Company "DistTutor", Moscow

Abstract: the time intervals for energy exchange between different pairs of pendulum are determined. It has been established which oscillators perform energy exchange in different time intervals. Moving maximum energy associated with pair of pendulum is shown.

Keywords: waves in system of unlinked linear oscillators, time interval for energy exchange.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИЗМЕНЕНИЯ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТА В РАМКАХ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Н.С. Камалова, В.И. Лисицын, Н.Н. Матвеев

Воронежский государственный лесотехнический университет им. Г.Ф. Морозова
rc@icmail.ru

Аннотация: в докладе приведено обоснование формульного соотношения для динамики изменения микроструктуры полимерного композита после воздействия структурирующего внешнего физического фактора в рамках классической термодинамики самоорганизующихся систем. Полученное соотношение предлагается использовать для формирования базы данных параметров отклика сложных композитов на воздействие физических полей.

Ключевые слова: самоорганизующиеся системы, структурные изменения, процессы структурных переходов, влияние внешних факторов, формализованное моделирование.

В настоящее время в различных технологиях наиболее активно используются полимерные материалы, поскольку обладают широким спектром свойств. Современная литература содержит большое количество информации о разновидностях современных промышленных полимерных материалов, их деформационно-прочностных и релаксационных свойствах, химической, тепловой и огневой стойкости и многих других характеристиках [1, 2]. В области композитов активно исследуется влияние состава на изменение их различных технологических параметров [3]. К настоящему моменту скопилось немало экспериментальных данных о процессах релаксации органических структур в том числе и природного происхождения после воздействия физических полей (импульсного магнитного поля, ультразвука [4], неоднородного температурного поля [5] и т.д.). При этом общий концептуальный подход к моделированию релаксационных процессов, стимулированных внешним физическим воздействием на настоящий момент отсутствует. Это обстоятельство ограничивает представления о механизмах изменения микроструктуры сложных композитов, а, следовательно, затрудняет разработку методов формирования материалов с необходимыми для использования свойствами. Основная сложность в разработке общей теории процессов релаксации полимерных композитов в том числе природного происхождения состоит в невозможности предсказать все варианты конформации их молекул, как это делается при исследовании более регулярных структур [6, 7]. Поэтому моделирование процессов изменения их микроструктуры следует осуществлять в рамках системного подхода для частично самоорганизующихся систем. В таком случае базовую модель процессов изменения

надмолекулярной структуры в многокомпонентных композитах целесообразно разрабатывать в рамках термодинамического подхода.

Целью данной статьи является формирование общего подхода к моделированию динамики структурных изменений в композите естественного происхождения (например древесине) после воздействия внешних физических факторов.

Композит естественного происхождения формируется в неконтролируемых условиях и содержит нерегулярные составляющие, структура которых, вообще говоря, неизвестна. Например, состав и микроструктура древесины существенно зависит от места произрастания, а возможные конформации кинетических фрагментов такой ее составляющей как лигнин оценить крайне сложно. Поэтому в таких объектах исследования практически невозможно выделить основную кинетическую единицу, а структура моделируется, как матрица с упорядоченностью ближнего порядка.

В подобной ситуации концептуально целесообразно представлять композит как частично самоорганизующуюся систему, в которой все процессы носят комплексный взаимозависимый и слабо предсказуемый характер. В рамках такого подхода можно использовать только термодинамический анализ. Справедливо полагая, что в процессах упорядочения в композитах флуктуации температуры (локальной) можно считать незначительными, энергия на преобразование микроструктуры δQ во многом определяется работой ее отклика на внешнее воздействие δA :

$$\delta Q \approx \delta A = p dV = \frac{F \delta h}{\sigma \delta h} dV = \frac{F \delta h dV}{V} = F \delta h d(\ln V), \quad (1)$$

где $p = F/\sigma$ – давление в слое микроструктуры, деформируемого в результате внешнего воздействия, F – силовой фактор внутреннего отклика микроструктуры на деформацию упорядочения, σ – площадь деформированного слоя микроструктуры, а $V = \sigma \delta h$ – его объем. Тогда изменение энтропии после внешнего воздействия определяется суммой изменения энтропии в двух процессах:

$$dS = dS_1 + dS_2, \quad (2)$$

где dS_1 – изменение энтропии в процессе увеличения объема упорядоченных структур в композите, а dS_2 – изменение энтропии уменьшения объема его неструктурированной части. С учетом (1):

$$\begin{aligned} dS_1 &= \frac{F \delta h}{T} d(\ln V_1), \\ dS_2 &= -\frac{F \delta h}{T} d(\ln V_2), \end{aligned} \quad (3)$$

где T – средняя температура деформируемого слоя. Если ввести такое понятие как объем среднего элементарного кинетического фрагмента композита V_m , величина которого практически не зависит от конформаций надмолекулярной структуры в целом, то для V_1 и V_2 можно записать:

$$V_1 = \frac{N}{N^*} V_m, \quad (4)$$

$$V_2 = \frac{N^* - N}{N^*} V_m,$$

где N и N^* – число кинетических фрагментов в упорядоченной структуре в текущий момент времени и их максимальное число в исследуемом композите соответственно.

После подстановки (4) в (2) и небольших математических преобразований:

$$dS = k_B \frac{F \delta h}{k_B T} d \left(\ln \left(\frac{N}{N^* - N} \right) \right) = k_B \chi \frac{dN}{(1 - \beta N) N}. \quad (5)$$

Здесь $\chi = F \delta h / k_B T$ – безразмерный параметр, который характеризует отношение энергии, затрачиваемой на отклик композита к средней тепловой энергии в области деформации (k_B – постоянная Больцмана), $\beta = 1/N^*$ – параметр, определяемый максимальным количеством относительно подвижных средних кинетических фрагментов в микроструктуре исследуемого композита.

С другой стороны элементарное изменение энтропии определяют потоки энергии внешних физических факторов, протекаемой за элементарный промежуток времени dt , через площадь поверхности композита σ_0 и определяемые как $J_{out} = \delta Q_{out} / \sigma_0 dt$. Соответственно изменение энтропии при температуре окружающей среды T_0 , можно оценить как:

$$dS = k_B \chi \frac{dN}{(1 - \beta N) N} = \frac{J_{out} \sigma_0 dt}{T_0}. \quad (6)$$

Если обозначить $\alpha = J_{out} \sigma_0 / \chi k_B T_0$, то соотношение (6) преобразуется в дифференциальное уравнение для количества средних кинетических фрагментов, структурирующихся в процессе перехода структуры в новое состояние после внешнего воздействия:

$$\frac{dN}{(1 - \beta N) N} = \alpha dt. \quad (7)$$

Поскольку система самоорганизующаяся, то всегда существует ненулевая вероятность, что до внешнего воздействия незначительное число N_0 средних кинетических фрагментов сформированных по типу образующейся структуры. Например, в условиях действия консервативных сил (к которым относится сила упругости при деформации) согласно статистическому закону Больцмана для числа подвижных структурированных кинетических фрагментов с энергией W , соответствующей упорядоченному состоянию в момент формирования отклика можно записать:

$$N_0 = N_s \exp\left(-\frac{W}{kT_0}\right),$$

где N_s – общее количество элементарных кинетических фрагментов в исследуемом композите. Уравнение (7) с начальным условием $N = N_0$ имеет аналитическое решение. В результате для динамики доли кинетических фрагментов, структурирующихся в процессе отклика композита на воздействие внешних физических факторов можно записать соотношение:

$$\frac{N}{N^*} = \frac{N_0 e^{\alpha t}}{N^* (1 + \beta N_0 (e^{\alpha t} - 1))}. \quad (8)$$

Если исследуемый композит в результате отклика на воздействие внешнего физического фактора через определенное время переходит в новое стационарное состояние, то функция (8) достигает максимума, а затем практически не меняется (см рис. 1). Из условий равенства нулю первой и второй производной функции (8) можно определить время перехода сложной структуры композита в новое состояние:

$$\tau = \frac{2}{\alpha} \ln\left(\frac{1 - \beta N_0}{\beta N_0}\right), \quad (9)$$

которое как видно из соотношения (9) определяется не только уровнем стимулирующего воздействия, но и таким уникальным для каждого композита параметром как $\beta N_0 = N_0/N^*$. Интересно, что величина произведения времени перехода на параметр α не равна единице, а нелинейно зависит от N_0/N^* (см. рис. 2).

Поскольку любое изменение структуры обязательно отразится на свойствах композита в целом, то соотношение (8) в сочетании с системным моделированием могло бы лечь в основу вычислительного эксперимента по определению таких уникальных параметров как α , β и N_0 , например, методом оптимизации критерия Неша-Сатклифа, который используется при анализе адекватности моделей экологических систем.

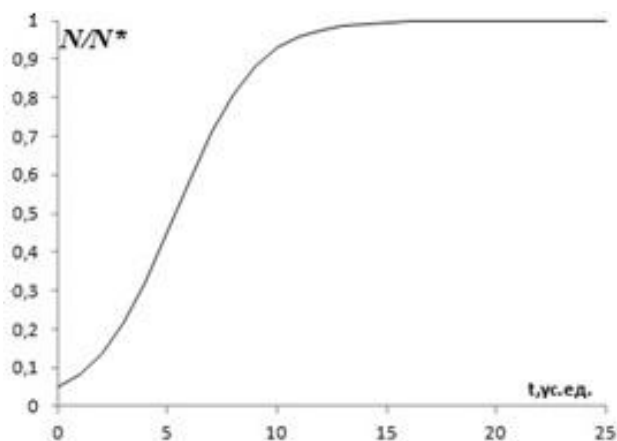


Рис. 1. Графическое представление функции N/N^* для произвольных значениях параметров

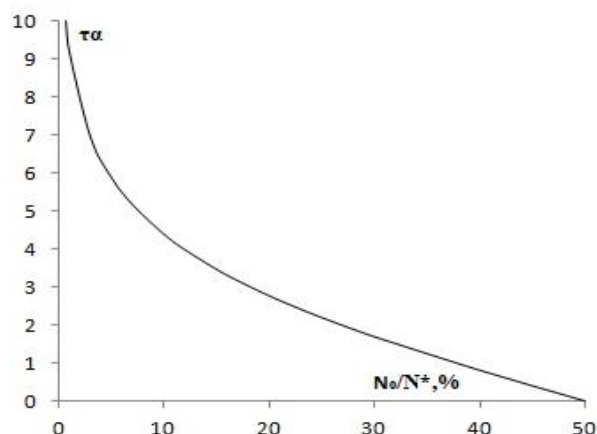


Рис. 2. График зависимости $\tau\alpha$ от N_0/N^*

Подобное сочетание экспериментальных данных и вычислительного эксперимента для определения параметров имеющих ясный физический смысл могло бы стать удобным инструментом для составления баз данных об отклике структуры различных композитов, в том числе и природного происхождения, на воздействие внешних физических факторов, которые в свою очередь могли быть востребованы в технологиях разработки материалов с необходимыми для использования свойствами.

Литература

1. Крыжановский В.К. «Технические свойства пластмасс»/ В.К. Крыжановский, ЦОП Профессия, Санкт-Петербург, 248с.
2. Сторожук И.П., Павлюкович Н.Г. Применение тиоколо-эпоксидных композиций в качестве гидроизоляционных и защитных покрытий / Сторожук И.П., Павлюкович Н.Г.//Полимерные материалы и технологии, 2017, том 3, № 1, с. 75-77
3. Новое связующее для минераловатных теплоизоляционных и огнезащитных материалов /Левичев А.Н., Валецкий П.М., Павлюкович Н.Г., Сторожук И.П.//Полимерные материалы и технологии, издательство, том 3, № 1, с. 78-81.
4. Камалова Н. С., Постников В. В. Физические основы модифицирования древесины [Текст] : монография / Н. С. Камалова, В. В. Постников; М-во науки и высшего образования РФ, ФГБОУ ВО «ВГЛТУ». – Воронеж, 2019. – 164 с.
5. Матвеев Н. Н., Камалова Н. С., Евсикова Н. Ю. Поляризационные эффекты в кристаллизующихся полимерах и биоконпозиционных материалах в неоднородном температурном поле: монография / Н. Н. Матвеев, Н. С. Камалова, Н. Ю. Евсикова ; М-во науки и высшего образования РФ, ФГБОУ ВО «ВГЛТУ». – Воронеж, 2021. – 316 с.
6. Матвеев Н. Н. и др. Влияние конформаций гибкоцепных полимеров на изменение поляризованности в неоднородном температурном поле / Н. Н. Матвеев, В. И. Лисицын, В. В. Саушкин, Н. С. Камалова // Пластические массы. - 2021. - № 1-2. - С. 44-45.
7. Матвеев Н. Н. и др. Конформационная модель оператора дипольного момента макромолекулы кристаллизующегося полимера в неоднородном температурном поле / Н. Н. Матвеев, В. И. Лисицын, В. В. Саушкин, Н. С. Камалова // Пластические массы. - 2021. - № 3-4. - С. 22-23.

SIMULATION OF THE DYNAMICS OF CHANGES IN THE SUPROMOLECULAR STRUCTURE OF A COMPOSITE IN THE FRAMEWORK OF THE CLASSICAL THERMODYNAMICS

N.S. Kamalova, V.I. Lisitsyn, N.N. Matveev

Voronezh State Forestry University n. a. G.F. Morozov

Abstract: the report substantiates the formula relationship for the dynamics of changes in the microstructure of a polymer composite after exposure to a structuring external physical factor in the framework of classical thermodynamics of self-organizing systems. The resulting relation is proposed to be used to form a database of parameters of the response of complex composites to the action of physical fields.

Keywords: self-organizing systems, structural changes, processes of structural transitions, influence of external factors, formalized modeling.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВЕЛИЧИНЫ НАПРЯЖЕНИЯ ПИТАНИЯ ДИОДА ГАННА НА ФУРЬЕ-СПЕКТР ГЕНЕРИРУЕМОГО ТОКА С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

Г.А. Костров, Д.Н. Жариков, Д.В. Завьялов

Волгоградский государственный технический университет
kostroff.jora@mail.ru

Аннотация: представлены результаты расчётов перемещения домена сильного поля в диоде Ганна при постоянном питающем напряжении. Приведены графики спектра сигнала, скорости доменов, изменения напряжённости поля внутри диода с течением времени.

Ключевые слова: диод Ганна, СВЧ, моделирование физических процессов.

В разработке генераторов электромагнитного излучения СВЧ уже давно актуальной является задача освоения пикосекундного диапазона времен нарастания, спада и длительностей импульсов.

В последние годы диод Ганна всё чаще исследуется [1-5]. Например, в [6] диод используется для создания генератора, способного заменить собой импульсные магнетронные СВЧ-генераторы в системах радиолокации. В отличие от громоздких электровакуумных схем, полупроводниковый генератор умещается на коротком отрезке волновода, что положительно сказывается на мобильности установки.

Для исследования процессов формирования и движения домена в кристаллической структуре используется локально-полевая модель диода Ганна, основанная на предположении о том, что средняя дрейфовая скорость электронов зависит от мгновенного значения электрического поля [7], а коэффициент диффузии не зависит от приложенного электрического поля [8]. Моделируется последовательная схема включения диода с источником питания и резистивной нагрузкой.

Одним из основных, хорошо изученных экспериментально и теоретически, является пролётный доменный режим работы генератора на диоде Ганна. Такой режим имеет место при малом значении сопротивления нагрузки, когда амплитуда колебаний напряжения на диоде мала и не оказывает заметного влияния на процессы образования и движения доменов.

Уравнения математической модели диода получаются из уравнений Максвелла и уравнений непрерывности, где плотность тока определяется суммой трёх слагаемых: плотности тока проводимости, диффузионного тока и тока смещения.

Для одномерной модели диода Ганна совместное решение этих уравнений даст нам следующее уравнение.

$$\frac{\partial E}{\partial t} = D \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - V(E) \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{e}{\varepsilon_a} D \frac{\partial n_0}{\partial x} - \frac{e}{\varepsilon_a} n_0 V(E) + \frac{I}{\varepsilon_a S}. \quad (1)$$

Дискретизация этого равенства приводит нас к уравнению напряжённостей в явном виде, полученному из уравнения Пуассона для распределения поля:

$$E_i^{k+1} = E_i^k + \Delta t \left[D(E_i^k) \frac{E_{i+1}^k + E_{i-1}^k - 2E_i^k}{\Delta x^2} - V(E_i^k) \frac{E_{i+1}^k - E_{i-1}^k}{2\Delta x} + \frac{e}{\varepsilon_a} \left(D(E_i^k) \frac{n_{0i+1} - n_{0i-1}}{2\Delta x} - n_{0i} V(E_i^k) + \frac{U_0 - \frac{1}{2} \Delta x \sum_{j=2}^N (E_{j-1}^k + E_j^k)}{eRS} \right) \right], \quad (2)$$

где Δt – временной шаг интегрирования; $D(E_i^k)$ – коэффициент диффузии; Δx – пространственный шаг интегрирования; ε_a – абсолютная диэлектрическая проницаемость GaAs; n_{0i} – значение локальной концентрации легирующих примесей; U_0 – напряжение питания диода Ганна; N – число пространственных интервалов разбиения диода; R – сопротивление нагрузки; S – площадь сечения кристаллической структуры диода.

За нелинейную часть прибора отвечает скорость электронов в заданной точке пространства в данный момент времени $V(E_i^k)$, которая определяется как [9]:

$$V(E_i^k) = \frac{\left[\mu_a E_i^k + V_{\text{нас}} \left(\frac{E_i^k}{E_{\text{пор}}} \right)^4 \right]}{\left[1 + \left(\frac{E_i^k}{E_{\text{пор}}} \right)^4 \right]}, \quad (3)$$

где μ_a – подвижность электронов; $V_{\text{нас}}$ – скорость, соответствующая насыщению характеристики при большом поле; $E_{\text{пор}}$ – пороговое значение напряжённости в поле.

Для уравнения (2) должны выполняться условия Неймана для границ с контактами диода:

$$E_1^k = E_2^k, \quad E_N^k = E_{N-1}^k. \quad (4)$$

Начало домену дает случайное повышение концентрации электронов в окрестности некоторой точки, где имеются различные дефекты кристаллической решетки. Таким образом, домен формируется у катода и движется к аноду со скоростью, равной дрейфовой скорости электронов (для арсенида галлия $\sim 10^5$ м/с). Достигнув анода, домен втягивается в него. Значительная часть напряжения, приложенного к образцу, снижается на домене; вне домена напряженность поля намного меньше пороговой, и флуктуации заряда развиваться не могут, т.е. как правило в объеме полупроводника возникает только один домен сильного поля. В то время, как один домен исчезает на аноде, на катоде зарождается новый домен, и в цепи нагрузки генерируются короткие импульсы. Расстояние между импульсами равно времени пролета домена через рабочую область диода.

На каждом временном шаге находится напряжённость поля во всех точках пространства в диоде [10]. Таким образом, появляется возможность отследить пе-

ремещение максимумов напряжённости, соответствующих домену сильного поля. На рис. 1 представлены графики напряжённостей, по которым можно проследить динамику перемещения зарядов. Максимумы, находящиеся в левой части образуются неоднородностями, из которых и начинается генерация при преодолении напряжением питания пороговой напряжённости поля. Сначала напряжённость поля постепенно набирает своё максимальное значение с течением времени. Через некоторое время максимум напряжённости перестаёт изменяться, и домен движется к контактам анода диода. В конце пути домен поглощается стенкой анода, после этого процесс формирования домена начинается заново.

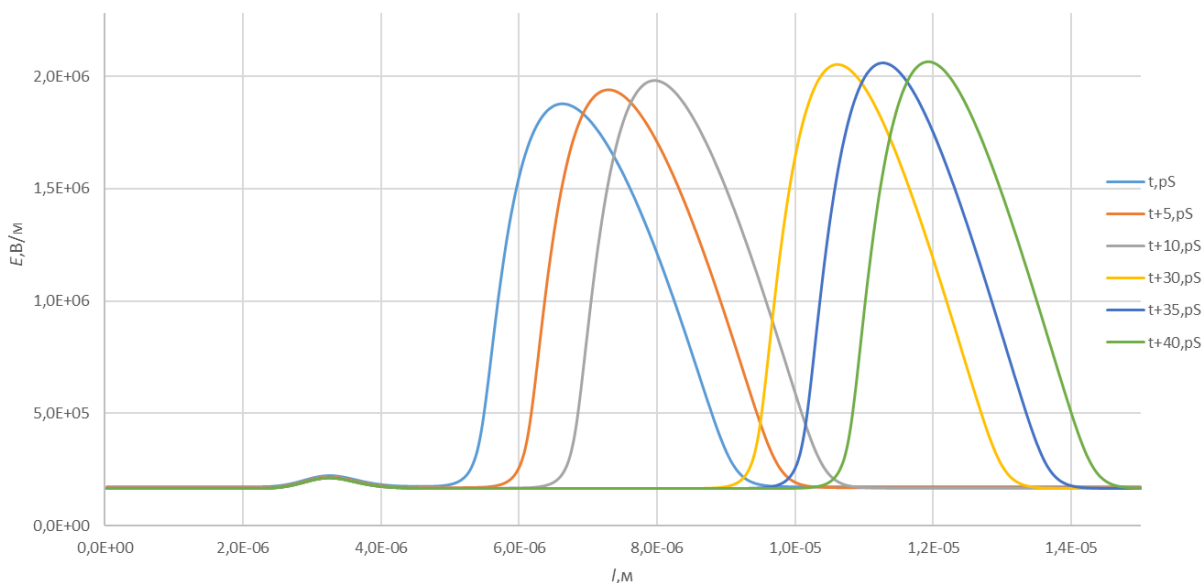


Рис. 1. Изменение напряжённости поля внутри диода с течением времени при постоянном напряжении U_0

Скорость перемещения домена зависит от питающего напряжения диода Ганна. При увеличении напряжения, изменяется энергия, переносимая доменом. Для различных значений питающего напряжения, получен график зависимости скорости перемещения доменов от напряжения питания, приведенный на рис. 2.

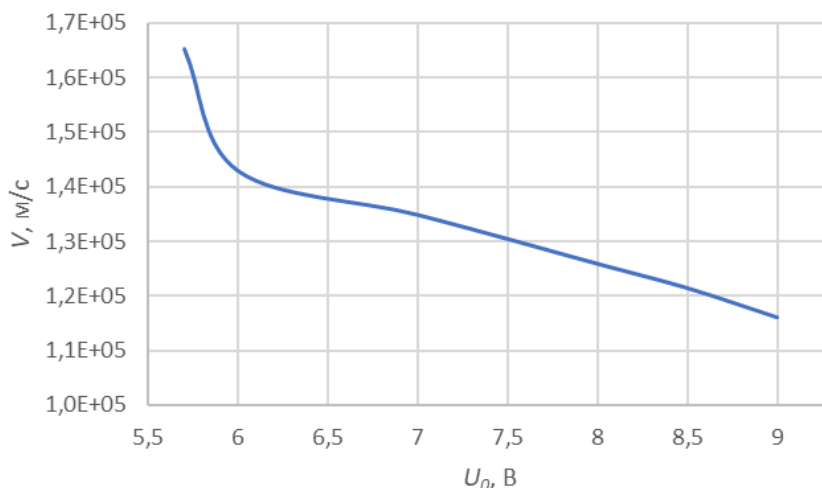


Рис. 2. Зависимость скорости пролёта домена в зависимости от напряжения питания диода Ганна

По графику видно, что с увеличением напряжения питания диода уменьшается скорость перемещения доменов сильного поля. Это связано с тем, что при приложении большего внешнего поля уменьшается добротность домена, увеличивается количество основных носителей заряда, при этом неоднородность в диоде остаётся постоянной. Для образования нового домена формируется более сильное поле, эффективная масса увеличивается.

Скорость доменов существенно зависит от величины питающего напряжения. При изменении скорости изменяется и частота генерации. На рисунке 3 представлена зависимость частоты основной гармоники Фурье спектра тока выходного сигнала от напряжения питания.

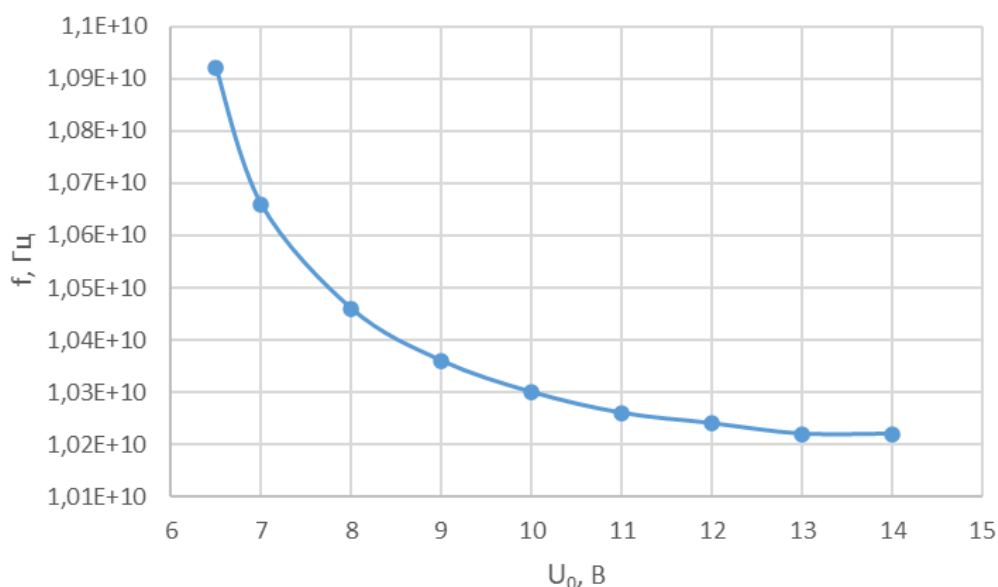


Рис. 3. Зависимость частоты основной гармоники Фурье спектра тока выходного сигнала от напряжения питания

Для подтверждения работоспособности программы была собрана экспериментальная установка на базе диода Ганна 3А703Б. Диод помещён в волновод с подвижной стенкой, электрические контакты подключены к стабилизированному источнику питания диода напрямую. Полученные данные совпадают с экспериментальными характеристиками диодов Ганна, работающими на участках после номинального напряжения питания на спаде частотных характеристик.

Форма неоднородностей в кристаллической решётке при их одинаковой ширине не влияет на образование доменов. Исследованы прямоугольная, параболическая и градиентная функции изменения концентрации легирующих примесей. Если функция изменяется более плавно, то максимальная амплитуда напряжённостей доменов будет больше, но домен будет формироваться немного дольше.

Полученную модель можно применять для расчётов полей с различной нагрузкой в электрической цепи. Планируется добавить в схему LC контур, что позволит производить расчёты для разных волноводов. Это должно упростить разработку и отладку экспериментальных схем.

