

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ ОМСКОЙ ОБЛАСТИ
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение
высшего профессионального образования
ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. Ф.М. ДОСТОЕВСКОГО
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН

ФМ ОмГУ 2014
Сборник статей
II Региональной конференции
магистрантов, аспирантов
и молодых ученых
по физике и математике



2014

УДК 53+51
ББК 22.3я43+22.1я43
Ф114

*Рекомендовано к изданию
редакционно-издательским советом ОмГУ*

Ответственные за выпуск:
А. А. Романова, Г. М. Серопян

Ф114 **ФМ ОмГУ 2014** : сборник статей II Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике и математике. – Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2014. – 168 с.

ISBN 978-5-7779-1745-4

В сборнике опубликованы статьи участников конференции, посвященные исследованиям в области математики, прикладной теоретической физики, экспериментальной физики и современных технологий образования.

Для молодых ученых, магистрантов, аспирантов физико-математических специальностей и направлений.

УДК 53+51

ББК 22.3я43+22.1я43

ISBN 978-5-7779-1745-4

© Оформление. ФГБОУ ВПО

«ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», 2014

СОДЕРЖАНИЕ

Организационный комитет	6
-------------------------------	---

Секция

«МАТЕМАТИКА»

<i>Барауля О. А.</i> Разработка и применение модели дискретной оптимизации для задачи формирования производственных групп.....	8
<i>Боброва Е. А.</i> Минимизация времени обработки для задачи Flow shop с возвратом на некоторые машины	12
<i>Гнусарев А. Ю.</i> Применение алгоритма локального поиска с чередующимися окрестностями для одной задачи конкурентного размещения предприятий	16
<i>Задорин Н. А.</i> Формулы Ньютона-Котеса для функций с погранслоистой составляющей на кусочно-равномерной сетке	20
<i>Ильев А. В.</i> О разрешимости универсальных теорий некоторых классов графов	24
<i>Прохоренко Д. В.</i> Использование графовой модели для задачи автоматической классификации текстовых документов	29
<i>Тиховская С. В.</i> Исследование двухсеточного метода Зейделя с учётом локализации пограничных слоев.....	33
<i>Шерешик Н. Ю.</i> Класс опорных неравенств для задачи минимизации суммарного взвешенного момента окончания работ для одного прибора	37

Секция

«ПРИКЛАДНАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

<i>Антипов В. С.</i> Метод возмущения начального состояния при моделировании спиновых стекол в магнитном поле	42
<i>Бояринов Д. Н.</i> Расчет динамического критического индекса z методом коротковременной динамики.....	48
<i>Валов А. А.</i> Нули статистической суммы неупорядоченной трехмерной модели Изинга.....	51
<i>Дубс В.В.</i> Теоретико-полевое описание фазовых переходов в сложных спиновых системах со случайной анизотропией.....	55

Иванов А. В., Маляренко П. Н. Эффекты старения в неравновесном критическом поведении трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга при эволюции из начального низкотемпературного состояния.....	59
Иванова С. В., Пилипенко Д. В. Расчет энергии неактивированной адсорбции ферромагнитных двухкомпонентных сплавов Fe_xNi_{1-x} в зависимости от толщины пленок	64
Кокин А. О. Критические свойства изинговских пленок	68
Лаврухин И. В. Ренормгрупповой расчет флуктуационно - диссипативного отношения для однородных и структурно неупорядоченных систем	72
Медведева М. А. Исследование влияния дефектов структуры и размерных эффектов на критическое поведение сложных спиновых систем	76
Папушин А. С. Критическое моделирование трехмерных неупорядоченных систем	81
Пилипенко Д. В. Исследование адсорбционных свойств ультратонких пленок ферромагнитных двухкомпонентных сплавов с неоднородным распределением намагниченности в зависимости от материала подложки.....	86
Повар А. В. Система распределенных вычислений Aurora.....	91
Попов И. С. Эффекты огрубления в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели	95
Савченко А. Ю. Расчет из первых принципов намагниченности ферромагнитной пленки никеля на медной подложке	99

Секция

«ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА»

Андреев В. В. Приближённый метод расчёта полосково-нагруженного диэлектрического волновода.....	104
Баканов И. А. Получение свободных наноплёнок меди	108
Гибашева И. В. Оценка изменения температуры при нагрузочных тестах в локализованных точках с помощью тепловизора ТКВр-ИФП СВИТ	112

Домрачев А. Г. Исследование влияния оксида кремния на морфологию поверхности кремния, облученного мощным ионным пучком	115
Загидулина Я. Ш. Исследование лазерной абляции YBCO керамики повышенной пористости	119
Иванова И. В. Структурные преобразования глобул технического углерода после воздействия лазерным пучком различной энергии	123
Кнор А. С. Разработка конструкции высокоэффективной системы охлаждения для блока фильтра гармоник мощного РПДУ	127
Осенник Д. В. Исследование влияния УФ излучения на газовый состав гемоглобина	131
Павлюченко П. Е. Исследование взаимодействия излучения второй гармоники Nd:YAG лазера с длиной волны 532 нм с пленками YBCO	135
Пальчик И. Е. Разработка коаксиально-волноводного зондового перехода	139
Позыгун Я. С. Клиническая дозиметрия в рентгенотерапии	142
Романенко А. Л. Пучковые неустойчивости в плазме, помещенной в магнитное поле	147
Шрайбер А. Л. Оптимизация выбора материала и толщины экрана	151
Юшенков К. А. Нековалентная иммобилизация транспортных белков крови на поверхность углеродных нанотрубок	153

Секция

«СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОБРАЗОВАНИЯ»

Кутафина Я. Р. Развитие памяти у студентов младших курсов на материале физики	158
Москвитин А. В. Формирование рефлексии школьников в ходе научно-исследовательской деятельности	162

Организационный комитет

*Колоколов
Александр
Александрович*

д.ф.-м.н., проф., зав. лабораторией дискретной оптимизации Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, заведующий кафедрой прикладной и вычислительной математики ОмГУ

*Геринг
Геннадий
Иванович*

д.ф.-м.н., проф., заведующий кафедрой прикладной и медицинской физики ОмГУ

Прудников Владимир Васильевич

д.ф.-м.н., проф., заведующий кафедрой теоретической физики ОмГУ

*Потуданская
Мария Геннадьевна
Серосян
Геннадий Михайлович
Леванова
Татьяна
Валентиновна*

к.б.н., доцент, декан физического факультета ОмГУ

к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики ОмГУ

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ

*Романова
Анна Анатольевна*

к.ф.-м.н., доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ

*Адельшин
Александр
Владимирович*

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ

**Секция
«МАТЕМАТИКА»**

Разработка и применение модели дискретной оптимизации для задачи формирования производственных групп

О. А. Барауля

Научный руководитель – д. ф.-м. н., проф. А. А. Колоколов

Данная работа посвящена исследованию и решению задачи формирования проектных групп для одного омского предприятия. Построена математическая модель, отражающая выполнение работ в проектах с учетом временных ограничений, нагрузки сотрудников и связи работ внутри каждого проекта. На основе предложенной модели проведены расчеты, в которых использованы исходные данные предприятия, полученные на основе имеющейся практики выполнения проектов.

В настоящее время весьма актуальными являются вопросы управления персоналом, в частности задачи формирования проектных групп. В этих задачах необходимо учитывать множество ограничений, касающихся назначения специалистов на должности, качества и своевременности выполнения работ, обеспечения условий труда и т. д. [1–5]. Для исследования и решения таких задач широко используются методы оптимизации.

Приведем постановку задачи. Рассматривается предприятие (институт), которое занимается выполнением проектов. Оно включает несколько отделов, состоящих, вообще говоря, из разного числа сотрудников. Требуется распределить специалистов по проектам таким образом, чтобы нагрузка каждого из них находилась в заданных пределах, все работы и условия связи между ними были выполнены и при этом минимизировался фонд оплаты труда предприятия. Следует также отметить, что отделы работают независимо, поэтому будем решать задачу для каждого из них, а затем полученные результаты объединять в общее решение.

С целью построения математической модели введем следующие обозначения. Пусть $I = \{1, \dots, m\}$ – множество сотрудников некоторого отдела, $J = \{1, \dots, n\}$ – множество проектов, $K_j = \{1, \dots, l_j\}$ – список работ в проекте $j \in J$. c_i – стоимость часа работы i -го сотрудника, b_i – норма (в часах) работы i -го сотрудника, $i \in I$. Через $I_{j,k} \subseteq I$ обозначим множество сотрудников, которые могут выполнять работу $k \in K_j$ в проекте $j \in J$. $A_{j,k}$, $j \in J, k \in K_j$ – средние временные затраты на выполнение k -той работы в j -том проекте.

Введем переменные $y_{i,j,k}$, обозначающие объем (количество часов) k -той работы в j -ом проекте, выполняемый i -ым сотрудником, $i \in I, j \in J, k \in K_j$. В свою очередь $x_{i,j,k}$ – булевы переменные, принимающие значение 1, если i -ый сотрудник выполняет какую-то часть k -той работы в j -ом проекте, и 0 иначе. Для связи переменных $y_{i,j,k}$ и $x_{i,j,k}$ будут использоваться величины $\alpha = 0,5$ и $\beta = 1000$.

Теперь можно определить связь работ внутри проекта. В каждом проекте присутствуют работы, выполнение которых i -ым сотрудником влечет выполнение этим же сотрудником других работ из этого проекта. Например, если старший экономист Петров обрабатывал исходные данные, то он должен принять участие в написании отчетов по проделанной работе, т.е. обработка исходных данных влечет за собой подготовку отчетов. Записать это формально можно при помощи параметров $d_{k,l}$, принимающих значение 1, если из выполнения i -ым сотрудником k -ой работы следует выполнение этим же сотрудником l -ой работы, и 0 иначе, $i \in I, k, l \in K_j$.

Пусть b_i^* – нагрузка i -го сотрудника с учетом переработки, $a_{j,k}$ – уменьшенные средние временные затраты на выпол-

нение k -той работы в j -том проекте, в проведенных нами расчетах $a_{j,k} = 0,9 \cdot A_{j,k}$, $j \in J$, $k \in K_j$.

Тогда математическую модель задачи можно записать следующим образом:

$$\sum_{i \in I} \sum_{j \in J} \sum_{k \in K_j} c_i \cdot y_{i,j,k} \rightarrow \min \quad (1)$$

при ограничениях

$$b_i \leq \sum_{j \in J} \sum_{k \in K_j} y_{i,j,k} \leq b_i^*, \quad i \in I \quad (2)$$

$$a_{j,k} \leq \sum_{i \in I_{j,k}} y_{i,j,k} \leq A_{j,k}, \quad j \in J, \quad k \in K_j \quad (3)$$

$$\alpha \cdot x_{i,j,k} \leq y_{i,j,k} \leq \beta \cdot x_{i,j,k}, \quad i \in I, \quad j \in J, \quad k \in K_j \quad (4)$$

$$x_{i,j,k} \leq d_{k,l} \cdot x_{i,j,l}, \quad i \in I, \quad j \in J, \quad k, l \in K_j \quad (5)$$

$$y_{i,j,k} \geq 0, \quad i \in I, \quad j \in J, \quad k \in K_j \quad (6)$$

$$x_{i,j,k} \in \{0, 1\}, \quad i \in I, \quad j \in J, \quad k \in K_j \quad (7)$$

Здесь (1) – целевая функция задачи, система неравенств (2) определяет ограничения на объемы работ сотрудников. В свою очередь (3) указывает верхние и нижние границы для времени выполнения каждой работы. Ограничения вида (4) отражают связь переменных $y_{i,j,k}$ и $x_{i,j,k}$. А неравенства (6) описывают связь работ внутри каждого проекта.

По модели (1)-(7) были проведены расчеты с использованием исходных данных, предоставленных институтом. В указанной прикладной задаче рассмотрен отдел предприятия, состоящий из 10 сотрудников. Этому отделу необходимо выполнить 5 проектов двух типов (1, 2, 3 – проекты первого типа, 4, 5 – проекты второго типа). Проекты первого типа включают по 3 задачи, второго – по 9. Задача была решена при помощи пакета GAMS.[6]

По результатам расчетов можно сделать вывод, что модифицированная модель дает решения, которые с точки зрения практики лучше, чем полученные в работе [3].

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Афанасьева Л.Д., Колоколов А.А.* Разработка и анализ алгоритма решения некоторых задач формирования производственных групп // Омский научный вестник. 2012. Вып. 2. С. 39–42.

[2] *Афанасьева Л.Д., Колоколов А.А.* Исследование и решение одной задачи формирования производственных групп // Вестник УГАТУ. 2013. Т. 17. №5 (58). С. 20–25.

[3] *Барауля О.А.* О решении одной задачи формирования проектных групп с использованием методов оптимизации // «Теоретические знания – в практические дела». 2014. (в печати)

[4] *Новиков Д.А.* Математические модели формирования и функционирования команд. М.: Издательство физико-математической литературы, 2008.

[5] *Burkard R.E., Dell’Amico M., Mortello S.* Assignment problems. Philadelphia: SIAM, 2009.

[6] GAMS Development Corporation: Websit. URL: <http://www.gams.com>.

Олеся Александровна Барауля,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, olesya.baraulya@gmail.com

Минимизация времени обработки для задачи Flow shop с возвратом на некоторые машины*

Е. А. Боброва

Научный руководитель: д.ф.-м.н., с.н.с В. В. Сервах

В работе исследуется сложность задачи обработки партии однотипных деталей с критерием минимизации общего времени обработки всех деталей. Доказано, что если в технологическом маршруте происходит один возврат на некоторую машину, и все остальные машины участвуют в обработке детали только один раз, то задача является полиномиально разрешимой. Приводится соответствующий алгоритм.

Ключевые слова: однотипные детали, сложный технологический маршрут.

Рассматривается задача обработки партии из N однотипных деталей. Все детали проходят одинаковый технологический маршрут обработки, состоящий из n последовательно выполняемых операций O_1, O_2, \dots, O_n . Операция O_i выполняется на машине m_i в течение p_i единиц времени, $i = 1, 2, \dots, n$. Операции выполняются непрерывно, возможны простои детали между операциями. Одновременное выполнение двух и более операций на одной машине не допускается. Требуется обработать все детали за минимальное время.

В самом простом случае все машины в технологическом маршруте детали различны, и получаем частный случай задачи Flow Shop, который является полиномиально разрешимой [1]. Однако в связи с растущей конкуренцией и необходимостью частого изменения номенклатуры выпускаемых изделий, машины, выполняющие одну операцию, заменяют более универсальными, способными выполнять несколько различных операций. При этом технологический маршрут больше не является конвейерным, так как происходит возврат детали на машину. Может быть произвольное количество машин, на которые деталь

* Работа поддержана грантами РФФИ (проекты 12-01-00184а, 12-01-00122).
© Е. А. Боброва, 2014

возвращается несколько раз. Такая задача является частным случаем задачи Job Shop с однотипными деталями. Даже с учетом специфики однотипных деталей она является NP-трудной [2]. К ней сводится NP-трудная задача Job Shop с тремя различными деталями и тремя различными машинами [3], то есть достаточно всего трех машин, на которые может возвращаться деталь в процессе обработки, для того, чтобы задача стала труднорешаемой.

В работе рассматривается случай, когда существует ровно одна машина, на которую возвращается деталь при обработке (рис.1).

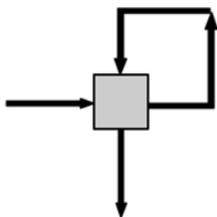


Рис. 1. Схема технологического маршрута

Для задачи Flow Shop с однотипными деталями, которую мы усложняем, оптимум достигается при использовании удобных на практике циклических расписаний. Однако, если разрешить однократный возврат на машину, оптимальное циклическое расписание не обеспечит оптимума общего времени обработки всех деталей. Если машина, на которую возвращается деталь, является самой загруженной, то на ней выполнение операций в оптимальном расписании будет соответствовать схеме, изображенной на рисунке 2.

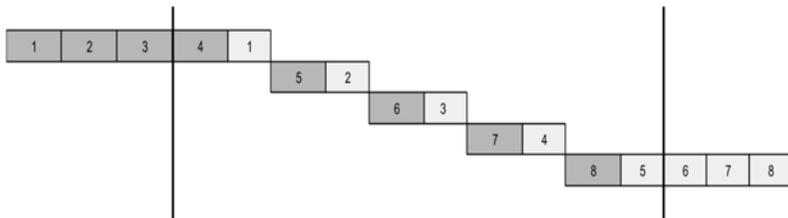


Рис. 2. Последовательность деталей на повторяющейся машине

Рассматриваемая задача разбивается на два случая:

- 1) повторяющаяся машина не является самой загруженной;
- 2) повторяющаяся машина является самой загруженной.

В первом случае циклическое расписание, построенное с теми же длительностями операций и различными машинами, будет допустимым и оптимальным и в случае возврата на машину. Как уже было сказано, такое расписание строится за полиномиальное время.

Для описание алгоритма построения расписания во втором случае введем следующие обозначения. Путь x – первая операция на самой загруженной машине, z – вторая операция на самой загруженной машине, y – сумма длительностей операций между операциями x и z в технологическом маршруте, k – наименьшее целое, не превосходящее $y/x + 1$.

Весь алгоритм разбивается на три этапа. На первом этапе самая загруженная машина как можно быстрее выполняет операцию x для первых k деталей. После этого появляются детали, которые ожидают выполнения операции z , и начинается второй этап. Он представляет собой обычное циклическое расписание обработки деталей из первого случая для следующих $N-2k$ деталей. На третьем этапе для последних k деталей на повторяющейся машине непрерывно выполняется операция z , выполнение операций до z идет как на втором этапе. На всех этапах операции, следующие за z выполняются как в случае обычной конвейерной линии Flow shop.

Обоснование оптимальности алгоритма построено на доказательстве того, что при построенном расписании достигается нижняя граница оценки общего времени обработки всех деталей. Данный алгоритм является полиномиальным и может быть обобщен на случай большего числа операций, выполняемых на повторяющейся машине.

В работе рассмотрен полиномиально разрешимый случай задачи минимизации общего времени обработки всех деталей для задачи обработки партии однотипных деталей со сложным технологическим маршрутом.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Гэри М., Джонсон Д.* Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. М.: Мир, 1982. 416 с.

[2] *Межецкая М.А., Сервах В.В.* Задачи обработки деталей со сложным технологическим маршрутом // *Современные проблемы науки и образования.* 2013. № 1.

[3] *Sotskov Y.N., Shakhlevich N.V.* NP-hardness of shop-scheduling problems with three jobs // *Discrete Appl. Math.* 1995. 59 (3). P. 237–266.

Екатерина Александровна Боброва,
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева
СО РАН, 2 курс аспирантуры,
644043, г. Омск, ул. Певцова, 13, (3812) 236739,
eabobrova88@gmail.com

Применение алгоритма локального поиска с чередующимися окрестностями для одной задачи конкурентного размещения предприятий

А. Ю. Гнусарев

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. Т. В. Леванова

Рассматривается вариантная задача конкурентного размещения предприятий, приводится ее математическая модель. Описывается построение тестовых примеров для поставленной задачи. Предлагается вариант алгоритма локального поиска с чередующимися окрестностями, приводятся результаты экспериментального исследования на сериях тестовых задач.

Ключевые слова: вариантная задача размещения; алгоритм локального поиска с чередующимися окрестностями; дискретная оптимизация.

Дискретные задачи оптимального размещения предприятий уже давно являются предметом пристального изучения. Обусловлено это тем, что многие прикладные задачи возникают при планировании или модернизации производства. Суть таких задач состоит в том, чтобы расположить предприятия в некоторых пунктах с наименьшими суммарными затратами или наибольшими доходами. В современных моделях задач размещения часто стали учитывать наличие конкурентов на рынке, что наиболее полно описывает реальную экономическую ситуацию.