Литература

1. Пушкарев В. П., Нелинейная модель диода Ганна / В. П. Пушкарев, Д. Ю. Пелявин, С. А. Ламонова – Томск : Научно-исследовательский институт полупроводниковых приборов, 2013. – С. 1-7;
2. Пушкарёв В. П., Импульсный генератор на диоде Ганна с повышенной стабильностью выходных параметров / В. П. Пушкарёв и др. – Известия Томского политехнического университета. – т. 320 №4, 2012. – С.102-105;
3. Юрченко Л. В., Хаотические режимы генерации в протяжённой микрополосковой линии с цепочкой диодов Ганна / Л. В. Юрченко, В. Б. Юрченко – Электроника, №3, 2009. – С. 14-19;
4. Гошин Г. Г., Экспериментальное исследование автодина на диоде Ганна / Г. Г. Гошин, А. А. Трубочёв – доклады ТУСУРа. –т. 19, №2, 2016. – С. 174-178.
5. Костров Г. А., СВЧ влагомер на диоде Ганна / Г. А. Костров. – Сборник научных трудов, по материалам XVII международной научно-практической конференции 12 июня 2018 г. – Изд. ЦНК МОАН, 2018. – 48 с.;
6. Титов А. А., Импульсный сверхвысокочастотный генератор для систем ближней радиолокации и радионавигации 2011 г. / А. А. Титов, В. П. Пушкарев, Д. Ю. Пелявин –М. : Приборы и техника эксперимента, №5, 2011 С.111-114.
7. Gunn J. B., Instabilities of Current in III-V Semiconductors / J. B. Gunn – IBM Journal of Research and Development, Vol. 8, 1964. – С.141-159.
8. Веселов Г. И., Микроэлектронные устройства СВЧ: Учеб. Пособие для радиотехнических специальностей вузов / Г. И. Веселов, Е. Н. Егоров, Ю. Н. Алехин – М. : Высшая школа, 1988, с.280
9. McCumber D. E., Theory of negative-conductance amplification and of Gunn instabilities in Two-Valley semiconductors / D. E. McCumber – IEEE Trans. Electron Devices, Vol. ed-13, № 1, 1966. – С. 4-21.
10. Ruch J. G., Transport properties of GaAs / J. G. Ruch – Phys. Rev., Vol 174, № 3, 1969. – С. 921-931.

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF THE SUPPLY VOLTAGE OF THE GUNN DIODE ON THE FOURIER SPECTRUM OF THE GENERATED CURRENT USING FINITE DIFFERENCE SIMULATION

G.A. Kostrov, D.N. Zjarikov, D.V. Zav'yalov

Volgograd State Technical University

Abstract: the results of calculations of the displacement of a strong field domain in a Gunn diode at a constant supply voltage are presented. Graphs of the signal spectrum, domain velocity, changes in the field strength inside the diode over time are given.

Keywords: Gunn diode, microwave frequency, simulation of physical processes.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО КОНФЛИКТА В ЭРГОТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

А.В. Попов

Воронежский институт МВД России
Alex_std_ex@mail.ru

Аннотация: рассматривается модель взаимодействия элементов эрготехнической системы. Для определения характера отношений между элементами используются положения теории конфликта. Исследуется динамика изменения полезностей элементов с учетом дискретности временной шкалы. Разрабатывается обобщенная модель определения полезности элементов эрготехнической системы на любом участке времени.

Ключевые слова: конфликт, эрготехническая система, динамика, отношения между элементами, полезность.

В настоящее время повсеместно находят свое применение человеко-машинные системы, имеющие различное назначение и природу реализуемых в них процессов. Исследование их свойств и особенностей в целях дальнейшей оптимизации является актуальной и важной задачей, при рассмотрении которой широкое применение нашли методы математического моделирования и системного анализа. В работе [1] человеко-машинная система, включающая в себя организационные и технические элементы и характеризующаяся операторским типом деятельности, носит название эрготехнической.

Отношения между элементами системы для оценки ее динамики предлагается рассматривать с точки зрения теории конфликта [2, 3]. Фундаментальными типами отношений в таком случае выступают сотрудничество, противоречие и независимость. Принципы и особенности взаимодействия элементов в составе эрготехнической системы, а также характер отношений между ними в зависимости от реализуемых процессов определены в работах [1, 4, 5].

Отметим, что основополагающим фактором при оценке динамики функционирования системы и характера отношений между ее элементами является определение целей ее элементов, а также их полезности. Под полезностью элемента p^i в настоящей работе будем понимать некоторую количественную оценку, значение которой возрастает пропорционально степени достижения цели i -м элементом. Отношение между i -м элементом на j -м оценивается с помощью весового коэффициента r^{ij} , характеризующим степень изменения полезностей элементов и, соответственно, «силу» воздействия i -го элемента на j -й.

Представим систему из двух элементов с циклическим взаимодействием друг на друга в виде графа G_1 (рис. 1). На графе элементам системы соответствуют вершины v_1 и v_2 соответственно, а отношениям – дуги с некоторыми весами r^{12} и r^{21} [6].

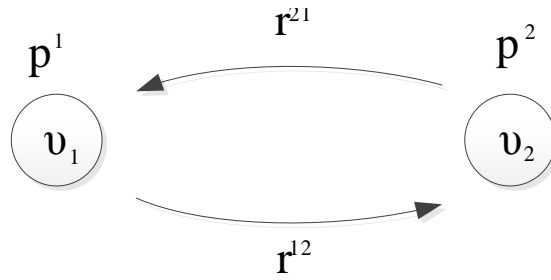


Рис. 1. Граф G_1

Рассматривать динамику функционирования такой системы как в условиях дискретности, так и в условиях непрерывности времени. В настоящей работе будет рассматриваться ситуация, когда полезности элементов меняются на определенных временных интервалах, т. е. в результате взаимных воздействий друг на друга.

В зависимости от рассматриваемой системы и реализуемых в ней процессов длительность выбранных временных интервалов в реальном масштабе времени может варьироваться в силу того, что природа воздействий может быть различной. Временная шкала системы, представленной в виде графа G_1 будет представлять собой s участков последовательных воздействий друг на друга элементов v_1 и v_2 (рис. 2), так как в графовой модели системы присутствует только один цикл длиной 2.

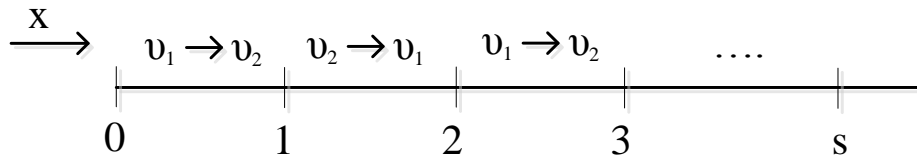


Рис. 2. Шкала дискретных временных интервалов для графа G_1

Таким образом, дуги графа G_1 будут заданы как r_{τ}^{ij} , где i – воздействующий элемент, j – элемент, подвергающийся воздействию, τ – правая граница временного интервала, за который было осуществлено воздействие; вершинам графа будут заданы условные значения полезностей p_0^1 и p_0^2 в нулевой момент времени.

Опишем процессы, протекающие в системе, представленной в виде графа G_1 . В результате некоторого внешнего воздействия x полезность вершины v_1 стала равна p_1^1 . В таком случае относительный коэффициент приращения значения полезности для вершины v_1 на участке $[0;1]$ обозначается k_{01}^1 и определяется по формуле:

$$k_{01}^1 = \frac{p_1^1}{p_0^1}, k_{01}^1 \in [0; +\infty). \quad (1)$$

При наличии причинной связи r_1^{12} (в интервале времени $[0;1]$) значение полезности вершины v_2 также изменится на некоторую величину и станет равно p_1^2 . Относительный коэффициент приращения значения полезности k_{01}^2 для вершины v_2 можно определить по формуле:

$$k_{01}^2 = \frac{p_1^2}{p_0^2}, k_{01}^2 \in [0; +\infty). \quad (2)$$

Для определения значений весовых коэффициентов влияний r_1^{12} и r_2^{21} применим относительный метод расчета [7]. Из предложенного метода следует, что значение весового коэффициента влияний i -го элемента на j -й есть отношение изменения полезности j -го элемента к изменению полезности i -го элемента. Таким образом значения r_1^{12} и r_2^{21} на временном участке $[0; 2]$ можно рассчитать по формулам:

$$r_1^{12} = \frac{k_{01}^2}{k_{01}^1} = \frac{p_1^2/p_0^2}{p_1^1/p_0^1}; \quad (3)$$

$$r_2^{21} = \frac{k_{12}^1}{k_{01}^2} = \frac{p_2^1/p_1^1}{p_1^2/p_0^2}. \quad (4)$$

Таким образом значения весовых коэффициентов влияний для графа G_1 в общем виде примут следующий вид:

$$r_{\tau}^{ij} = \frac{k_{(\mu-1)\mu}^j}{k_{(\mu-1)\mu}^i} = \frac{p_{\mu}^j/p_{\mu-1}^j}{p_{\mu}^i/p_{\mu-1}^i}; \quad (5)$$

$$r_{\tau+1}^{ji} = \frac{k_{(\mu+1)\mu}^i}{k_{(\mu-1)\mu}^j} = \frac{p_{\mu+1}^i/p_{\mu}^i}{p_{\mu}^j/p_{\mu-1}^j}, \quad (6)$$

где $\tau = 1, 3, 5, \dots, n$; $\mu = 1, 2, 3, \dots, (s-1)$.

Отметим, что систему можно считать синергетически сбалансированной [3, 7], если выполняется условие: $\forall i$

$$\left(\bigwedge_{\mu=0}^{s-1} k_{\mu(\mu+1)}^i > 1 \right) \vee \left(\bigwedge_{\mu=0}^{s-1} k_{\mu(\mu+1)}^i < 1 \right), \quad (7)$$

антагонистически сбалансированной, если

$$\left(\bigwedge_{\mu=0,2,4,\dots,s-2} [(k_{\mu(\mu+1)}^1 > 1) \wedge (k_{\mu(\mu+1)}^2 < 1) \wedge (k_{(\mu+1)(\mu+2)}^1 > 1)] \right) \vee \left(\bigwedge_{\mu=0,2,4,\dots,s-2} [(k_{\mu(\mu+1)}^1 < 1) \wedge (k_{\mu(\mu+1)}^2 > 1) \wedge (k_{(\mu+1)(\mu+2)}^1 < 1)] \right). \quad (8)$$

Во всех остальных случаях, где $k_{\mu(\mu+1)}^i \neq 1 \forall i, \mu$ система считается конфликтной и несбалансированной [3].

Значения весовых коэффициентов влияний элементов системы друга могут быть как постоянными, так и переменными, т. е. $r_{\tau}^{ij} = r_{\tau+2}^{ij}$ или $r_{\tau}^{ij} \neq r_{\tau+2}^{ij}$.

При известных значениях r_{τ}^{ij} и $r_{\tau+1}^{ij}$ можно исследовать дальнейшую динамику развития системы даже через τ -е количество временных интервалов.

Определим значение полезности 1-го элемента, представленного вершиной v_1 , спустя один полный цикл (т. е. через 2 временных интервала) при известных значениях весовых коэффициентов влияний, для упрощения заданных постоянными, но необязательно одинаковыми, т. е. $\forall \tau: r_{\tau}^{12} = \text{const}; r_{\tau}^{21} = \text{const}$. Значение его полезности p_2^1 выражаем из (4):

$$p_2^1 = r_2^{21} \cdot \frac{p_1^1 \cdot p_1^2}{p_0^2}. \quad (9)$$

Значения p_1^2 получаем из выражения (3):

$$p_1^2 = r_1^{12} \cdot \frac{p_0^2 \cdot p_1^1}{p_0^1}. \quad (10)$$

Подставляем p_1^2 в формулу (9):

$$p_2^1 = r_2^{21} \cdot \frac{p_1^1}{p_0^2} \cdot r_1^{12} \cdot \frac{p_0^2 \cdot p_1^1}{p_0^1}; \quad (11)$$

$$p_2^1 = r_2^{21} \cdot r_1^{12} \cdot \frac{(p_1^1)^2}{p_0^1}.$$

Исследуем значение полезности v_1 спустя 2 цикла (4 временных интервала) и выявим закономерность для представления формул в обобщенном виде.

$$p_3^1 = r_4^{21} \cdot \frac{p_2^1 \cdot p_2^2}{p_1^2}, \quad (12)$$

где

$$p_2^2 = r_3^{12} \cdot \frac{p_1^2 \cdot p_1^1}{p_1^1}.$$

Приводим формулу (9) к виду:

$$p_3^1 = r_4^{21} \cdot \frac{p_2^1}{p_1^1} \cdot r_3^{12} \cdot \frac{p_1^2 \cdot p_2^1}{p_1^1};$$

$$p_3^1 = r_4^{21} \cdot r_3^{12} \cdot \frac{(p_2^1)^2}{p_1^1}.$$
(13)

При подстановке значения p_2^1 из (11) в (13) получаем:

$$p_3^1 = r_4^{21} \cdot r_3^{12} \cdot \frac{\left(r_2^{21} \cdot r_1^{12} \cdot \frac{(p_1^1)^2}{p_0^1}\right)^2}{p_1^1} =$$

$$= r_4^{21} \cdot r_3^{12} \cdot (r_2^{21})^2 \cdot (r_1^{12})^2 \cdot (p_1^1)^3 \cdot \frac{1}{(p_0^1)^2}.$$
(14)

После выполнения аналогичных итерационных расчетов для $\tau = 5, 6, \dots, s$ были получены обобщенные формулы для расчета полезностей элементов системы. Так, на шаге $\tau = s$ значение полезности p_τ^1 будет определяться по формулам:

– если значения весовых коэффициентов неизменны, т. е. $\forall \tau$ $(r_\tau^{12} = r_{\tau+2}^{12}) \wedge (r_{\tau+1}^{21} = r_{\tau+3}^{21})$, то

$$p_\tau^1 = (r^{12} \cdot r^{21})^{(\tau-1)!} \cdot \frac{(p_1^1)^\tau}{(p_0^1)^{\tau-1}},$$
(15)

– если $(r_\tau^{12} \neq r_{\tau+2}^{12}) \vee (r_{\tau+1}^{21} \neq r_{\tau+3}^{21})$, то

$$p_\tau^1 = \frac{(p_1^1)^\tau}{(p_0^1)^{\tau-1}} \cdot \prod_{\alpha=0}^{\tau-1} (r_\alpha^{21} \cdot r_\alpha^{12})^m.$$
(16)

Соответственно, для второго элемента общие формулы расчета принимают следующий вид.

При $(r_\tau^{12} = r_{\tau+2}^{12}) \wedge (r_{\tau+1}^{21} = r_{\tau+3}^{21}) \forall \tau$:

$$p_\tau^2 = (r^{12})^\tau \cdot \frac{p_\tau^1 \cdot p_0^2}{p_0^1},$$
(17)

иначе

$$p_\tau^2 = \frac{p_\tau^1 \cdot p_0^2}{p_0^1} \cdot \prod_{\beta=1,3,\dots,(2\tau-1)} r_\beta^{12}.$$
(18)

Таким образом, зная весовые коэффициенты влияний элементов друг на друга можно определить полезность каждого элемента системы на любом временном отрезке, что является важным фактором при решении задач теории конфликта. Для этого могут быть использованы различные методы, использование которых зависит от условий решаемой задачи. Как правило, использование относительного метода определения весовых коэффициентов рационально применять для дискретной временной шкалы в тех случаях, когда природа ис-

следуемой системы такова, что у функций полезности ее элементов высокая дисперсия и частота изменения.

Основываясь на данном методе, по найденным значениям p_t^i осуществляется построение и аппроксимация функций полезности элементов на всём интервале времени, за который осуществляется наблюдение. После определения искомым функций могут быть использованы методы функционального анализа для дальнейшего исследования системы, в том числе моделирование поведения системы с помощью эволюционных дифференциальных уравнений.

Литература

1. Алексеев В.В. Моделирование информационного воздействия на эрготехнический элемент в эрготехнических системах / В.В. Алексеев [и др.]. – М.: «Стенвил», 2003. – 200 с.
2. Сысоев В.В. Конфликт. Сотрудничество. Независимость. Системное взаимодействие в структурно-параметрическом представлении / В.В. Сысоев. – М.: Московская академия экономики и права, 1999. – 151 с.
3. Светлов В.А. Управление конфликтом. Новые технологии принятия решений в конфликтных ситуациях: учеб. пособие / В.А. Светлов. – Саратов: Ай Пи Эр Медиа, 2019. – 136 с.
4. Попов А.В. Модель взаимодействия между элементами эрготехнической системы на примере сети связи специального назначения / А.В. Попов // Математические методы в технологиях и технике, 2022. – № 3. – С. 48–51.
5. Попов А.В. Декомпозиционный подход к построению модели эрготехнической системы на примере сети связи специального назначения / А.В. Попов // Информационные технологии, 2022. – № 1. – С. 8–17.
6. Попов А.В. Исследование структурных и конфликтных свойств систем с использованием знаковых графов // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сб. тр. Междунар. науч. конф. (г. Воронеж, 11-13 ноября 2019 г.). Воронеж: «Научно-исследовательские публикации», 2020. – С. 1050–1055.
7. Пьянков О.В. Математическое моделирование информационно-аналитических систем органов внутренних дел: монография // Воронеж: Воронежский институт МВД России. 2013. 132 с.

MATHEMATICAL MODELING OF DYNAMIC CONFLICT IN ERGOTECHNICAL SYSTEMS

A.V. Popov

Voronezh Institute of the Ministry of Internal Affairs of Russia

Abstract: the model of interaction between elements of ergotechnical system is considered. Provisions of conflict theory are used to determine the nature of relations between the elements. The dynamics of element utility changes with regard for time scale discreteness is studied. A generalized model of determining the utility of elements of an ergotechnical system at any stretch of time is developed.

Keywords: conflict, ergotechnical system, dynamics, relations between elements, utility.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АГРЕГАЦИИ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА НА КАПЛЯХ ВОДОНЕФТЯНОЙ ЭМУЛЬСИИ

Ю.Г. Смирнов, И.В. Ивенина

Ухтинский государственный технический университет
ysmirnov@ugtu.net

Аннотация: выполнено теоретическое обоснование процесса агрегации наночастиц магнетита на каплях водонефтяной эмульсии. Сравнение созданной математической модели с результатами эксперимента продемонстрировали связь между размерами эмульсионных капель и временем контакта водонефтяной эмульсии с магнитными наночастицами перед началом магнитной сепарации на степень очистки.

Ключевые слова: численное моделирование, водонефтяная эмульсия, агрегация, наночастицы магнетита

Введение

В работах [1-3] была описана методика извлечения эмульгированной нефти в магнитном поле из загрязненной воды после обработки водонефтяной эмульсии наночастицами магнетита. В силу высокой удельной поверхностной энергии, эти частицы агрегируются на границе раздела фаз вода-нефть, то есть на поверхности эмульсионных капель. Направленно двигаясь в неоднородном магнитном поле магнитного сепаратора, частицы магнетита увлекают за собой эмульсионные капли нефти, чем и достигается очистка загрязненной воды.

Процесс агрегации магнитных наночастиц на поверхности капель дисперсной фазы эмульсии растянут во времени и зависит от многих факторов, в частности, от температуры, химического состава нефти, размера и концентрации твердых частиц магнетита и микрокапель эмульсии.

В ходе экспериментальной работы [5] были проведены исследования по очистке воды, загрязненной нефтью Ярегского месторождения. Эксперимент показал необходимость обеспечения более длительного контакта магнетита с водонефтяной эмульсией для увеличения эффективности метода. Это обстоятельство может быть объяснено с учетом того, что передвижение наночастиц магнетита обусловлено броуновским движением. Следовательно, необходимо некоторое время для продвижения частиц магнетита к эмульсионным каплям. Процесс может быть ускорен интенсивным перемешиванием. Кроме того, сам процесс образования связей на поверхности капель нефти за счет когезионных сил требует определенного времени.

Целью настоящей работы является теоретическое рассмотрение и численные оценки необходимого времени отстоя смеси нефтяной эмульсии с магнитными наночастицами перед началом процесса магнитной сепарации.

Математическая модель процесса

Аналогично [5] предположим, что в сосуде объемом V находится загрязненная нефтью вода в виде водонефтяной эмульсии с плотностью ρ_l , содержащая эмульсионные капли радиуса R_b , с удельной плотностью ρ_b , и массовой концентрацией ϕ_b .

Будем также считать, что там же находятся во взвешенном состоянии наночастицы магнетита радиуса R_a с удельной плотностью ρ_a и массовой концентрацией ϕ_a . Их коэффициент диффузии пусть будет D .

Размер и масса наночастиц значительно меньше размеров и массы капелек эмульсии. Поэтому можно считать, что двигаться в результате броуновского движения будут только наночастицы, а значительно более крупные по сравнению с наночастицами капли эмульсии будут практически неподвижны.

Оценим среднее расстояние между эмульсионными каплями. Будем считать, что эмульсионные капли имеют сферическую форму и равномерно распределены в объеме жидкости. Масса эмульсионной частицы m_b может быть определена по формуле

$$m_b = \frac{4}{3}\pi R_b^3 \rho_b. \quad (1)$$

Число эмульсионных капель массой m_b в объеме жидкости V будет равно

$$N_b = \frac{V \rho_l \phi_b}{m_b}. \quad (2)$$

Разобьем объем V на N_b элементарных объемов в виде кубиков со стороной L_b . Очевидно, что объем элементарного кубика будет равен

$$L_b^3 = \frac{V}{N_b}. \quad (3)$$

С учетом (2) из (3) получим

$$L_b^3 = \frac{m_b}{\rho_l \phi_b}. \quad (4)$$

Подставим (1) в (4). Получим

$$L_b = \sqrt[3]{\frac{4\pi\rho_b}{3\rho_l\phi_b}} R_b. \quad (5)$$

Максимальное расстояние L_a , которое должна преодолеть наночастица, чтобы достигнуть расположенной в центре элементарного кубика эмульсионной частицы, очевидно, будет равна половине диагонали этого кубика

$$L_a = \frac{\sqrt{3}}{2} L_b. \quad (6)$$

С другой стороны, диффузионная длина L_a , на которую смещается наночастица за интервал времени t при броуновском движении, может быть определена из известной формулы [6]

$$L_a^2 = 6Dt. \quad (7)$$

Здесь D – коэффициент диффузии.

Поскольку нам необходимо найти связь между эмульсионными частицами размера R_b , на которых агрегируются магнитные наночастицы в течение времени t , и этим временем, воспользуемся формулами (5-7). Получим

$$L_a^2 = \frac{3}{4} \left(\frac{4\pi\rho_b}{3\rho_l\phi_b} \right)^{\frac{2}{3}} R_b^2. \quad (8)$$

Объединяя формулы (8) и (9), получим искомую связь

$$t = \frac{1}{8D} \left(\frac{4\pi\rho_b}{3\rho_l\phi_b} \right)^{\frac{2}{3}} R_b^2. \quad (9)$$

Результаты и обсуждение

Для выполнения численных расчетов примем коэффициент диффузии в загрязненной нефтью воде равным $D = 5,56 \cdot 10^{-12}$ м²/с [7]. Для плотности наночастиц и эмульсий ярегской нефти возьмем значения: $\rho_a = 5180$ кг/м³, $\rho_b = 1,017$ кг/м³ [8].

Примем для наночастиц $R_a = 10$ нм. Будем выполнять расчеты для эмульсионных капель с радиусами R_b , меняющимися в диапазоне от 0,5 до 10 мкм. Будем также считать, что степень нефтяного загрязнения жидкости составляет 10 мг/л, что соответствует $\phi_b = 10^{-5}$. Положим $\phi_a = \phi_b$.

Для сравнения с результатами экспериментальных исследований [4] (рис.1) были выполнены расчеты размеров эмульсионных капель (R_b), оставшихся в растворе после отстоя в течение интервала времени t и последующей магнитной сепарации.

В указанных предположениях численные расчеты по вышеприведенным формулам выполнялись в рамках пакета MatLab. Полученные результаты приведены на рис. 2.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующее заключение.

1. Сравнение полученной теоретической и экспериментальной зависимостей показывает примерное совпадение их хода, что свидетельствует об адекватности математической модели рассматриваемого процесса.

2. Чем крупнее эмульсионные капли, тем быстрее они омагничиваются за счет агрегирования на них наночастиц магнетита и быстрее выводятся из загрязненной воды.

3. Увеличение времени контакта наночастиц магнетита и загрязненной нефтью воды перед поступлением ее в магнитный сепаратор позволяет повысить степень очистки.

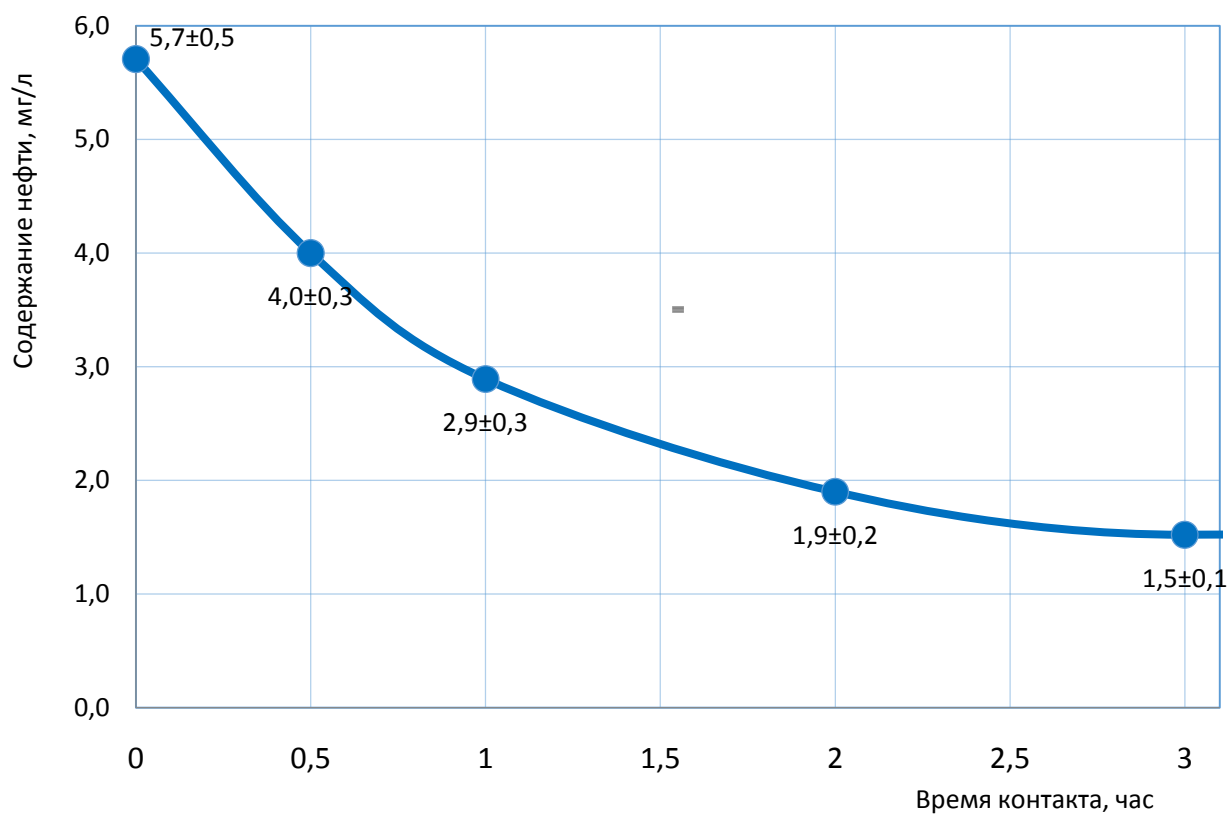


Рис. 1. Зависимость эффективности извлечения нефти от времени контакта загрязненной воды с магнетитом [4]

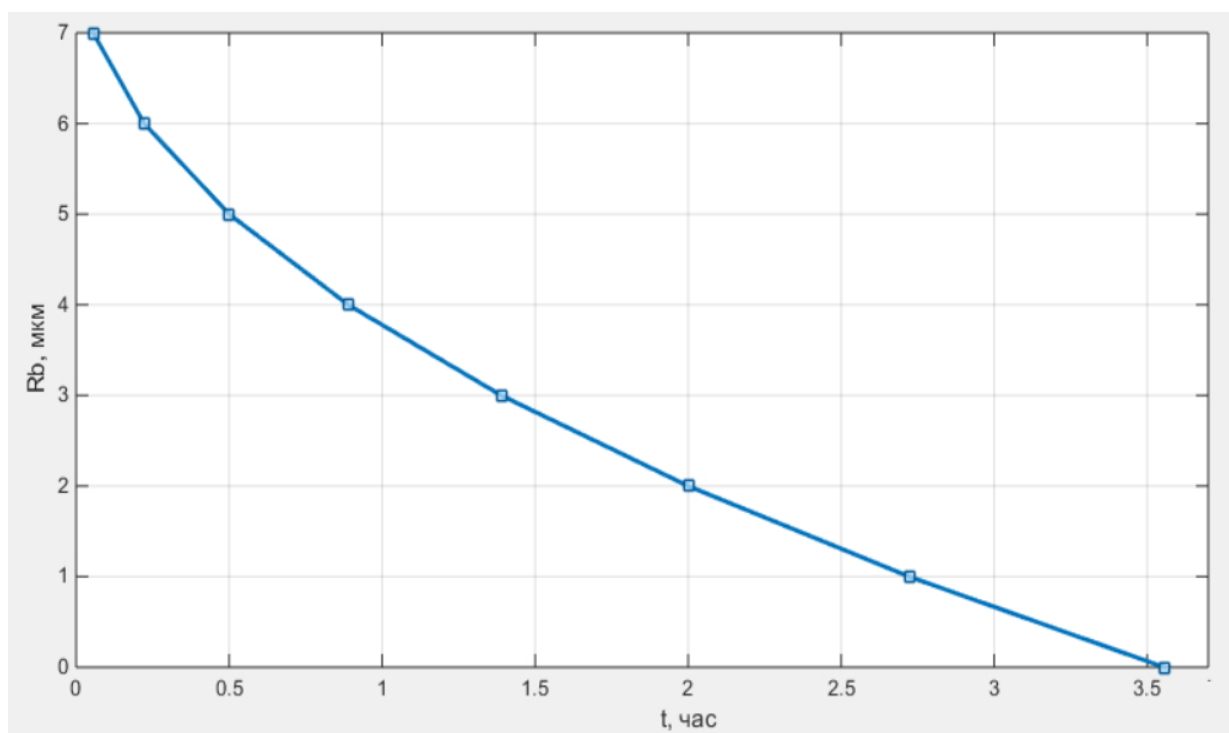


Рис. 2. Зависимость размеров эмульсионных капель (R_b), оставшихся в растворе после отстоя в течение интервала времени t и последующей магнитной сепарации

Литература

1. Смирнов Ю.Г. Математическое моделирование процесса очистки сточных вод от нефти с использованием магнитных наночастиц // Известия Коми научного центра Уро РАН, 2012, №2(10). С.104-107.
2. Лютоев А.А., Смирнов Ю.Г. Разработка технологической схемы очистки сточных вод от нефтяных загрязнений с использованием магнитных наночастиц // Нефтегазовое дело: электрон. науч. журн. 2013. №4. С. 424-435. URL: http://www.ogbus.ru/authors/LyutoevAA/LyutoevAA_1.pdf.
3. Лютоев А.А., Смирнов Ю.Г., Ивенина И.В. Извлечение эмульгированных примесей нефти из воды при помощи высокодисперсных частиц магнетита // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2014. №4. С. 40-45.
4. Ивенина И.В., Смирнов Ю.Г., Лютоев А.А. Оптимизация продолжительности контакта водонефтяной эмульсии с магнетитом в системе очистки воды от нефти // Рассохинские чтения: материалы международной конференции (7–8 февраля 2019 года). В 2 ч. Ч. 2 – Ухта: УГТУ, 2019. – С.194-196
5. Смирнов Ю.Г., Ивенина И.В. Моделирование процесса омагничивания водонефтяной эмульсии наночастицами магнетита // Физико-математическое моделирование систем: материалы XXI Международного семинара. Воронеж: Ф ГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2020. С . 101-105.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. 3-е изд., перераб. — М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит. 1986. 736 с.
7. Auterrieth T., Robert A., Wagner J., Grubel G. The dynamic behavior of magnetic colloids in suspension // J. Appl. Cryst. 2007. V.40 (Supplement). P. 250-253. URL: <http://journals.iucr.org/j/issues/2007/s1/00/cj6004/>.
8. Ланина Т.Д., Литвиненко В.И., Варфоломеев Б.Г. Процессы переработки пластовых вод месторождений углеводородов: монография. Ухта: УГТУ, 2006. 172 с.

NUMERICAL MODELING OF AGGREGATION OF MAGNETITE NANOPARTICLES ON OIL-WATER EMULSION DROPLETS

Yu.G. Smirnov, I.V. Ivenina

Ukhta State Technical University

Abstract: a theoretical substantiation of the process of aggregation of magnetite nanoparticles on drops of water-oil emulsion has been performed. Comparison of the created mathematical model with the results of the experiment demonstrated the relationship between the size of the emulsion droplets and the contact time of the water-oil emulsion with magnetic nanoparticles before the start of magnetic separation for the degree of purification.

Keywords: numerical modeling, oil-water emulsion, aggregation, magnetite nanoparticles.

ЭКСПЕРТНАЯ СИСТЕМА ДИАГНОСТИКИ ПОСТТРАВМАТИЧЕСКОГО СТРЕССОВОГО РАССТРОЙСТВА

А.И. Сунагатуллина, А.М. Стебеньков

Волгоградский государственный медицинский университет
adelinasun2001@mail.ru, stebenkov@inbox.ru

Аннотация: в статье описывается метод диагностики посттравматического расстройства посредством экспертной системы, а также указываются основные проблемы современной диагностики.

Ключевые слова: посттравматическое стрессовое расстройство, Миссисипская шкала, шкала базовых убеждений.

Посттравматическое стрессовое расстройство (ПТСР) – одно из наиболее распространенных психических состояний, связанных с травматическими событиями. Риск развития ПТСР возрастает с увеличением количества пережитых травматических ситуаций. Несвоевременная диагностика расстройства ведет к развитию симптомов, ухудшению состояния пациента. На сегодняшний день существуют необходимые специалисты и методики лечения, способные определить и помочь выйти из данного состояния, но стоимость услуг не соответствует бюджету большинства населения страны.

Автоматизация диагностики посттравматического стрессового расстройства поможет сэкономить время и деньги. Методы, используемые в экспертной системе основаны на критериях МКБ-10 и DSM-IV(III). По данным критериям построены основные опросники на определение посттравматического стрессового расстройства. Данные тесты врачи используют на первой консультации, чтобы понять пациента и поставить первичный диагноз.

Миссисипская шкала была разработана для выраженности ПТСР среди военных. Данная шкала включает утверждения, которые отражают состояние людей, переживших травматическую ситуацию. Существует два варианта Миссисипской шкалы: гражданский и военный. Опросник включает 3 шкалы, образованные из 30 вопросов, которые соотносятся с тремя группами симптомов ПТСР. Вопросы описывают симптомы группы вторжения, симптомы группы избегания, симптомы возбудимости, также присутствуют вопросы, описывающие симптомы чувства вины и суицидальных наклонностей. Данная шкала используется в диагностике у тех, у кого можно ожидать ПТСР и определения его тяжести.

Для измерения влияния психотравмы на базовые убеждения человека используется шкала базовых убеждений. Базовыми убеждениями принимаются такие как: доброта окружающего мира, доброжелательность людей, справедливость мира, контролируемость мира, случайность как принцип распределения происходящих событий, ценность собственного «Я», степень самоконтроля, степень удачи или везения. Шкала состоит из 32 вопросов, определенная сово-

купность которых тоже образуют шкалы. Значение каждой из шкал определяется средним арифметическим баллом по соответствующим утверждениям. Результаты принимаются во внимание, если они сильно занижены.

Актуальность создания экспертной системы диагностики также заключается в скорости обработки результатов и экономии времени. При прохождении теста пациент будет сам себе задавать данные вопросы, он будет наедине с собой.

В связи с событиями, происшедшими в мире за 2014-2022 гг., необходимость тестирования военнослужащих имеет актуальный характер. Помимо их физиологического состояния, следует проверять и психическое. Но из-за нехватки кадров и бюджета данную услугу люди, пережившие боевые действия, не имеют возможности получить. Автоматизация помогла бы выявить начальные стадии посттравматического стрессового расстройства, до их перехода в сложные формы и предотвратить появление других психических заболеваний.

Ситуации, вызывающие данное расстройство, могут быть связаны не только с военными действиями или насилием, но также с болезнями, которые перенес человек.

Возникновение COVID-19 привело не только к множеству смертей среди населения мира, но также нанесло психологическую травму пациентам, перенесшим данный вирус. Из статьи Д.В. Назарова и В.В. Блинниковой «Частота встречаемости посттравматического стрессового расстройства у пациентов, переболевших коронавирусом в тяжелой форме» [5] были рассмотрены результаты по числу людей, у которых было выявлено ПТСР. Исследования показали, что из 53 человек у 64,2% было выявлено данное расстройство.

С учетом событий во время пандемии, можно предположить, что многие, кто перенесли вирус в тяжелой форме и испытали тяжелый стресс, не обращались к психотерапевтам. И в случае, если посттравматическое стрессовое расстройство стало прогрессировать, пациент подвергнут к более опасным психическим последствиям, если вовремя не обратится к специалисту.

Помимо коронавируса существует множество заболеваний, которые несут серьезный ущерб здоровью человека, и если пациент пережил данное заболевание в тяжелой форме, то ему необходимо провериться у специалиста, чтобы убедиться, что он здоров не только физически, но и психически.

По данным МВД, которое фиксирует число потерпевших от насильственных преступлений, известно, что за период с января по сентябрь 2019 года в России совершено 15381 преступление в отношении женщин в сфере семейно-бытовых отношений. За 2018 год произошло:

- 8600 убийств и покушений;
- 23200 умышленных причинений тяжкого вреда здоровью;
- 3400 изнасилований и покушений;
- 31 террористических актов;
- 20100 нарушений правил дорожного движения без человеческих жертв;
- 7200 нарушений правил дорожного движения, закончившиеся смертью одного и более лиц.

Данные события могли привести к возникновению ПТСР у большого количества человек, и нет гарантий, что люди прошли необходимую диагностику после пережитых ситуаций по причине собственного отказа или же по причине того, что им не оказали необходимые услуги.

Таким образом, благодаря автоматизации, первичная диагностика будет бюджетной, доступной и удобной как для пациентов, так и для врачей.

Литература

1. Davidson I.R.T., Foa E.B. Diagnostic issues in post-traumatic stress disorder : Considerations for the DSM-IV // J. Abnorm. Psychol. -1991. — Vol. 100, № 3. — P. 346 — 355.
2. Темур, Г.М. Диагностика отдаленных последствий посттравматического стрессового расстройства // Научно-методический электронный журнал «Концепт». – 2018. №10 (октябрь). – 0,5 п. л. – <http://ekoncept.ru/2018/182031.htm>.
3. Молчанова, Е.С. Посттравматическое стрессовое и острое стрессовое расстройство в формате DSM-V: внесены изменения и прежние проблемы [Электронный ресурс]. - http://www.medpsy.ru/mprj/text2014/t14_1_06.pdf
4. https://aci.health.nsw.gov.au/__data/assets/pdf_file/0004/212971/ACPMH_Ful1_ASD_PTSD_Guidelines.pdf
5. <https://medconfer.com/node/19720>

EXPERT SYSTEM FOR DIAGNOSTICS OF POSTTRAUMATIC STRESS DISORDER

A.I. Sunagatullina, A.M. Stebenkov

Volgograd State Medical University

Abstract: the article describes a method for diagnosing post-traumatic disorder using an expert system, and also indicates the main problems of modern diagnostics.

Keywords: post-traumatic stress disorder, Mississippi Scale, Basic Belief Scale.

ФОРМИРОВАНИЕ ИНЖЕНЕРНЫХ НАВЫКОВ КУРСАНТОВ ПОСРЕДСТВОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Т.И. Сушко, А.Е. Кожемякин, Т.В. Пашнева

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

Аннотация: цель данной работы – показать пример формирования инженерных навыков курсантов на примере реализации физико-математических моделей в расчетах движения свободной поверхности расплава в процессе заполнения формы бронзовой отливки «Втулка» методом VOF (volume of fluid) и уравнения теплопроводности в неоднородной среде посредством CAD/CAE-пакетов при литье в кокиль.

Ключевые слова: литье в кокиль, компьютерное моделирование, прототипирование.

Формирование инженерных навыков курсантов военных вузов является одним из направлений высшей военной школы России, основу которого составляет интеллектуальная деятельность вуза с обучением посредством компьютерного моделирования. Такой подход в современных реалиях времени позволяет подготовить специалистов с широким спектром собственных линий обучения за счет изменения организации учебной деятельности в рамках компетенций специализации при сохранении целостности учебной подсистемы. При этом интенсификация учебного процесса, позволяет поддерживать деятельный подход (заинтересованность-задачи-условия-средства-реализация) будущих инженеров на всех его этапах. Программное обеспечение с компьютерным моделированием заменяют экспериментальные установки, где на входе подаются различные данные, определяемые граничными условиями инженерного задания, а на выходе решение задачи в виде графических и иных представлений, при этом весь процесс выбора оптимального варианта можно наблюдать виртуально.

Компьютерное моделирование в образовательной инженерной среде позволяет получить более быстрые средства передачи и обработки учебного и дополнительного материала, апробировать рациональные предложения в закладке инженерного мышления, как курсанту, так и преподавателю, формирование которого, на наш взгляд, и является одной из целей военного образования. По нашему мнению, системный подход к изучению технологических процессов получения деталей необходимо начинать с изучения фундаментальных и специальных дисциплин, применительно к простым и «прозрачным» объектам по тематике военно-научной секции (ВНС) кафедры физики. Он представляется курсантами в виде решения инженерных задач по созданию и разработки трехмерных моделей деталей используемых при конструировании самолетов в интегрированной среде твердотельного моделирования SolidWorks [1] с оптимизаци-

ей технологии их изготовления посредством компьютерного моделирования процессов затвердевания в системе LVM Flow.

Цель данной работы – пример решения инженерной задачи курсантом, обучающимся по специальности «Техническая эксплуатация и восстановление боевых летательных аппаратов и двигателей», при изучении движения жидкости сплава при затвердевании в процессе заполнения формы отливки «Втулка» из медного сплава на основе уравнения теплопроводности в неоднородной среде посредством CAD/CAE-пакетов при литье в кокиль. В процессе работы курсанты, получают индивидуальные задания с шагами, т.е. алгоритмами действий для решения поставленной задачи. Сочетание информационных технологий, наложенных на специфику военного обучения курсантов, с предложенными методиками является, на наш взгляд, правильным направлением работы, продиктованным настоящими условиями.

Адаптацию подхода к решению инженерной задачи преподаватель для курсанта делит на несколько этапов, как по времени обучения, так и по мере овладения ими специальных дисциплин. Этапы включают в себя материалы и задания как теоретического, так и практического характера, начиная с изучения метода конечных элементов, программы твердотельного моделирования SolidWorks, диаграмм состояния литейных сплавов, уравнение Навье - Стокса для ламинарного течения жидкости, правил построения чертежей. Практическая разработка включает чертежи и трехмерные модели деталей, расчет времени, скорости заполнения формы в неоднородной среде, задание граничных и начальных условий изучение технологии процессов, оптимизацию и выбор оптимальных параметров посредством CAD/CAE-пакетов при литье деталей, в том числе и оборонного назначения.

Для выполнения задач моделирования задаются условия однозначности, характеризующие литейный процесс, в нашей работе это литье в кокиль. Данная модель реализуется в программном комплексе LVM Flow, где решается математическая задача (модель процесса литья), представляющая собой сложную систему дифференциальных уравнений. Теоретический и практический этапы в обучении позволяют сформировать систему инженерных знаний курсантов по специализации с кооперированием знаний по физике, высшей математике, материаловедению, гидродинамике, термодинамике, инженерной графике, деталей машин. Покажем процесс формирования такой матрицы на примере детали «Втулка» с конусностью 1:12, она массой 225 кг и соответственно массой отливки порядка 387,45 кг, сплав БрО5Ц5С5, так он из цветных сплавов изучается первым в курсе «Материаловедение», габаритные размеры представлены на чертеже. К ней имелся комплект необходимой конструкторской документации. Чертеж детали выполнен в программе «Компас», рис. 1. Практический этап оптимизации начинали при помощи модуля «Эскиз» SolidWorks вычерчивая трехмерную модель отливки и системы питания согласно требованиям реального технологического процесса, рис. 2. Связь с системами геометрического моделирования осуществляется через конвертор, преобразующий файлы форматов STL во внутренний формат LVM Flow CV.

В модуле « Начальные условия» задавали размер ячейки сетки, для произведения расчетов МКЭ, объём памяти порядка 150 мегабайт. Выбирали «нормальные» граничные по всем плоскостям, кроме верхней плоскости XY, так как в этом месте происходит по нашему технологическому процессу заливка, рис. 3.

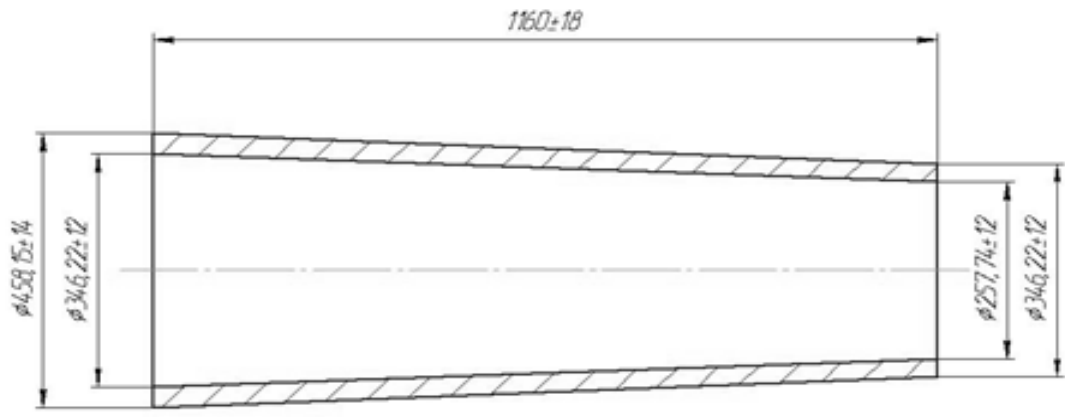


Рис. 1. Чертеж детали

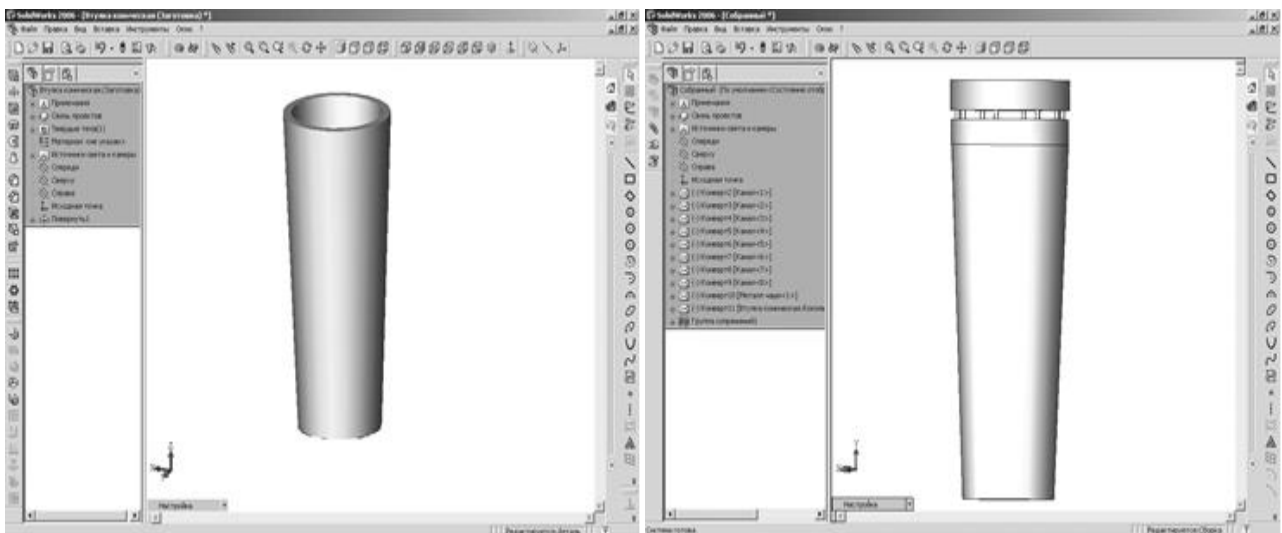


Рис. 2. Трехмерные модели отливки и отливки с питанием

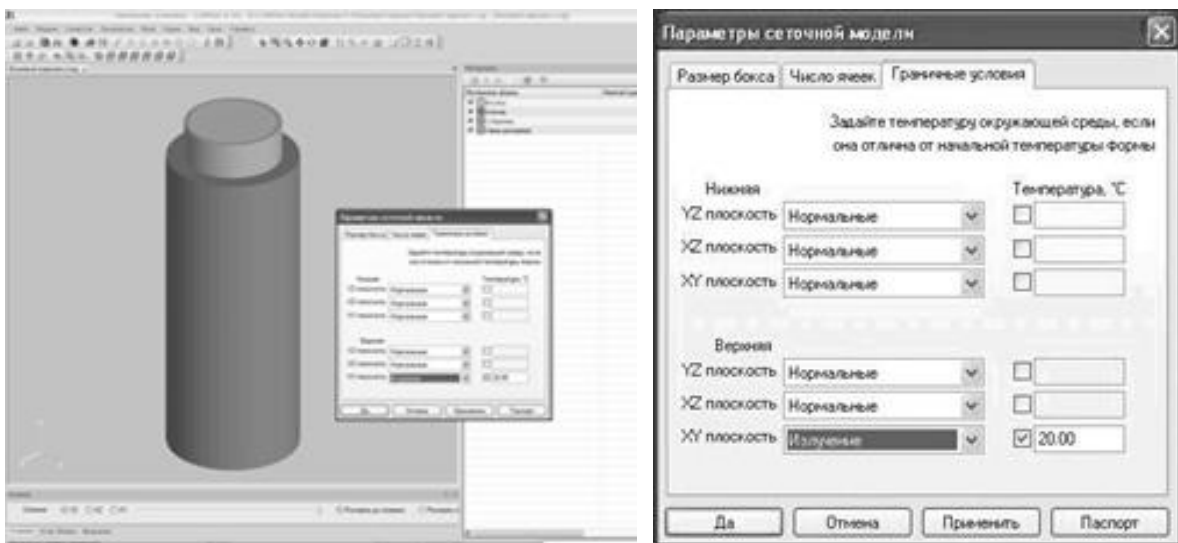


Рис. 3. Граничные условия

Литейные свойства сплава задаются уравнением бинарной диаграммы состояния [2] в справочном банке программы, при этом учитываются внешние воздействия: горение, работа каналов системы нагрева-охлаждения, теплоэлектронагреватели. Курсант задавал материалы формы и марки сплава условия (время заливки расплава порядка 30 с; скорость потока расплава около 15 кг / с; температура заливки сплава по диаграмме состояния 1150 °С; температура нагрева кокиля порядка 250°С; раскрытие кокиля при температуре 500 °С), их физические параметры, литниковую точку и датчики внутри формы и отливки для последующего выведения графиков, рис. 4. Графические зависимости скорости заполнения расплавом формы от времени показаны на рис. 5, реперные точки определялись в местах установки термодатчиков, что позволило виртуально наблюдать скачки скоростей в центральной части отливки при выбранной системе питания, нарушение ее конфигурации, вероятности деформирования стержня во время заливки.