Рассматриваемая задача конкурентного размещения предприятий была предложена R. Aboolian, O. Berman, D. Krass в [1]. Этими авторами приводится постановка задачи, результаты ее исследования и сведения о NP-трудности. А также предлагаются два алгоритма приближенного ее решения.

Конкурентная задача размещения является достаточно сложной как с теоретической, так и с практической точки зрения. Применение пакетов прикладных программ для решения подобных задач не всегда является обоснованным, т.к. получение оптимального решения может потребовать значительных времен-

ных затрат. В связи с этим в последние годы активно развиваются методы приближенного решения. В [2] предложен вариант алгоритма локального поиска с чередующимися окрестностями для двухстадийной задачи размещения предприятий. Впервые разработан данный алгоритм был Hansen P., Mladenovic N. в последствие применен для ряда задач [3] и получил большую популярность. В данной статье приводится вариант этого алгоритма для задачи конкурентного размещения предприятий.

В рассматриваемой задаче [1] имеется дискретное множество точек спроса N и подмножество $P \in N$ пунктов возможного размещения предприятий. Часть из них уже занята конкурентом $C \subset P$, который пытается удовлетворить наибольшую долю спроса клиентов. Спрос не является фиксированным и зависит от того, где и какое предприятие разместить. Лицу принимающему решение (ЛПР) необходимо открыть свои предприятия в местах из множества $S = P \setminus C$ и выбрать для них сценарий развития $r \in \{1, \dots, R\}$ так, чтобы максимизировать суммарный спрос клиентов, не выходя за рамки установленного бюджета B . Для каждого пункта $i \in N$ задан w_i – вес спроса в пункте; c_{jr} – стоимость размещения предприятия со сценарием r в пункте j ; $x_{jr} = 1$, если предприятие в пункте j работает по сценарию r .

Математическая модель задачи имеет вид:

$$\sum_{i \in N} w_i \cdot g(U_i) \cdot MS_i \rightarrow \max$$

$$\sum_{j \in S} \sum_{r=1}^R c_{jr} x_{jr} \leq B, \sum_{r=1}^R x_{jr} \leq 1, j \in S, x_{jr} \in \{0,1\}, j \in S, r \in R,$$

где $g(U_i)$ функция спроса, а U_i – суммарный спрос пункта i , удовлетворяемый ЛПР и конкурентом. Доля открытых предприятий в общем объеме обслуживания на рынке обозначается $MS_i, i \in N$.

Ограничение (1) не позволяет выйти за пределы бюджета; условие (2) означает, что в пункте может работать предприятие только по одному сценарию.

Экспериментальные исследования предложенного алгоритма проводились на тестовых примерах, специально создан-

ных для данной задачи. В [1] были предложены правила для их формирования, которые описаны ниже.

Рассматривалось только три сценария ($R = 3$), по которым можно открывать новые предприятия: основной, средний и улучшенный с затратами в 1, 2, 3 единицы соответственно. Расходы на открытие идентичны для всех потенциальных мест.

Рассматривалось два класса тестовых примеров.

Класс А. Низкая чувствительность клиента к расстоянию: $\beta = 1$. Количество точек спроса изменялось в пределах $60 \leq n \leq 340$ с шагом в 20 единиц.

Класс В. Высокая чувствительность клиента к расстоянию: $\beta = 2$. Количество точек спроса изменялось в пределах $10 \leq n \leq 90$ с шагом в 5 единиц.

Каждый узел считался потенциальным местом размещения предприятий, т. е. множество P совпадало с множеством N . Бюджет изменялся в пределах $3 \leq B \leq 9$ с шагом в 2 единицы. В каждом $i \in N$ предприятие конкурента открывалось с вероятностью $\frac{1}{2}$, в остальных пунктах ЛПП мог размещать свои предприятия для удовлетворения наибольшего спроса.

Привлекательность формировалась по следующему правилу: $a_1 = 3$; $a_2 = a_1 + t_2$, $1 \leq t_2 \leq 6$; $a_3 = a_2 + t_3$, $1 \leq t_3 \leq 9$. Гибкость спроса была идентична для всех пунктов и рассматривалась равной 1, $\lambda = 1$. Веса узлов w_i генерировались в пределах $1 \leq w_i \leq 10$. Расстояние между пунктами спроса d_{ij} измерялось в Евклидовой метрике.

Для решения рассмотренной ранее задачи был предложен алгоритм локального поиска с чередующимися окрестностями. Основная идея его заключается в следующем. В начале работы алгоритма определяется множество используемых окрестностей, порядок их просмотра и выбирается исходное решение. Начиная с первой окрестности, алгоритм за один шаг специальным образом просматривает список окрестностей и находит улучшающее решение. Алгоритм заканчивает свою работу, в случае, если список окрестностей просмотрен и не найдено решение, лучше рекорда.

Начальное решение для данной задачи определялось в зависимости от значений w_i и доступного бюджета. В данной работе использовались два вида окрестностей.

Результаты вычислительного эксперимента для случая $\beta = 2$ приведены в таблице.

Вычислительный эксперимент

N	B	GAMS TIME, min	VNS TIME, sec	VNS ERROR
90	3	19	15	9.78
	5	17	15	9.85
	7	19	15	10.39
	9	16	15	12.8

Как видно из таблицы, пакет GAMS решает поставленную задачу более 15 минут, в то время как алгоритм локального поиска с чередующимися окрестностями выдает решение менее чем за 15 секунд при невысокой погрешности. В будущем планируется увеличить точность решения за счет введения новых окрестностей.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Aboolian R., Berman O., Krass D.* Competitive facility location and design problem // *European Journal of Operational Research*. Vol. 182. 2007. P. 40–62.

[2] *Леванова Т.В., Федоренко А.С.* Локальный поиск с чередующимися окрестностями для двухстадийной задачи размещения // *Дискретный анализ и исследование операций*. 2008. С. 43–57.

[3] *Hansen P., Mladenovic N. and Moreno-Perez J.F.* Variable neighbourhood search: algorithms and applications // *Ann. of Operations Research*. Vol. 175. P. 367–407.

Александр Юрьевич Гнусарев,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, london_5.10@mail.ru

Формулы Ньютона-Котеса для функций с погранслойной составляющей на кусочно-равномерной сетке

Н. А. Задорин

Научный руководитель: д. ф.-м.н., проф. А. И. Задорин

Исследуются квадратурные формулы Ньютона-Котеса на сетке Шишкина для интегрирования функций с погранслойной составляющей. Доказано, что погрешность формул Ньютона-Котеса на такой сетке равномерна по погранслойным изменениям интегрируемой функции. Обсуждаются результаты численных экспериментов.

Ключевые слова: формула Ньютона-Котеса, пограничный слой, большие градиенты, сетка Шишкина, оценка погрешности.

Исследуем вопрос численного интегрирования функции, которую можно рассматривать как решение сингулярно возмущенной краевой задачи. Остановимся на вычислении интеграла:

$$I(u) = \int_0^1 u(x) dx.$$

Предполагаем, что для функции $u(x)$ справедливо представление:

$$u(x) = q(x) + \Theta(x), \quad x \in [0,1], \quad (1)$$

где

$$|q^{(j)}(x)| \leq C_1, \quad |\Theta^{(j)}(x)| \leq \frac{C_1}{\varepsilon^j} e^{-\alpha x/\varepsilon}, \quad 0 \leq j \leq m, \quad (2)$$

Функции $q(x), \Theta(x)$ в явном виде не заданы, $\alpha > 0, \varepsilon > 0$. Подразумеваем, что постоянные C, C_j не зависят от ε и N .

Известно, что представление (1) справедливо для решения сингулярно возмущенной краевой задачи:

$$\varepsilon u''(x) + a_1(x)u'(x) - a_2(x)u(x) = f(x), \quad u(0) = A, \quad u(1) = B,$$

где $a_1(x) \geq \alpha > 0, a_2(x) \geq 0, \varepsilon > 0$.

В соответствии с представлением (1), интегрируемая функция содержит регулярную составляющую $q(x)$ с ограниченными производными и погранслойную составляющую $\Theta(x)$, производные которой не ограничены равномерно по параметру ε . Представление (1) соответствует наличию пограничного слоя у границы $x = 0$. Если для вычисления интеграла $I(u)$ применять составные формулы Ньютона-Котеса на равномерной сетке с шагом h , то при $\varepsilon \leq h$ погрешность этих формул, согласно [1], становится величиной порядка $O(h)$.

Повысим точность формулы Ньютона-Котеса с m равноотстоящими узлами за счет использования кусочно-равномерной сетки Шишкина. Зададим кусочно-равномерную сетку:

$$\Omega = \{x_n : x_n = x_{n-1} + h_n, n = 1, 2, \dots, N, x_0 = 0, x_N = 1\}, \quad (3)$$

где

$$h_n = \frac{2\sigma}{N}, 1 \leq n \leq \frac{N}{2}; h_n = \frac{2(1-\sigma)}{N}, \frac{N}{2} < n \leq N,$$

$$\sigma = \min\{1/2, m\alpha^{-1}\varepsilon \ln N\}.$$

Предполагаем, что N кратно $2(m-1)$. Для построения составной квадратурной формулы интервал $[0,1]$ разбиваем на непересекающиеся интервалы, шаги которых равномерны:

$$[0,1] = \bigcup_{k=0, m-1}^{N-m+1} [x_k, x_{k+m-1}].$$

Для каждого интервала строим формулу Ньютона-Котеса с m узлами:

$$S_{k,m}(u) = \int_{x_k}^{x_{k+m-1}} L_{k,m}(u, x) dx,$$

где $L_{k,m}(u, x)$ — многочлен Лагранжа с узлами интерполяции $x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m-1}$. Теперь строим составную формулу:

$$S_m(u) = \sum_{k=0, m-1}^{N-m+1} S_{k,m}(u). \quad (4)$$

Теорема 1. Пусть для функции $u(x)$ справедливо представление (1) с ограничениями (2). Тогда для формулы (4) на сетке (3) для некоторой постоянной C выполняются оценки погрешности:

$$|I(u) - S_m(u)| \leq \frac{C}{N^m} [1 + \varepsilon \ln^{m+1} N] \text{ при } \varepsilon < \frac{\alpha}{2m \ln N}, \quad (5)$$

$$|I(u) - S_m(u)| \leq \frac{C}{N^m} \min\{\varepsilon^{-m}, \ln^m N\} \text{ при } \varepsilon \geq \frac{\alpha}{2m \ln N}. \quad (6)$$

Доказательство. Определим интеграл:

$$I_{k,m}(u) = \int_{x_k}^{x_{k+m-1}} u(x) dx.$$

Тогда $|I_{k,m}(u) - S_{k,m}(u)| \leq (x_{k+m-1} - x_k) \max_x |L_{k,m}(u, x) - u(x)|$. Для погрешности интерполяции многочленом Лагранжа справедлива оценка:

$$|L_{k,m}(u, x) - u(x)| \leq \max |u^{(m)}(s)| \frac{\tau_k^m}{4m}, \quad (7)$$

где $s \in [x_k, x_{k+m-1}]$, τ_k — шаг этого интервала. Погрешность интерполяции оцениваем отдельно на функциях $q(x)$, $\Theta(x)$ с использованием оценок (2), (7). Далее, суммируя по k погрешности $|I_{k,m}(u) - S_{k,m}(u)|$, получаем утверждение теоремы.

Результаты численных экспериментов.

Пусть $u(x) = \cos(\pi x / 2) + e^{-x/\varepsilon}$, $\varepsilon \in (0, 1]$. Остановимся на квадратурной формуле Ньютона-Котеса с четырьмя узлами, $m = 4$. В табл. 1 приведена погрешность квадратурной формулы $\Delta_{N,\varepsilon} = |I(u) - S_4(u)|$ на равномерной сетке в зависимости от ε и N . Погрешность увеличивается с уменьшением ε . В табл. 2 приведена погрешность этой же формулы на сетке Шишкина. Точность квадратурной формулы существенно повысилась.

Таблица 1

Погрешность формулы Ньютона-Котеса на равномерной сетке

ε	N				
	48	96	192	384	768
1	1.06e-8	6.63e-10	4.15e-11	2.59e-12	1.61e-13
10^{-1}	2.33e-6	1.47e-7	9.23e-9	5.77e-10	3.61e-11
10^{-2}	1.13e-3	1.17e-4	8.64e-6	5.66e-7	3.58e-8
10^{-3}	6.81e-3	2.91e-3	9.85e-4	2.10e-4	2.55e-5
10^{-4}	7.71e-3	3.81e-3	1.85e-3	8.77e-4	3.88e-4

Таблица 2

Погрешность формулы Ньютона-Котеса на сетке Шишкина

ε	N				
	48	96	192	384	768
1	1.06e-8	6.63e-10	4.15e-11	2.59e-12	1.61e-13
10^{-1}	2.33e-6	1.47e-7	9.23e-9	5.77e-10	3.61e-11
10^{-2}	1.97e-5	2.53e-6	2.85e-7	2.94e-8	2.86e-9
10^{-3}	2.10e-6	2.61e-7	2.90e-8	2.97e-9	2.88e-10
10^{-4}	3.44e-7	3.44e-8	3.41e-9	3.29e-10	3.08e-11

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Задорин А.И., Задорин Н.А.* Квадратурные формулы для функций с погранслошной составляющей // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2011. Т. 51. № 11. С. 1952–1962.

Никита Александрович Задорин,
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева
СО РАН, 3 курс аспирантуры,
644043, г. Омск, ул. Певцова, 13, (3812) 236739,
nik-zadorin@yandex.ru

О разрешимости универсальных теорий некоторых классов графов

А. В. Ильев

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. Н. Ремесленников

Вопросы о разрешимости теорий различных классов алгебраических систем относятся к числу важнейших алгоритмических вопросов теории моделей. В работе доказана разрешимость универсальной теории графов, а также универсальных теорий планарных графов и двудольных графов.

1. Классы и теории

Класс алгебраических систем – это семейство однотипных систем. Все системы заданного типа предполагаются записанными в некоторой сигнатуре Σ и называются Σ -системами. Класс Σ -систем \mathbf{K} называется *абстрактным*, если вместе с каждой своей системой он содержит все изоморфные ей Σ -системы.

Совокупность $T(\mathbf{K})$ всех предложений сигнатуры Σ , истинных во всех Σ -системах из \mathbf{K} , называется (*элементарной теорией* класса \mathbf{K}).

Формула ϕ называется *универсальной*, или \forall -формулой, если $\phi = \forall x_1 \dots \forall x_k \psi$, и *экзистенциальной*, или \exists -формулой, если $\phi = \exists x_1 \dots \exists x_k \psi$, где ψ — бескванторная формула. Теория называется *универсальной*, если она включает только предложения, являющиеся универсальными формулами.

Универсальные теории занимают особое место в теории моделей, так как любую теорию можно расширить до универсально аксиоматизируемой теории путем расширения сигнатуры (метод скулемизации) [1]. Кроме того, многие комбинаторные задачи, сформулированные на языке теории моделей, приводят к изучению моделей универсальных теорий [3].

При рассмотрении любой теории важное значение имеет вопрос о ее разрешимости. Пусть L_Σ – множество всех предло-

жений сигнатуры Σ . Теория T называется *разрешимой*, если существует алгоритм, позволяющий для любого предложения ϕ из L_Σ ответить на вопрос: «Принадлежит или нет предложение ϕ теории T ?» Установление разрешимости теории какого-либо класса \mathbf{K} алгебраических систем позволяет сделать вывод о принципиальной возможности получения исчерпывающего перечня свойств, присущих всем системам класса \mathbf{K} .

2. Графы

Будем рассматривать только *обыкновенные графы*, т. е. неориентированные графы без петель и кратных ребер. С точки зрения теории моделей, любой такой граф – это алгебраическая система $G = \langle X, \Sigma \rangle$, сигнатура Σ которой состоит из предиката равенства и бинарного иррефлексивного симметричного предиката смежности $E(x, y)$. Другими словами, *обыкновенный граф* – это непустое множество X (вершин) с определенным на нем бинарным отношением $E(x, y)$, удовлетворяющим аксиомам:

$$(G1) \quad \forall x (\neg E(x, x)) ;$$

$$(G2) \quad \forall x \forall y (E(x, y) \rightarrow E(y, x)) .$$

Аксиомами теории графов являются все аксиомы исчисления предикатов с равенством плюс аксиомы графов (G1) и (G2). Система аксиом теории класса двудольных графов включает, сверх того, счетное множество аксиом, выражающих тот факт, что никакой двудольный граф не содержит циклов нечетной длины (теорема Кёнига). Аксиомами теории класса планарных графов являются все аксиомы теории графов, а также счетное множество аксиом, утверждающих, что никакой планарный граф не содержит подграфов, гомеоморфных графам K_5 или $K_{3,3}$ (теорема Куратовского).

В 60-е годы XX века И.А. Лавровым была установлена неразрешимость теории графов.

Теорема [2]. *Теория графов неразрешима.*

Таким образом, не существует алгоритма, который для любого предложения ϕ сигнатуры $\Sigma = \langle E(x, y), = \rangle$ мог бы ответить на вопрос: «Истинно ли предложение ϕ для всех графов?»

Естественно возникают вопросы о разрешимости универсальной теории графов, а также универсальных теорий различных классов графов.

3. Разрешимость универсальных теорий

Доказаны следующие утверждения:

1. *Универсальная теория графов разрешима.*
2. *Универсальная теория планарных графов разрешима.*
3. *Универсальная теория двудольных графов разрешима.*

Для доказательства утверждения 1 рассмотрим алгоритм, отвечающий на вопрос: «Принадлежит ли \forall -предложение ϕ универсальной теории графов?»

Алгоритм 1.

Шаг 1. Для универсального предложения ϕ формулируем предложение $\neg\phi$. Это будет \exists -предложение.

Шаг 2. Преобразуем $\neg\phi$ в предваренную ДФ (дизъюнктивную форму): $\exists x_1 \dots \exists x_n (\psi_1 \vee \dots \vee \psi_m)$, где ψ_k — конъюнкты, $k = 1, \dots, m$.

Шаг 3. В каждом конъюнкте ψ_k , где есть множитель $x = y$, заменяем все вхождения переменной y на x в остальных множителях конъюнкта ψ_k . Эту процедуру повторяем до тех пор, пока не исключим все равенства. Получим предваренную ДФ, где в каждом конъюнкте все множители имеют вид $E(x, y), \neg E(x, y)$ или $x \neq y$.

Шаг 4. Предложение $\neg\phi$ в ДФ будет истинно для графа, если истинным будет хотя бы один из конъюнктов ψ_k этого предложения. Последовательно просматриваем все конъюнкты ψ_k и удаляем те из них, которые ложны для любого графа. Признаки таких конъюнктов:

- конъюнкт содержит множитель $x \neq x$;
- конъюнкт содержит множитель $E(x, x)$;
- конъюнкт содержит множители $E(x, y)$ и $\neg E(x, y)$;
- конъюнкт содержит множители $E(x, y)$ и $\neg E(y, x)$.

Шаг 5. Если на шаге 4 все конъюнкты предложения $\neg\phi$ удалены, то предложение ϕ истинно для всех графов и, следовательно, принадлежит универсальной теории графов.

Если же какие-то конъюнкты предложения $\neg\phi$ удалить не удалось, то ϕ не принадлежит универсальной теории графов, так как существует граф, для которого истинно его отрицание $\neg\phi$.

Такой граф можно построить по любому из конъюнктов ψ_k , не удаленных на шаге 4, следующим образом: вершины графа взаимно однозначно соответствуют переменным из $\neg\phi$; вершины x и y смежны, если и только если конъюнкт ψ_k содержит множитель $E(x,y)$.