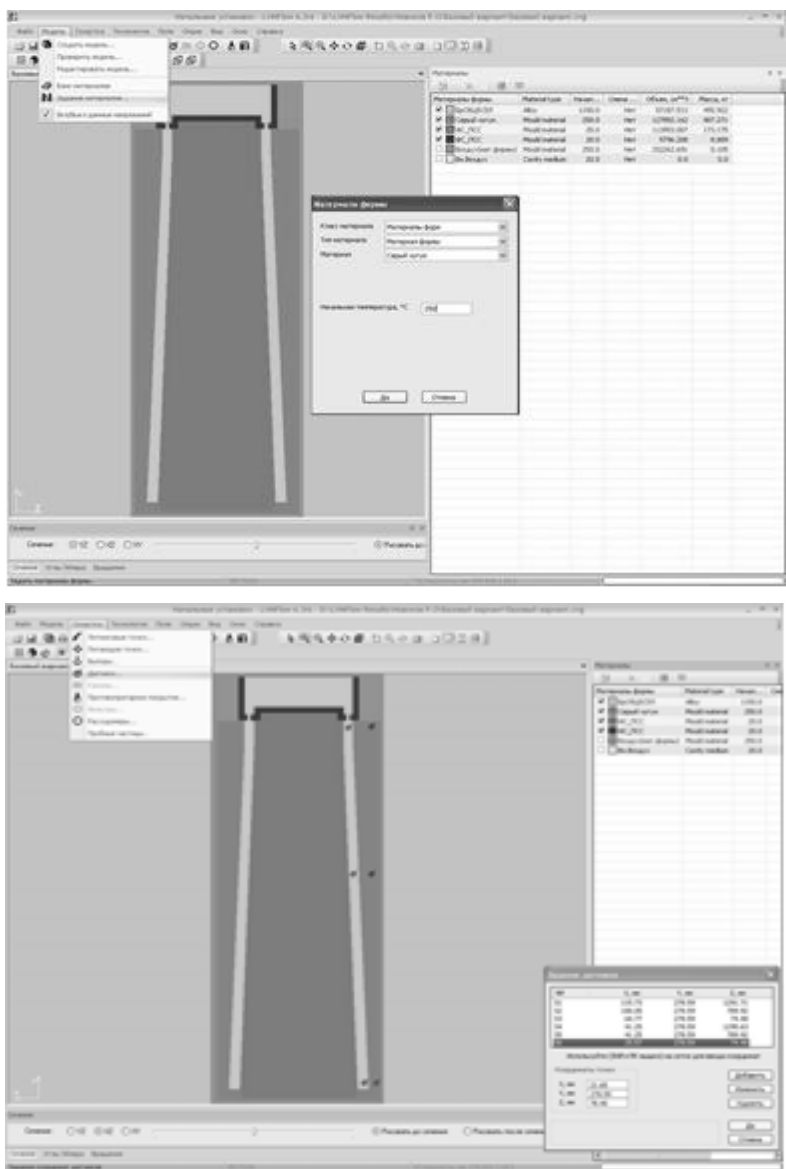


Рис. 4. Задание материалов формы и датчиков

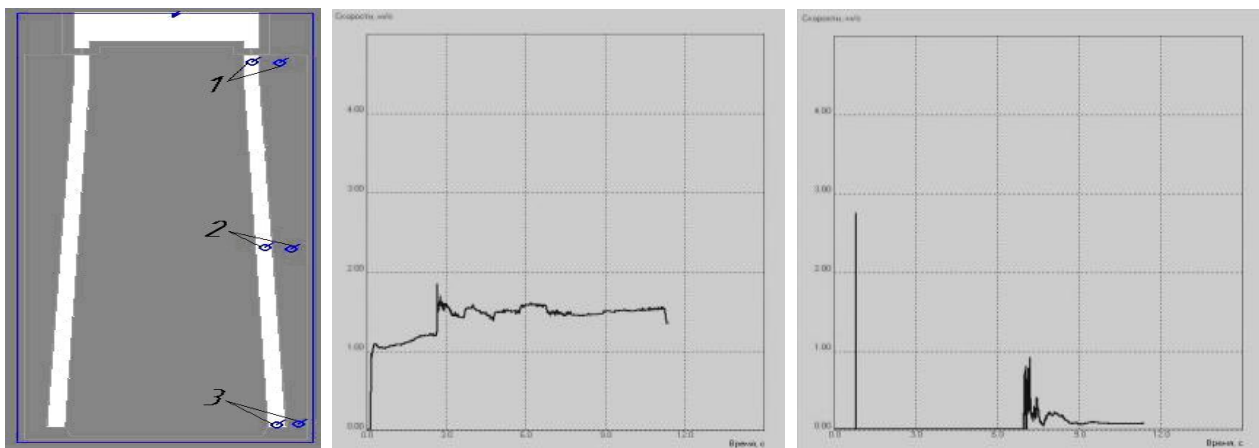


Рис. 5. Зависимость скоростей расплава при заполнении формы от времени заполнения формы

Данные моделирования показали, что изменения, внесенные в конструкцию системы питания отливки, она выбирается с учетом теоретических рекомендаций, выбор способов очистки литейного сплава и технологических свойств с представленными значениями в диапазоне согласно технологическим требованиям позволило научиться выбирать наиболее вероятный вариант изготовления отливки с минимальными затратами и качеством, что и продемонстрировано иллюстративно. По-нашему мнению, курсант освоил навыки физико-математического моделирования, использующиеся в практической деятельности предприятий оборонного комплекса.

Литература

1. 3D CAD Design Software SolidWorks [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.solidworks.ru> (06.10.2018).
2. Баландин Г.Ф. Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердевание и охлаждение отливки/ Г.Ф. Баландин. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1998. – 360 с.

FORMATION OF ENGINEERING SKILLS OF CADETS THROUGH COMPUTER MODELING

T.I. Sushko, A.Je. Kozhemjakin, T.V. Pashneva

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

Abstract: the purpose of this work is to show an example of the formation of engineering skills of cadets on the example of the implementation of physical and mathematical models in the calculation of melt free surface movement in the process of filling the mold of the bronze casting “Bushing” by the VOF (volume of fluid) method and the heat conduction equation in an heterogeneous medium by means of CAD/CAE packages when casting into a child mold.

Keywords: mold casting, computer modeling, prototyping.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ ОТЛИВОК ПРИ ЛИТЬЕ В КОКИЛЬ КАК СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ОБЪЕКТА

Т.И. Сушко, С.В. Ильинский, Т.В. Пашнева

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

Аннотация: цель работы – разработка и построение в САД-системе объемной модели отливки из бронзового сплава при литье в кокиль, анализ процесса литейной технологии посредством LVMFlow на основе визуализации объектов проектирования.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, литейные дефекты, модель отливки.

В настоящее время элементы имитации физических явлений и процессов, невыполнимых в натуральных экспериментах, широко применяются в литейном производстве на основе методов математического моделирования. Они рассматриваются как фундаментальное средство проектирования бизнес-процессов машиностроительных компаний для достижения наиболее важных показателей их деятельности и производственной цели. Моделирование процессов затвердевания отливок предполагает полный учет всех операций, определяющих конкурентоспособность продукции компании. Нахождение этого оптимального множества строится на математической модели, позволяющей находить наилучшее техническое проектное решение. Использование моделирующих литейных программ оказывается эффективным за счет иллюстрации физических явлений, имеющих сложное аналитическое представление, зрительного восприятия статической и динамической информации в графическом представлении, управляемости действия с возможностью изменения значений физических и геометрических параметров, определяющих результат. В немалой степени интерес металлургов к моделирующим программам связан с заменой реального физического эксперимента на компьютерный, который позволяет компании экономить производственные ресурсы и энергию, а также поддерживать имеющееся на предприятии оборудование. В модулях программы LVMFlow моделируются процессы заполнения, затвердевания, образования усадочных раковин и микро- и макропористости, гидродинамические явления движения жидкости при различных скоростях с учетом эффектов сжимаемости, турбулентности и теплопереноса. Численное решение задачи производится методом конечных объёмов.

Цель работы – разработка и построение в САД-системе объемной модели отливки из бронзового сплава при литье в кокиль, анализ процесса литейной технологии посредством LVMFlow на основе визуализации объектов проектиро-

вания. В качестве объекта выбрали деталь «Колесо» из сплава БрА9Ж3Л, он хорошо зарекомендовал себя при литье в кокиль высокой жидкотекучестью (850 мм), хорошей проливаемостью тонких элементов без рассеянной пористости, а сосредоточенные усадочные раковины технологически возможно вывести в прибыль. Отливка ответственного назначения, ее масса 400 кг, рис. 1.

Наиболее экономически выгодным для отливок такого класса является центробежный способ литья, но возможности компании по нему ограничены отсутствием оборудования. В программе трехмерного твердотельного моделирования SolidWorks Russia с помощью модуля «Эскиз» вычерчивали объёмную модель отливки и систем питания с наличием стержней, утеплителей, наполнителей, холодильников, фильтров (рис. 2) для конвертации в формат STL и загрузки в модуль программы LVM Flow.

В модуле «Начальные условия» были заданы: материалы элементов формы (кокиль, стержень, термоизоляционное покрытие) согласно граничным условиям с учетом геометрии отливки и «Банка данных» программы; параметры теплоотвода в различных направлениях по осям, сетка для решения уравнения тепломассопереноса, условия теплообмена, а именно толщина противопригарного покрытия (порядка 1 мм в области отливки и 2 мм в области прибыли); тепловое покрытие (асбест) толщиной 2 мм; а также начальные температуры формы и заливаемого металла – температура нагрева кокиля (чугун ВЧ – 45) порядка 300°C, температура заливки бронзы от 1150 до 1180°C в соответствии с бинарной фазовой диаграммой состояния. Расчетные данные процесса заливки и затвердевания отливки «Колесо» с образо-



Рис. 1. 3D модель детали «Колесо»

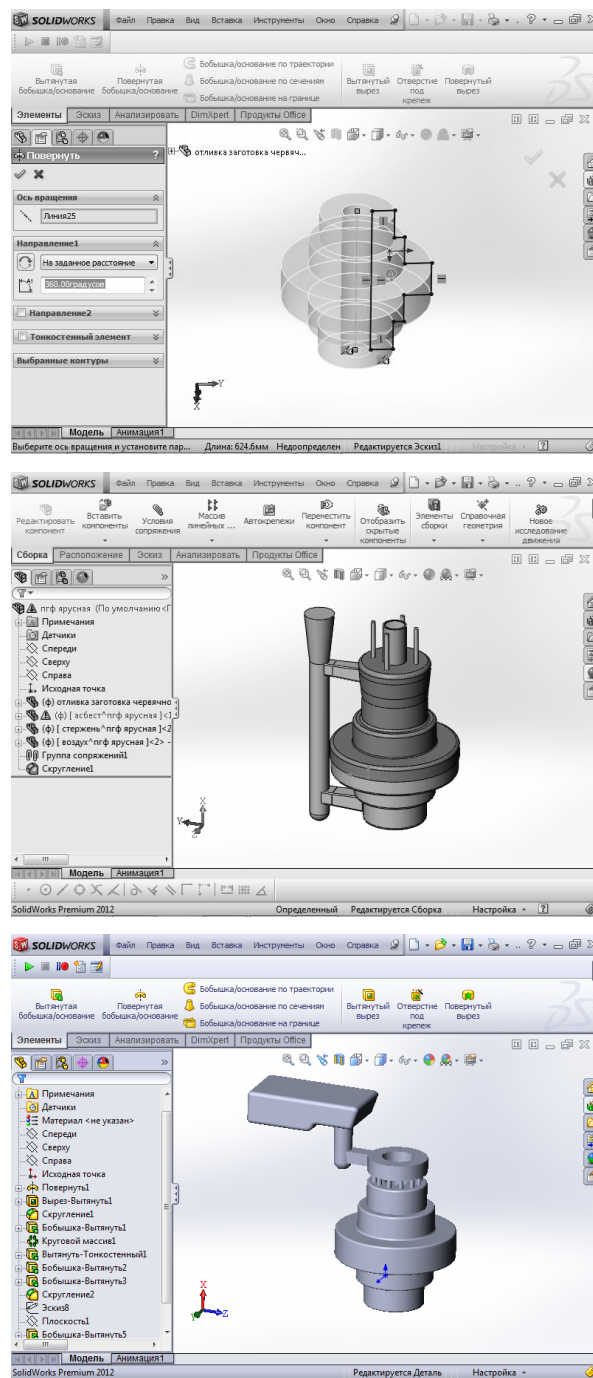


Рис. 2. Объёмная трехмерная модель отливки и системы питания

ванием усадочной раковины порядка 1,8 % от общей массы отливки с системой питания представлены на рис. 3. Основная часть раковины располагается в прибыли, а ее некоторая часть затрагивает тело отливки. Наибольшая величина критерия Нийямы составляет 0,2 К·с/мм и в этих местах возникают очаги микропористости.

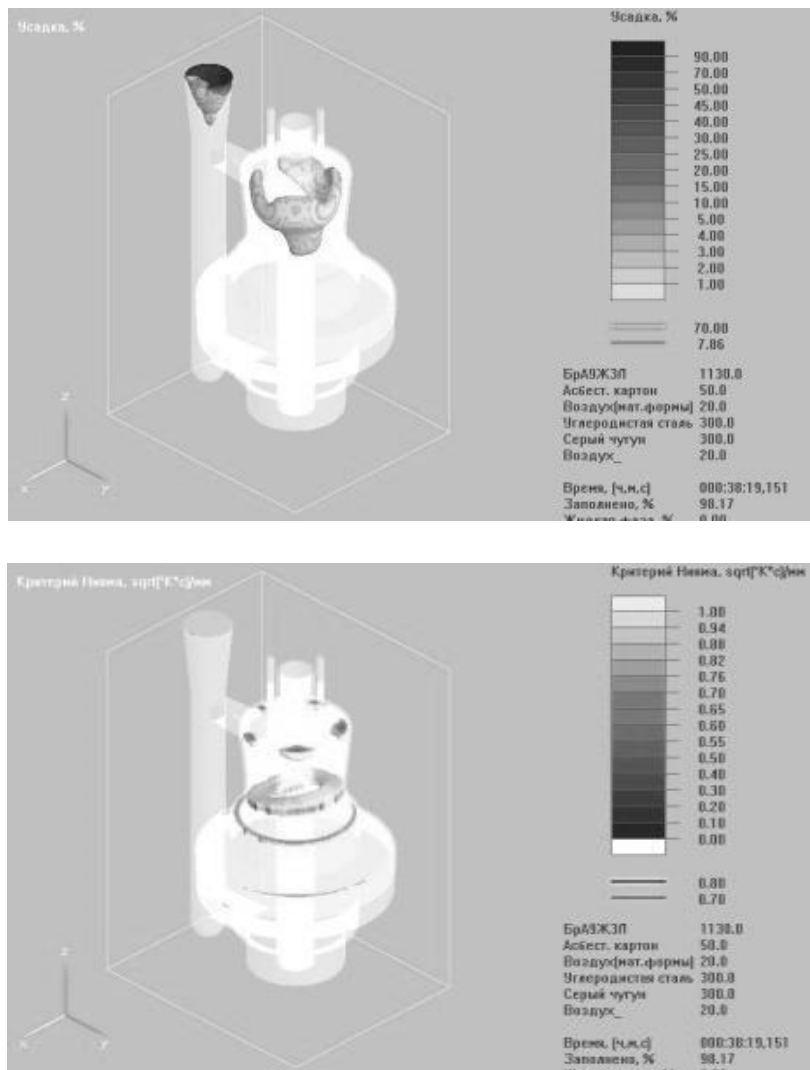


Рис. 3. Усадка и микропористость в отливке

Анализ и распределение температурных полей в теле отливки подтверждает специфику, характерную для теплоотвода от отливки в ярусной системе питания, что объясняется разогревом сплава в центральной части отливки в жидком состоянии продолжительное время и питанием отливки через сложную систему – нижний питатель, затем верхний. Центральная часть отливки постоянно обогревается теплом, приносимым сначала жидким металлом, а потом переходящим от прибыли. Нижняя часть отливки охлаждается довольно интенсивно, например, спустя 4 минуты от начала заливки скорость отвода теплоты составляет 0,24 К·с/мм, а спустя 5 минут – 2,04 К·с/мм, что говорит о ранней кристаллизации сплава в питателе (мы увеличили его длину до 180 мм). Рас-

пределение температурных полей подтверждает направленное затвердевание к прибыли, а теплоизоляция питателя способствует выходу усадочной раковины из тела отливки в прибыль.

Компьютерное моделирование процесса заполнения и затвердевания отливки «Колесо» показало пригодность ярусной системы питания без усадочной раковины в теле отливки и незначительные очаги микропористости, не оказывающие влияния на качество отливки.

Литература

1. 3D CAD Design Software SolidWorks [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.solidworks.ru> (06.10.2018).

2. Баландин Г.Ф. Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердевание и охлаждение отливки / Г.Ф. Баландин. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1998. – 360 с.

COMPUTER SIMULATION OF THE PHYSICAL PROCESSES OF CASTING SOLIDIFICATION WHEN CASTING INTO A MOLD AS A SYSTEM ANALYSIS OF THE OBJECT

T.I. Sushko, S.V. Iliinskii, T.V. Pashneva

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

Abstract: the purpose of the work is the development and construction in a CAD system of a three-dimension model of a casting from a bronze alloy, when casting into a mold, analysis of a foundry technology process using LVM Flow based on the visualization of design objects.

Keywords: computer simulation, casting defect, casting model.

КОМПЬЮТЕРНАЯ ИМИТАЦИЯ ТЕЧЕНИЯ ПРОЦЕССА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ ОТЛИВОК НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ГИДРОДИНАМИКИ

Т.И. Сушко, С.В. Ильинский, Т.В. Пашнева

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

Аннотация: в данной работе рассматривается имитация течения процесса затвердевания отливки «Корпус» на основе аналитических возможностей программы LVM Flow при проведении исследования двухфазного состояния стали 30ХМЛ.

Ключевые слова: литейное производство, отливка «Корпус», процесс затвердевания отливки.

Имитация физических явлений и процессов на основе методов математического моделирования широко применяется в литейном производстве. Она рассматривается как фундаментальное средство проектирования бизнес-процессов машиностроительных компаний для достижения наиболее важных показателей их деятельности и производственной цели, особенно при изготовлении деталей с высокими требованиями по наличию эксплуатационных свойств, где одну из важных ролей играет качество отливки. Получение отливок с минимальным уровнем дефектов (пористость, рыхлоты, раковины) возможно с учетом исследований теоретического и практического характера, особенно в процессах, невыполнимых в натуральных экспериментах.

В данной работе рассматривается имитация течения процесса затвердевания отливки «Корпус» на основе аналитических возможностей программы LVM Flow при проведении исследования двухфазного состояния стали 30ХМЛ. На рис. 1 показаны в трехмерном изображении отливка с элементами системы питания (СП), состоящая из стояка, питателей, прибыли, и конечно-разностная сетка конструкции литейной формы.

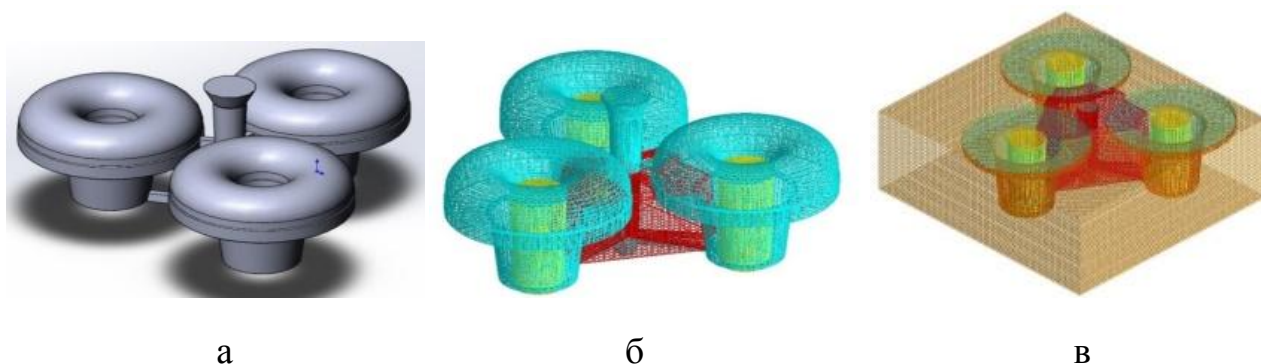


Рис. 1. Модельное представление: отливка «Корпус» с системой питания (а); конечно-разностная сетка отливки с СП (б) и конструкция литейной формы (в)

Имитация процессов затвердевания в прибыльной и подприбыльной частях отливки осуществлялась посредством русифицированной системы LVM Flow с программными модулями, позволяющими визуализировать процессы заполнения расплавом формы и его охлаждения, отражая течение, давление в сплаве, долю жидкой и твердой фазы, а также скопление дефектов как усадочного, так и газового происхождения. Для проведения исследования формировали трехмерную модель отливки и СП посредством SolidWorks, создавая конечно-разностную сетку, состоящую из 54102 элементов для отливки и 263138 элементов для литейной формы. Численное моделирование проводили на основе технологических параметров стали 30 ХМЛ и материала формы, в нашем случае это песчано-жидкостеклянная смесь. Данными для расчета являлись: температура ликвидуса 1500°C; температура солидуса 1450°C; температуру заливки выбирали из диаграммы состояния 1620°C; порог текучести для данной стали около 70%, протекания порядка 30%. Начальную температуру песчаной формы выбирали в пределах комнатной температуры 20°C, толщину формы около 60 мм. В системе компьютерного моделирования состояние двухфазной зоны описывается методом конечных разностей на регулярной прямоугольной разностной сетке посредством макроскопических функций – полей температуры, скорости и других. Также рассчитывается объемная доля жидкой фазы и объемная доля пустоты. Численное моделирование процесса затвердевания отливки показало наличие тепловых узлов в ее теле и степень свободы дефектов по разностной сетке. Процесс затвердевания за определенные промежутки времени в цветной гамме можно наблюдать на рис. 2, с учетом окончания гидродинамических процессов в соответствии с законом $x = K \cdot \tau^{0,5}$.

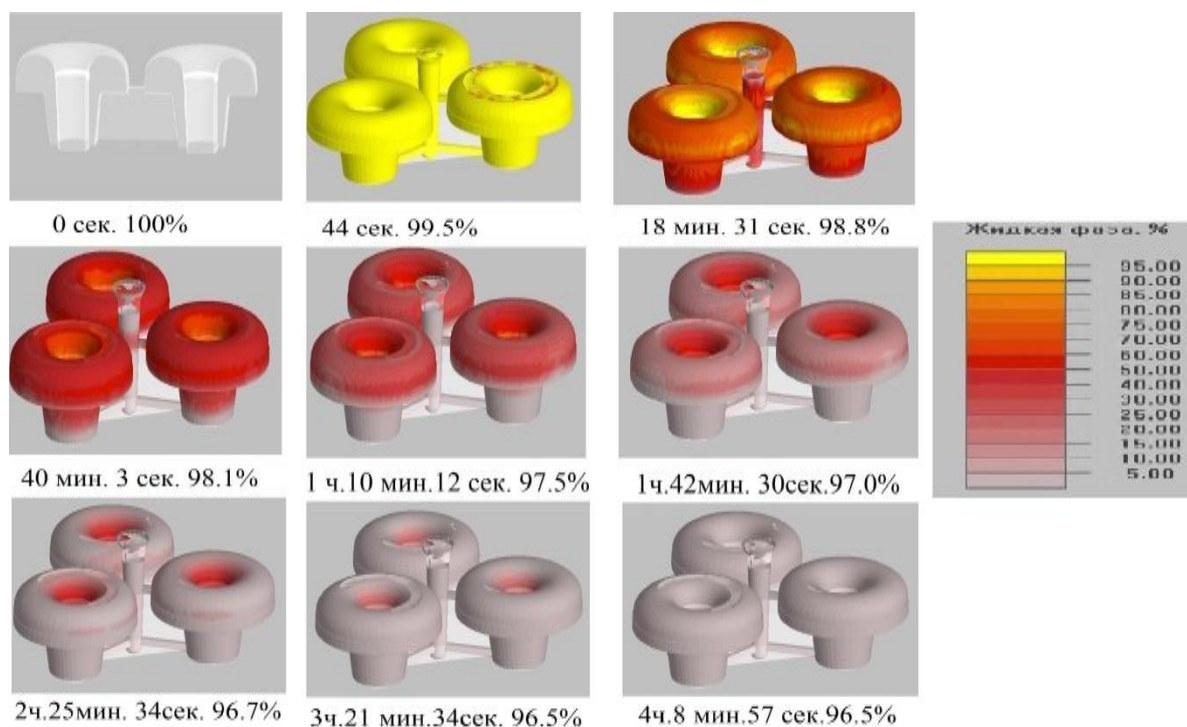


Рис. 2. Затвердевание отливки до полного завершения гидродинамических процессов

Графическая зависимость изменения количества жидкой фазы во времени показана на рис. 3.

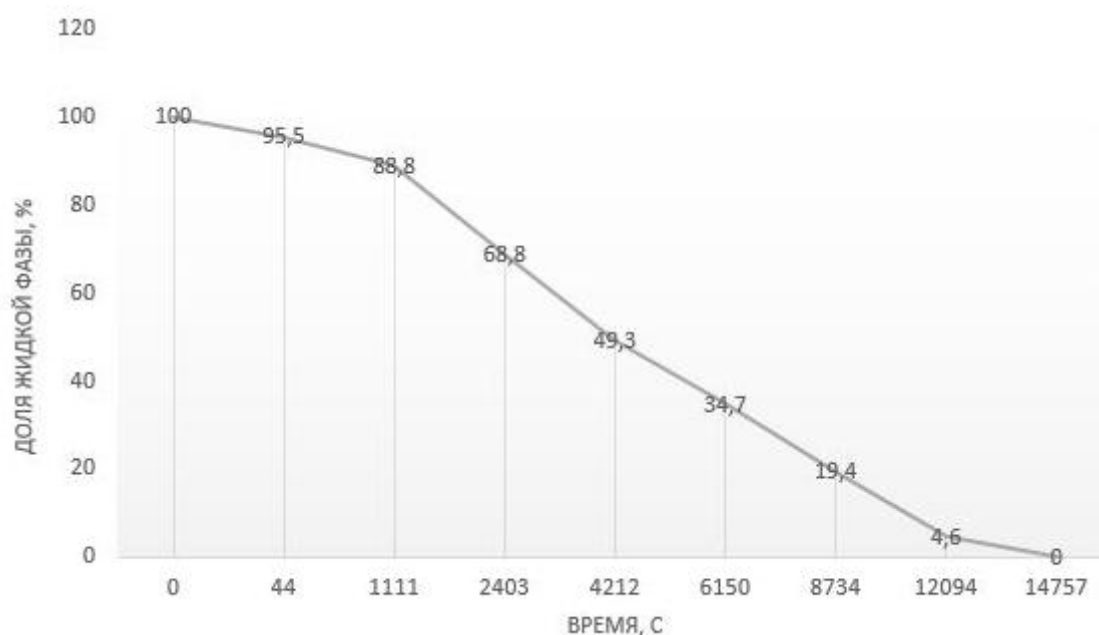


Рис. 3. Зависимость объемной доли жидкого металла на этапе затвердевания от времени

Кинетику процесса затвердевания наблюдали по изменению цветовой гаммы в сечении отливки в разный момент времени согласно рис. 4. Он показывает наличие зон: жидко-твердой и твердо-жидкой, через которую и осуществляется транспорт жидкого сплава в твердый.