Конец алгоритма.

Используемый в доказательстве утверждения 2 алгоритм 2, отвечающий на вопрос: «Принадлежит ли \forall -предложение ϕ универсальной теории планарных графов?», отличается от алгоритма 1 тем, что на шаге 5 алгоритма 2 выполняется процедура проверки, существует ли планарный граф, являющийся моделью предложения $\neg\phi$.

Если да, то ϕ не принадлежит универсальной теории планарных графов, так как существует планарный граф, для которого истинно его отрицание $\neg\phi$.

Если нет, то предложение ϕ истинно для всех планарных графов и, следовательно, принадлежит универсальной теории планарных графов.

Утверждение 3 доказывается аналогично.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Ершов Ю.Л.* Разрешимые теории и конструктивные модели. М., 1980. 415 с.

[2] *Лавров И.А.* Эффективная неотделимость множества тождественно истинных и множества конечно неопределимых

формул некоторых элементарных теорий // Алгебра и логика. 1963. № 2. С. 5–18.

[3] *Razborov A.A.* Flag algebras // J. of Symbolic Logic. 2007. V. 72. № 4. P. 1239–1282.

Артём Викторович Ильев,
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева
СО РАН, 1 курс аспирантуры,
644099, г. Омск 99, ул. Певцова 13, (3812) 972251,
artyom_iljev@mail.ru

Использование графовой модели для задачи автоматической классификации текстовых документов

Д. В. Прохоренко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. А. В. Пролубников

В работе рассматривается вопрос автоматической классификации текстовых документов без учителя. Основным отличием предложенного подхода является использование графовой модели представления документов вместо привычного векторного представления.

Ключевые слова: классификация текстовых документов, матрица совместной встречаемости, графовая модель, алгоритм Дейкстры, интервальный анализ.

1. Введение

Классификация текстов по тематическим категориям является актуальной задачей, решение которой требуется в различных информационных системах. Общие принципы и основные подходы хорошо описаны в [1].

Все существующие методы классификации полнотекстовых документов делятся на два вида: классификация с учителем и без. Все обнаруженные подходы имеют одну общую черту: документ представляется в виде некоторого вектора большой размерности. Похожесть или близость двух документов оценивается на основе некоторой меры, к примеру, косинусной.

В работе рассматривается другой подход и проверяется его целесообразность: каждый из документов представляется не в виде вектора, а в виде графа связанности терминов.

2.1. Постановка задачи

Дан набор текстовых документов, который содержит тексты из двух различных предметных областей. Необходимо проанализировать каждый документ и принять решение к какой предметной области необходимо отнести документ.

2.2. Связанные определения

Матрица совместной встречаемости – это квадратная симметричная матрица, элементы которой соответствуют частоте вхождений двух индексных слов.

Словарное окно – это максимально удаленная позиция слова, на которой может находиться термин, чтобы считать, что два слова в документе встречаются вместе.

Кластеризация – в рамках данной задачи под кластеризацией понимается процесс разделения основного графа на отдельные части. Кластер является связным графом.

Центр кластера – это термин, который по некоторому предположению является самым значимым в данном кластере.

3. Общий алгоритм решения

Полный алгоритм классификации набора документов от первоначального анализа до выбора класса, к которому отнести текст, содержит большое количество небольших подзадач, но его можно разбить на три основные фазы:

- 1) построение матрицы совместной встречаемости терминов,
- 2) построение графовой модели для матрицы совместной встречаемости и ее кластеризация,
- 3) отнесение каждого документа к некоторой предметной области.

Предметом рассмотрения данной статьи является целесообразность использования графовой модели для решения поставленной задачи. В связи с этим описание фаз 1 и 3 будут опущены. Перейдем к рассмотрению фазы 2 с предположением, что матрица совместной встречаемости уже построена.

4.1. Построение графовой модели для матрицы совместной встречаемости

Для построения графовой модели используется матрица совместной встречаемости $A = (a_{ij})$. Элемент матрицы a_{ij} равен частотному интервалу встречаемости термина i и термина j в заданном словарном окне: $a_{ij} = [avr_{ij}, max_{ij}]$, где avr_{ij} – средняя

встречаемость пары терминов в документах, где эта пара присутствует; max_{ij} – максимальная встречаемость пары терминов (i, j) в отдельном документе среди всех рассмотренных.

Для выделения центров кластера определяется значимость каждого термина как средний суммарный вес смежных ребер:

$$sw_i = \sum_{i \neq j} avr_{ij}$$

Из числа наиболее значимых терминов выбирается 3, 5, 10 центров (количество используемых центров является параметром системы, который можно варьировать).

4.2. Алгоритм кластеризации

После выделения центров кластера производится принятие решения о необходимости разделения двух центров по разным предметным областям или отнесении их к одной предметной области. В случае, если два термина имеют непосредственную связь ($avr_{ij} \neq 0$) и уровень значимости связи больше некоторого порогового значения (α):

$$\frac{avr_{ij}}{sw_i + sw_j} > \alpha$$

то принимается решение, что два термина принадлежат одной предметной области, в противном случае к разным областям.

При разделении двух кластерных центров по разным областям удаляются все связи между ними, в результате чего два кластера представляют собой два не связанных между собой графа. Процесс удаления связей осуществляется следующим образом:

1) пытаемся найти какой-нибудь путь между двумя центрами с помощью интервальной вариации алгоритма Дейкстры [2];

2) если связь есть, удаляем связь наименьшего веса между двумя терминами и переходим к п.1. Если связи нет, то делаем вывод, что два термина уже принадлежат различным кластерам.

5. Заключение

В ходе проведенной работы была построена графовая модель представления данных для решения задачи автоматической классификации текстовых документов. Графовая модель позволяет использовать оптимизационные алгоритмы на графах для решения возникающих задач. Так, в текущей версии алгоритма классификации используется интервальный вариант алгоритма Дейкстры.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Большакова Е.И.* Автоматическая обработка текстов на естественном языке и компьютерная лингвистика: учеб. пособие // Е.И. Большакова, Э.С. Клышинский, Д.В. Ландэ, А.А. Носков, О.В. Пескова, Е.В. Ягунова. М.: МИЭМ, 2011. 272 с.

[2] *Козина Г.Л.* Алгоритмы поиска оптимальных решений интервальных задач на графах / Г.Л. Козина, Р.К. Кудерметов, Н.Д. Маслова // Интервал-06: Всероссийское (с международным участием) совещание по интервальному анализу и его приложениям. Петергоф, 2006. С. 59–62.

Данил Валериевич Прохоренко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
danilf16@gmail.com

Исследование двухсеточного метода Зейделя с учётом локализации пограничных слоев*

С. В. Тиховская

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. А. И. Задорин

Рассматривается уравнение типа конвекция-диффузия с регулярными пограничными слоями. Для его решения используется схема направленных разностей на сетке Шишкина на основе двухсеточного метода. Исследован вопрос уменьшения необходимого количества итераций метода Зейделя за счёт учёта направления потока.

Ключевые слова: эллиптическое уравнение, сингулярное возмущение, метод Зейделя по потоку, сетка Шишкина, разностная схема, двухсеточный метод.

Рассмотрим линейную эллиптическую сингулярно возмущенную краевую задачу:

$$\varepsilon u''_{xx} + \varepsilon u''_{yy} + a(x)u'_x + b(y)u'_y - c(x, y)u = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad (1)$$

$$u(x, y) = g(x, y), \quad (x, y) \in \Gamma = \overline{\Omega} \setminus \Omega,$$

где $\Omega = (0, 1)^2$, $\varepsilon > 0$, $a(x) \geq \alpha > 0$, $b(y) \geq \beta > 0$, $c(x, y) \geq 0$.

Предполагается, что a, b, c, f, g – достаточно гладкие. Тогда решение задачи (1) является равномерно ограниченным и имеет два пограничных слоя у границ $x = 0$, $y = 0$.

Рассмотрим разностную схему, имеющую на сетке Шишкина [2] с параметром $\sigma = \min\{1/2, 2\varepsilon \ln N\}$ погрешность $O(\ln N / N)$:

$$\varepsilon \lambda_{xx}^N u_{ij}^N + \varepsilon \lambda_{yy}^N u_{ij}^N + a_i \lambda_x^N u_{ij}^N + b_j \lambda_y^N u_{ij}^N - c_{ij} u_{ij}^N = f_{ij}, \quad (x_i, y_j) \in \Omega_N, \quad (2)$$

$$u_{ij}^N = g(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Gamma_{N, \sigma} = \Gamma \cap \Omega_{N, \sigma}, \quad v_{ij} = v(x_i, y_j),$$

где $\lambda_x^N, \lambda_{xx}^N$ – обозначения для разностных производных.

$$\text{Пусть } \Delta_N = \ln N / N, \quad \|v^N\| = \max_{i, j} |v_{ij}^N|, \quad \delta_N = \|u^{(0)} - u^N\|.$$

* Выполнено при поддержке РФФИ, грант № 13-01-00618-а.

Разностную схему (2) можно разрешить на основе итераций, поэтому для уменьшения их количества будем использовать двухсеточный метод и обозначения из [1]. Пусть n – число узлов более редкой, вложенной сетки Шишкина. Тогда выигрыш в количестве итераций составит $M_N - M_{nN} \approx d(N^2 - n^2) \log_{q_n} (\Delta_N / \delta_n) - J_n$, где J_n – число действий метода интерполяции.

Пятиточечную схему (2) можно представить как $a_{i,j} u_{i-1,j}^N + b_{i,j} u_{i,j-1}^N + c_{i,j} u_{i+1,j}^N + d_{i,j} u_{i,j+1}^N - e_{i,j} u_{i,j}^N = f_{i,j}^N$, $0 < i, j < N$. Тогда векторно-матричная запись метода Зейделя имеет вид:

$$u^{(m)} = D^{-1}(f + Lu^{(m)} + Uu^{(m-1)}), \quad (Dv)_{i,j} = e_{i,j} v_{i,j},$$

$$(Lv)_{i,j} = a_{i,j} v_{i-1,j} + b_{i,j} v_{i,j-1}, \quad (Uv)_{i,j} = c_{i,j} v_{i+1,j} + d_{i,j} v_{i,j+1}.$$

В работе [3] на равномерной сетке исследован метод Зейделя, учитывающий направления потока, векторно-матричная запись которого $u^{(m)} = D^{-1}(f + Lu^{(m-1)} + Uu^{(m)})$.

Исследуем преимущество метода Зейделя по потоку на сетке Шишкина в случае сингулярно возмущенной задачи (1).

Рассмотрим задачу (1) при $a(x) = 1 + x$, $b(y) = 1 + y$, $c(x, y) \equiv 2$, $g(x, y) \equiv 0$, $f(x, y) = e^x \sin(\pi y)$. В таком случае точное решение не задается в явном виде и тем самым пограничные слои формируются, исходя из вида задачи.

В табл. 1 приведено в верхней строке количество итераций двухсеточного метода, при этом в скобках указано количество итераций на сетке с $n = N/2$ узлами. В нижней строке приведено количество итераций односеточного метода.

В табл. 2 приведено количество итераций метода Зейделя в зависимости от \mathcal{E} и N на равномерной сетке. Число итераций значительно меньше, чем на сетке Шишкина. Отметим, что при этом разностная схема не обладает свойством равномерной сходимости по параметру \mathcal{E} , что приводит к погрешности порядка $O(1)$ внутри пограничного слоя.

В табл. 3 приведено количество итераций метода Зейделя по потоку в зависимости от \mathcal{E} и N на равномерной сетке. При малых \mathcal{E} требуется только одна итерация, что согласуется с [3].

В табл. 4 приведено количество итераций метода Зейделя по потоку в зависимости от ε и N на сетке Шишкина.

Таблица 1

Число итераций метода Зейделя на сетке Шишкина

ε	N				
	32	64	128	256	512
1	4(2)	15(11)	71(53)	294(262)	1175(1274)
	11	53	262	1274	6019
10^{-3}	26(8)	74(26)	212(76)	619(224)	1884(675)
	29	89	266	803	2518
10^{-6}	48(14)	137(44)	385(127)	1107(361)	3308(1059)
	51	152	439	1286	3920

Таблица 2

Число итераций метода Зейделя на равномерной сетке

ε	N				
	32	64	128	256	512
1	4(2)	15(11)	71(53)	294(262)	1175(1274)
	11	53	262	1274	6019
10^{-3}	5(2)	8(8)	10(23)	14(54)	42(119)
	8	23	54	119	260
10^{-6}	5(2)	8(8)	10(23)	14(53)	39(114)
	8	23	53	114	240

Таблица 3

Число итераций метода Зейделя по потоку на равномерной сетке

ε	N				
	32	64	128	256	512
1	3(2)	19(8)	73(48)	300(251)	1188(1251)
	8	48	251	1251	5972
10^{-3}	1(1)	1(1)	2(1)	3(3)	8(9)
	1	1	3	9	29
10^{-6}	1(1)	1(1)	1(1)	1(1)	1(1)
	1	1	1	1	1

Таблица 4

**Число итераций метода Зейделя по потоку
на сетке Шишкина**

ε	N				
	8	16	32	64	128
1	3(2)	19(8)	73(48)	300(251)	1188(1251)
	8	48	251	1251	5972
10^{-3}	18(1)	55(16)	173(54)	539(178)	1723(583)
	20	68	221	711	2333
10^{-6}	40(1)	118(34)	346(105)	1026(316)	3146(967)
	41	130	394	1194	3735

На равномерной сетке с уменьшением ε количество итераций методов Зейделя сокращается, так как при этом узлы не попадают в область больших градиентов, а вне пограничного слоя решение задачи (1) близко к решению вырожденной задачи, когда $\varepsilon = 0$, которое можно найти, исходя из явных соотношений. В случае сетки Шишкина при всех ε половина узлов находится в пограничном слое, поэтому с уменьшением ε число итераций несколько увеличивается.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Тиховская С.В.* Двухсеточный метод для эллиптического уравнения с пограничными слоями на сетке Шишкина // Учен. зап. Казан. ун-та. Серия Физ.-матем. науки. 2012. Т. 154. Кн. 4. С. 49–56.
- [2] *Шишкин Г.И.* Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург, 1992. 234 с.
- [3] *Han H., Il'in V.P., Kellogg R.B.* Flow directed iterations for convection dominated flow // Proceeding of the Fifth Int. Conf. on Boundary and Interior Layers. 1988. P. 7–17.

Светлана Валерьевна Тиховская,
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева
СО РАН, 644043, г. Омск, ул. Певцова, 13, (3812) 236739,
s.tihovskaya@yandex.ru

**Класс опорных неравенств
для задачи минимизации суммарного
взвешенного момента окончания работ
для одного прибора**

Н. Ю. Шерешик

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор В.В. Сервах

В данной статье рассматривается задача минимизации общего времени обслуживания различных требований одним прибором с прерываниями. В работе описана модель целочисленного линейного программирования для данной задачи. Исследуется многогранник целочисленных решений, представлен класс неравенств, правильных относительно этого многогранника.

Ключевые слова: теория расписаний, модель целочисленного линейного программирования, многогранник, полиэдр, правильные неравенства.

В настоящей работе рассматривается задача теории расписаний, имеющая следующую содержательную постановку. Требования множества V , $|V|=n$, имеющие положительные веса w_i , обслуживаются одним прибором. Для каждого требования $i \in V$ определен момент ожидания r_i , до которого включительно оно недоступно для обработки. Длительности обслуживания одинаковы и равны p . В обслуживании разрешены прерывания. Необходимо найти такое расписание работы прибора, для которого взвешенная сумма моментов окончания обслуживания требований минимальна. В обозначениях, принятых в теории расписаний, эта задача может быть записана как $1 | pmtn; p_i = p; r_i | \sum w_i C_i$.

На данный момент сложностной статус рассматриваемой задачи не известен.

Введём понятие общего директивного срока d , момента, к которому обслуживание всех требований будет завершено. В силу возможности декомпозиции рассматриваемой задачи [4], будем полагать $d = pn$. Обозначим множество $D = \{1, 2, \dots, d\}$ – множество всех моментов обслуживания требований.

Введем переменные:

$$x_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{если } i \in V \text{ обрабатывается в момент } k \in D, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

$$y_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{если в момент } k \in D \text{ обслуживание } i \in V \text{ ещё} \\ & \text{не завершено,} \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Булев вектор (x, y) , определенный таким образом, будем называть расписанием. Выпуклую оболочку всех расписаний обозначим \tilde{P} . В [3] описан полиэдр \tilde{M} , являющийся полиэдральной релаксацией \tilde{P} . Кроме того, в [3] было доказано, что точка (x, y) является расписанием тогда и только тогда, когда она целочисленная точка из \tilde{M} .

Единичный момент времени, в который некоторое требование находится в обработке, будем называть *юнит* [2]. Момент начала обслуживания требования i обозначим как S_i . Имеет место следующая теорема [2].

Теорема 1. *При любом оптимальном расписании, если $S_i < S_j$, то выполняется либо $C_i \leq S_j$, либо $C_i > C_j$ для всех $i, j \in V$.*

Другими словами, теорема 1 утверждает, что при любом оптимальном расписании юниты двух произвольных требований не могут “перемешаться” между собой. То есть существуют два возможных варианта относительного обслуживания двух требований:

- одно требование полностью обслуживается до момента начала или после окончания другого требования;

- одно требование “погружено” во второе требование так, что интервал обслуживания погруженного требования не содержит юниты второго требования.

Пусть имеется некоторое расписание работы прибора. И требование i обслуживается в моменты k_1, k_2, \dots, k_p ($k_m < k_{m+1}$). Заметим, что юниты k_1, k_2, \dots, k_p не обязательно идут непосредственно один за другим.

Докажем, что в оптимальном расписании для любого m разница между двумя любыми соседними юнитами k_{m+1} и k_m имеет вид $pl+1$, где $l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$.

Наименьшая возможная разница между двумя соседними юнитами, очевидно, равна 1. То есть $(k_{m+1} - k_m) = 1$, в этом случае $l = 0$. Наибольшая возможная разница равна $d - (p - 1)$, в этом случае $l = n - 1$. Рассмотрим временной интервал (k_m, k_{m+1}) . Предположим, что разница между юнитами k_{m+1} и k_m не может быть представлена в виде $pl+1$. Это означает, что в данном интервале находится количество юнитов не кратное p . Т.е. найдётся требование j , которое не будет полностью обработано в этом интервале, значит, найдётся юнит требования j , стоящий либо раньше k_m , либо позже k_{m+1} . Значит, юниты требований i и j “перемешаны”. Следовательно, это расписание не является оптимальным.

Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 2. *В оптимальном расписании различные юниты одного требования принадлежат разным классам вычетов по модулю p .*

На основе этой теоремы можно утверждать, что следующий класс уравнений является правильным и опорным относительно многогранника \tilde{P} :

$$\sum_{k \in T^s} x_{ik} \leq 1, \quad i \in V,$$

где $T^s = \{s, p+s, \dots, pl - (p-s)\}$, $l \in \{1, 2, \dots, n\}$, $s \in \{1, 2, \dots, p\}$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Brucker Peter, Knust Sigrid* Complexity Results for Scheduling Problems. URL: [www//mathematik.uni-snabrueck.de/research/OR/class](http://www.mathematik.uni-snabrueck.de/research/OR/class).

[2] *Лазарев А.А., Кварацхелия А.Г.* Свойства оптимальных расписаний задачи теории расписаний минимизации суммарного взвешенного момента окончания для одного прибора // Автомат. и телемех. 2010. № 10. С. 80–89.