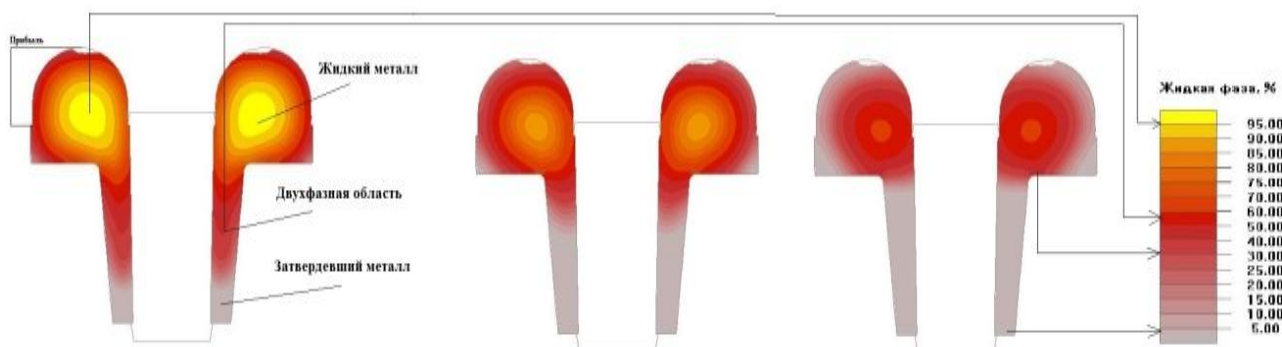


Рис. 4. Изменение фазовых полей в сечении отливки при ее затвердевании

Степень свободы дефектов усадочного происхождения установили виртуально на разностной сетке в прибылях и сечении отливки, газовая пористость (критерий Нияма) сосредоточена в основном в прибыльной зоне (рис. 5). Данное предположение желательно проверить натурным экспериментом.

Количество жидкой фазы в нижней части прибыли отливки на всем этапе затвердевания соответствует теоретическим расчетам; доля жидкой фазы в отливке максимальна в тепловом узле, который быстро охлаждается, и в общем позволяет выполнять принцип направленного затвердевания, но он нарушается

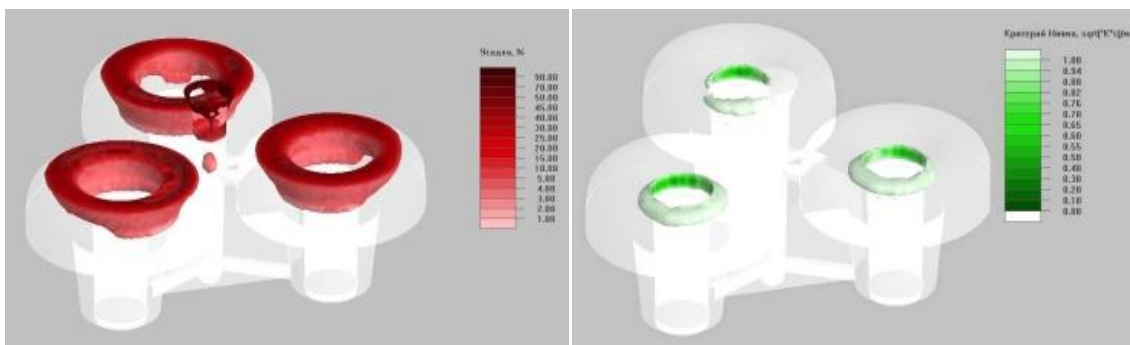


Рис. 5. Усадочные дефекты, которые образовались в прибылях в теле отливки

на границе отливка-прибыль и тем самым не обеспечивает получения качественных отливок. На границе отливка-прибыль большую часть дефектов составляют пористость и рыхлота. Скорость охлаждения в верхней части прибыли максимальна и составляет $0,2 \text{ }^\circ\text{C}/\text{с}$, что объясняется теплоотводом с открытой поверхности прибыли, в тепловом узле отливки скорость охлаждения минимальна и составляет $0,07 \text{ }^\circ\text{C}/\text{с}$.

Литература

1. 3D CAD Design Software SolidWorks [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.solidworks.ru> (06.10.2018).
2. Баландин Г.Ф. Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердевание и охлаждение отливки/ Г.Ф. Баландин. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 1998. - 360 с.
3. Сушко Т.И., Караев Р.Ш., Пашнева Т.В. Междисциплинарное обучение курсантов физике посредством моделирования физических процессов затвердевания [Текст] // Научный альманах. 2019. № 6. С.128–134.

COMPUTER SIMULAYION OF THE CASTING SOLIDIFICATION PROCESS ON THE BASIS OF HYDRODINAMIC EQUATION

T.I. Sushko, S.V. Iliinskii, T.V. Pashneva

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

Abstract: in this paper we consider the simulation of the flow of the solidification process of the casting “Body” based on the analytical capabilities of the LVM Flow program when studying the two-phase state of 30 Kh ML steel.

Keywords: foundry, casting “Body”, casting solidification process.

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ СИСТЕМЫ ПИТАНИЯ ОТЛИВКИ ПОСРЕДСТВОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Т.И. Сушко, А.Е. Кожемякин, Т.В. Пашнева

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

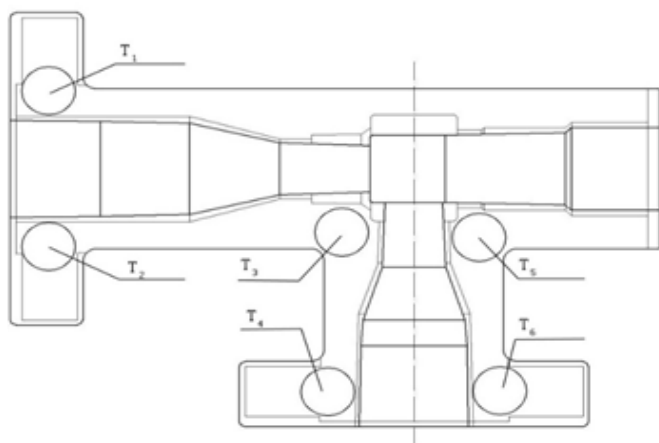
Аннотация: провели компьютерный эксперимент посредством моделирования процессов затвердевания в программе LVM Flow, Трехмерное проектирование позволяет при минимальных затратах получать качественные модели и чертежи проектируемого трехмерного объекта. В данной работе применяем русифицированную систему автоматизированного проектирования SolidWorks.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, система питания отливок, усадочные дефекты, газовая пористость.

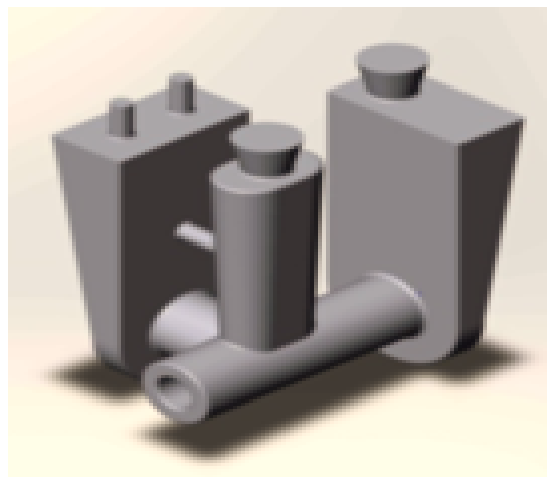
Одним из направлений в современном машиностроении остается автоматизация проектных работ различного характера на основе специализированных систем компьютерного моделирования литейных процессов. Многообразие задач, решаемых при этом, сводится к разработке технической, организационной и экономической документации производственного цикла, который направлен на разработку наиболее экономичных вариантов систем питания отливок, за счет конструирования литниковых систем и подборки оптимальных технологических параметров литья. Обеспечение плотной литейной структуры с высокой герметичностью является одной из трудновыполнимых задач в литье по выплавляемым моделям (ЛВМ), для ее решения необходима отработка с оптимизацией питающей системы отливки. Необходимо учитывать тот факт, что отливки сложной конфигурации имеют разнотолщинные элементы, находящиеся в процессе затвердевания в неравномерных условиях, и в массивных узлах металл затвердевает в последнюю очередь, следствием этого будут усадочные дефекты и газовая пористость. Процесс затвердевания развивается последовательно и регулируется конструкцией питания, если дефекты переходят в прибыльную отрезную часть. Вся проблема сводится к оптимизации объёма и размерной конфигурации прибыли, для этого часто используют эмпирические формулы, которые носят вероятностный характер, и заложенный расчет приводит к чрезмерному расходу жидкого сплава, а это неэкономично и ресурсо- и энергозатратно для предприятия.

В качестве объекта выбрана массивная отливка «Корпус клапана» из стали 30ХМЛ, необходимая для работы в нефтегазовом секторе страны. Проведен анализ работы прибыли с элементами литниковой системы по заводскому экспериментальному варианту. На рис. 1 показан чертеж отливки с массивными узлами (а) и заводской системой питания (б), масса отливки с системой питания порядка 290 кг, выход годного почти 29%, его можно определить как показа-

тель неэффективности работы прибыли, хотя он входит в допустимый нижний предел при данном способе литья. Заводской вариант представляет типовую систему прибылей с соединительными каналами с непосредственным подводом металла в прибыль при горизонтальном расположении отливки. Такая питающая система как рекомендуется в литературе, так и часто используется для корпусных отливок.



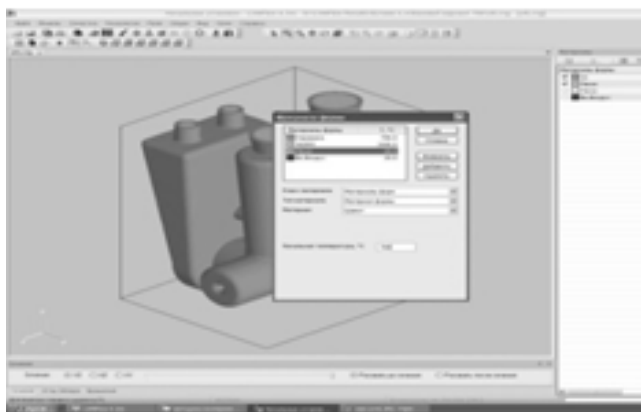
а



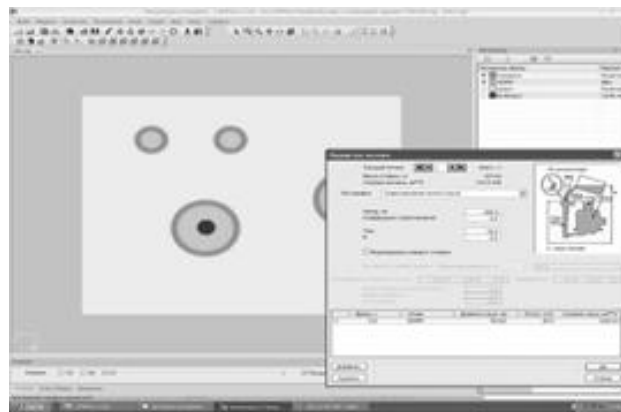
б

Рис. 1. Отливка с массивными узлами (а) и трехмерная модель заводской системой питания (б)

Для выявления мест, подверженным дефектам усадочного характера, в модуле «Полная задача» выполнено моделирование с учетом заполнения формы расплавом. Оболочковая форма строилась в модуле 3D Импорт, виртуальными термодатчиками в отливке и в форме определялись согласно разностной сетке литниковые точки (места питания металлом), рис. 2.



а



б

Рис. 2. Построение оболочковой трехмерной формы (а) и задание литниковой точки (б)

Заливка проводилась при 1600°C в оболочковую форму, состоящую из тринадцати слоев покрытия, нагретую до 700°C, минимальная толщина слоя

составила порядка 25 мм, формовка с наполнителем, время заливки по нашим ожиданиям оказалось около 40 с. Компьютерный расчет не дал желательных результатов, указал на наличие дефектов в реперных точках и как, следствие, на невыполнения условий последовательного затвердевания. На рис. 3 показаны двухмерное и трехмерное изображение отливки с дефектом усадочной природы, где можно наблюдать места скопления жидкого сплава с усадкой порядка 3-4% в пределах расчетного узла по методу наименьших квадратов, в то время когда отливка полностью затвердела.

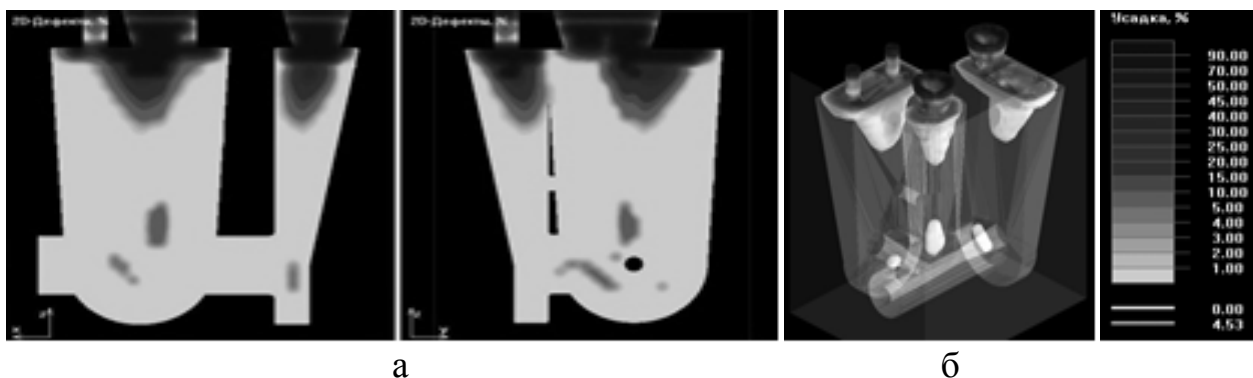


Рис. 3. Двухмерное (а) и трехмерное (б) изображения дефекта усадочной природы

Наблюдение процесса затвердевания помогло найти ответ на вопрос о причине возникновения усадки в теле отливки, рис. 4. По нашему мнению, подвод металла в центральную прибыль неравномерно разогревает керамическую оболочку в месте соединения проходных каналов, вследствие чего питатели, необходимые для оптимального заполнения огнеупорной керамической формы, затвердевают с большей скоростью, чем прибыль, а не наоборот, то есть нарушается принцип направленного затвердевания, что приводит к образованию наблюдаемых дефектов.

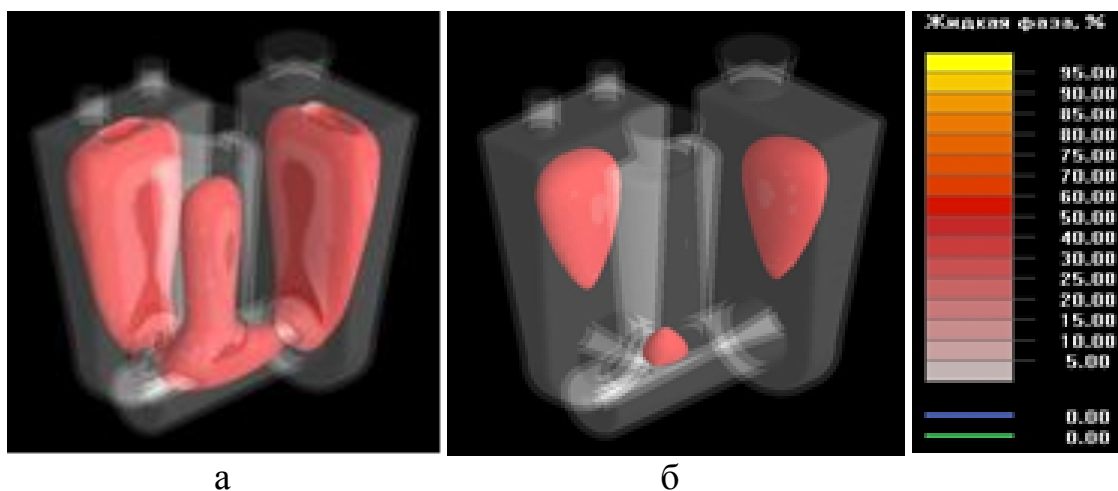


Рис. 4. Процесс затвердевания жидкого металла в объеме (а) и в 2D (б) на 25 минуте

Таким образом, система питания с центральной прибылью не обеспечивает направленное затвердевание отливки и как, следствие, в теле отливки возникают дефекты усадочного характера, что и подтверждается представленным расчетом. По нашему мнению, конструкция питания требует доработки, чтобы усадочные дефекты концентрировались в прибыльной отрезной части.

Литература

1. 3D CAD Design Software SolidWorks [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.solidworks.ru> (06.10.2018).
2. Баландин Г.Ф. Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердевание и охлаждение отливки/ Г.Ф. Баландин. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1998. - 360 с.
3. Сушко Т. И., Караев Р. Ш., Пашнева Т. В. Междисциплинарное обучение курсантов физике посредством моделирования физических процессов затвердевания [Текст] // Научный альманах. 2019. № 6. С.128–134.

EVALUATION OF THE EFFICIENCY OF THE CASTING POWER SYSTEM BY COMPUTER SIMULATION

T.I. Sushko, A.Je. Kozhemjakin, T.V. Pashneva

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

Abstract: we conducted a computer experiment by modeling solidification process in the LVM-Flow program. Three-dimensional design allows us to obtain high-quality models and drawings of a three-dimensional object being designed at minimal cost. In this work we use the Russified Solid Works computer-aided design system.

Keywords: computer simulation, casting supply system, shrinkage defects, gas porosity.

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ РАСЧЕТА ПЛАНА ПРОИЗВОДСТВА ТОВАРА, ОБЕСПЕЧИВАЮЩЕГО МАКСИМАЛЬНУЮ ПРИБЫЛЬ ОТ ЕЕ РЕАЛИЗАЦИИ, В СРЕДЕ MATHCAD

А.А. Катрахова, В.С. Купцов, А.В. Зотова

Воронежский государственный технический университет
vckuptsov@rambler.ru

Аннотация: решается задача построения математической модели, пригодной для нахождения наиболее рациональной области применения и последующей оптимизации. В качестве примера использовалось влияние типа производства на выбор метода получения заготовки. Получено аналитическое описание в среде MathCAD.

Ключевые слова: математическая модель, область применения, оптимизация, целевая функция.

В работе используется метод, который позволяет определить максимум или минимум функции $f(x_1, \dots, x_n)$ с условиями ограничения на переменные. Идея метода заключается в переходе от задачи поиска условного экстремума к задаче отыскания безусловного экстремума.

Рассмотрим следующую задачу. На мебельной фабрике из стандартных листов фанеры необходимо вырезать заготовки трёх видов в количествах, равных 24, 31 и 18 шт.

Лист фанеры разрезан на заготовки двумя различными способами. Количество получаемых заготовок при конкретном раскрое приведены в таблице. Также в таблице указаны величины отходов при определенном способе раскроя одного листа.

Вид заготовки	Количество заготовок при раскрое по способу	
	I	II
1	2	6
2	5	4
3	2	3
Величина отходов (см ²)	12	16

Задача состоит в том, чтобы определить: а) количество листов фанеры; б) какой способ следует применить, чтобы было получено не меньше нужного количества заготовок при минимальных отходах. Также необходимо провести анализ данного решения.

Пусть x и y – количество листов фанеры для данной раскройки. В качестве целевой функции $f(x, y)$ определим суммарное количество отходов:

$$f = 12x + 16y \rightarrow \min_{\{x, y\}}.$$

Количество заготовок при раскрое двумя способами будем принимать за ограничения на переменные x и y .

Задача поиска условного экстремума будет записана так:

$$f = 12x + 16y \rightarrow \min_{\{x, y\}}, \quad \begin{array}{l} 2x + 6y \geq 24, \\ 5x + 4y \geq 31, \\ 2x + 3y \geq 18, \end{array} \quad \begin{array}{l} x \geq 0, \\ y \geq 0. \end{array}$$

Решим задачу следующим образом.

1) приведем ограничения к виду $\varphi(x) \leq 0$:

$$\begin{array}{l} 24 - 2x - 6y \leq 0, \\ 31 - 5x - 4y \leq 0, \\ 18 - 2x - 3y \leq 0, \end{array} \quad \begin{array}{l} -x \leq 0, \\ -y \leq 0. \end{array}$$

2) введем дополнительные переменные z_1, z_2, z_3, z_4, z_5 , тогда ограничения будут вида:

$$\begin{array}{l} 24 - 2x - 6y + z_1^2 = 0, \\ 31 - 5x - 4y + z_2^2 = 0, \\ 18 - 2x - 3y + z_3^2 = 0, \end{array} \quad \begin{array}{l} -x + z_4^2 = 0, \\ -y + z_5^2 = 0. \end{array}$$

3) функция Лагранжа данной задачи будет иметь вид:

$$\Phi(x, y, z_1, z_2, z_3, z_4, z_5, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5) = 12x + 16y + \lambda_1(24 - 2x - 6y + z_1^2) + \lambda_2(31 - 5x - 4y + z_2^2) + \lambda_3(18 - 2x - 3y + z_3^2) + \lambda_4(-x + z_4^2) + \lambda_5(-y + z_5^2).$$

4) Необходимые условия $\nabla\Phi(x, \lambda) = 0$ могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{array}{l} \frac{\partial\Phi}{\partial x} = 12 - 2\lambda_1 - 5\lambda_2 - 2\lambda_3 - \lambda_4 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial y} = 16 - 6\lambda_1 - 4\lambda_2 - 3\lambda_3 - \lambda_5 = 0; \\ \frac{\partial\Phi}{\partial z_1} = 2\lambda_1 z_1 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial z_2} = 2\lambda_2 z_2 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial z_3} = 2\lambda_3 z_3 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial z_4} = 2\lambda_4 z_4 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial z_5} = 2\lambda_5 z_5 = 0; \\ \frac{\partial\Phi}{\partial \lambda_1} = 24 - 2x - 6y + z_1^2 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial \lambda_2} = 31 - 5x - 4y + z_2^2 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial \lambda_3} = 18 - 2x - 3y + z_3^2 = 0; \\ \frac{\partial\Phi}{\partial \lambda_4} = -x + z_4^2 = 0; \quad \frac{\partial\Phi}{\partial \lambda_5} = -y + z_5^2 = 0. \end{array}$$

5) полученную систему нелинейных уравнений можно решить с помощью средств математического пакета MathCAD. Программа решения приведена ниже.

```

x := 1    z1 := 0    z2 := 0    z3 := 0    z4 := 0    z5 := 0
y := 1    λ1 := 0    λ2 := 0    λ3 := 0    λ4 := 0    λ5 := 0
+
Given
12 = 2λ1 + 5λ2 + 2λ3 + λ4
16 = 6λ1 + 4λ2 + 3λ3 + λ5
2λ1 · z1 = 0    2λ3 · z3 = 0
2λ2 · z2 = 0    2λ4 · z4 = 0
2λ5 · z5 = 0
24 - 2x - 6y · z12 = 0    31 - 5x - 4y + z22 = 0
18 - 2x - 3y + z32 = 0
-x + z42 = 0    -y + z52 = 0
x1 := Find(x, y, z1, z2, z3, z4, z5, λ1, λ2, λ3, λ4, λ5)
x1T = (3 4 0.866 0 0 1.732 2 0 0.571 4.571 0 0)
(x, y) := x1T
x = 3
y = 4
12x + 16y = 100

```

Рис. 1

В результате расчета получено следующее решение:

$$x = 3, \quad y = 4, \quad f(x, y) = 100,$$

т.е. три листа необходимо раскроить первым способом, а четыре листа – вторым способом, при этом $f(x, y) = 100$ – минимальное количество отходов.

Для проверки правильности результатов решаемой задачи нахождения условного экстремума проводится анализ.

В данной задаче экстремум можно найти двумя способами (графически и аналитически). Рациональным способом решения является аналитический способ решения в программе MathCAD.

Решение этой системы и проверку граничных условий можно провести аналитическим способом, который представлен на рис. 2.

Проверка граничных условий $2x + 6y = 24$, $5x + 4y = 31$, $2x + 3y = 18$ показывает полное совпадение результатов с аналитическим способом решения этой задачи и подтверждает строгое выполнение условий.

Можно отметить, что данный алгоритм решения может быть реализован на любом формаль-

```

x := 0    + y := 0
Given
2x + 6y = 24
5x + 4y = 31

(x, y) := Find(x, y)
x = 4.091
y = 2.636
12x + 16y = 91.273

```

Рис. 2

ном языке. Математический пакет MathCAD в данном случае выбран из-за его удобного интерфейса. Однако решение этой задачи данным методом получено ценой повышения ее размерности. Этот недостаток ограничивает область его применения сравнительно простыми задачами, и с повышением числа переменных этой задачи и ограничений решение лучше реализовать численными методами математического программирования.

Литература

1. Алексеев В.М., Тихомиров В.М., Фомин О.В. Оптимальное управление. – М.: Наука, 1979. – 430 с.
2. Пшеничный Б.М., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. – М.: Наука, 1975. – 350 с.
3. Далингер В.А., Симонженков С.Д. Метод множителей Лагранжа и его применения: учеб. пособие. – Омск: – Изд-во ООО «Амфора», 2019. – 472 с.
4. Ашманов С.А., Тимохов А.В. Теория оптимизации в задачах и упражнениях. – М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1991. – 448 с.

CONSTRUCTION OF A MATHEMATICAL MODEL FOR CALCULATING A PRODUCTION PLAN FOR A PRODUCT THAT ENSURES MAXIMUM PROFIT FROM ITS IMPLEMENTATION IN THE MATHCAD ENVIRONMENT

A.A. Katrakhova, W.S. Kuptsov, A.V. Zotova

Voronezh State Technical University

Abstract: the problem of constructing a mathematical model suitable for finding the most rational field of application and subsequent optimization is solved. As an example, the influence of the type of production on the choice of the method of obtaining the workpiece was used. An analytical resolving is obtained using Mathcad.

Keywords: mathematical model, scope of application, optimization, purpose function.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОДНОЧАСТИЧНОГО ТОКА В НЕУПОРЯДОЧЕННОМ $S-I-N$ КОНТАКТЕ

**В.Я. Кирпиченков, Н.В. Кирпиченкова, А.А. Косач,
К.В. Крыжановский, И.А. Вяткина**

Южно-Российский государственный политехнический университет
(Новочеркасский политехнический институт) имени М.И. Платова
wkiprich@rambler.ru

Аннотация: показано, что присутствие случайных узкозонных квантовых закороток в грязном $S-I-N$ контакте приводит к значительному недостатку одночастичного тока по сравнению с одночастичным током, рассчитанным для этого же контакта в рамках существующей сейчас теории для чистых $S-I-N$ контактов. Основываясь на численных оценках одночастичного тока, предложена принципиальная схема эксперимента по обнаружению эффекта недостатка одночастичного тока в грязных $S-I-N$ контактах.

Ключевые слова: неупорядоченные системы, квантовые резонансно-перколяционные траектории, квантовые закоротки, примеси, грязный $S-I-N$ контакт, одночастичный ток, туннельный контактанс, мезоскопические флуктуации

1. Введение

Экспериментальным исследованиям низкотемпературных токов в $S-I-N$ -структурах посвящено достаточно большое количество работ, инициированных, главным образом, перспективами практического применения этих структур в качестве низкотемпературных термометров [1, 2], устройств электронного охлаждения [1, 3], чувствительных приемников электромагнитного излучения [4].

Среди экспериментальных работ последнего времени отметим работу [5], в которой, среди прочего, проведено многостороннее исследование низкотемпературных одночастичного и андреевского (двухчастичного) токов в $S-I-N$ -структурах и сравнение полученных экспериментальных результатов с немногочисленными известными теоретическими результатами, полученными для одночастичного тока в работе [6].