[3] *Симанчѳв Р.Ю., Толстуха Б.А.* Некоторые полиэдральные свойства одной задачи теории расписаний // Сборник трудов международной конференции «Дискретная оптимизация и исследование операций» (Новосибирск, 24–28 июня, 2013). Новосибирск: Ин-т математики СО РАН, 2013. 153 с.

[4] *Симанчѳв Р.Ю., Шерешик Н.Ю.* Схема дихотомии для поиска минимального директивного срока в задаче обслуживания различных требований одним прибором // Вестник ОмГУ. 2013. № 2. С. 48–50.

Николай Юрьевич Шерешик,
Омский филиал Института математики им С.Л.Соболева
СО РАН, 3 курс аспирантуры,
644043, г. Омск 43, пр. Певцова 13,
m-m_pikm@mail.ru

**Секция
«ПРИКЛАДНАЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»**

Метод возмущения начального состояния при моделировании спиновых стекол в магнитном поле

В. С. Антипов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент А. Н. Вакилов

Представлены методика и результаты численного моделирования 3-х мерного Изинговского спинового стекла методом возмущённых начальных состояний в динамике Метрополиса в магнитном поле. Выявлена зависимость равновесного значения дистанции Хэмминга от её начального значения и температуры в низкотемпературной и высокотемпературной фазах. Получена оценка значения температуры фазового перехода ($T_d=1.74$ [J/k_B]) и произведено её сравнение с температурой спин-стекольного перехода, а также поведение спинового стекла в магнитных полях. Обнаружено сохранение качественного соответствия картины поведения спинового стекла в магнитном поле, модели без поля, вплоть до значений поля $H=1$ (μ_B), что согласуется с результатами репличной теории Паризи.

Существует большое разнообразие магнитоупорядоченных веществ, среди которых есть особый класс – спиновое стекло. К таковым относятся разбавленные магнетики (сплавы AuFe, CuMn, CuCo), полумагнитные полупроводники ($Cd_{1-x}Mn_xTe$) и даже диэлектрики ($Eu_xSr_{1-x}S$), имеющие магнитные включения невысокой концентрации. В данном классе веществ, при температурах, ниже определённой величины – температуры спин-стекольного перехода (T_{sg}) – ориентация элементарных магнитных моментов атомов не имеет какой-либо пространственной периодичности [1].

В ходе эксперимента рассматривались четыре линейных размера: $L = 6, 8, 10, 14$, на 5000 шагах Монте-Карло с пропуском начальных 3000 шагов. Усреднение производилось по 20 независимым конфигурациям [7]. Температура измеряется в единицах обменного интеграла, делённого на константу Больцмана (J/k_B), а магнитное поле в единицах магнитона Бора (μ_B).

По достижению равновесного значения наблюдаются две фазы, разделённые фазовым переходом (рис. 1–3 для различных L). Для низкотемпературной фазы характерна зависимость равновесного значения дистанции Хэминга от его начального значения и температуры, что является наглядным проявлением эффекта старения и подтверждением того, что низкотемпературная фаза есть спин-стекольная фаза. В высокотемпературной фазе зависимость от начального значения пропадает и стремится к равновесному значению $D = 1/2$, что говорит нам о том, что система вне зависимости от своего начального состояния стремится к одному и тому же равновесному значению.

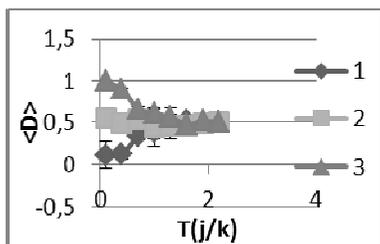


Рис. 1. Поведение в поле $H = 0$:
1) $D_0 = 0$; 2) $D_0 = 0.5$; 3) $D_0 = 1$

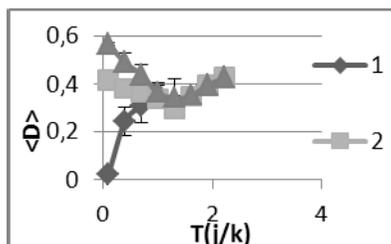


Рис. 2. Поведение в поле $H = 0.5$:
1) $D_0 = 0$; 2) $D_0 = 0.5$; 3) $D_0 = 1$

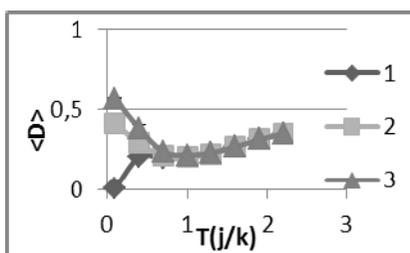


Рис. 3. Поведение в поле $H = 1$:

Поведение динамики Метрополиса в данном случае совпадает с поведением Глауберовской динамики [2], и отличается

от динамики термостата (heatbathdynamics) [3]–[4], [6], в которой наблюдаются 3 фазы и 2 фазовых перехода.

Значение температуры, очерченные характерным поведением дистанции Хэмминга доподлинно не известны. Её приближительные оценки для Глауберовской динамики и динамики термостата равны находятся в интервале 1.5–1.8 (J/k_B) [2]–[4], [6]. Подобные оценки вступают в противоречие с достаточно хорошо известным на сегодняшний день значением температуры спин-стекольного перехода $T_{sg} = 1.175 \pm 0.025$ (J/k_B) [5]. Подобное противоречие, совместно с отсутствием оценок данной температуры для динамики Метрополиса обусловили потребность в нахождении таковой. Схема нахождения температуры фазового перехода основана на основном свойстве фаз – различном поведении равновесного значения дистанции Хэмминга в зависимости от его начального значения. Поэтому температура, при которой графики равновесного значения дистанции Хэмминга, соответствующие её различным начальным значениям совпадут (для этой цели применялись $D_0 = 1$ и $D_0 = 1/N$) и есть температура фазового перехода.

При реальном проведении эксперимента, в силу флуктуаций, может возникнуть случай, при котором уже после смыкания графиков с различными начальными значениями дистанции Хэмминга, они вновь расходятся при более высокой температуре и таких разрывов может быть несколько. При этом поступают так, находят температуру T_1 , такую, что для всех $T < T_1$, значения графиков с $D_0 = 1$ и $D_0 = 1/N$ не совпадают (т. е. наблюдается низкотемпературная фаза). Затем находят такое значение T_3 , для которого для всех $T > T_3$ равновесное значение дистанции Хэмминга совпадут друг с другом (как видно, промежуточная температура T_2 этому условию не удовлетворяет). Температура фазового перехода T_d будет лежать в интервале $[T_1, T_3]$. С увеличением статистики графики равновесного значения дистанции Хэмминга будут становиться более гладкими, а разрывы исчезать. Поэтому с ростом статистики $T_1 \rightarrow T_2$.

Согласно одним моделям при включении поля спин-стекольное состояние исчезает (дроплетная модель Fisher, Huse, Bray, Moore, McMillan), другие же предсказывают, что спин-

стекольная фаза сохраниться вплоть до некоторого критического значения поля (H_{AT}) и исчезнет только при превышении такого (теория репличной симметрии Parisi) [9].

Для выявления влияния магнитных полей на поведение дистанции Хэмминга рассматривалась модель с фиксированных линейным размером ($L=10$) и тремя значениями магнитных полей: $H = 0$, $H = 0.5$, $H = 1$ (μ_B) (рис. 1–3).

Значение поля $H = 1$ таково, что, исходя из вида гамильтониана, влияние поля в состоянии полностью скомпенсировать любые возможные значения «правой» – термодинамической – части гамильтониана. $H = 0.5$ выбрано как занимающее промежуточное, между этими двумя крайностями.

Для спинового стекла в поле наблюдается наличие двух фаз, разделённых фазовым переходом. Значение T_d с ростом магнитного поля смещается в область более низких температур (следует иметь в виду, что шаг по температуре весьма груб – 0.25 (J/k_B)). Качественная картина поведения равновесного значения дистанции Хэмминга от её начального значения сохраняется, и, что примечательно, даже сильное поле не способно её размыть. Как следствие, следует отдать предпочтение сторонникам теории Parisi, так как спин-стекольная фаза в поле не только не исчезает, но и сохраняется при достаточно сильных полях ($H = 1$). Исходя из тенденции поведения модели в поле следует ожидать что спин-стекольная фаза всё же пропадёт, но критическое значение поля будет заметно больше единицы ($H_{AT} \gg 1$). Влияние поля максимально в районе T_d . В области, непосредственно прилегающей к данной температуре, равновесное значение дистанции Хэмминга сильно снижается с ростом поля. Такое снижение равновесного значения дистанции Хэмминга наблюдается и во всех остальных областях, но с удалением от T_d , влияние поля сравнительно слабее. Влияние поля в низкотемпературной фазе несколько ниже, чем в высокотемпературной, но не намного. Также влияние поля проявляется в заметном снижении флуктуаций.

Наибольшее влияние поля в районе T_d может говорить нам о том, что поле оказывает своё влияние на времена релаксации, либо же на степени свободы спинов.

Любопытным является также факт того, что максимальное влияние поля на систему проявляется, независимо от значения силы поля и начального значения дистанции Хэминга в области температуры рядом с температурой $T_d(H=0)$. С ростом силы поля равновесное значение дистанции Хэминга в районе температуры $T_d(H=0)$ очевидно стремится к 0.

Подводя итоги следует сказать следующее, что обнаружено сохранение качественного соответствия картины поведения спинового стекла в магнитном поле, модели без поля, вплоть до значений поля $H = 1$ (μ_B), что согласуется с результатами репличной теории Паризи.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Коренблит И.Я., Шендер Е.Ф.* Спиновые стекла и неэргодичность // *Успехи физических наук.* 1989. Т. 157. Вып. 2. С. 267–310.

[2] *Wang F., Hatano N. and Suzuki M.* Study on dynamical critical exponents of the Ising model using the damage spreading method // *J. Phys. A Math. Gen.* 1995. 28. P. 4543–4552.

[3] *Derrida B., Weisbuch G.* Dynamical Phase Transitions in 3-Dimensional Spin Glasses // *Europhys. Lett.*, 1987. 4 (6). P. 657–662.

[4] *Heber R., Da Cruz, Uriel M.S. Costa, Evaldo, Curado M.F.* Spreading of damage in a 3D Ising spin glass // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1989. 22. P. 651–655.

[5] *Campbell I.A., De Arcangelis L.* The Ising Spin Glass and Phase Space Geometry // *Europhys. Lett.*, 1990. 13 (7). P. 587–592.

[6] *Wang F., Kawashima N., Suzuki M.* The dynamical critical behaviour of the $\pm J$ spin glass at the damage-spreading threshold // *Europhys. Lett.*, 1996. 33 (2). P. 165–169.

[7] *Курицын П.Е.* Исследование спиновых стёкол методом возмущённых начальных состояний // Молодёжь третьего тысячелетия: XXXIV региональная научно-практическая студенческая конференция: сборник статей секции «Физико-математические науки». Омск, 2010. С. 106–109.

[8] *Rabio Puzzo M.L., Roma F. Bustingorry S., Gleiser P.M.* Griffiths-like phase in the three-dimensional J Edwards-Anderson spin-glasses model // cond-mat.stat.mech. arXiv:0911.4837v1. 2010.

[9] *Yang P.* Phase Transitions in Spin Glasses // <http://physics.ucsc.edu/~peter/talks/sinica.pdf>, p. 12, december 14, 2009.

Валерий Сергеевич Антипов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет.
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812) 64-77-87, lerych-
leruych@mail.ru

Расчет динамического критического индекса z методом коротковременной динамики

Д. Н. Бояринов

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. П. В. Прудников

В данной работе методом коротко-временной динамики моделируется поведение системы при старте из начального высокотемпературного и низкотемпературного состояний. На основе полученных данных строится временная зависимость для кумулянта F_2 и вычисляется значение динамического критического индекса z .

Поведение ряда физических величин вблизи критической точки характеризуется набором, так называемых, критических индексов. Критический индекс z характеризующий время релаксации системы

$$\tau = |T_C - T|^{-z\nu}.$$

Проблемы с исследованием систем при температурах близких к критической связаны с ростом времени релаксации системы, а следовательно и времени эксперимента. Метод коротко-временной динамики позволяет уменьшить влияние эффектов критического замедления поскольку позволяет получить информацию о поведении системы на относительно малых макроскопически промежутках времени.

В рамках метода в работе [1] аналитически была получена скейлинговая форма k -го момента намагниченности после макроскопически малого времени t_{mic} его форма представлена ниже

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} m^{(k)}(tb^{-z}, b^{1/\nu}\tau, Lb^{-1}, b^{x_0}m_0). \quad (1)$$

где $\tau = (T - T_C)/T_C$ – приведенная температура; t – время в шагах Монте-Карло; L – линейный размер системы; β, z, ν – критические индексы; b – произвольный масштабный фактор; m_0 – начальная намагниченность; x_0 – новый независимый критический индекс.

Из уравнения (1) была получена динамическая скейлинговая зависимость для намагниченности:

$$m(t, m_0) = t^{-\beta/\nu z} m(1, t^{x_0/z} m_0)$$

Таким образом, при моделировании из низкотемпературного состояния ($m_0 = 1$) реализуется следующий степенной закон для намагниченности,

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}.$$

С другой стороны при старте из высокотемпературного состояния ($m_0 = 0$) степенной закон имеет вид

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z},$$

где $\theta = (x_0 - \beta/\nu)/z$.

Значение динамического критического индекса z выводится на основе анализа графиков временной зависимости кумулянта F_2 имеющего вид

$$F_2(t, L) = \frac{M(t, L)_{m_0=0}^{(2)}}{(M(t, L)_{m_0=1}^2)^{1/2}} \sim \frac{t^{(d-2\beta/\nu)/z}}{t^{-2\beta/\nu z}} = t^{d/z}.$$

Вычисление намагниченности для системы эволюционирующей из начального неупорядоченного состояния производится по следующей формуле

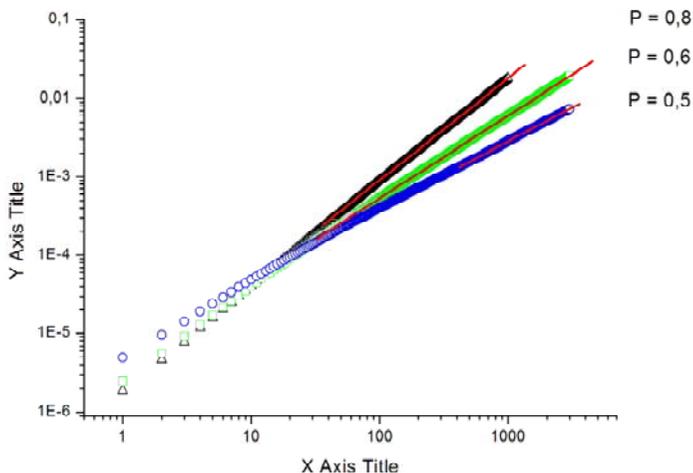
$$m(t) = \left[\left\langle \frac{1}{N_S} \sum_i^{N_S} p_i S_i(t) \right\rangle \right],$$

а значение второго момента намагниченности для системы эволюционирующей из начального полностью упорядоченного состояния по формуле

$$m^{(2)}(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{N_S} \sum_i^i p_i S_i(t) \right)^2 \right\rangle \right],$$

здесь $\langle \dots \rangle$ – статистическое усреднение, $[\dots]$ – усреднение по различным примесным конфигурациям, $N_S = pL^3$

На графике представлены полученные временные зависимости кумулянта F_2 . Рассчитанные значения индекса z и их сравнение с результатами других работ приведены в таблице.



Временная зависимость кумулянта F_2 для системы с концентрацией спинов $p = 0,5$, $p = 0,6$ и $p = 0,8$ в двойном логарифмическом масштабе

Значения критического индекса z

	z
$p = 0,5$	3,43694
$p = 0,6$	2,85165
$p = 0,8$	2,30632
Prudnikov and Vakilov MC $p = 0,8$ (Паб. [2])	2.20(8)
Prudnikov and Vakilov MC $p = 0,6$ (Паб. [2])	2.58(9)
Hasenbusch, et al., MC $p = 0,8$ (Паб. [3])	2,35(2)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Janssen H.K., Schaub B., Schimtmann B. / Z. Phys. 1989 B 73, 539.
 [2] Prudnikov V.V., Vakilov A. N. / JETP Lett. 1992 55, 741.
 [3] Rosov N., Kleinhammes A., Lidbjork P., Hohenemser C., Eibschutz M. / Phys. Rev. 1988 B 37, 3265.

Денис Николаевич Бояринов,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 2
 курс магистратуры, физический факультет, 644077, г. Омск 77,
 пр. Мира 55-А, (3812)212979,
 bojarinov.denis@yandex.ru

Нули статистической суммы неупорядоченной трехмерной модели Изинга

А. А. Валов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. А. Н. Вакилов

Определение нулей статистической суммы позволяет говорить о наличии в системе фазового перехода. Введение комплексных температур в системе даёт, в результате, очень точные значения критических индексов и универсальных отношений. Неупорядоченная модель Изинга, до сих пор, остается не до конца изученной и актуальна для изучения и компьютерного моделирования.

В данной работе проводились исследования трехмерной неупорядоченной модели Изинга [2; 3]. При использовании алгоритма Вольфа были получены: плотности состояний энергий для различных систем, на основе которых рассчитывались статистическая сумма систем, критические индексы и универсальные соотношения [1].

Гамильтониан неупорядоченной модели Изинга без внешнего магнитного поля записывается в виде:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j \quad (1)$$

где N узлов, и предположим, что с каждым узлом решетки i связано число S_i , где $S_i = +1$, если спин ориентирован «вверх», и $S_i = -1$, если он ориентирован «вниз», p_i – пустой узел (дефект структуры).

Статистическая сумма находилась по формуле:

$$Z(\beta) = \sum_E P[E, \beta] e^{-\beta E} \quad (2)$$

$$Z(\beta) = Z(\eta - i\xi) = 0 \quad (3)$$

где β – плотность состояний энергии, β – обратная температура, η, ξ – комплексные температуры. При перенормировке статистической суммы получаем:

$$R = \langle \cos(\xi E) \rangle_{\eta} - i \langle \sin(\xi E) \rangle_{\eta} \quad (4)$$

В случае, если статистическая сумма равна нулю, то в системе происходит явление фазового перехода. Введение комплексных температур позволяет найти критические индексы α , ν и соотношение критических амплитуд:

$$\operatorname{Re}(\beta) - \beta_c \sim L^{-1/\nu} \quad (5)$$

$$\operatorname{Im}(\beta) \sim L^{-1/\nu} \quad (6)$$

$$\nu d = 2 - \alpha \quad (7)$$

где τ – приведенная температура.

Компьютерное моделирование проводилось на системах с линейными размерами решеток $L = 8; 10; 12; 14; 16$ по 20 прогонок для каждого L . Температурным диапазоном послужила критическая точка $\beta_c = 0,234595$ [2]. Использовалось 20000000 шагов МК. В результате моделирования мы получили плотность состояния энергии в критической точке, пример ниже (рис. 1).