Авторами работы [5] констатируется, что обнаруженные в ней различия результатов эксперимента и существующей теории обусловлены, по-видимому, тем, что в существующей теории не учтены все факторы, существенно влияющие на проводимость $S-I-N$ -структур. В качестве одного из таких факторов ими отмечено возможное влияние на характеристики контактов процессов взаимодиффузии материалов контактов, однако, установить это экспериментально, не разрушая образец, не представляется возможным.

Итак, в результате процессов диффузии атомов из берегов $S-I-N$ -контакта, а также по каким-либо другим причинам, в оксидном I -слое контакта могут оказаться, хотя бы и в малых концентрациях, случайно распределенные по объему этого слоя немагнитные примеси, квазилокальные энергетические уровни которых находятся в ближайшей окрестности энергии Ферми контакта. В такой

слабо неупорядоченной системе примесей всегда имеются случайные квантовые закоротки [7], которые могут оказывать существенное влияние на одночастичный низкотемпературный ток, не учитываемое существующей теорией. Таким образом, как внутренняя логика развития квантовой теории неупорядоченных систем [8], так и современное состояние эксперимента, технологий изготовления и применения $S-I-N$ -контактов, актуализируют задачи теоретического исследования низкотемпературного квантового электронного транспорта в неупорядоченных (грязных) $S-I-N$ -контактах.

Здесь рассматривается только одночастичный ток в грязном $S-I-N$ -контакте, вклад которого в полный ток может быть не только теоретически, но и экспериментально выделен [5]. В существующей теории для чистых (без примесей в I -слое) контактов выражение для одночастичного тока, справедливое в области низких температур $0 \leq T \ll \Delta_0$ и напряжений $0 \leq |eV| \ll \Delta_0$, имеет следующий вид [6]:

$$J(V, T) = \frac{G_n}{e} \sqrt{2\pi\Delta_0 T} e^{-\frac{\Delta_0}{T}} \operatorname{sh}\left(\frac{eV}{T}\right), \quad (1)$$

где G_n – линейный кондактанс контакта в нормальном ($N-I-N$) состоянии при $T = 0$.

2. Физическая модель грязного $S-I-N$ контакта

В области температур $0 \leq T \ll \Delta_0$ и напряжений $0 \leq |eV| \ll \Delta_0$ рассматривается модель грязного $S-I-N$ -контакта [7], представляющего собой сэндвич из сверхпроводника и нормального металла, разделенных плоским тонким слоем изолятора толщиной L и площадью S с вкрапленными в него одинаковыми притягивающими электроны немагнитными примесями. Регулярный (не возмущенный примесями) барьерный потенциал I -слоя равен $U_0 = \text{const} > \mu$ (μ – электронный химпотенциал контакта в равновесии), электроны в I -слое предполагаются невзаимодействующими как между собой, так и с другими квазичастицами, а их подбарьерное рассеяние на примесях – упругим. Энергия актуального для данной задачи однопримесного электронного уровня $\varepsilon_0 = \mu$, радиус локализации электронного состояния на нем $\alpha^{-1} = [2m_e(U_0 - \varepsilon_0)/\hbar^2]^{1/2}$. По объему $V_i = LS$ неупорядоченного I -слоя распределены $N_i \gg 1$ примесей макроскопически однородно с плотностью $n = N_i/V_i$ ($c = n\alpha^{-3}$ – их безразмерная концентрация). В таком слабо неупорядоченном ($c \ll 1$) I -слое достаточно большой площади всегда имеются маловероятные флуктуации пространственного расположения примесей в виде уединенных слабоизвилистых квазиэквидистантных цепочек из $m = 1, 2, 3, \dots$ примесей, соединяющих противоположные берега контакта. В пространственно узких трубках вдоль этих цепочек сосредоточены квантовые резонансно-перколяционные траектории (КРПТ) электронов [9], с которыми ассоциированы узкие энергетические зоны резонансной тун-

нельной прозрачности (туннельные резонансы), энергетические ширины которых $\gamma_m \ll \varepsilon_0, \mu$, а коэффициенты упругого прохождения электронов вдоль этих цепочек $D_m \leq 1$, в отличие от экспоненциально малых коэффициентов прохождения вдоль других путей.

Такие уединенные квазипериодические цепочки примесей являются своеобразными случайными узкозонными квантовыми закоротками в слабо неупорядоченном I -слое, и, хотя вероятности их образования весьма малы, именно они в достаточно широких интервалах малых концентраций примесей определяют характер упругого низкотемпературного электронного транспорта в грязных $M-I-M$ контактах ($M = N, S$), краткий обзор соответствующих работ приведен в [10]. Для электронов проводимости в N -береге контакта предполагается изотропный квадратичный закон дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m_e$, а S -берег контакта описывается моделью БКШ (Бардина-Купера-Шриффера).

Отметим два существенных аспекта рассматриваемой здесь модели случайных квантовых закороток в слабо неупорядоченном I -слое [8, 9].

1. «Идеальная» m -примесная квантовая закоротка, имеющая наибольшую (при фиксированном значении m) энергетическую ширину ассоциированного с ней туннельного резонанса, представляет собой кратчайшую, строго периодическую цепочку из m примесей, соединяющую противоположные берега контакта. Однако очевидно, что вероятности реализации (статистические веса) таких идеальных квантовых закороток в слабо неупорядоченном I -слое равны нулю. Как это количественно показано в [8, 9], вероятности реализации «реальных» квантовых закороток определяются совместным выполнением трех, упомянутых выше условий: квазиэквидистантности, слабой извилистости и уединенности цепочек примесей, соединяющих берега контакта. На качественном уровне смысл этих условий состоит в следующем. Условия квазиэквидистантности и слабой извилистости цепочек задают необходимую малость всех возможных вариаций положений примесей в реальной закоротке от их положений в идеальной, что, с одной стороны, сохраняет резонансные свойства квантовых закороток, а с другой – обеспечивает им ненулевой статистический вес. Условие уединенности обеспечивает отсутствие вблизи квантовой закоротки «посторонних» – не принадлежащих этой закоротке примесей, которые в противном случае, за счет «туннельного взаимодействия» с ближайшими примесями квантовой закоротки «разрушают» туннельный резонанс вдоль этой закоротки.

2. При $T = 0$ масштаб мезоскопических флуктуаций резонансного туннельного контактанса G_n грязного контакта в нормальном состоянии определяется следующим соотношением [8]:

$$\delta \equiv \frac{\left\langle \left(G_n - \langle G_n \rangle \right)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}}}{\langle G_n \rangle} = \alpha^{-1} (cS)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{c\pi (\alpha L)^3}{2} \right], \quad (2)$$

здесь $\langle \dots \rangle$ – символ усреднения по ансамблю случайных примесных конфигураций $\Gamma_N = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$, где \mathbf{r}_i ($i=1, 2, \dots, N$) – случайные координаты примесей в I -слое.

Из требования $\delta \ll 1$ следует, что эти мезоскопические флуктуации «подавляются» при площади контакта S , удовлетворяющей соотношению:

$$\sqrt{S} \gg \alpha^{-1} c^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{c\pi(\alpha L)^3}{2}\right]. \quad (3)$$

При выполнении (3), что и предполагается ниже, происходит реальное самоусреднение резонансного туннельного контактанса G_n , и следовательно, описание грязного туннельного контакта с квантовыми закоротками в I -слое на основе лишь среднего значения $G_n = \langle G_n \rangle$ является вполне адекватным.

3. Математическая модель одночастичного тока в грязном S - I - N контакте

Одночастичный ток, проходящий в грязном S - I - N -контакте через уединенную m -примесную квантовую закоротку с «шагом» u (безразмерное – в единицах α^{-1} – среднее расстояние между соседними примесями в квантовой закоротке), представим в виде, аналогичном [11]:

$$i^{(m)}(V, T, u) = \frac{4e}{\pi\hbar} \sum_{p,q} |T_{p,q}^{(m)}(u)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} G_N^R(\varepsilon + eV, \mathbf{p}) \text{Im} G_S^R(\varepsilon, \mathbf{q}) \cdot [n_F(\varepsilon, T) - n_F(\varepsilon + eV, T)] d\varepsilon, \quad (4)$$

где

$$\text{Im} G_N^R(\varepsilon + eV, \mathbf{p}) \equiv \text{Im} G_N^R(\varepsilon + eV, \xi_p) = -\pi\delta(\varepsilon + eV - \xi_p), \quad (5)$$

$$\text{Im} G_S^R(\varepsilon, \mathbf{q}) \equiv \text{Im} G_S^R(\varepsilon, \xi_q) = -\pi(\varepsilon + \xi_q)\delta(\varepsilon^2 - \xi_q^2 - \Delta^2)\text{sign}(\varepsilon) \quad (6)$$

– мнимые части запаздывающих одночастичных функций Грина в N и S берегах контакта соответственно,

$$\xi_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \mu, \quad \text{sign}(x) = \begin{cases} -1, & x < 0, \\ +1, & x > 0, \end{cases}$$

$$n_F(\varepsilon, T) = \left(\varepsilon^T + 1 \right)^{-1} \quad (7)$$

– фермиевская функция распределения, $T_{p,q}^{(m)}(u)$ – матричные элементы туннельного гамильтониана «виртуального» S - I - N -контакта с одной рассматриваемой квантовой закороткой:

$$\hat{H}^{(m)}(u) = \sum_{p,q,\sigma} T_{p,q}^{(m)}(u) \hat{a}_{p,\sigma}^+ \hat{b}_{q,\sigma} + h.c., \quad (8)$$

описывающего гибридизацию электронных состояний в различных берегах контакта, посредством туннелирования электронов через рассматриваемую квантовую закоротку, $\hat{a}_{p,\sigma}$, $\hat{b}_{q,\sigma}$ – операторы уничтожения электронов в N и S берегах контакта, σ – проекция спина электрона.

Переходя в (4) от сумм по \mathbf{p}, \mathbf{q} к интегрированию по ξ_p, ξ_q и вычисляя эти интегралы, получаем:

$$i_m(V, T, u) = \frac{4\pi e}{\hbar} v_1(0)v_2(0) \int_{|\varepsilon| > \Delta} |T^{(m)}(\varepsilon, u)|^2 \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}} \cdot [n_F(\varepsilon, T) - n_F(\varepsilon + eV, T)] d\varepsilon, \quad (9)$$

где: $v_1(0), v_2(0)$ – одночастичные плотности электронных состояний на уровне Ферми в берегах контакта, находящегося в нормальном состоянии,

$$|T^{(m)}(\varepsilon, u)|^2 \equiv |T^{(m)}(\varepsilon, \varepsilon; u)|^2 \sim D_m^{res}(\varepsilon, u) \quad (10)$$

– усредненный по направлениям импульсов \mathbf{p}, \mathbf{q} (и поэтому зависящий только от сохраняющейся при упругом туннелировании полной энергии ε туннелирующей квазичастицы) квадрат диагонального по ε матричного элемента туннельного гамильтониана (8), пропорциональный усредненному подобным же образом коэффициенту упругого прохождения квантовой закоротки для этих квазичастиц, полученному в [7]:

$$D_m^{res}(\varepsilon, u) \sim \exp\left[-\frac{\varepsilon^2}{\gamma_m^2(u)}\right], \quad (11)$$

$$\gamma_m(u) = 4(U_0 - \varepsilon_0)u^{-1}e^{-u}, \quad (12)$$

– энергетическая ширина туннельного резонанса, ассоциированного с квантовой закороткой.

Таким образом, с учетом (11) формулу (10) перепишем в виде равенства

$$|T^{(m)}(\varepsilon, u)|^2 = |T_0^{(m)}|^2 \exp\left[-\frac{\varepsilon^2}{\gamma_m^2(u)}\right], \quad (13)$$

где неизвестный параметр $|T_0^{(m)}|^2$ в соответствии с методом туннельного гамильтониана выражается ниже через линейный ($|eV| \ll \gamma_m(u)$) туннельный кондактанс квантовой закоротки в нормальном состоянии контакта при $T=0$. Для получения этой связи в формуле (4) сделаем замену: $\text{Im}G_S^R(\varepsilon, \mathbf{q}) \rightarrow \text{Im}G_N^R(\varepsilon, \mathbf{q})$ и вычислим ток через квантовую закоротку, после чего находим искомую связь:

$$|T_0^{(m)}|^2 = \frac{\hbar}{4\pi e^2 v_1(0)v_2(0)} g_m(T=0), \quad (14)$$

где [10]

$$g_m(T=0) = \frac{(U_0 - \varepsilon_0)\varepsilon_0}{2\pi^4 U_0^2} \left(\frac{e^2}{2\pi\hbar} \right) \quad (15)$$

– линейный кондактанс квантовой закоротки в нормальном состоянии контакта при $T=0$.

Вычисляя интеграл (9) с учетом соотношений (13), (14), получаем формулу для одночастичного тока через квантовую закоротку в S - I - N -контакте при $0 \leq T \ll \Delta_0$, $\gamma_m(u)$ и $0 \leq |eV| \ll \Delta_0$, $\gamma_m(u)$ в следующем виде:

$$i^{(m)}(V, T, u) = \left[\frac{g_m(T=0)}{e} \sqrt{2\pi\Delta_0 T} e^{-\frac{\Delta_0}{T}} \operatorname{sh}\left(\frac{eV}{T}\right) \right] \varphi_m(u, \Delta_0, T), \quad (16)$$

где

$$\varphi_m(u, \Delta_0, T) = \exp\left[-\frac{\Delta_0^2}{\gamma_m^2(u)} \left(1 + \frac{T}{\Delta_0} \right) \right]. \quad (17)$$

Из формулы (17) следует, что $0 < \varphi_m(u, \Delta_0, T) < 1$. Для широкозонных ($\gamma_m^2(u)/\Delta_0^2 \gg 1$) квантовых закороток значение мультипликатора $\varphi_m(u, \Delta_0, T)$ близко к единице, а для узкозонных ($\gamma_m^2(u)/\Delta_0^2 \sim 1$) – значительно меньше единицы.

Суммируя теперь токи (16) по всем уединенным «параллельно» включенным случайным квантовым закороткам с различными значениями m и u (с учетом вероятностей их реализации), и, учитывая вклад в ток чистого контакта, получаем следующее представление для одночастичного низкотемпературного тока в грязном S - I - N -контакте:

$$J(V, T) = \left[\frac{G_n}{e} \sqrt{2\pi\Delta_0 T} e^{-\frac{\Delta_0}{T}} \operatorname{sh}\left(\frac{eV}{T}\right) \right] \Phi(\Delta_0, T, c, \mathcal{L}), \quad (18)$$

где: G_n – линейный кондактанс грязного S - I - N -контакта в нормальном состоянии при $T=0$, $\mathcal{L} = \alpha L$ – безразмерная толщина I -слоя, выражение в квадратных скобках совпадает с формулой (1),

$$\Phi(\Delta_0, T, c, \mathcal{L}) = \frac{g_0 + Sp(\hat{g}\hat{\varphi})}{g_0 + Sp(\hat{g})} \quad (19)$$

– мультипликатор, учитывающий отличие ВАХ (18) от ВАХ существующей теории, $g_0 = G_{0n}/S$,

$$G_{0n} = S\alpha^2 \frac{8(U_0 - \mu)\mu}{\pi U_0^2 \mathcal{L}} e^{-2\mathcal{L}} \left(\frac{e^2}{2\pi\hbar} \right) \quad (20)$$

– туннельный кондактанс чистого контакта в нормальном состоянии при $T=0$ [12],

$$Sp\langle\hat{g}\rangle = \sum_m \int_{\mathcal{L}/m}^{\infty} p_m(u, c) g_m(T=0) du, \quad (21)$$

$$Sp\langle\hat{g}, \hat{\phi}\rangle = \sum_m \int_{\mathcal{L}/m}^{\infty} p_m(u, c) g_m(T=0) \phi_m(u, \Delta_0, T) du, \quad (22)$$

$$p_m(u, c) = \alpha^2 c^m e^{-c\pi u^3} \left[u^2 \theta^2(m, u) \right]^{m-1} \quad (23)$$

– вероятность (на единицу площади контакта) образования уединенной m -примесной квантовой закоротки с шагом u , $\theta(m, u) \ll 1$ – угол, характеризующий извилистость квантовой закоротки, $\theta^2(m, u) = 2(mu/\mathcal{L} - 1)$ [8, 9].

Заметим, что, поскольку из-за экспоненциально быстрого убывания вероятности $p_m(u, c)$ (23) при увеличении аргумента u , главный вклад в интегралы (21), (22) накапливается вблизи нижнего предела $u_{\min} = \mathcal{L}/m$, то верхний предел в этих интегралах формально можно положить равным $u_{\max} = \infty$.

Учитывая, что в соответствии с формулой (17) все «парциальные» мультипликаторы $0 < \phi_m < 1$, из формул (19), (21), (22) следует, что и мультипликатор (19)

$$0 < \Phi(\Delta_0, T, c, \mathcal{L}) < 1. \quad (24)$$

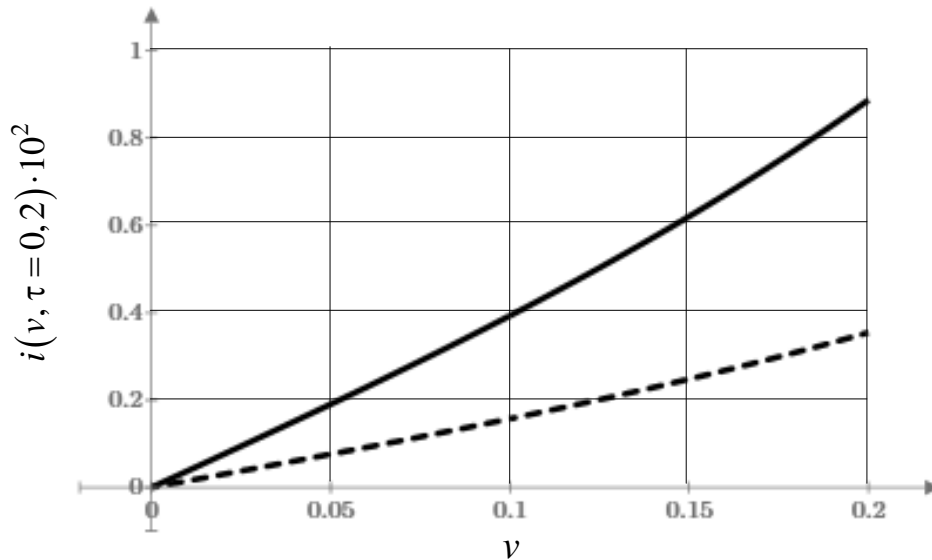
В тех случаях, когда наиболее вероятными являются узкозонные квантовые закоротки ($\gamma_m^2(u)/\Delta_0^2 \sim 1$), значение мультипликатора Φ оказывается существенно меньше единицы, что приводит к значительному недостатку тока на ВАХ (18) по сравнению с рассчитанным для этого же контакта током на ВАХ (1) существующей теории.

Численные расчеты, проведенные для характерных значений $U_0 = 10$ эВ, $\mu = \varepsilon_0 = 6$ эВ, $\Delta_0 = 2 \cdot 10^{-4}$ эВ, $\mathcal{L} = \alpha L = 9$, показали, что, например, в интервале концентраций примеси $10^{-6} < c < 10^{-4}$ наиболее вероятными являются однопримесные ($m=1$) квантовые закоротки, имеющие достаточно малую ширину туннельного резонанса $\gamma_1 = 2,2 \cdot 10^{-4}$ эВ, т.е. являющиеся узкозонными: $\gamma_1^2/\Delta_0^2 = 1.21$. Именно они, в этом интервале концентраций примеси, определяют величину мультипликатора Φ (19), численное значение которого, например, при $c = 10^{-5}$ и $T = 0,2\Delta_0$ оказывается равным $\Phi = 0,4$.

На рисунке для перечисленных выше значений параметров грязного S - I - N -контакта в качестве примера приведены в безразмерном виде графики $i(v, \tau = 0, 2)$ двух вольт-амперных характеристик (1) и (18), где:

$$i = \frac{Je}{G_n \Delta_0}, \quad v = \frac{eV}{\Delta_0}, \quad \tau = \frac{T}{\Delta_0} \quad (25)$$

– безразмерный ток, напряжение и температура соответственно.



Безразмерные ВАХ при $\tau = 0,2$, $\Phi = 0,4$. Кривая a соответствует формуле (1), кривая b – формуле (18)

Как видно из рисунка, присутствие наиболее вероятных случайных узкозонных квантовых закороток в слабо неупорядоченном I -слое грязного S - I - N -контакта приводит к весьма значительному отклонению одночастичной низкотемпературной ВАХ (18) такого контакта в сторону уменьшения тока (кривая b) от рассчитанной для этого же контакта ВАХ (1) в рамках существующей теории (кривая a). Это обстоятельство может служить экспериментальным тестом на наличие квантовых закороток в контакте.

Принципиальная схема такого эксперимента может выглядеть следующим образом. В S - I - N -контакте достаточно большой площади S (3), необходимой для подавления мезоскопических флуктуаций резонансного туннельного контактанса грязного S - I - N -контакта, основываясь на формуле (18), проводятся косвенные измерения мультипликатора Φ по результатам прямых независимых измерений: одночастичного тока $J(V, T)$, туннельного контактанса G_n , сверхпроводящей щели Δ_0 , температуры T и напряжения V . При этом, измерения должны проводиться в области применимости формул (1) и (18) ($0 \leq T \ll \Delta_0$, $0 \leq |eV| \ll \Delta_0$) в той области температур, где одночастичный ток много больше андреевского (двухчастичного) тока. Если полученные значения Φ оказываются заметно или даже значительно меньше единицы, то это может свидетельствовать о присутствии случайных квантовых закороток в I -слое.

Литература

1. Giazotto, F. Opportunities for mesoscopics in thermometry and refrigeration: Physics and applications / F. Giazotto, T. T. Heikkilä, A. Luukanen, A. M. Savin and J. P. Pekola // Rev. Mod. Phys. – 2006. – V. 78. – P. 217.
2. Feshchenko, A.V. Tunnel-Junction Thermometry Down to Millikelvin Temperatures / A. V. Feshchenko, L. Casparis, I. M. Khaymovich, D. Maradan, O.-P. Saira, M. Palma, M. Meschke, J. P. Pekola and D. M. Zumbühl // Phys. Rev. Appl. – 2015. – V. 4. – P. 03401.

3. Nguyen, H.Q. Sub-50-mK Electronic Cooling with Large-Area Superconducting Tunnel Junctions / H. Q. Nguyen, M. Meschke, H. Courtois and J. P. Pekola // *Phys. Rev. Appl.* – 2014. – V. 2. – P. 054001.
4. Tarasov, M. Quantum Efficiency of Cold Electron Bolometer Optical Response / M. Tarasov, V. Edelman, A. Ermakov, S. Mahashabde and L. S. Kuzmin // *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.* – 2015. – V. 5. – Iss.1. – P.44.
5. Seliverstov, A.V. The Andreev conductance in superconductor–insulator–normal metal structures / A. V. Seliverstov, M. A. Tarasov and V. S. Edel'man // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* – 2017. – V. 124. – P. 643-656.
6. Golubev, D. Nonequilibrium theory of a hot-electron bolometer with normal metal-insulator-superconductor tunnel junction / D. Golubev and I. Kuzmin // *J. Appl. Phys.* – 2001. – V. 89. – P. 6484.
7. Kirpichenkov, V. Ya. Effect of Random Quantum Jumpers on the Single-Particle Low-Temperature Current in Dirty SIN Junctions / V. Ya. Kirpichenkov, N.V. Kirpichenkova, O.I. Lozin, A.A. Kosach // *JETP Letters.* – 2020. – V. 112. – № 2. – P. 112 – 116.
8. Кирпиченков, В.Я. Резонансная вольт-амперная характеристика трехмерного туннельного перехода со слабым структурным беспорядком / В.Я. Кирпиченков // *ЖЭТФ.* – 1999. – Т.116. – С. 1048–1057.
9. Лифшиц, И.М. О туннельной прозрачности неупорядоченных систем / И.М. Лифшиц, В.Я. Кирпиченков // *ЖЭТФ.* – 1979. – Т. 77. – С. 989–1016.
10. Кирпиченков, В.Я. Низкотемпературный вклад в резонансный туннельный контактанс неупорядоченного N-I-N контакта / В.Я. Кирпиченков, Н.В. Кирпиченкова, О.И. Лозин, А.А. Постников // *Письма в ЖЭТФ.* – 2016. – Т.104. – № 7. – С. 530 - 533.
11. Левитов, Л.С. Функции Грина. Задачи с решениями / Л.С. Левитов, А.В Шитов. – М.: Физматлит, 2002. – 392 с.
12. Кирпиченков, В.Я. Бифуркации рождения низкотемпературных максимумов туннельного контактанса грязного N-I-N контакта / В.Я. Кирпиченков, Н.В. Кирпиченкова, О.И. Лозин, А.А. Пухлова // *Письма в ЖЭТФ.* – 2017. – Т.105. – № 9. - С. 577 - 580.

MATHEMATICAL MODEL OF A SINGLE-PARTICLE CURRENT IN A DISORDERED S-I-N CONTACT

**V.Ya. Kirpichenkov, N.V. Kirpichenkova, A.A. Kosach,
K.V. Kryzhanovskii, I.A. Vyatkina**

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

Abstract: it is shown that the presence of random narrow-gap quantum shorts in a dirty S-I-N contact leads to a significant shortfall in the single-particle current compared to the single-particle current calculated for the same contact within the current theory for clean S-I-N contacts. Based on numerical estimates of the single-particle current, a schematic diagram of an experiment to detect the effect of a lack of a single-particle current in dirty S-I-N contacts is proposed.

Keywords: disordered systems, quantum resonant-percolation trajectories, quantum short circuits, impurities, dirty S-I-N contact, single-particle current, tunneling conductance, mesoscopic fluctuations.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НИЖНЕГО КРИТИЧЕСКОГО ПОЛЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННОМ $S-I-S$ КОНТАКТЕ

**В.Я. Кирпиченков, Н.В. Кирпиченкова, А.А. Косач,
К.В. Крыжановский, А.А. Малый**

Южно-Российский государственный политехнический университет
(Новочеркасский политехнический институт) имени М.И. Платова
wkiprich@rambler.ru

Аннотация: на плоскости параметров (безразмерная концентрация примеси, энергия однопримесного электронного уровня) при различных температурах найдены области, внутри которых нижнее критическое поле неупорядоченного контакта превышает нижнее критическое поле чистого контакта и показано, что с ростом температуры контакта эти области сужаются.

Ключевые слова: джозефсоновский контакт, нижнее критическое поле, джозефсоновский вихрь, неупорядоченный контакт, квантовые резонансно-перколяционные траектории, уравнение *sin-Gordon*.