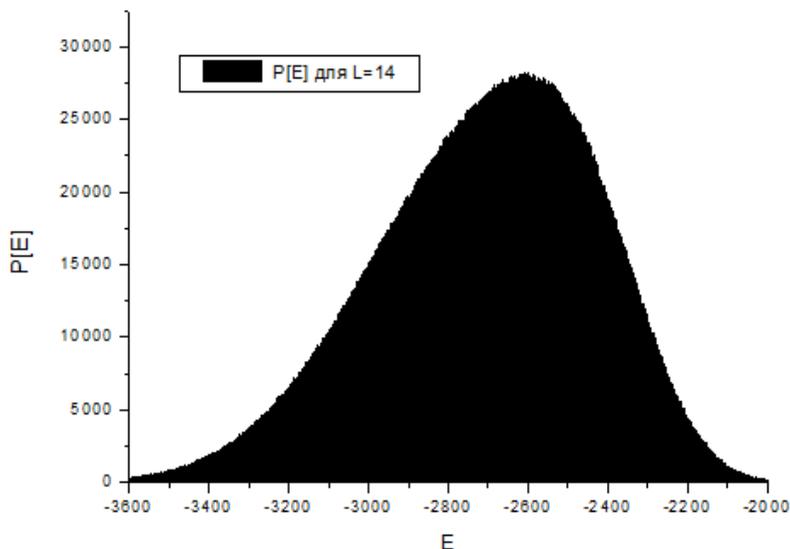


Рис. 1. Плотность состояния энергии в критической точке для $L=14$

Введя η , ξ – комплексные температуры и применив метод Хука-Дживса для минимизации, мы нашли нули статистиче-

ской суммы. На основе которых были построены графики (рис. 2 и 3), подчиняющиеся законам, соответствующим формулам (5) и (6):

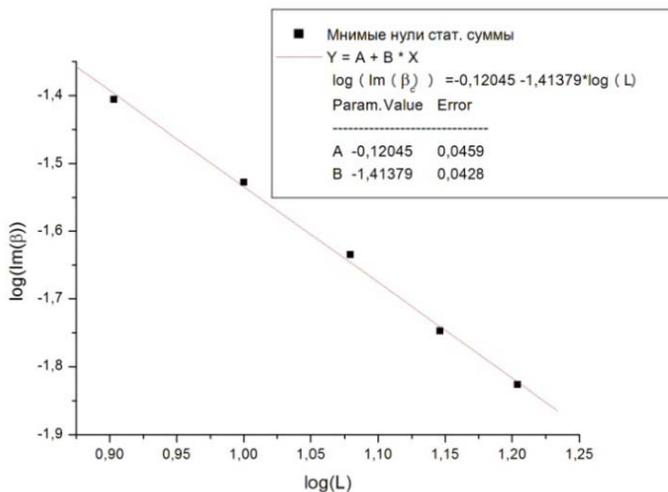


Рис. 2. Линейная аппроксимация для мнимой части стат. суммы

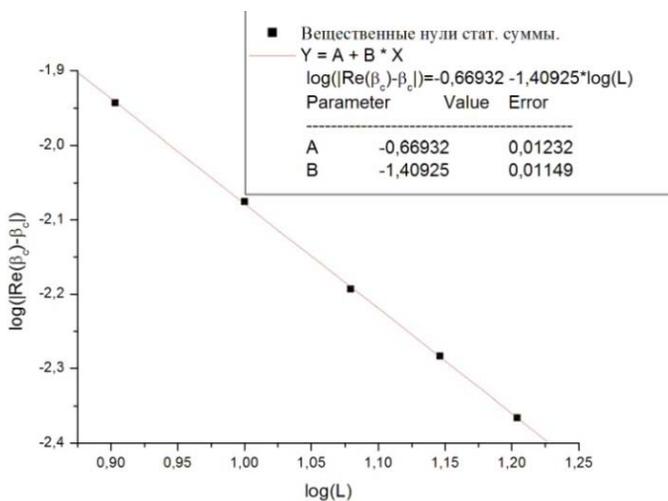


Рис. 3. Линейная аппроксимация для вещественной части стат. суммы

Затем, путем линейной аппроксимации были найдены критические индексы ν и α :

$$\begin{aligned} \nu_{ReZ} &= 0,701 & \nu_{ImZ} &= 0,707 \\ \alpha_{ReZ} &= -0,127 & \alpha_{ImZ} &= -0,121 \end{aligned}$$

Результаты предыдущих работ [2–4]:

Компьютерное моделирование ($p = 0,95$)	Экспериментальные исследования ($p = 0,93$)
1) Прудников и др. 2010 – $\nu = 0,668(14)$;	1) Slanic et.al. 1998 – $\nu = 0,71(1)$
2) Прудников и др. 2007 – $\nu = 0,693(5)$;	2) Slanic et.al. 1999 – $\nu = 0,70(2)$
3) Муртазаев и др. 2004 – $0,646(2)$	

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Gordillo-Guerrero A., Kenno R., Ruiz-Lorenzo J.J.* Universal Amplitude Ratios in the Ising Model in Three Dimensions. 2011. [cond-mat.stat-mech. 1107.1186v2].

[2] *Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. Омск: ОмГУ, 2007. С. 288.

[3] *Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т.* Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга. // УФН. 2003 Т. 173. № 2. С. 175–200.

[4] *Шпот Н.А.* Уравнение состояния и универсальные комбинации термодинамических критических амплитуд примесной модели Изинга // ЖЭТФ. 1990. Т. 98. С. 1762–1777.

Андрей Андреевич Валов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, 8(962)-054-50-45,
andrew-omsk-@mail.ru

Теоретико-полевое описание фазовых переходов в сложных спиновых системах со случайной анизотропией

В. В. Дубс

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. В. Прудников

Описывается процедура нахождения системы ренормгрупповых уравнений в рамках двухпетлевого приближения, соответствующей аморфным магнетикам с эффектами случайной анизотропии и дефектами структуры.

Ключевые слова: метод ренормгруппы, фазовый переход, аморфные магнетики, анизотропия, дефекты структуры.

С точки зрения влияния дефектов структуры на стабилизацию фазового перехода второго рода большой интерес представляют анизотропные магнитные системы [1], содержащие немагнитные примеси [2]. Ренормгрупповое описание [3-5] фазового перехода в подобных системах в рамках однопетлевого приближения и метода ϵ -разложения приведено в работе [6]. Авторами было высказано предположение о существовании двух областей, соответствующих двум сценариям. В первом случае гамильтониан задачи под действием ренормгрупповых потоков переходит в неустойчивое состояние, соответствующее фазовому переходу первого рода, а во втором – ренормгрупповые потоки переводят гамильтониан в устойчивую неподвижную точку, соответствующую фазовому переходу второго рода. Однако, авторы работы [6] не смогли доказать существование таких областей. Для подтверждения этого предположения необходимо провести анализ ренормгрупповых уравнений системы в рамках двухпетлевого приближения при фиксированной размерности $d = 3$.

Рассмотрим фазовый переход в аморфных магнетиках с эффектами случайной анизотропии, содержащих дефекты

структуры. Гамильтониан такой системы характеризуется четырехкомпонентным параметром порядка и выглядит следующим образом:

$$H = \int d^d R \left[\frac{1}{2} [\mu_0^2 |\bar{\phi}|^2 + |\bar{\nabla} \bar{\phi}|^2] + u_0 |\bar{\phi}|^4 + v_0 \sum_{\alpha=1}^n |\bar{\phi}_\alpha|^4 + y_0 \sum_{i=1}^m \sum_{\alpha=1}^n (\phi_i^\alpha)^4 + \right. \\ \left. + w_0 \sum_{I=1}^m \sum_{\alpha, \beta=1}^n (\phi_i^\alpha)^2 (\phi_i^\beta)^2 + z_0 \sum_{i,j}^m \sum_{\alpha, \beta=1}^n \phi_i^\alpha \phi_j^\alpha \phi_i^\beta \phi_j^\beta \right). \quad (1)$$

Учет вкладов от двухпетлевых диаграмм и поправок от петлевых интегралов в систему уравнений, полученных в рамках однопетлевого приближения [6], приводят систему ренормгрупповых уравнений к следующему виду:

$$\beta_u = -\varepsilon \left\{ u - \frac{1}{6} [2(m+2)uv + 2vw + 4uw + 6uy + (2m+2)uz + \right. \\ \left. + 2vz + 2wz + 3z^2 + 8u^2] + \frac{1}{9} [56u^2w + 28w^2u + 24(m+2)u^2v + \right. \\ \left. + 2(3m+6)v^2u + 12v^2w + 60u^2y + 18y^2u + 40uvw + 18uvy + \right. \\ \left. + 40uwy + 28z^3 + 28uwz + 20uyz + 20vwz + 6vyz + 20wyz + \right. \\ \left. + 2(3m+6)uvz + 4w^2v + 44u^3 \right] i_1 + \frac{2}{9} [2u^3 + 2w^2u + 6uvw + 4u^2w + \right. \\ \left. + 6uvy + 6uwy + 3y^2u + 6zuy + 6uzw + 2(m+2)z^2u + (m+2)uzv + \right. \\ \left. + 8(m+2)z^2u + 2(m+2)v^2u \right] i_2 \left. \right\} \\ \beta_v = -\varepsilon \left\{ v - \frac{1}{6} [(m+8)v^2 + 12uv + 4vw + 6vy + 6yz + (2m+10)vz] + \right. \\ \left. + \frac{1}{9} [2(5m+22)v^3 + 8(3m+15)v^2u + 84u^2v + 24w^2v + 72v^2w + \right. \\ \left. + 72v^2y + 18y^2v + 72uvw + (5m+22)v^2z + (5m+22)z^2v + 36vwy + \right. \\ \left. + 28z^2y36y^2z + 4(m+26)vuz + 48vwz + 72vyz + 48yzu + 24yzw + \right. \\ \left. + 72vuy \right] i + \frac{2}{9} [(m+2)v^3 + 2(m+2)v^2u + 2u^2v + 2w^2v + 6v^2w + \right. \\ \left. + 4vuw + 6vuy + 6v^2y + 6vwy + 3y^2v + 6vzy + 6vzw + 2(m+2)vzu + \right. \\ \left. + (m+2)v^2z + 8(m+2)z^2v \right] i_2 \left. \right\}$$

$$\begin{aligned} \beta_w = & -\varepsilon\{w - \frac{1}{6}[8w^2 + 12uw + 4uw + 4vw + 6yw + 10wz + 6yz] + \\ & + \frac{1}{9}[84w^3 + 28u^2w + 56w^2u + 2(m+6)v^2w + 60w^2v + 18y^2w + \\ & + 2(6m+36)wuv + 60wuy + 18wvy + (m+6)z^2w + 44w^2z + 18y^2z + \\ & + 20z^2y + 28wuz + (m+6)wvz + 20wyz + 32yzu + 6yzv]i + \\ & + \frac{2}{9}[(m+2)v^2w + 2(m+2)vuw + 2u^2w + 2w^3 + 6w^2v + 6vyw + \\ & + 4w^2u + 6wuy + 6w^2y + 3y^2w + 6wzy + 6w^2z + 2(m+2)wzu + \\ & + (m+2)vzw + 8(m+2)z^2v]i_2\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_y = & -\varepsilon\{y - \frac{1}{6}[9y^2 + 8vw + 12uy + 12vy + 12wy + 6yz] + \frac{1}{9}[108y^3 + \\ & + (4m+72)v^2w + 48w^2v + 72u^2y + (6m+84)v^2y + 72w^2y + 108y^2u + \\ & + 108y^2w + 72uvw + 2(6m+84)uvy + 72vwy + 72uwy + 24z^2y + \\ & + 72y^2z + 24yuz + 36yzv + 48yzw + 24vwz]i + \frac{2}{9}[2u^2y + 2(m+2)vuy + \\ & + (m+2)v^2y + 6vwy + 2w^2y + 4uwy + 6y^2u + 6y^2v + 6y^2w + 3y^3 + \\ & + 6y^2z + 6zwy + 2(m+2)zuy + (m+2)zvy + 8(m+2)z^2y]i_2\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_z = & -\varepsilon\{z - \frac{1}{6}[(m+4)z^2 + 12uz + 4zw + 4vz] + \frac{1}{9}[(5m+22)z^3 + \\ & + 28u^2z + 2(3m+15)z^2u + 2(3m+15)v^2z + 40z^2v + 28w^2z + \\ & + 56w^2z + 20z^2y + 28zuw + 20zvw + 108zuy + 4(3m+15)zuv + \\ & + 20zwy + 6zyv]i + \frac{2}{9}[2u^2z + 2(m+2)uvz + (m+2)v^2z + 6vwz + \\ & + 2w^2z + 4uwz + 6uyz + 6vyz + 6wyz + 3y^2z + 6z^2y + z^2w + \\ & + 2(m+2)z^2u + (m+2)z^2v + 8(m+2)z^3]i_2\} \end{aligned}$$

где $i_1(d=3) = 1/5$ и $i_2(d=3) = -2/27$ [1].

Анализ системы ренормгрупповых уравнений при фиксированной размерности $d = 3$ с помощью многопараметрического метода Паде-Бореля позволил выявить устойчивую неподвижную точку, связанную с появлением дополнительной симметрии относительно случая кубического распределения эффектов анизотропии:

m	u*	v*	w*	y*	z*	η
2	1.5179	0	0	0	-1.3014	0.028
3	1.3995	0	0	0	-0.9482	0.028

Полученные результаты говорят о том, что наличие в системе дефектов структуры приводит к появлению дополнительной устойчивой неподвижной точки, что указывает на то, что дефекты структуры в магнетиках с эффектами случайной анизотропии оказывают дополнительное стабилизирующее воздействие на фазовый переход второго рода.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Dudka M., Folk R., Holovatch Yu.* On the critical behaviour of random anisotropy magnets: cubic anisotropy // *Cond. Matt. Phys.* 2001. V. 4. № 3(27). P. 459–472.

[2] *Прудников В.В., Дубс В.В.* Ренормгрупповое описание влияния дефектов структуры на фазовые переходы первого рода // *Вестн. Ом. ун-та.* 2011. № 1. С. 1.

[3] *Вильсон К., Когут Дж.* Ренормализационная группа и ϵ -разложение. М.: Мир, 1975. 256 с.

[4] *Gell-Mann M., Low F.E.* // *Phys. Rev.* 1954. V. 95. № 5. P. 1300–1312.

[5] *Amit D.J.* Field theory the renormalization group and critical phenomena. N.-Y.: Acad. press. : McGraw-Hill, 1978. 333 p.

[6] *Mukamel D., Grinstein G.* Critical behavior of random systems // *Phys. Rev. B* 1982. V. 25. № 1. P. 381–388.

Вадим Викторович Дубс,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, +79620406056,
sorano@mail.ru

**Эффекты старения
в неравновесном критическом поведении
трехмерной структурно неупорядоченной
модели Изинга при эволюции
из начального низкотемпературного состояния**

А. В. Иванов, П. Н. Маляренко

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. В. Прудников

Представлена методика и результаты численного описания методом Монте-Карло особенностей неравновесного критического поведения в трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга со спиновой концентрацией $p = 0.8$. На основе анализа двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости выявлены эффекты старения, характеризующиеся замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания и вычислено предельное флуктуационно-диссипативное отношение $X^\infty(p = 0.8) = 0.73(2)$.

В последние годы исследование систем, характеризующихся медленной динамикой, вызывает значительный интерес. Это обусловлено наблюдаемыми в них свойствами старения при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния и нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы [1]. Примерами систем с медленной динамикой и эффектами старения являются такие сложные системы как спиновые стекла. Данные особенности возникают в системах при фазовых переходах второго рода [2], критическая динамика которых характеризуется аномально большими временами релаксации.

Эффекты старения определяются проявлением двухвременных зависимостей для корреляционной функции и функции отклика, зависящих от t_w – времени ожидания и $t - t_w$ – времени наблюдения. t_w – это время, прошедшее с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. В течение

$t - t_w \ll \tau_{rel}$, где τ_{rel} – время релаксации, в поведении системы проявляется влияние начальных состояний и эффектов старения, характеризующихся замедлением релаксации с увеличением «возраста» образца t_w .

В данной работе проведены исследования эффектов старения в неравновесном критическом поведении трёхмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. Гамильтониан модели задаётся выражением:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} p_i p_j S_i S_j, \quad (1)$$

где p_i – случайное число, принимающее два значения $p_i = 1$, если в узле i находится спин $S_i = \pm 1$, или $p_i = 0$, когда он отсутствует. Функция отклика $R(t, t_w)$ спиновой системы на внешнее магнитное поле, приложенное к системе в момент времени t_w , определяется соотношением ($t > t_w$)

$$R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \frac{\delta \langle S(x, t) \rangle}{\delta h(x, t)} \Big|_{h=0}. \quad (2)$$

Более удобной величиной для получения методами компьютерного моделирования является интегральная характеристика – динамическая восприимчивость

$$\chi(t, t_w) = \int_{t_w}^t dt' R(t, t'). \quad (3)$$

Динамика системы моделировалась с применением алгоритма тепловой бани. Осуществлялось вычисление автокорреляционной функции

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle - \langle M(t) \rangle \langle M(t_w) \rangle \quad (4)$$

и динамической восприимчивости [1]:

$$\chi(t, t_w) = \frac{1}{TE^3} \sum_{i=1}^{L^3} \langle S_i(t) \Delta t_i(t_w) \rangle, \quad \Delta S_i(t_w) = \sum_{l=0}^{t_w} \delta_{l(s), i} \left[S_i(t) - th \left(h_i^w(t) / T \right) \right] \quad (5)$$

где функция $\Delta S_i(t_w)$ вычисляется в процессе моделирования с момента времени $t = 0$ до $t = t_w$. В выражении (6) $I(s)$ – индекс спина, выбранного в момент времени t , $h_i^w(t) = \sum_{j:|i-j|=1} S_j(t)$ – сумма ближайших соседних спинов.

Рассматривалась кубическая решётка спинов с линейным размером $L = 64$ с концентрацией $p = 0,8$ при критической температуре $T_c = 3,49948$. Формировалось низкотемпературное ($T = 0$) начальное состояние системы, которое для исследуемого при $T = T_c$ режима являлось неравновесным. Поведение $C(t, t_w)$ и $\chi(t, t_w)$ исследовалось для $t_w = 10, 20, 30$ и 40 MCS/s. На рис. 1 (а), 2 (а) приведены графики их временной зависимости. Видно, что с увеличением времени ожидания t_w процесс степенной релаксации системы замедляется. Ренормгрупповой анализ поведения автокорреляционной функции и функции отклика предсказывает их скейлинговую двухвременную зависимость в виде [1]:

$$C(t, t_w) \sim t_w^{(d-2+\eta)/z} F_C(t/t_w), \quad T\chi(t, t_w) \sim t_w^{(d-2+\eta)/z} F_R(t/t_w) \quad (6)$$

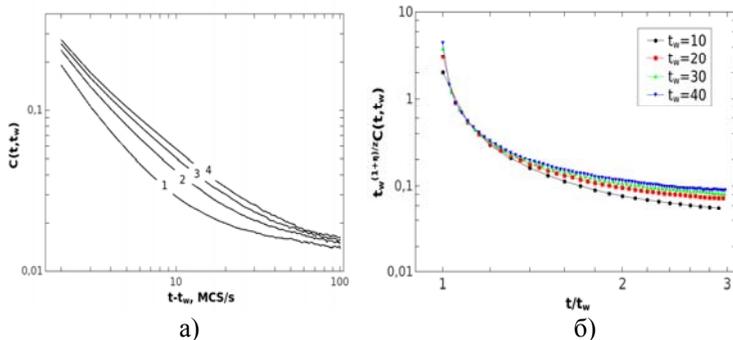


Рис. 1

- а) Временная зависимость автокорреляционной функции для $t_w = 10$ (1), 20 (2), 30 (3), 40 (4);
- б) Параметрическая зависимость $t_w^{-(1+\eta)/z} C(t, t_w)$ от t/t_w .