Если напряженность внешнего магнитного поля H , параллельного плоскости джозефсоновского $S-I-S$ (S – сверхпроводник, I – изолятор) контакта, превышает некоторое критическое значение H_c , называемое термодинамическим нижним критическим полем джозефсоновского контакта, то в контакте появляются джозефсоновские вихри. Безвихревое состояние контакта, имеющее место при $H < H_c$, при $H > H_c$ становится неустойчивым, поскольку состояние контакта с джозефсоновским вихрем оказывается энергетически более выгодным, чем безвихревое [1, 2].

В чистом $S-I-S$ контакте формула для нижнего критического поля имеет следующий вид [1]:

$$H_{c0} = \frac{1}{\Phi_0} F[\varphi_0],$$

где

$$F[\varphi_0] = C \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi_0}{dx} \right)^2 + \lambda_J^{-2} (1 - \cos \varphi_0) \right] dx$$

– функционал свободной энергии чистого $S-I-S$ контакта с одним джозефсоновским вихрем,

$$\varphi_0(x) = 4 \operatorname{arctg}(e^{kx})$$

– солитонное решение для уединенного джозефсоновского вихря в чистом $S-I-S$ контакте, $k = \lambda_J^{-1}$, λ_J – джозефсоновская глубина проникновения магнитного поля в чистый $S-I-S$ контакт, $\Phi_0 = \pi \hbar / e$ – квант магнитного потока, C – некоторая константа, одинаковая для случаев чистого и неупорядоченного $S-I-S$ контактов.

В неупорядоченном (с примесями в I -слое) S - I - S контакте формула для нижнего критического поля имеет вид [3, 4]:

$$\langle H_c \rangle = \frac{1}{\Phi_0} F[\langle \varphi \rangle],$$

где

$$F[\langle \varphi \rangle] = C \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\langle \varphi \rangle}{dx} \right)^2 + \langle \lambda_J^{-2} \rangle (1 - \cos \langle \varphi \rangle) \right] dx$$

– функционал свободной энергии неупорядоченного S - I - S контакта с одним джозефсоновским вихрем,

$$\langle \varphi \rangle = \langle \varphi(x, T) \rangle$$

– усредненное по ансамблю примесей $\{\Gamma_N\}$ решение стохастически возмущенного стационарного уравнения *sin-Gordon*.

На основе специализированного программного комплекса "NISPSE SIN-GORDON" [5] проведено численное исследование совместного влияния случайных КРПТ в неупорядоченном S - I - S контакте и ненулевых температур $0 \leq T < T_c$ на нижнее критическое поле неупорядоченного S - I - S контакта.

Для этого над плоскостью (c, ε_0) (c – безразмерная концентрация примеси, ε_0 – энергия однопримесного электронного уровня) построены поверхности безразмерного критического поля неупорядоченного S - I - S контакта

$$\langle h_c(c, \varepsilon_0, T) \rangle = \frac{\langle H_c(c, \varepsilon_0, T) \rangle}{H_{c0}(T=0)},$$

где в качестве единицы измерения принято нижнее критическое поле $H_{c0}(T=0)$ соответствующего чистого ($c=0$) S - I - S контакта при температуре $T=0$. Поверхности $\langle h_c(c, \varepsilon_0, T) \rangle$ и соответствующие им линии уровня построены для температур: $T_1=0$, $T_2=0,2T_c$, $T_3=0,4T_c$, $T_4=0,6T_c$, $T_5=0,8T_c$, $T_6=0,9T_c$; электронный химпотенциал контакта $\mu=5\text{эВ}$.

Заметим, что эти поверхности в пространстве параметров (c, ε_0, T) разделяют безвихревые состояния неупорядоченного S - I - S контакта (под поверхностью) от состояний в одном или более джозефсоновских вихрем (над поверхностью).

На рис. 1 – 12 построены поверхности безразмерного критического поля $\langle h_c(c, \varepsilon_0, T) \rangle$ и для большей информативности – соответствующие им линии уровня для упомянутых выше шести температур. Из этих рисунков видно, что:

1. На поверхностях $\langle h_c(c, \varepsilon_0, T) \rangle$ при всех рассмотренных температурах явно выражены два максимума, обусловленные вкладами однопримесных (более высокий максимум) и двухпримесных квантовых резонансно-перколяционных траекторий (КРПТ) [6].

2. При температуре $T_1 = 0$ максимальное значение $\langle h_c \rangle_{\max} = 6$, а при $T_6 = 0,9T_c$ $\langle h_c \rangle_{\max} = 2,5$, т.е. влияние КРПТ на нижнее критическое значение магнитного поля неупорядоченного $S-I-S$ контакта уменьшается с ростом температуры контакта, оставаясь, тем не менее, весьма существенным при всех исследованных температурах.

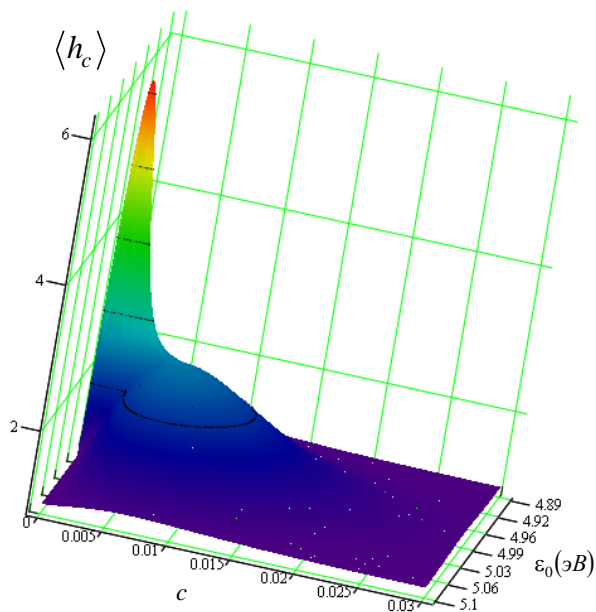


Рис. 1. Безразмерное нижнее критическое поле $\langle h_c(c, \varepsilon_0, T_1) \rangle$ неупорядоченного $S-I-S$ контакта при $T_1 = 0$

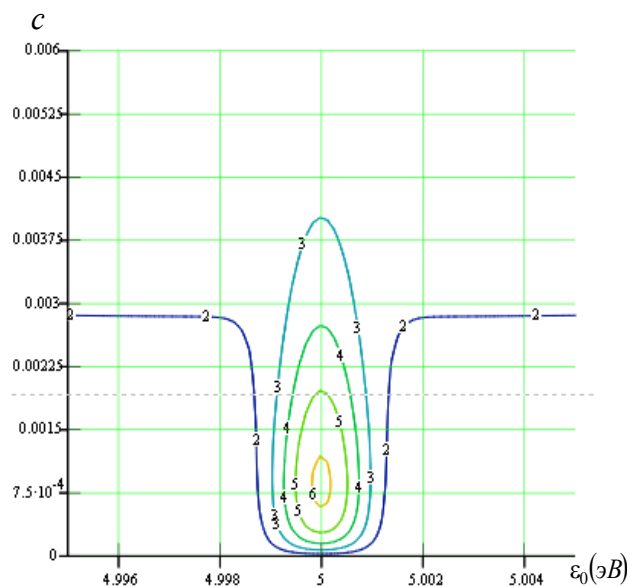


Рис. 2. Линии уровня функции $\langle h_c(c, \varepsilon_0, T_1) \rangle$ при $T_1 = 0$

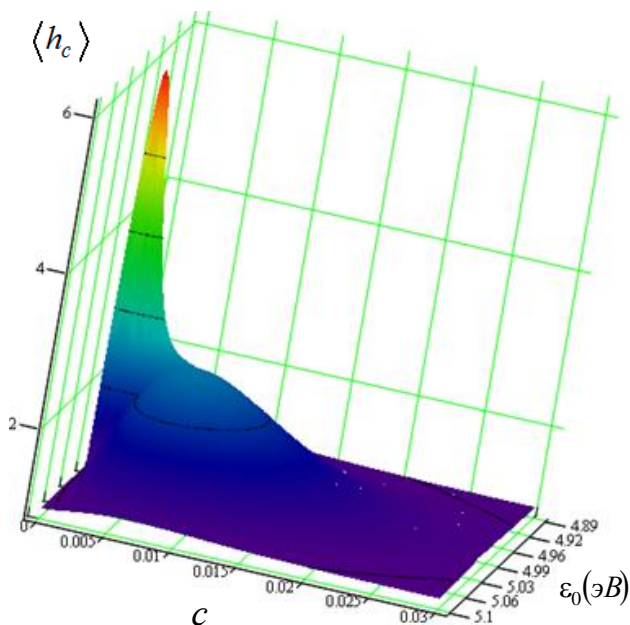


Рис. 3. Безразмерное нижнее критическое поле $\langle h_c(c, \varepsilon_0, T_2) \rangle$ неупорядоченного $S-I-S$ контакта при $T_2 = 0,2T_c$

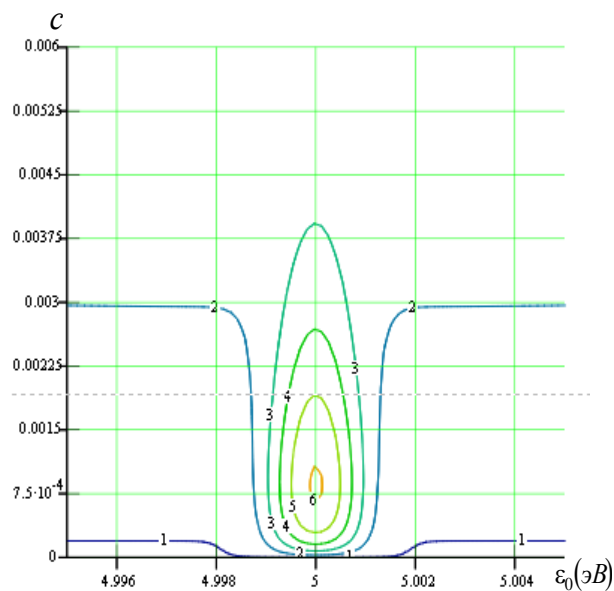


Рис. 4. Линии уровня функции $\langle h_c(c, \varepsilon_0, T_2) \rangle$ при $T_2 = 0,2T_c$

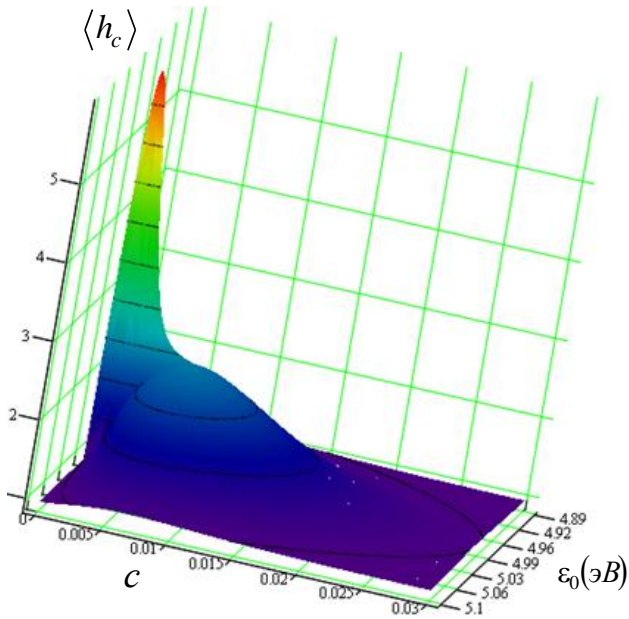


Рис. 5. Безразмерное нижнее критическое поле $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_3) \rangle$ неупорядоченного $S-I-S$ контакта при $T_3 = 0,4T_c$

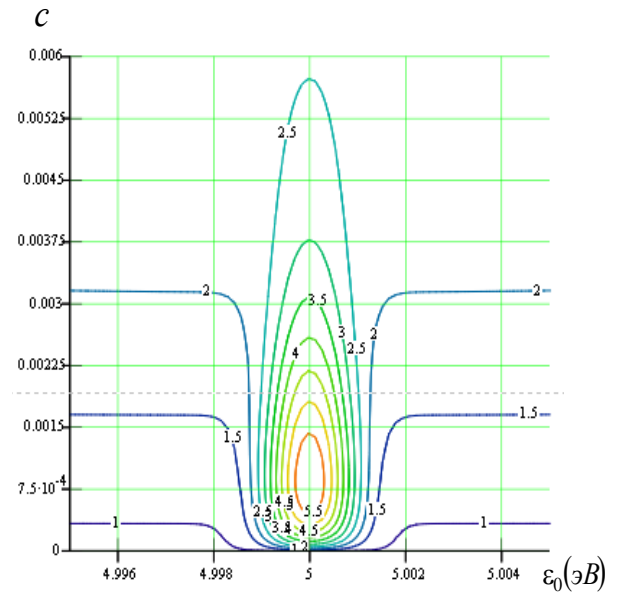


Рис. 6. Линии уровня функции $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_3) \rangle$ при $T_3 = 0,4T_c$

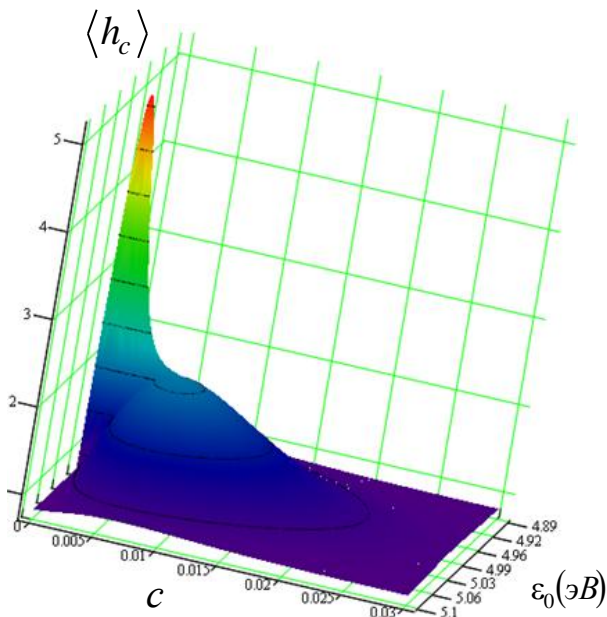


Рис. 7. Безразмерное нижнее критическое поле $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_4) \rangle$ неупорядоченного $S-I-S$ контакта при $T_4 = 0,6T_c$

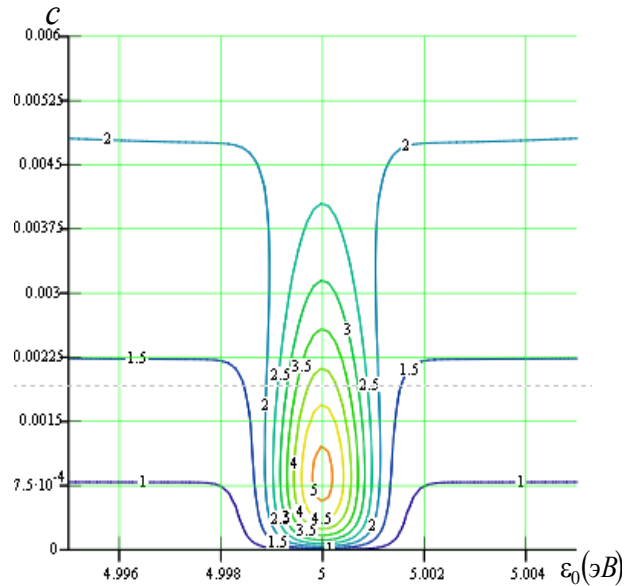


Рис. 8. Линии уровня функции $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_4) \rangle$ при $T_4 = 0,6T_c$

3. В интервале температур $0 \leq T \leq 0,4T_c$ нижнее критическое магнитное поле $\langle h_c \rangle$ слабо изменяется с ростом температуры – зона «слабой чувствительности».

4. Линии уровня $\langle h_c \rangle = 1$ отделяют на плоскости параметров (c, ϵ_0) область существенного влияния КРПТ на нижнее критическое магнитное поле неупорядоченного $S-I-S$ контакта от области, где это влияние отсутствует.

5. С ростом температуры область существенного влияния КРПТ на нижнее критическое магнитное поле неупорядоченного $S-I-S$ контакта сужается.

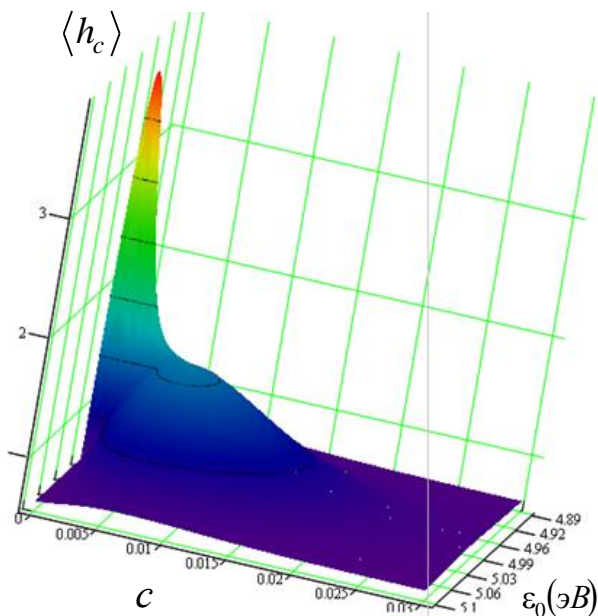


Рис. 9. Безразмерное нижнее критическое поле $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_5) \rangle$ неупорядоченного $S-I-S$ контакта при $T_5 = 0,8T_c$

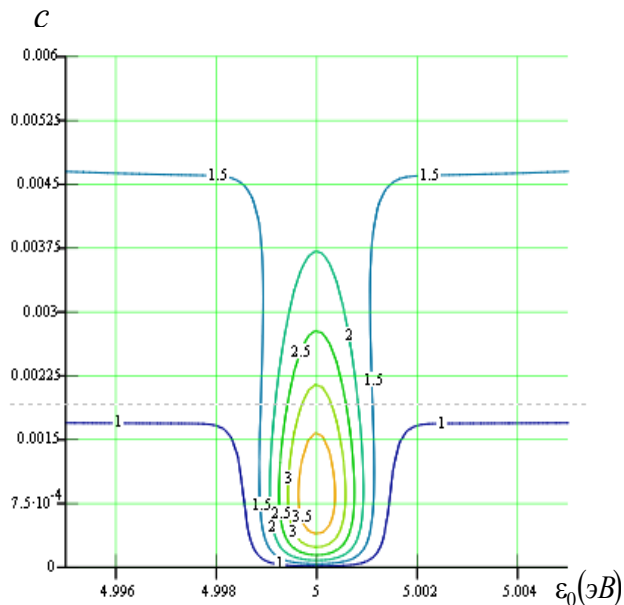


Рис. 10. Линии уровня функции $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_5) \rangle$ при $T_5 = 0,8T_c$

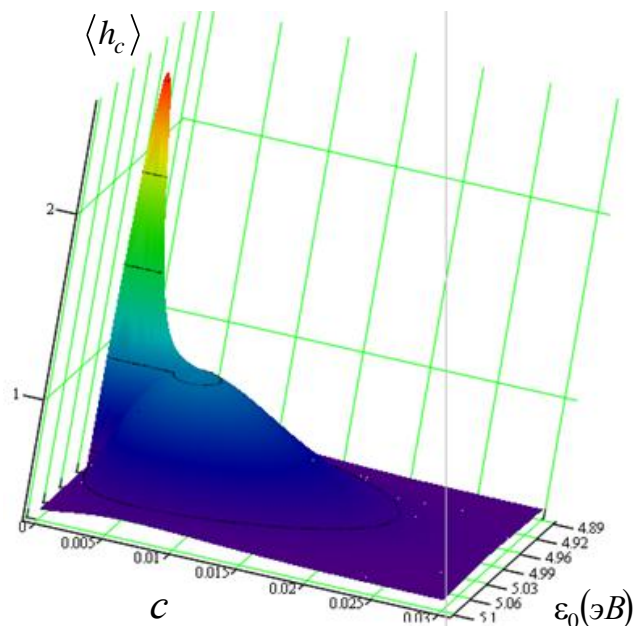


Рис. 11. Безразмерное нижнее критическое поле $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_6) \rangle$ неупорядоченного $S-I-S$ контакта при $T_6 = 0,9T_c$

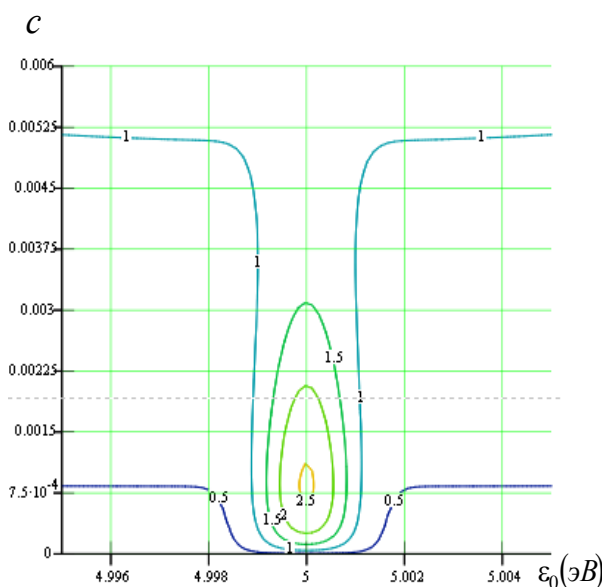


Рис. 12. Линии уровня функции $\langle h_c(c, \epsilon_0, T_6) \rangle$ при $T_6 = 0,9T_c$

Литература

1. Бароне, А. Эффект Джозефсона. Физика и применение / А. Бароне, Дж. Патерно. – М.: Мир, 1984. – 639 с.
2. Кулик, И.О. Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах / И.О. Кулик, И.К. Янсон. – М.: Наука, 1970. – 272 с.
3. Kirpichenkov, V.Ya. Effect of Quantum Resonance–Percolation Trajectories on the Parameters of a Josephson Vortex / V.Ya. Kirpichenkov // JETP. – 2007. – Vol. 105, N.1. – P. 259-261.
4. Кирпиченков, В.Я. Теория стохастического туннелирования в неупорядоченных наноструктурах / В.Я. Кирпиченков. – М.: Экономическое образование, 2006. – 193 с.
5. NISPSE SIN-GORDON / К.В. Крыжановский, Н.В. Кирпиченкова, В.Я. Кирпиченкова – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2019615672 "NISPSE SIN-GORDON"; зарег. в Реестре программ для ЭВМ 06.05.2019 г.
6. Лифшиц, И.М. О туннельной прозрачности неупорядоченных систем / И.М. Лифшиц, В.Я. Кирпиченков // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 77. – С. 989-1016.

NUMERICAL STUDY OF THE LOWER CRITICAL FIELD IN A DISORDERED S-I-S CONTACT

**V.Ya. Kirpichenkov, N.V. Kirpichenkova, A.A. Kosach,
K.V. Kryzhanovskii, A.A. Maliy**

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

Abstract: on the parameter plane (dimensionless impurity concentration, energy of a single-impurity electronic level) at different temperatures, regions are found, within which the lower critical field of a disordered contact exceeds the lower critical field of a pure contact, and it is shown that these regions narrow with increasing contact temperature.

Keywords: Josephson junction, lower critical field, Josephson vortex, disordered junction, quantum resonant-percolation trajectories, *sin-Gordon* equation.

КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ НА СОБСТВЕННЫЕ ЧАСТОТЫ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО РЕЗОНАТОРА ВОЛНОВОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ГИРОСКОПА

И.Л. Батаронов, Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков, В.В. Пешков, В.А. Шулгина

Воронежский государственный технический университет
vmfmm@mail.ru

Аннотация: методом конечных элементов рассчитана зависимость спектра собственных частот цилиндрического резонатора волнового твердотельного гироскопа от глубины лунки и разреза на его торце. Установлено увеличение расщепления собственных частот с увеличением глубины этих дефектов и привязка «тяжёлой оси» резонатора к таким дефектам. Исследовано также влияние числа конечных элементов на точность расчёта собственных частот.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод конечных элементов, конструктивные элементы гироскопа, собственные частоты.

Введение

Математические модели резонаторов волновых твердотельных гироскопов (ВТГ), построенные на основе теории упругости тонких осесимметричных оболочек, достаточно хорошо описывают поведение полусферического ВТГ и позволяют приближёнными аналитическими методами исследовать влияние дефектов массы и формы на его параметры и характеристики, а также разработать алгоритмы его балансировки [1-2]. Однако в случае цилиндрического ВТГ с более сложной формой подвеса резонатора, использующего пьезоэлементы для раскачки и съёма сигнала [1], аналитические методы теряют свою эффективность. Необходимо использовать численные методы анализа математических моделей, описывающих физические процессы в резонаторах ВТГ. Так, например, в работе [3] было проведён численный анализ резонаторов ВТГ различной формы при наличии дефектов.

Балансировка резонаторов ВТГ часто осуществляется нанесением маленьких разрезов и лунок на торец резонатора. Поэтому представляет практический интерес исследование влияния этих дефектов резонатора на спектр его собственных частот.

В данной работе методом конечных элементов рассчитана зависимость первых десяти собственных частот от глубины лунки и разреза на торце резонатора. Установлено увеличение расщепления собственных частот с увеличением их глубины и привязка «тяжёлой» оси резонатора к таким дефектам. Исследовано также влияние числа конечных элементов на точность расчёта собственных частот.

Постановка задачи на собственные частоты

Для нахождения собственных частоты и форм колебаний резонатора решалась краевая задача для уравнения

$$-\rho\omega^2\mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$$

с граничным условием $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$ на всей поверхности резонатора, за исключением основания ножки резонатора, на котором задавалось граничное условие $\mathbf{u} = 0$.

Здесь $\omega = 2\pi f$, f – собственная частота, \mathbf{n} – единичный вектор нормали к границе области решения задачи, \mathbf{u} – вектор смещений, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, ρ – плотность материала.

В вычислительных экспериментах использовалась геометрическая модель резонатора ВТГ и параметры конструктивных материалов из статьи [4]. Конечно-элементный анализ проводился с помощью Comsol Multiphysics.

Выбирались лагранжевы элементы 2-го порядка. Конкретное число конечных элементов и степеней свободы зависело от решаемой задачи и необходимой точности.

Результаты вычислительных экспериментов и их обсуждение

В идеальном осесимметричном резонаторе ориентация главных осей («тяжёлой» и «лёгкой») может быть произвольной, но при этом сохраняется угол между ними, равный 45° . При нарушении симметрии (конечно-элементный, массовый, геометрический, жёсткостный дебаланс) происходит привязка главных осей к выделенным направлениям.

В табл. 1 приведены результаты изучения влияния типа конечных элементов и числа степеней свободы на собственные частоты резонатора.