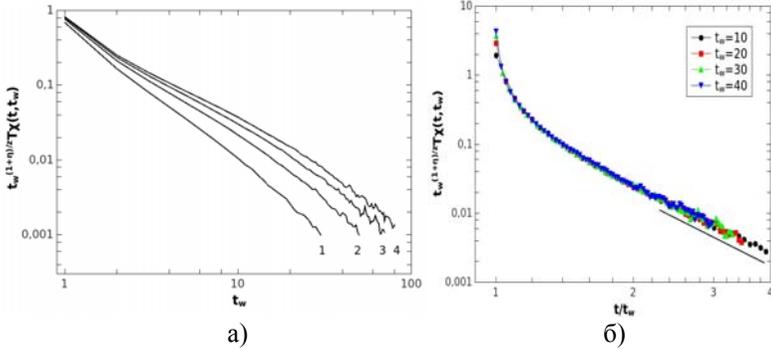


Рис. 2

- а) Временная зависимость динамической восприимчивости для $t_w = 10$ (1), 20 (2), 30 (3), 40 (4);
 б) Параметрическая зависимость $t_w^{-(1+\eta)/z} T\chi(t, t_w)$ от t/t_w .

Для проверки этих соотношений были построены зависимости ($d = 3$) $t_w^{-(1+\eta)/z} C(t, t_w)$ и $t_w^{-(1+\eta)/z} T\chi(t, t_w)$ от t/t_w , показанные на рис. 1 (б), 2(б) и демонстрирующие “коллапс” полученных данных для различных t_w на одной универсальной кривой. Функции F_C и F_R на временах $t \gg t_w$ характеризуются зависимостями $F_C \sim (t/t_w)^{-\phi_C}$, $F_R \sim (t/t_w)^{-\phi_R}$. Были вычислены значения показателей: $\phi_C = 2,76 \pm 0,05$, $\phi_R = 2,80 \pm 0,07$, которые в пределах погрешности совпадают между собой и с предсказываемым теорией значением $\phi = 1 + \beta(\delta + 2)/z\nu \approx 2,72$ при $z = 2,208(32)$.

В данной работе выявлены эффекты старения для структурно неупорядоченной модели Изинга. Подтверждены скейлинговые соотношения, предсказываемые в рамках ренорм-группового описания. Вычислено предельное флуктуационно-диссипативное отношение $X^\infty(p = 0.8) = 0.73(2)$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F.* Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state // *J. Stat. Mech.* 2006. V. 6. P. 2–35.

[2] *Calabrese P., Gambassi A.* Ageing properties of critical systems // *J. Phys. A*, 2005, V. 38. P. 066120.

Александр Владимирович Иванов, 2 курс магистратуры,
Петр Николаевич Маляренко, 1 курс магистратуры,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
физический факультет
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А,
a.v.ivanov@ftc.ru, petr.malyarenko@yandex.ru

Расчет энергии неактивированной адсорбции ферромагнитных двухкомпонентных сплавов $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ в зависимости от толщины пленок

С. В. Иванова, Д. В. Пилипенко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М. В. Мамонова

Данная работа посвящена теоретическому исследованию влияния типа материала подложки и толщины пленки на энергию адсорбции ферромагнитной пленки бинарного сплава в зависимости от его фазового состава.

Ключевые слова: поверхностные явления, метод функционала плотности, тонкие пленки, сплавы.

Исследование природы магнетизма в тонких пленках имеет большой фундаментальный интерес из-за возникающей в них размерной зависимости для магнитных характеристик. Сплавы ферромагнетиков, в особенности пермаллоя $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ широко применяются в радиотехнике и технике связи, из-за их особых магнитных свойств.

В настоящей работе развита методика расчета энергетических характеристик неактивированной адсорбции ферромагнитных пленок основанная на использовании метода функционала спиновой плотности с учетом температурных эффектов [1; 2] применительно к описанию адсорбции пленки ферромагнитных сплавов конечной толщины.

Метод функционала спиновой плотности, один из наиболее широко используемых методов описания многоэлектронных систем, вводит в качестве основы для расчета энергии основного состояния плотность частиц, определяемую в обычном трехмерном пространстве. Минимум такого функционала задает истинное распределение плотности в системе.

Неоднородное пространственное распределение намагниченности в приповерхностном слое можно считать пропорциональным вкладу в электронную плотность от магнитных атомов

адсорбата. Поэтому на основе пространственного распределения для электронной плотности системы, выбираемого в виде решение линеаризованного уравнения Томаса-Ферми, можно записать следующее распределение для намагниченности:

$$m(z) = \begin{cases} 0.5m_0 e^{\beta(z-D)} [1 - e^{-\beta h}] & z < D \\ m_0 [1 - 0.5^{-\beta(z-D)} - 0.5^{\beta(z-D-h)}] & D < z < D + h \\ 0.5m_0 e^{-\beta(z-D)} [e^{\beta h} - 1] & z > D + h \end{cases} \quad (1)$$

Экспериментальные исследования ультратонких магнитных пленок с толщинами $N < 4-6$ монослоев показывают, что их намагниченность демонстрирует температурную зависимость с ярко выраженным низкоразмерным характером.

Для описания температурной зависимости относительной намагниченности $m(T)$ можно использовать выражение:

$$m_0 = \left[\frac{T_c^{(s)}(x, N) - T}{T_c^{(s)}(x, N)} \right]^{\beta(N)}, \quad (2)$$

где $T_c^{(s)}$ – температура Кюри пленки сплава.

При аппроксимации экспериментальной зависимости [3] критического индекса от толщины пленки для системы Ni/W[110] была получена зависимость.

$$\beta(N) = \beta_a^{2d} + (N - 4) \frac{(\beta_a^{3d} - \beta_a^{2d})}{10} \theta(N - 4) \theta(15 - N), \quad (3)$$

где $\beta_a^{2d} = 0.23$, $\beta_a^{3d} = 0.35$. Критическая температура магнитного упорядочения пленки зависит от числа монослоев N , т.е. $T_c^{(s)}(N)$, и отличается от критической температуры магнетика в объеме $T_c^{(b)}$. Оценка $T_c^{(s)}(N)$ может быть осуществлена следующим образом:

$$T_c^{(s)}(N) = T_c^b(x) \left(1 - \frac{Z_b - Z_s}{N * Z_b} \right) \quad (4)$$

а Z_b и Z_s – число ближайших соседей в объемном металле и монослое соответственно, значения температуры Кюри в зависимости от концентрации железа в сплаве были взяты их экспериментальной статьи [4].

Если пленка толщиной в N монослоев, то адсорбция происходит с верхнего слоя и отрыв атома происходит от системы,

состоящей из пленки толщиной в N-1 слой и подложки. Тогда энергию адсорбции можем записать в виде:

$$E_{ads} = \frac{\sigma(N-1) + 2\sigma_{f\bar{e}} - \sigma(N)}{n_s} \quad (5)$$

где $\sigma(N)$ – межфазная энергия системы подложки и пленки в толщине N монослоев, $\sigma_{пл}$ – поверхностная энергия пленки.

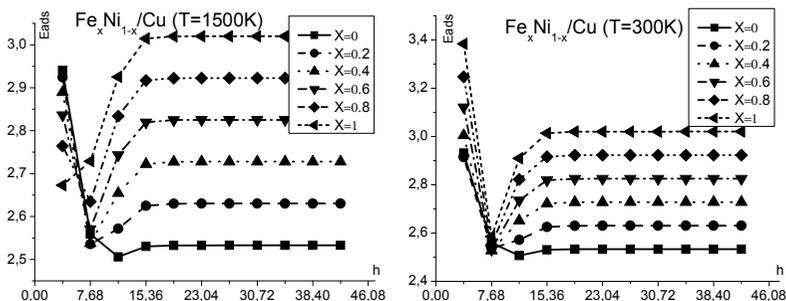


Рис. 1. Зависимость энергии адсорбции от толщины пленки в: а) парамагнитной; б) ферромагнитной фазах для Fe_xNi_{1-x}/Cu [111]

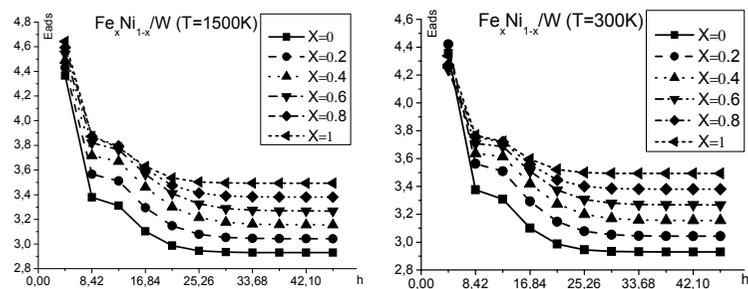


Рис. 2. Зависимость энергии адсорбции от толщины пленки в: а) парамагнитной; б) ферромагнитной фазах для Fe_xNi_{1-x}/W [110]

По результатам расчета энергии адсорбции в зависимости от толщины пленки сплава в пара- и ферромагнитных фазах для плотноупакованных граней подложек из меди и вольфрама, приведенных на рис. 1–2, можно сделать следующие выводы.

Энергия адсорбции для системы $Fe_xNi_{1-x}/W[110]$ уменьшается с увеличением толщины пленки и уменьшением кон-

центрации железа в сплаве. А для системы $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}/\text{Cu}[111]$ наблюдается минимум энергии адсорбции для толщины пленки в два монослоя. Такое различие в поведении систем вызвано разницей в поверхностных энергиях пленки и подложек. Поверхностная энергия вольфрама больше поверхностной энергии железа никеля и меди соответственно.

Существенные отличия энергии адсорбции в пара- и ферромагнитных фазах наблюдаются только для системы $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}/\text{Cu}[111]$. Для монослойной пленки в ферромагнитной фазе с увеличением концентрации железа в сплаве энергия адсорбции растет, а в парамагнитной уменьшается.

Энергия адсорбции для обеих систем, начиная с толщины пленки в 6 монослоев, перестает зависеть от количества слоев, следовательно, при данной толщине влиянием подложки можно пренебречь.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А.* Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы. М.: Физматлит. 2011. 400 с.

[2] *Мамонова М.В., Пилипенко Д.В., Климов С.П.* Исследование неактивированной адсорбции пленок ферромагнитных сплавов // Вестник Ом. ун-та. 2011. № 4. С. 75–79.

[3] *Huang F., Kief M.T., Mankey G.J., and Willis R.F.* Magnetism in the few-monolayers limit: A surface magneto-optic Kerr-effect study of the magnetic behavior of ultrathin films of Co, Ni, and Co-Ni alloys on Cu(100) and Cu(111) // Phys.Rev. B. 1994. 49. p. 3962.

[4] *Schumann F. O., Wu S. Z., Mankey G. J. and Willis R. F.* Growth and magnetic properties of $\text{Co}_x\text{Ni}_{1-x}$ and $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ultrathin films on Cu // Phys. Rev. B. 56. p. 2668.

Светлана Викторовна Иванова, 2 курс магистратуры,
Дмитрий Викторович Пилипенко, 1 курс аспирантуры,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
физический факультет
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
kanc@tresuare.ru

Критические свойства изинговских пленок

А. О. Кокин

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. А. Н. Вакилов

Найдены температурные значения для намагниченности, энергии, восприимчивости, теплоемкости и корреляционной длины в зависимости от температуры для тонких изинговских пленок различных толщин. Вычислены критические температуры для различной толщины пленок.

Ультратонкие магнитные пленки являются объектом интенсивных исследований, что во многом определяется возможностями их применения в микроэлектронике и вычислительной технике. Магнитные пленки обладают рядом уникальных особенностей, способствующих повышению плотности записи информации и быстродействия запоминающих устройств. Наряду с этим, изучение физических свойств ферромагнитных пленок носит фундаментальный характер, обуславливая развитие как физики магнитных явлений, так и физики поверхностных явлений.

В рамках поставленной задачи были выставлены следующие цели исследования: найти температурные значения для намагниченности, энергии, восприимчивости, теплоемкости и корреляционной длины в зависимости от температуры для тонких изинговских пленок различных толщин, с их помощью вычислить критические температуры для различной толщины пленок.

Гамильтониан модели Изинга записывается в виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J S_i S_j \quad (1)$$

где J – обменный интеграл, а S_i – спин в i -м узле. По направлениям x и y ставились периодические граничные условия, а по направлению z – условия свободной границы, что позволяло моделировать пленки со свободными поверхностями, перпен-

дикулярными оси z . Моделирование проводилось с использованием алгоритма Метрополиса. Системе давалось 5000 MCS/s на релаксацию для приведения ее в состояние равновесия, в котором в течение 10000 MCS/s проводилось вычисление средних значений обозначенных в цели исследования величин. Усреднение проводилось по 200 спиновым конфигурациям. Расчет корреляционной длины проводился по формулам:

$$\xi_j = \frac{1}{2\sin(\pi/L_j)} \sqrt{\frac{\chi}{F} - 1} \quad (2)$$

$$\chi = \frac{1}{L^3} \langle S^2 \rangle \quad (3)$$

$$S = \sum_i \sigma_i \quad (4)$$

$$F = \langle \hat{O}_j \rangle / L^3 \quad (5)$$

$$\hat{O}_{xy} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^2 \left| \sum_i \sigma_i \exp\left(\frac{2\pi i x_{n,i}}{L_{xy}}\right) \right|^2 \quad (6)$$

$$\hat{O}_z = \left| \sum_i \sigma_i \exp\left(\frac{2\pi i x_{z,i}}{L_z}\right) \right|^2 \quad (7)$$

Расчеты проводились для различных толщин пленки $d = 2, 4, 8, 12$. Для исследования влияния конечноразмерных эффектов линейный размер пленки L брался в виде 16, 24 и 32.

На рис. 1 приведены некоторые из полученных результатов.

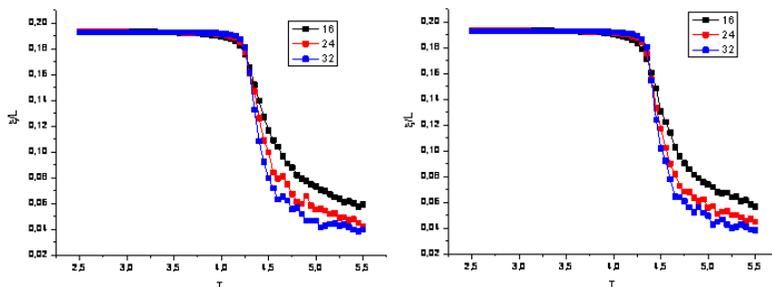


Рис. 1. Температурная зависимость приведенной корреляционной длины

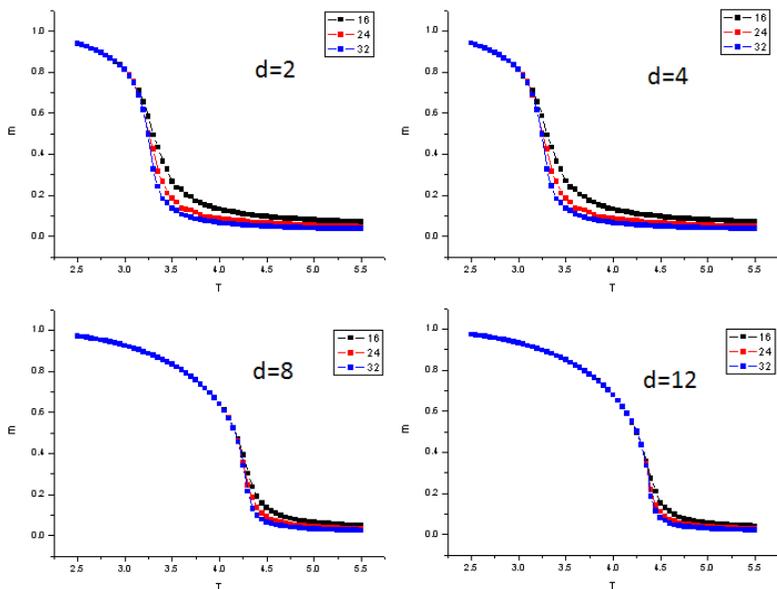


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности

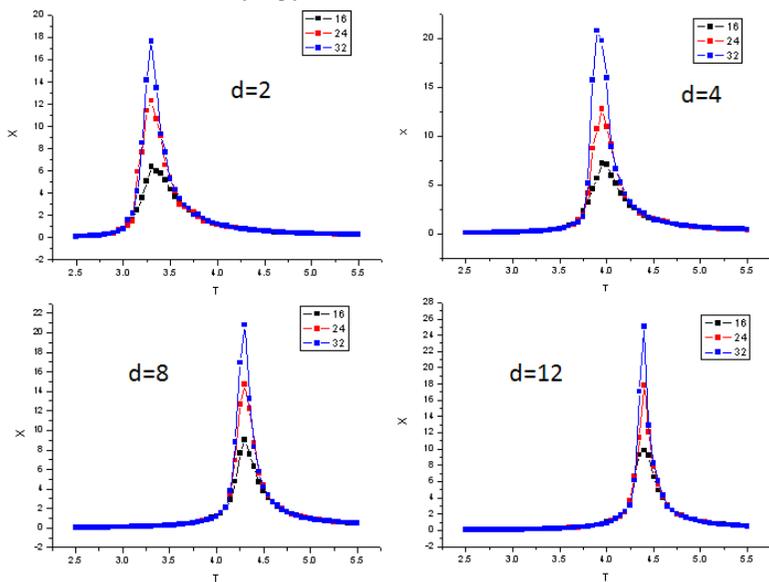


Рис. 3. Температурная зависимость восприимчивости

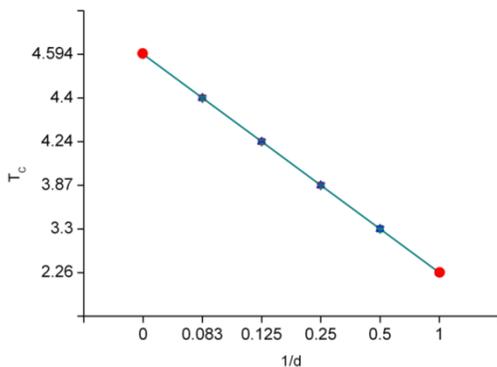


Рис. 4. Зависимость критической температуры от числа слоев в пленке

В рамках работы были получены значения для энергии, намагниченности, восприимчивости, теплоемкости и корреляционной длины в зависимости от температуры для тонких пленок различных толщин. По полученным данным были определены критические температуры.

Александр Олегович Кокин,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 2 курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812) 644238,
 petroff@mail.ru

Ренормгрупповой расчет флуктуационно-диссипативного отношения для однородных и структурно неупорядоченных систем

И. В. Лаврухин

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. В. Прудников

Применен ренормгрупповой подход для исследования неравновесной критической динамики магнитных систем, переведенных в критическую точку из высокотемпературного начального состояния. С помощью диаграммного разложения получены флуктуационные поправки к функции отклика и корреляционной функции при фиксированной размерности пространства $d = 3$. Универсальное флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО) получено в двухпетлевом приближении для однородных систем, $X^\infty = 0.412(13)$, и в однопетлевом приближении для систем с низкой концентрацией немагнитных атомов примеси, $X_d^\infty = 0.384$.

Особенностью магнитных систем вблизи температуры фазового перехода второго рода является аномально большое время релаксации. В связи с этим, встает вопрос исследования таких неравновесных свойств как *эффекты старения* и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ). Для их описания вводятся новые характеристики: флуктуационно-диссипативное отношение [2] и эффективная температура [3; 4].

Пусть система, описываемая гамильтонианом Гинзбурга – Ландау – Вильсона

$$\hat{H} = \int d^3x \left[\frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} (r + \psi(\mathbf{x})) \varphi^2 + \frac{1}{4!} g_0 \varphi^4 \right], \quad (1)$$

приведена в критическое состояние из начального состояния ($t = 0$), соответствующего неупорядоченной фазе ($T \gg T_c$). За φ обозначен параметр порядка, а $\psi(\mathbf{x})$ задает поле нескоррелированных дефектов.

Для описания релаксационной динамики данной системы (Модель А в классификации работы [6]) применяется уравнение эволюции

Введем в рассмотрение двухвременные корреляционную функцию и функцию отклика. Функция отклика $R(t,s)$ показывает реакцию параметра порядка в момент времени t на внешнее поле h , приложенное в момент времени s

$$R_{i,j}(t,s) = \left. \frac{\delta \langle \varphi_i(t) \rangle_h}{\delta h_j(s)} \right|_{h=0}, \quad (2)$$

а корреляционная функция $C(t,s)$ – взаимосвязь значений параметра порядка в различных точках, во временах t и s , при эволюции из высокотемпературного начального состояния

$$C_{i,j}(t,s) = \langle \varphi_i(t) \varphi_j(s) \rangle. \quad (3)$$

Связь этих двух функций определяется флуктуационно-диссипативной теоремой

$$R_{i,j}(t,s) = \frac{1}{T} \frac{\partial C_{i,j}(t,s)}{\partial s}, \quad (4)$$

где T – температура. В равновесном режиме двухвременная зависимость переходит в зависимость от времени наблюдения, $t-s$.

Однако, на неравновесном этапе релаксации, ФДТ может нарушаться, поэтому для описания системы вводят флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО)

$$X_x(t,s) = \frac{T R_x(t,s)}{\partial_s C_x(t,s)}, \quad (5)$$

или в импульсном пространстве,

$$X_q(t,s) = \frac{T R_q(t,s)}{\partial_s C_q(t,s)}. \quad (6)$$

Предельное отношение является универсальной характеристикой в рамках релаксационной модели

$$\lim_{s,t \rightarrow \infty} X_{x=0}(t,s) = \lim_{s,t \rightarrow \infty} X_{q=0}(t,s). \quad (7)$$

В модели среднего поля Ландау, которая не учитывает взаимодействие флуктуаций параметра порядка, при $T = T_c$, корреляционная функция и функция отклика принимают вид:

$$R_q^0(t, t') = \theta(t - s) \frac{S}{t} e^{-q^2(t-s)}, \quad (8)$$

$$C_q^0(t, t') = \frac{1}{q^2} \frac{S}{t} \left(e^{-q^2|t-s|} - e^{-q^2(t+s)} \right), \quad (9)$$

что приводит к предельным значениям ФДО $X_{q=0}^\infty = 1/2$ и $X_{q \neq 0}^\infty = 1$, свидетельствуя о нарушении флуктуационно-диссипативной теоремы для моды параметра порядка $q = 0$.

Флуктуационные поправки к корреляционной функции и функции отклика будут задаваться одно- и двухпетлевыми диаграммами Фейнмана с соответствующими симметричными коэффициентами. Для однородных систем ($\psi(\mathbf{x}) = 0$), нами был осуществлен расчет двухпетлевых поправок и получено предельное значение ФДО

$$X^\infty = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2\pi}}{6\pi} \frac{N+2}{N+8} g - \left(\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} + \frac{\sqrt{3}}{3\pi} \right) \frac{N+2}{(N+8)^2} + \left(\frac{1}{2} - \frac{10}{9\pi} \right) \left(\frac{N+2}{N+8} \right)^2 \right) g^2, \quad (10)$$

которое в критической точке рассматривается при $g = g^*$ – фиксированном значении вершины взаимодействия. К полученному ряду был применен метод асимптотического суммирования Паде – Бореля.

N	g^*	X^∞
1	1.418	0.412(13)
2	1.408	0.393(11)
3	1.393	0.378(15)

Для $N = 1$ результат лучше согласуется со значением ФДО $X^\infty = 0.390(12)$, полученным в [7] при компьютерном модели-

ровании методом Монте-Карло неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга, чем результат $X^\infty = 0.429(6)$ полученный в рамках применения метода ε -разложения, [1].

Согласно критерию Харриса [5], наличие примесей повлияет на значение ФДО только для модели Изинга, $N = 1$. Были вычислено предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения $X_d^\infty = 0.384$, однако тенденция уменьшения ФДО при наличии примесей не подтверждается в работах по компьютерному моделированию [7]. Возможно, данное противоречие будет устранено в двухпетлевом приближении.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Calabrese P., Gambassi A.* Two-loop Critical Fluctuation-Dissipation Ratio for the Relaxational Dynamics of the O(N) Landau-Ginzburg Hamiltonian // *Phys. Rev. E.* 2002. V. 66. P. 066101.

[2] *Cugliandolo L.F., Kurchan J.* Analytical solution of the off-equilibrium dynamics of a long-range spin-glass model // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 71. P. 173.

[3] *Cugliandolo L.F., Kurchan J.* Energy flow, partial equilibration, and effective temperatures in systems with slow dynamics // *Phys. Rev. E.* 1997. V. 55. P. 3898.

[4] *Cugliandolo L.F.* Out-of-equilibrium dynamical fluctuations in glassy systems // *AIP Conf. Proc.* 1999. V. 484, P. 238.

[5] *Harris A.B.* Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // *J. Phys. C.* 1974. V. 7, P. 1671.

[6] *Hohenberg P.C., Halperin B.I.* Theory of dynamic critical phenomena // *Rev. Mod. Phys.* 1977. V. 49, P. 435.

[7] *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А.* // *ЖЭТФ.* 2014. Т. 145. Вып. 3. С. 462.

Иван Владимирович Лаврухин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)672592,
jovanni.omsu@gmail.com

Исследование влияния дефектов структуры и размерных эффектов на критическое поведение сложных спиновых систем

М. А. Медведева

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. П. В. Прудников

Осуществлено компьютерное моделирование равновесного и неравновесного критического поведения для слабо неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов. Исследован переход от двумерных критических свойств к трехмерным многослойных ферромагнетиков с ростом толщины пленки.

Особенности поведения макроскопических систем в окрестности температуры фазового перехода второго рода определяются сильным взаимодействием долгоживущих флуктуаций параметра порядка. Так, слабое возмущение в окрестности критической точки может вызывать аномально сильный отклик и приводить к новым физическим эффектам. В этом плане наиболее интересные явления возникают при рассмотрении влияния различных неравновесных начальных условий на аномально медленную релаксацию системы в критической области.

В данной работе рассматривается модель неупорядоченной спиновой системы на кубической решетке с линейным размером L и наложенными периодическими граничными условиями. Микроскопический гамильтониан неупорядоченной модели Гейзенберга записывается в виде

$$H = -J \sum_{i,j}^N p_i p_j \vec{S}_i(t) \vec{S}_j(t),$$

где $\vec{S}_i(t) = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – это трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших

* Данная работа выполнена в рамках гранта «Молодые ученые ОмГУ» МУ-5/2014.

© М. А. Медведева, 2014

спинов, носящее ферромагнитный характер, p_i – случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе. Было показано, что если начальное состояние ферромагнитной системы характеризуется значением относительной намагниченности, далеким от состояния насыщения ($m_0 \ll 1$), то в критической точке процесс релаксации системы из данного начального неравновесного состояния на макроскопически малых временах будет характеризоваться не уменьшением $m(t) \sim t^{-\beta/\nu}$ (рис. 1а), а увеличением намагниченности со временем по степенному закону $m(t) \sim t^{\theta'}$ (рис. 1б). При найденных критических температурах $T_c(p=0.8) = 1.197(2) J/k_B$ [2] и $T_c(p=0.6) = 0.888(5) J/k_B$ [3] было осуществлено численное исследование неравновесной критической динамики в коротковременном режиме для трехмерной слабо и сильно неупорядоченной модели Гейзенберга со спиновой концентрацией $p = 0.80$ и $p = 0.60$ с линейными дефектами. Были исследованы логарифмическая производная намагниченности $\partial_t \ln m(t, \tau)|_{\tau=0} \sim t^{1/\nu}$, кумулянт $F_2(t, L) = m^2_{m_0=0} / (m(t, L))^2_{m_0=1} \sim t^{d/z}$, $U_2(t) = m^2 / m^2 - 1 \sim t^{d/z}$, второй момент намагниченности $m^{(2)}(t) \sim t^{c_2}$ и автокорреляционная функция $A(t) \sim t^{-c_a}$, где $c_2 = (d-2\beta/\nu)/z$, $c_a = d/z - \theta'$ где $d = 3$ – размерность системы. С учетом ведущих поправок к скейлингу были получены следующие значения критических индексов $\beta/\nu = 0.510(78)$, $z = 2.257(61)$, $\nu = 0.770(74)$ для слабо неупорядоченной модели Гейзенберга и $\beta/\nu = 0.946(48)$, $z = 3.529(125)$, $\nu = 0.821(14)$ для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга.

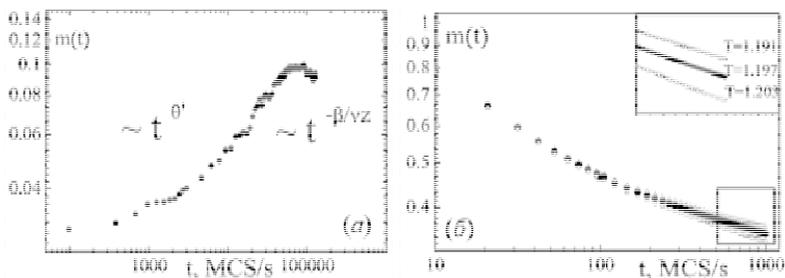


Рис. 1. Релаксация намагниченности из различных начальных состояний

Полученные нами значения показателей демонстрируют сильное влияние дальнедействующей корреляции дефектов на критическое поведение систем, описываемых многокомпонентным параметром порядка. Сравнивая значения критических индексов для сильно и слабо неупорядоченной модели Гейзенберга, можно сделать вывод, что данные системы принадлежат к разным классам универсальности. Установлено, что сильно неупорядоченная модель Гейзенберга характеризуется более медленной динамикой.

Нами проводилось исследование тонких ферромагнитных пленок в рамках анизотропной модели Гейзенберга. Гамильтониан системы выбирался следующим образом:

$$H = -J \sum_{i,j} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z],$$

где Δ – константа анизотропии ($\Delta = 0$ – изотропная модель Гейзенберга, $\Delta = 1$ – модель Изинга). Для трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с использованием алгоритма Свендсена-Ванга были исследованы температурные зависимости намагниченности m и ее составляющие m_z и $m_{||}$ для различных размеров системы $N_s = L_x L_y N$. Были исследованы пленки с линейными размерами $L = 32, 48, 64$ с числом слоев от $N=1$ до $N=31$ с периодическими граничными условиями в направлении плоскости пленки.

Для пленок с числом слоев от $N = 9$ до $N = 22$ наблюдается два пика восприимчивости $\chi_m \sim [\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle]^2$. В данной области был обнаружен спин ориентационный переход. В экспериментальных и теоретических работах, посвященных исследованию однослойных магнетиков, предсказывается, что данный переход является слабым переходом первого рода.

В температурной области спин ориентационного перехода, соответствующей первому пику, были более детально исследованы зависимости намагниченности $m_{||}$ и m_z , а также ориентационного параметра порядка O_z [1]. После анализа температурной зависимости восприимчивостей $\chi_m(T)$, $\chi_o(T) \sim [\langle O_z^2 \rangle] - [\langle O_z \rangle]^2$ установлено, что первый пик соответствует спин ориентационному переходу, а второй пик соответствует фазовому

переходу второго рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. На рис. 2 приведены значения критических температур для различных размеров пленок. Сплошная линия соответствует переходу из ферромагнитного состояния в парамагнитное, пунктирная линия соответствует спин ориентационному переходу.

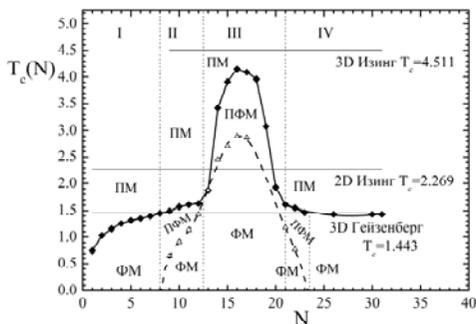


Рис. 2. Фазовая диаграмма для тонких пленок ферромагнетик

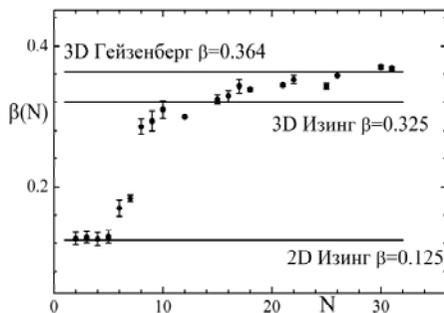


Рис. 3. Зависимость критического индекса намагниченности от толщины пленки

В данной работе была получена температурная зависимость намагниченности вблизи критической точки $m \sim (T_c - T)^\beta$, из которой были определены значения критического индекса β для различных размеров системы. Представленные на рис. 3 данные наглядно демонстрируют размерный переход от поведения двумерной модели Изинга к поведению трехмерной модели Гейзенберга с ростом толщины пленки.

ЛИТЕРАТУРА

[6] *Ambrose M.C. and Stamps R.L.* Monte Carlo simulation of the effects of higher-order anisotropy on the spin reorientation transition in the two-dimensional Heisenberg model with long-range interactions // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 87. P. 184417.

[3] *Prudnikov P.V., Medvedeva M.A.* Non-equilibrium critical relaxation of the 3D Heisenberg magnets with long-range correlated disorder // *РТР.* 2012. V. 127. N. 3. P. 369 – 382.

[4] *Прудников П.В., Медведева М.А.* Неравновесное критическое поведение сильно неупорядоченных магнетиков с дальнедействующей корреляцией дефектов // *ФНТ.* 2014. Т. 40. Вып. 5. С. 570–579.

Мария Александровна Медведева,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
3 курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812) 647787,
mmed@mail.ru

Критическое моделирование трехмерных неупорядоченных систем

А. С. Папушин

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. П. В. Прудников

Рассказывается о исследовании трехмерных неупорядоченных систем перколяционным кластерным методом. В ходе исследований было смоделировано поведение трехмерных решеток с концентрацией спинов $p = 0,7$, $p = 0,69$ для решеток с линейным размером до 64, а для концентраций спинов $p = 0,8$ и $0,6$ для решеток с линейным размером до 256. Это стало возможным благодаря последним усовершенствованиям алгоритма.

Описание фазовых переходов считается одной из наиболее сложных и актуальных задач статистической физики. Наблюдаемые по мере приближения к точке фазового перехода аномально большие и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических величин характеризуются сильным взаимодействием, что создает значительные трудности при аналитическом и экспериментальном исследовании критического поведения. В последнее время [5] компьютерное моделирование является независимым инструментом исследования аномального поведения фазового перехода второго рода, о чем свидетельствует прогресс в развитии различных методов компьютерного моделирования. Поэтому одной из важных задач является разработка методов компьютерного моделирования, слабо зависящих от эффектов критического замедления.

В последние годы исследование различных неоднородных моделей вблизи порога примесной перколяции стало актуальной и интересной задачей [1; 3].

В статье [4] был предложен перколяционный кластерный алгоритм, который намного эффективнее всех предыдущих методов вблизи порога примесной перколяции.

Цель данной работы состояла в расширении возможности исследования критического поведения структурно-неоднород-

ной трехмерной модели Изинга с концентрацией примесей, близкой к порогу примесной перколяции на высокопроизводительных вычислительных комплексах.

Теория перколяции (протекания) – теория, описывающая возникновение бесконечных связанных структур (кластеров), состоящих из отдельных элементов [2]. Представляя среду в виде дискретной решетки, сформулируем два простейших типа задач. Можно выборочно случайным образом открывать узлы решетки, считая долю открытых узлов основным независимым параметром и полагая два открытых узла принадлежащими одному кластеру, если их можно соединить непрерывной цепочкой соседних открытых узлов. Можно также выборочно открывать связи между соседними узлами и считать, что одному кластеру принадлежат узлы, соединенные цепочками открытых связей. Тогда вопросы о среднем числе узлов в кластере составляют содержание задачи связей. Если все узлы закрыты, решетка является моделью изолятора. Когда они все открыты и по проводящим связям через открытые узлы может идти ток, то решетка моделирует металл. При некотором критическом значении произойдет перколяционный переход, являющийся геометрическим аналогом перехода металл-изолятор.

Новый метод, который мы называем перколяционным кластерным алгоритмом, работает следующим образом. Начиная с конфигурации спина в модели Изинга S , связывает решетки случайного порядка. Перколяционные кластеры выращиваются до тех пор, пока один из кластеров не охватит систему. (В текущей реализации, кластер считается охватывающий, когда максимальное отделение в одном из направлений для некоторой пары точек кластера является размер системы) после роста процесс прекращается. Кластер переворачивается с вероятностью P_n , уступая место новой конфигурации спина, S . Связывание происходит случайно и процесс начинается заново.

$$P_n = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (1)$$

где ΔE – изменение энергии системы, обусловленное произведенным пробным изменением конфигурации.

В ходе исследования был доработан перколяционный кластерный алгоритм, что дало возможность более корректно об-считывать ситуации, когда мы не можем построить один боль-шой протекающий кластер. Такие ситуации довольно часто мо-гут встречаться при концентрации спинов ниже порога перколя-ции. Для этого в алгоритм были введены две новые сущности: граница кластера и критерий переворачиваемости. Теперь при построении протекающего кластера если в течение 10 попыток кластер ни разу не изменил своего состояния (увеличение в раз-мере или переворот), то такой кластер выпадает из дальнейших расчетов. В итоге, если у нас слияния кластеров в конечном счете не произошло, то для моделирования выбираются два кластера, которые больше других изменяли свое состояние.

Как уже говорилось, для ускорения работы программы была введена новая сущность – граница кластера. С помощью нее стало проще стало отлавливать слияние кластеров, а так же находить «замкнутые» кластеры.

Что из себя представляет граница кластера? Это набор узлов решетки, которые граничат с конкретным кластером, но не входят в его состав. Так как каждый узел в решетке имеет свой идентификатор принадлежности (это может быть номер кластера или идентификатор его отсутствия или же идентифи-катор немагнитной примеси), то проверка слияния кластеров заметно упрощается. Достаточно проверить, нет ли у нас на границе кластера узлов с идентификатором другого (не родно-го) кластера. Если таковой присутствует, то мы к первому кла-стеру добавляем второй, при этом все элементы второго кла-стера получают идентификаторы первого. Так же при слиянии двух кластеров сливаются и их границы, а корректировка про-изводится путем исключения из набора узлов тех элементов, которые обладают идентификатором родного кластера.

Подобным образом можно находить замкнутые кластеры – такие кластеры, граница которых состоит полностью из примесей.

Все эти нововведения позволили уменьшить трудоем-кость алгоритма почти на 20%. Это дало возможность вычис-лить критическую температуру с помощью кумулянтов Биндера четвертого порядка для трехмерных неоднородных решеток с линейным размером $L = 256$.