Таблица 1

Тип КЭ Мода	Призматические (408960 степеней свободы)	Тетраэдральные (475821 степеней свободы)	Тетраэдральные (722235 степеней свободы)
1	1720.2376	1724.9063	1721.2153
2	1720.2376	1724.9936	1721.2319
3	3896.0854	3911.4991	3900.4138
4	4326.1878	4325.9289	4324.9969
5	4326.3874	4325.9699	4325.0422
6	7486.2901	7495.7964	7492.0844
7	11350.6857	11345.4782	11343.52
8	11350.6857	11345.5194	11343.5496
9	17951.6769	17984.6067	17969.777
10	17951.6769	17984.9627	17970.8021

Ориентацию главных осей можно определить из вида проекций форм колебаний резонатора на рабочих частотах (моды 4, 5) на координатную плоскость xOy . Оси привязываются к случайным неоднородностям плотности раз-

биения геометрической модели резонатора на конечные элементы. Это является погрешностью вычислительного эксперимента.

В табл. 2 приведены собственные частоты мод колебаний при наличии прорези шириной 0.5 мм в торце резонатора. Использовалась тетраэдральная конечно-элементная сетка (рис. 1, 722 тыс. степеней свободы). На рис. 2 показана зависимость рабочих частот от глубины прорези.

Таблица 2

Глубина Номер моды	0 мм	0,1 мм	0,5 мм	1 мм
1	1721.2153	1721.2979	1721.5947	1721.9497
2	1721.2319	1721.3451	1721.7792	1722.2944
3	3900.4138	3900.5104	3900.9112	3901.4167
4	4324.9969	4324.8814	4320.7373	4310.3175
5	4325.0422	4324.9142	4323.2752	4318.2746
6	7492.0844	7492.4191	7493.1752	7494.136
7	11343.52	11342.9634	11329.8412	11297.571
8	11343.5496	11343.2044	11338.6569	11324.7893
9	17969.777	17970.3588	17971.3952	17970.9104
10	17970.8021	17972.935	17973.1889	17974.7054

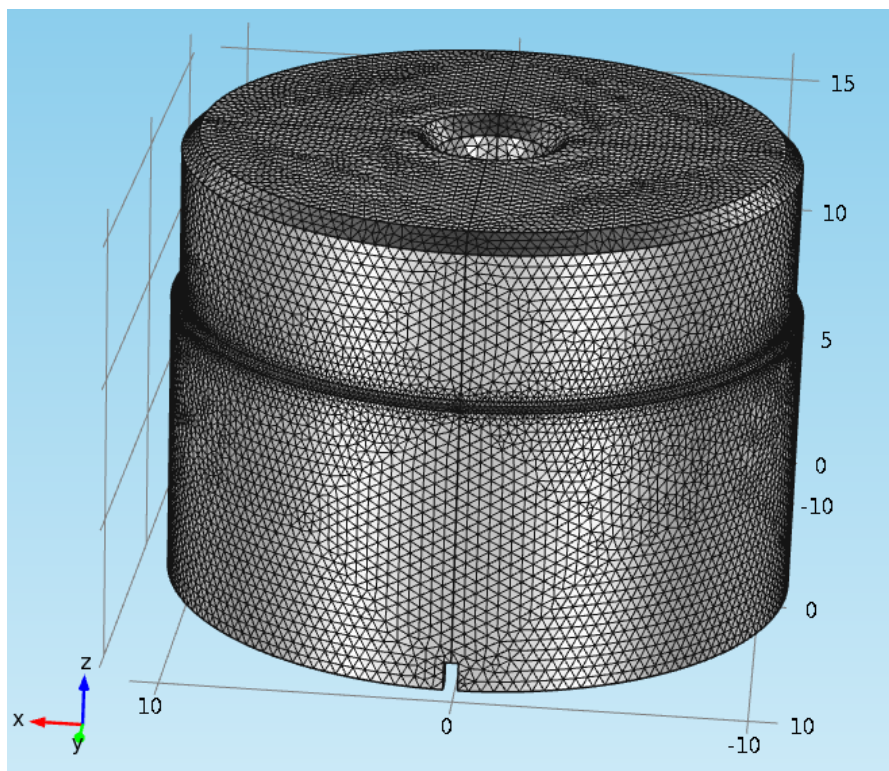


Рис. 1. Геометрическая модель резонатора при наличии прорези шириной 0.5 мм в торце резонатора и конечно-элементная сетка

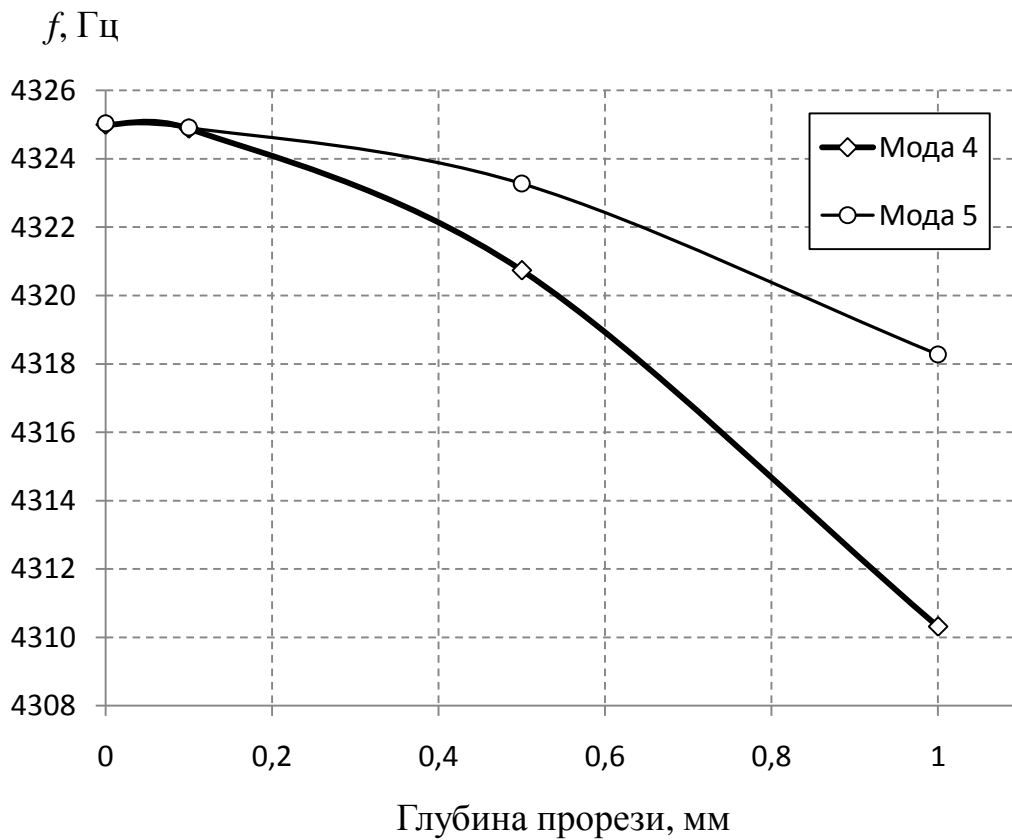


Рис. 2. Зависимость рабочих частот резонатора от глубины прорези

Наличие прорези приводит к привязке к ней «тяжелой» оси. Так, на рис. 3 показана ориентация главных осей резонатора при глубине прорези 1 мм. Угол между осями сохраняет значение 45° .

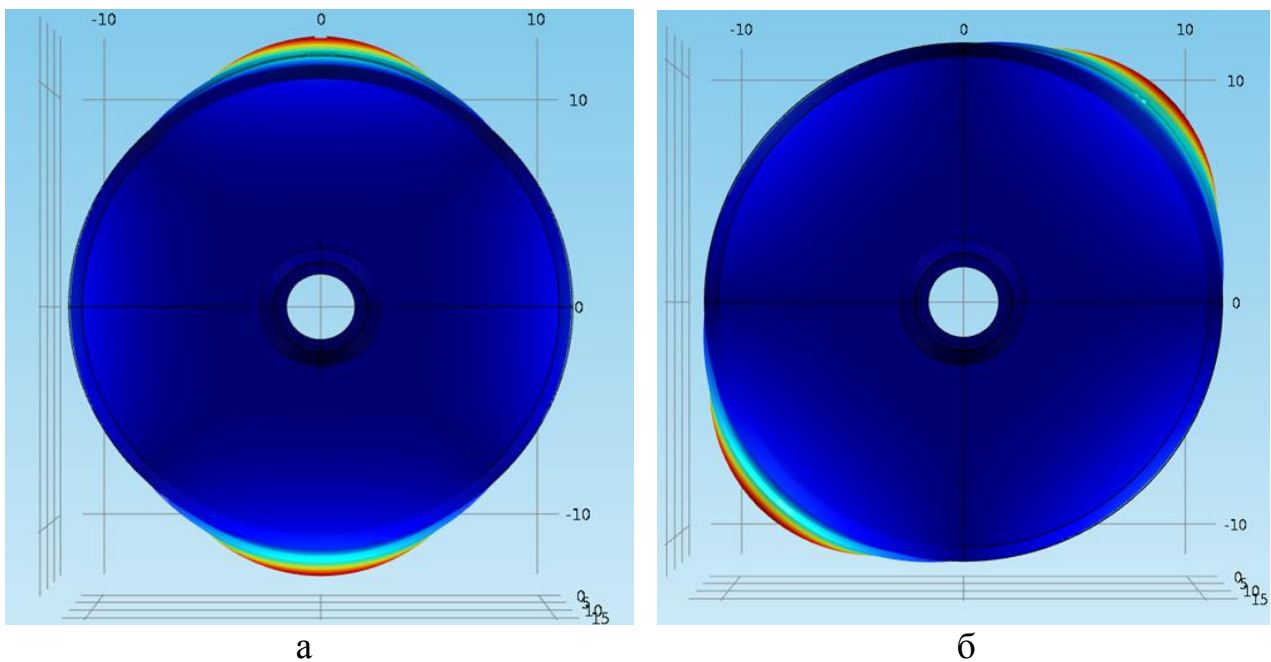


Рис. 3. Ориентация главных осей резонатора при глубине прорези 1 мм

Влияние лунки в торце резонатора

В табл. 3 приведены собственные частоты мод колебаний для лунок диаметром 1 мм в торце цилиндра резонатора (рис. 4). Использовалась тетраэдральная конечно-элементная сетка (более 700 тыс. ст. св.). На рис. 5 показана зависимость рабочих частот от глубины отверстия.

Таблица 3

Глубина Номер моды	0 мм	0,15 мм	0,3 мм	0,6 мм	0,9 мм
1	1721.2153	1721.13364	1721.18009	1721.23672	1721.30023
2	1721.2319	1721.14227	1721.18596	1721.28569	1721.35823
3	3900.4138	3900.15058	3900.20236	3900.2895	3900.36131
4	4324.9969	4324.87192	4324.80229	4324.78159	4324.80894
5	4325.0422	4325.1541	4325.2913	4325.55523	4325.80285
6	7492.0844	7491.21586	7491.24305	7491.64105	7491.98767
7	11343.52	11343.15971	11342.90963	11342.69198	11342.61486
8	11343.5496	11343.91872	11344.33161	11345.11619	11345.84191
9	17969.777	17969.72965	17970.14441	17970.27917	17970.70728
10	17970.8021	17969.97247	17970.29239	17970.92633	17972.40001

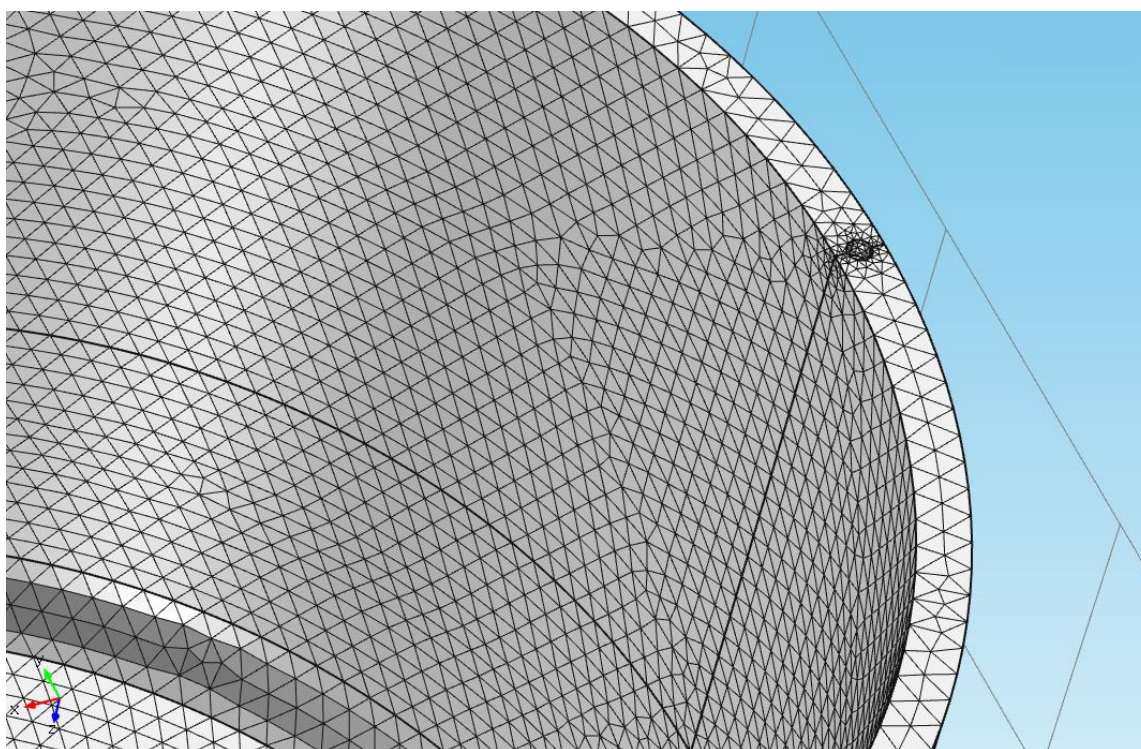


Рис. 4. Конечно-элементная сетка вокруг лунки диаметром 1 мм в торце цилиндра резонатора

Наличие лунки приводит к привязке к нему «легкой» оси. Так, на рис. 6 показана ориентация главных осей резонатора при глубине лунки 0,3 мм. Угол между осями сохраняет значение 45°.

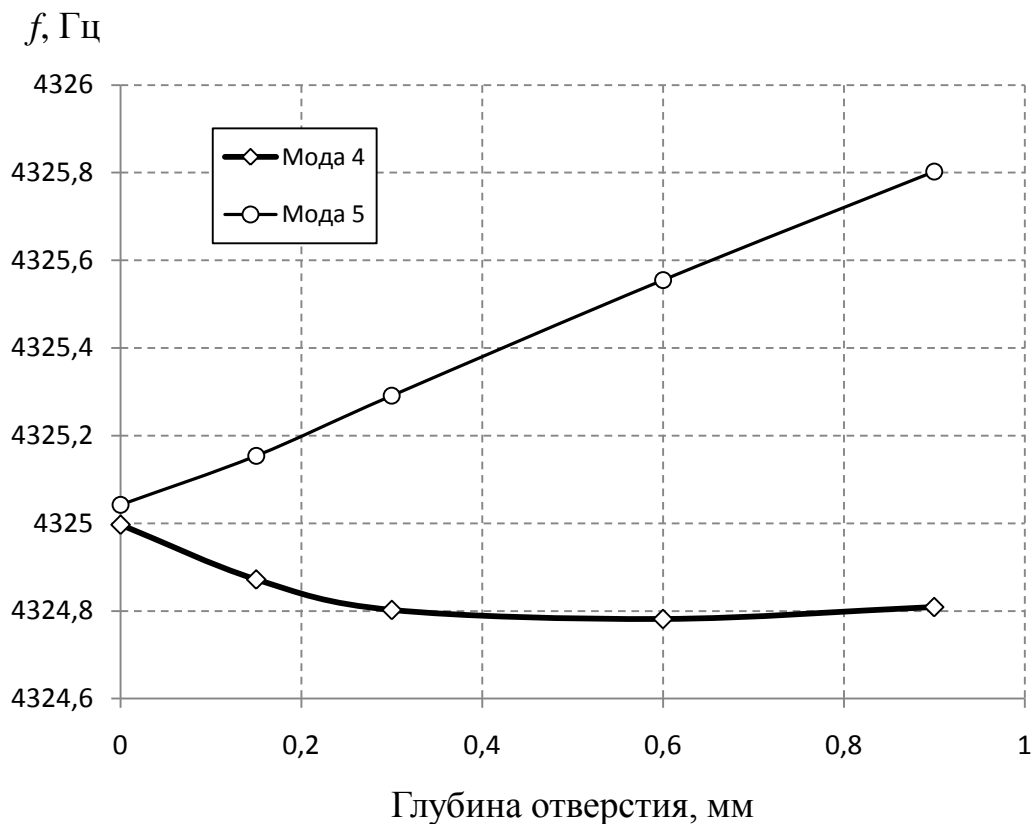


Рис. 5. Зависимость рабочих частот от глубины отверстия в торце цилиндра резонатора

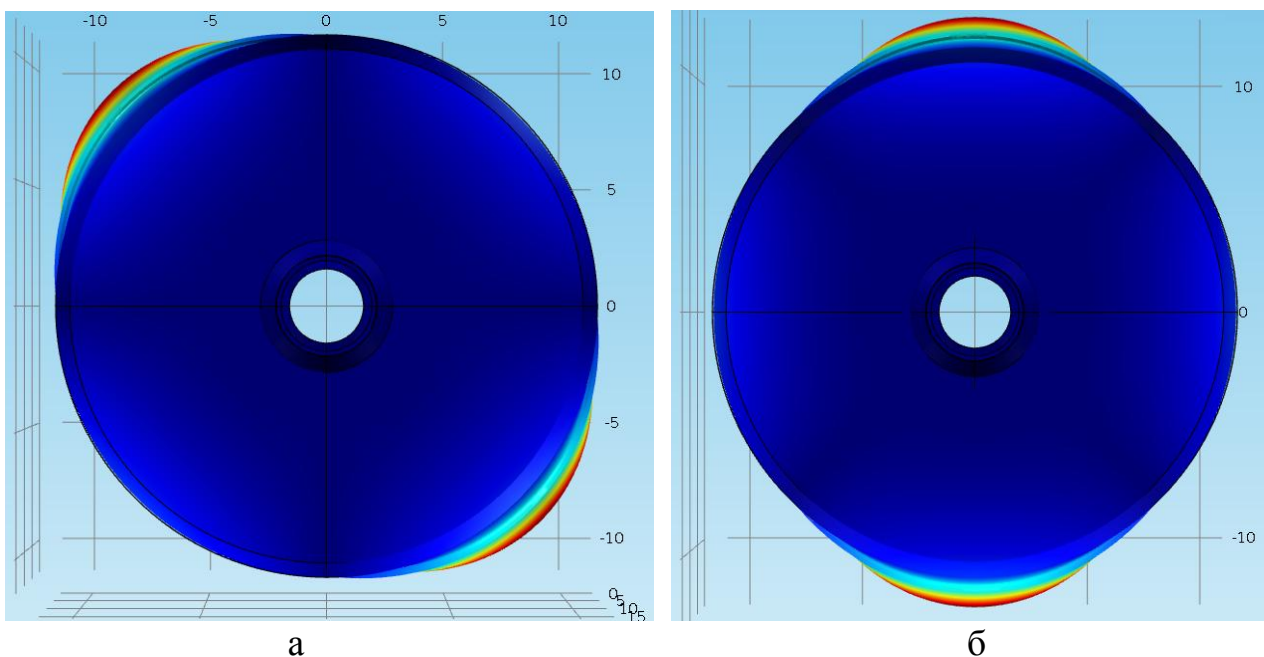


Рис. 6. Ориентация главных осей резонатора при глубине лунки 0,3 мм

Полученные результаты позволят более эффективно осуществлять балансировку резонатора путём совместного вычислительного и натурального экспериментов.

Литература

1. Лунин Б.С. Волновой твердотельный гироскоп. Теория и технология / Б.С. Лунин, В.А. Матвеев, М.А. Басараб. – М.: Радиотехника, 2014. – 176 с.
2. Влияние неоднородности толщины оболочки волнового твердотельного гироскопа на параметры дебаланса / М.А. Басараб, В.А. Матвеев, Б.С. Лунин, С.В. Фетисов // Гироскопия и навигация. – 2016. – Т. 24. – № 4. – С. 14-24.
3. Численное исследование резонаторов ВТГ различной формы при наличии дефектов / Д.С. Вахляровский, А.М. Гуськов, М.А. Басараб, В.А. Матвеев // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электронный журнал. – 2016. – № 10. – С. 1-22.
4. Влияние пьезоэлектрических преобразователей на собственные частоты резонатора волнового твердотельного гироскопа / И.Л. Батаронов, Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков, В.В. Пешков // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2019. – Т. 83. – № 9. – С. 1217-1219.

FINITE ELEMENT ANALYSIS OF THE INFLUENCE OF TECHNOLOGICAL DEFECTS ON THE NATURAL FREQUENCIES OF A CYLINDRICAL RESONATOR OF A SOLID-STATE WAVE GYROSCOPE

**I.L. Bataronov, G.E. Shunin, S.A. Kostryukov,
V.V. Peshkov, V.A. Shunina**

Voronezh State Technical University

Abstract: using the finite element method, the dependence of the spectrum of natural frequencies of a cylindrical resonator of a solid-state wave gyroscope on the depth of the hole and the cut at its end is calculated. It has been established that the splitting of natural frequencies increases with increasing depth of these defects and that the “heavy axis” of the resonator is tied to such defects. The influence of the number of finite elements on the accuracy of calculation of natural frequencies was also studied.

Keywords: computer simulation, finite element method, structural elements of a gyroscope, natural frequencies.

СОДЕРЖАНИЕ

Абрамова О.П. Особенности поведения комплексного поля деформации фрактальных связанных структур.....	3
Абрамов В.С. Тетранейтроны и бозон Хиггса в кварк-глюонной модели.....	9
Батаронов И.Л., Бородкин С.В., Иванов А.В., Ряжских В.И. Исследование алгоритма моделирования тепломассопереноса в сверхкритическом потоке.....	15
Дорохова О.А. k-ε-модельный расчет температурного профиля вдоль термоэлектрического модуля при охлаждении турбулентным потоком.....	31
Селиванов Г.В., Батаронов И.Л., Булков А.Б. Моделирование процесса восстановления охрупченного слоя на титане в условиях автовакуумного отжига.....	43
Нечаев В.Н., Шуба А.В., Неудахин Е.Ю., Гаврилов К.Н. Математическая модель температурного гистерезиса в сегнетоэлектриках	47
Нечаев В.Н., Шуба А.В., Кузнецов М.В., Евстратов А.А. Об описании фазовых переходов в сегнетоэлектриках с несоизмерными фазами.....	52
Боженко К.В., Утенышев А.Н., Гуцев Л.Г., Алдошин С.М., Гуцев Г.Л. Квантово-химическое изучение взаимодействий кластеров Fe_2O_n с молекулами H_2 и O_2	57
Бадикова П.В., Завьялов Д.В., Сивашова Е.С. Вычисление тензора обратной эффективной массы в фосфорене методом теории функционала плотности.....	59
Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Махаев В.Д., Шульга Ю.М. Взаимодействие фуллерена с комплексным борогидридом: квантово-химическое моделирование.....	61
Зюбина Т.С., Зюбин А.С., Истакова О.И., Талагаева Н.В., Золотухина Е.В., Воротынцев М.А., Конев Д.В. ИК-маркер взаимодействия полипиррольных цепочек в тонких пленках полипиррола с акцепторами электронной плотности в виде VF_4 и PF_6 . Квантово-химическое моделирование.....	66
Манякин М.Д., Курганский С.И. Моделирование электронной структуры VO_2	72
Смирнов В.А., Борщ Н.А., Переславцева Н.С., Манякин М.Д., Курганский С.И. Моделирование электронной структуры перспективного термоэлектрика скуттерудита $CoSb_3$	76
Волвенков Р.В., Дубровский О.И. Моделирование $L_{2,3}$ спектра рентгеновского поглощения кремния в $\alpha-SiO_2$ с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO.....	82

Конобеева Н.Н., Бумагин В.В., Белоненко М.Б. Параметр порядка и динамика электромагнитного импульса в углеродных нанотрубках в условиях накачки.....	85
Буховец А.Г., Бирючинская Т.Я., Горностаев А.К. О симметричности систем фрактальной структуры.....	88
Гетманова Е.Е. Обмен энергией между маятниками в цепочке несвязанных линейных осцилляторов.....	93
Камалова Н.С., Лисицын В.И., Матвеев Н.Н. Моделирование динамики изменения надмолекулярной структуры композита в рамках классической термодинамики.....	98
Костров Г.А., Жариков Д.Н., Завьялов Д.В. Исследование влияния величины напряжения питания диода Ганна на Фурье-спектр генерируемого тока с помощью моделирования методом конечных разностей.....	103
Попов А.В. Математическое моделирование динамического конфликта в эрготехнических системах.....	108
Смирнов Ю.Г., Ивенина И.В. Численное моделирование агрегации наночастиц магнетита на каплях водонефтяной эмульсии.....	114
Сунагатуллина А.И., Стебеньков А.М. Экспертная система диагностики посттравматического стрессового расстройства.....	119
Сушко Т.И., Кожемякин А.Е., Пашнева Т.В. Формирование инженерных навыков курсантов посредством компьютерного моделирования.....	122
Сушко Т.И., Ильинский С.В., Пашнева Т.В. Компьютерное моделирование физических процессов затвердевания отливок при литье в кокиль как системный анализ объекта.....	127
Сушко Т.И., Ильинский С.В., Пашнева Т.В. Компьютерная имитация течения процесса затвердевания отливок на основе уравнения гидродинамики.....	131
Сушко Т.И., Кожемякин А.Е., Пашнева Т.В. Оценка эффективности работы системы питания отливки посредством компьютерного моделирования.....	135
Катрахова А.А., Купцов В.С., Зотова А.В. Построение математической модели для расчета плана производства товара, обеспечивающего максимальную прибыль от ее реализации, в среде MathCAD.....	139
Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Косач А.А., Крыжановский К.В., Вяткина И.А. Математическая модель одночастичного тока в неупорядоченном S-I-N контакте.....	143

Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Косач А.А., Крыжановский К.В., Малый А.А. Численное исследование нижнего критического поля в неупорядоченном <i>S-I-S</i> контакте.....	152
Батаронов И.Л., Шунин Г.Е., Кострюков С.А., Пешков В.В., Шунина В.А. Конечно-элементный анализ влияния технологических дефектов на собственные частоты цилиндрического резонатора волнового твердотельного гироскопа.....	158

Научное издание

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ**

Материалы XXIV Международного семинара
(г. Воронеж, 25-26 ноября 2022 г.)

Издается в авторской редакции

Подписано к изданию 13.12.2023.

Объем данных 12,6 Мб.

Тираж 10 экз.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»
394006 Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84