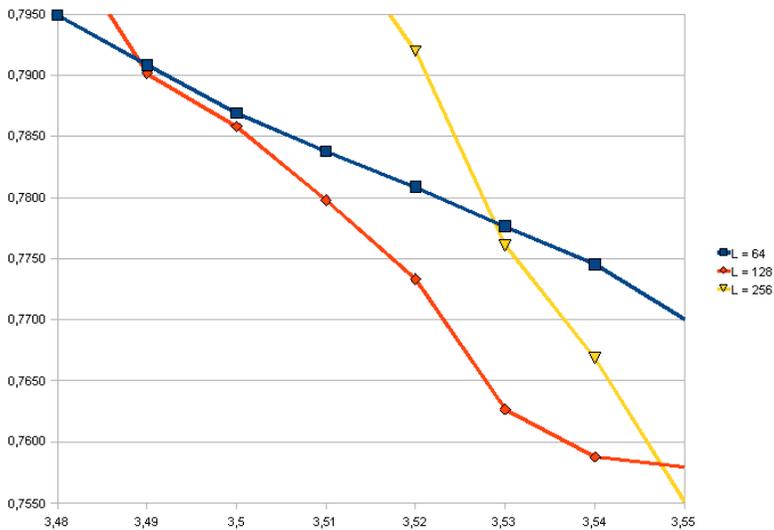


Рис. 1. Кумулянты биндера U4 при концентрации $p = 0.8$

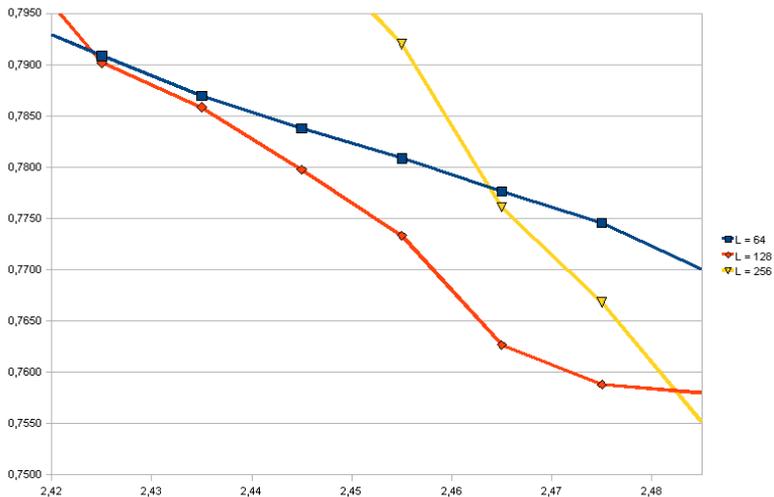


Рис. 2. Кумулянты биндера U4 при концентрации $p = 0.6$

Полученные значения

Концентрация	Tc известное ранее [6]	Tc полученное
0,80	3,49937(21)	3,51(4)
0,70	-	2,895(20)
0,69	-	2,715(30)
0,60	2,42409(11)	2,41(3)

Погрешность, полученная в расчетах, может быть связана с тем фактом, что исследуемые параметры восприимчивы к термализации эффектов. Это может быть улучшено путем увеличения статистики.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Balog I., Uzelac K.* Invaded cluster algorithm for a tricritical point in a diluted Potts model // *Phys. Rev. E.* 2007. V. 76. 011103.

[2] *Essam J.W.* Percolation theory // *Rep.Prog.Phys.* 1980. V. 43. P. 833–912.

[3] *Faraggi E.* Locally converging algorithms for determining the critical temperature in Ising systems // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 78. 134416.

[4] *Machta J., Choi Y.S., Lucke, Schweizer T.* Invaded cluster algorithm for Equilibrium Critical Points // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 15. P. 2792–2795.

[5] *Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. 224 с.

[6] *Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В., Криницын А.С.* Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга // 2007. V. 132. P. 417–425.

Александр Сергеевич Папушин,
Омский государственный университет им Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812) 644238,
as.ollaf@gmail.com

Исследование адсорбционных свойств ультратонких пленок ферромагнитных двухкомпонентных сплавов с неоднородным распределением намагниченности в зависимости от материала подложки

Д. В. Пилипенко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В. Мамонова

Данная работа посвящена теоретическому исследованию влияния различных подложек, на примере Cu[111] и W[110], на адсорбцию сплавов ферромагнитных металлов Fe, Ni, с учетом пространственного распределения намагниченности и экспериментальных значений критических параметров.

Ключевые слова: метод функционала плотности, сплавы, субмонослойные покрытия.

Ультратонкие магнитные пленки являются объектом интенсивных исследований, что во многом определяется возможностями применения ферромагнитных пленок. Сплав из $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ известен как пермаллой и широко применяется в радиотехнике, технике связи и автоматики, из-за его особых магнитных свойств.

В настоящей работе применяется методика расчета энергетических характеристик неактивированной адсорбции ферромагнитных пленок основанная на использовании метода функционала спиновой плотности (МФСП)[1,2].

В данной методике рассматривается полубесконечный металл со средней плотностью заряда n_1 , ограниченный бесконечной плоской поверхностью и занимающий область $z < -D$. Пленка адсорбата с плотностью заряда n_2 и толщиной h занимает область $D < z < D + h$. Между пленкой и подложкой в данной модели задается вакуумный зазор шириной $2D$.

Межфазная энергия взаимодействия подложки с металлической пленкой, приходящаяся на единицу площади контакта, определяется формулой:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \{f[n(z)] - f[n_0(z)]\} dz + \sigma_{ei} + \sigma_{ii}, \quad (1)$$

В рамках модели "желе" объемная плотность свободной энергии неоднородного электронного газа может быть представлена в виде градиентного разложения:

$$f[n(z)] = w_0[n(z)] + w_2[n(z), |\nabla n(z)|^2] + w_4[n(z), |\nabla n(z)|^4] - T(s_{id} + s_m), \quad (2)$$

где $w_0[n(z)] = w_{kin} + w_{Cul} + w_{ex} + w_{cor}$

есть плотность энергии однородного электронного газа. Пространственное распределение электронной плотности системы, выбирается в виде решения линеаризованного уравнения Томаса-Ферми. Согласно МФСП электронная плотность определяется через плотности электронов с проекцией спина "вверх" n_+ и проекцией спина "вниз" n_- , которые могут быть определены следующим образом:

$$n_{+/-}(z) = n(z) \frac{1 \pm m}{2} \quad (3)$$

где m – относительная намагниченность ферми-системы.

Неоднородное пространственное распределение намагниченности $m(z)$ в приповерхностном слое можно считать пропорциональным вкладу в электронную плотность от магнитных атомов адсорбата. Магнитное упорядочение в пленке рассматривается в приближении, описываемой ХУ-моделью, что подтверждается экспериментальными значениями критического индекса β для пленок Ni [3]. Для описания температурной зависимости относительной намагниченности $m(T)$ применялось выражение:

$$m_0 = \left[\frac{T_c^{(s)}(x) - T}{T_c^{(s)}(x)} \right]^{0.23}, \quad (4)$$

где $T_c^{(s)}$ – температура Кюри зависящая от концентрации компонент X , ее значения были взяты их экспериментальной статьи [4].

Из условия положительности минимума межфазной энергии от величины зазора и толщины пленки стало возможным определение области существования субмонослойных пленок сплава Fe_xNi_{1-x} на плотноупакованных гранях подложек из различных материалов, зависимость которой от температуры и концентрации представлена в таблицах 1–2.

Параметр θ характеризует степень заполнения подложки адатомами. Было выявлено, что при $T = 0$ непрерывные пленки могут образовываться на $Cu[111]$ при $\theta \geq 0.7$, на $W[110]$ при $\theta \geq 0.5$, а с ростом температуры область существования сужается. При значениях $\theta=1$, на медной подложке образуются пленки для всех концентраций железа в пленке, а на подложке из вольфрама только при малых $x \leq 20$. Такое отличие в поведении энергии адсорбции может определяться различием поверхностных и кристаллических свойств подложек. Так поверхностная энергия Cu в 1,5 раза меньше, чем у W , кроме того W имеет ОЦК структуру, а Cu - ГЦК.

На рисунках 1–2 приведены графики зависимости минимизационных параметров системы: значений толщины пленки и зазора между ней и подложкой. Как видно из графиков характер зависимости величин от параметра покрытия θ одинаков для обоих материалов подложки – с ростом θ зазор увеличивается, а толщина пленки уменьшается. Но для подложки из W толщина пленки с ростом θ меняется значительней от двух монослоев при $\theta = 0.6$, до толщины менее монослоя при $\theta = 0.9, 1$. Также системы отличаются в зависимости величины зазора от концентрации: если для Cu она увеличивается с ростом концентрации, то для W постоянна. Толщина пленки от концентрации железа почти не зависит, кроме значения $\theta = 0.6$ для системы Fe_xNi_{1-x} на $W[110]$.

Таблица 1
Область существования пленок сплавов Fe_xNi_{1-x} на $W[110]$

T, K	θ	X, %
0	[0.5-0.7]	All concentrations
	0.8	[0-60]
	0.9	[0-20]
	1	[0]
100	[0.7,0.8]	All concentrations
	0.9	[0-40]
	1	[0-20]
200	0.7	[40-100]
	0.8	[20-100]
	0.9	[0-60]
	1	[0-20]

Таблица 2
Область существования пленок сплавов Fe_xNi_{1-x} на $Cu[111]$

T, K	θ	X, %
0	0.7	[30-100]
	[0.8-1]	All concentrations
200	0.8	[50-100]
	[0.9-1]	All concentrations
600	0.9	[17-100]
	1	All concentrations

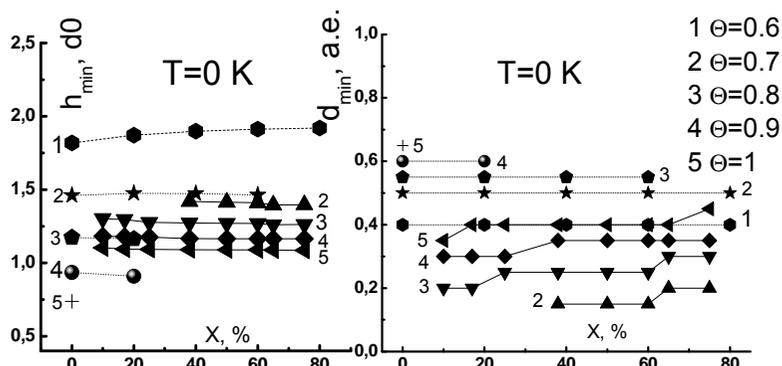


Рис. 1, 2. Зависимость равновесных толщины пленки h_{min} и зазора d_{min} от концентрации компонент сплава.
Пунктирная линия – W, сплошная – Cu

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А.* Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы. М.: Физматлит. 2011. 400 с.

[2] *Мамонова М.В., Пилипенко Д.В., Климов С.П.* Исследование неактивированной адсорбции пленок ферромагнитных сплавов // Вестник Омского университета. 2011. № 4. С. 75–79.

[3] *Vaz C A F, Bland J A C, Lauhoff G.* Magnetism in ultrathin film structures. // Rep. Prog. Phys. 2008. V. 71. P. 056501.

[4] *Schumann F.O., Wu S.Z., Mankey G.J., Willis R.F.* Growth and magnetic properties of $\text{Co}_x\text{Ni}_{1-x}$ and $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ ultrathin films on Cu // Phys. Rev. B. V. 56. P. 2668.

Пилипенко Дмитрий Викторович,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
virgo54@mail.ru

Система распределенных вычислений Aurora

А. В. Повар

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. П. В. Прудников

В настоящее время подавляющее большинство экспериментов в области физики представляют собой расчет и симуляцию математических моделей, которые, в свою очередь, для реализации требуют значительного количества вычислительных мощностей. Особенно ярко проявляется данная тенденция в области физики критических явлений, где даже самые простые эксперименты требуют сотен часов процессорного времени для расчетов и производят гигабайты результирующих данных. Рассматриваемая в данной статье система призвана значительно упростить процесс запуска моделей в распределенных системах.

Ключевые слова: распределенные системы, MPI, scaling out.

Для решения подобных задач индустрией и научным сообществом используются программно-аппаратные решения – вычислительные кластеры и суперкомпьютеры. Однако, во-первых, доступ к ним весьма ограничен, во-вторых, каждое из таких решений зачастую представляет собой уникальный продукт со своими особенностями, которые необходимо учитывать. Стоит отметить, что довольно часто лаборатория обладает достаточными вычислительными мощностями для проведения некоторого подмножества вычислений в виде рабочих станций, компьютерных классов, личных и других компьютеров, однако отсутствует возможность консолидации всех доступных средств в единую вычислительную платформу. Именно эту проблему и призвана решить система распределенных высоконагруженных вычислений Aurora.

Актуальность данной проблемы чрезвычайно высока как в инженерной, так и научной области.

Проект нацелен на предоставления единой вычислительной платформы для различного рода проектов, так или иначе

связанных с необходимостью производить ресурсоемкие расчеты и моделирования. Хорошим примером такого рода являются расчеты критического поведения неупорядоченных систем. Подобные модели, требует огромного количества машинного времени – порядка сотен тысяч часов процессорного времени, а также производят большое количество данных – порядка терабайт.

Однако, стоит отметить, что в данном направлении не существует ни одного решения, способного удовлетворить полностью данным нуждам. Эту проблему частично призван решить протокол MPI, который предоставляет интерфейс ко многим суперкомпьютерным системам, однако данный протокол адресован лишь проблеме передачи сообщений между участниками вычислений, не достаточно стандартизован (поведение различается на различных вычислительных платформах), и едва ли позволяет строить действительно надежные и отказоустойчивые системы (выход из строя даже не большей части кластера грозит полным сбоем распределенных вычислений). Более того, данный протокол решает лишь проблему передачи сообщений, оставляя конечному пользователю возможность проявить все свои знания в области разработки, оптимизации и отладке распределенных хранилищ данных, что, разумеется, не может не требовать от специалиста, рискнувшего заняться сим не простым делом, еще и квалификации и глубоких знаний в области баз данных.

Тем самым фактически ситуация, наблюдаемая в отрасли выглядит следующим образом: при необходимости проведения распределенных вычислений, пользователь (ученый, разработчик, программист) встает лицом к лицу перед чрезвычайно широким спектром задач, охватывающим все, начиная от системного программирования и знания из области построения сетей, заканчивая распределенными базами данных, проблемами синхронизации и определения одновременности, а также рядом междисциплинарных знаний. При этом еще необходимо решить и собственно поставленную целевую задачу.

Кроме того, существует ряд проблем, возникающих при переносе вычислительных программ с одной вычислительной

платформы на другую. Такие проблемы возникают как при переносе в рамках одной платформы (x86 -> x86, x86-64 -> x86-64), так и при межплатформенном переносе (x86 -> ARM, x86 -> POWER) или работе в гетерогенной среде (x86 + ARM + POWER).

Таким образом, основной задачей ставится создание базового слоя, который позволит унифицировать поведение различных вычислительных платформ, предоставит единый интерфейс взаимодействия с ними, абстрагируя пользователя от несущественных деталей, в то же время предоставляя доступ к действительно нужным особенностям платформы. Немаловажно отметить, что данная система нацелена в конечном итоге на предоставления полной и завершенной вычислительной среды, которая может быть развернута на множестве платформ - начиная от рабочего компьютера, заканчивая суперкомпьютерами, такими как кластер СКИФ МГУ Чебышев.

Система базируется на одноранговой оверлейной сети обмена сообщениями (модель акторов), которая позволяет строить виртуальную вычислительную сеть, объединяя транспортные сети различного типа (TCP/IP, MPI). На основе сети строится набор алгоритмов для распределения задач, сбора данных, контроля выполнения и подсистем обработки отказов аппаратных и программных компонентов системы.

Система ориентирована на инкрементальную стабильность (scaling out), симметрию вычислительных узлов (каждый узел имеет одинаковые обязанности, спецификация осуществляется на уровне приложения), децентрализацию (нет единой точки отказа), гетерогенность инфраструктуры (вычислительные узлы могут представлять собой существенно разные системы).

Инфраструктура системы Augoga позволяет выполнять специально разработанные для данной вычислительной сети приложения, которые, однако, могут представлять собой как разработанные с нуля решения, так и использовать уже существующие программы, используя систему Augoga как среду исполнения.

В качестве демонстрации возможностей системы производится запуск на стенде, состоящем из двух физических ма-

шин, на которых расположено по две виртуальных машины, на каждой из которых запущено по три экземпляра компонента программы. Таким образом, общее число узлов в системе достигает двенадцати. С помощью данной конфигурации можно показать независимость платформы от аппаратного обеспечения, а также продемонстрировать работу механизмов мониторинга системы и обработки ошибок различного уровня. Система адекватно отрабатывает отказы оборудования, разрывы сетевого соединения и перераспределяет задачи с учетом доступности узлов в режиме реального времени.

Повар Алексей Владимирович,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, +7 903 980 67 97,
a.v.povar@gmail.com

Эффекты огрубления в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели

И. С. Попов

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. П. В. Прудников

Проведено численное исследование эффектов огрубления в неравновесной критической динамике двумерной XY-модели. Исследовано влияние структурного беспорядка на эффекты огрубления.

Исследование критических свойств систем с медленной динамикой в последние годы вызывает значительный фундаментальный и практический интерес. Это обуславливается наблюдаемыми в таких системах эффектами старения и огрубления, а также нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы. Характерным примером системы с медленной динамикой является двумерная XY-модель в низкотемпературной фазе Березинского. Фаза Березинского формируется при температуре ниже температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса T_{KT} , и обуславливается возникновением в системе поперечной жёсткости относительно флуктуаций, что приводит к возникновению состояния с эффективно бесконечным радиусом корреляции. Особенностью фазы Березинского является то, что во всём её температурном диапазоне наблюдается каскад фазовых переходов, что делает всю низкотемпературную область критической.

Двумерная XY-модель описывает большое количество реальных физических систем, вследствие чего исследование её неравновесных свойств является актуальной научной задачей. Примерами систем, критическое поведение которых описывается данной моделью, являются моноатомные магнитные плёнки, планарные магнетики типа «лёгкая плоскость», тонкие сверхпроводящие плёнки, поверхности сверхпроводников, тонкие сверхтекучие плёнки, двумерные кристаллы, решётки джо-

зефсоновских контактов, решётки контактов сверхпроводник–ферромагнетик–сверхпроводник и многие другие.

Все реальные системы содержат дефекты структуры, что приводит к необходимости исследования структурно неупорядоченных систем. Согласно критерию Харриса, влияние дефектов структуры не должно сказаться на критической статике двумерной XY-модели. Однако было показано, что влияние неупорядоченности на критическую динамику весьма существенно и приводит к возникновению новых эффектов. Задача комплексного исследования влияния дефектов структуры на критическую динамику двумерной XY-модели не решена по сей день.

В данной работе проведено численное исследование критической динамики, и возникающих в ней эффектов, однородной и структурно неупорядоченной двумерной XY-модели при старте из начального неравновесного состояния как с малым значением параметра дальнего порядка, т.е. высокотемпературной фазы, так и низкотемпературной фазы, т.е. полностью упорядоченной, с использованием реализации динамики Метрополиса.

Гамильтониан двумерной XY-модели имеет вид:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j \bar{S}_i \bar{S}_j \quad (1)$$

где J – обменный интеграл, S_i – планарный вектор (играющий роль в случае магнитных систем магнитного момента, бозежидкостей – фазы волновой функции). Числа заполнения $p_i = 1$, если в i -м узле решетки находится спин, и $p_i = 0$, если в узле находится немагнитный атом. Вид гамильтониана указывает на его сильную нелинейность. Динамика двумерной XY-модели обеспечивается двумя вкладками: спиновыми волнами и топологическими образованиями солитонного типа – вихрями.

Эффекты огрубления (от англ. coarsening) – эффекты, связанные с образованием более крупных структур из более мелких, в сочетании с общим уменьшением количества объектов (рис. 1).

Некоторые результаты моделирования для различных концентраций спинов, линейных размеров системы и всей низкотемпературной фазы при данной концентрации представлены на рис. 2.

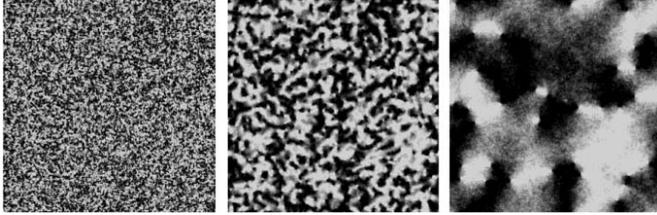


Рис. 1. Визуализация неравновесной динамики двумерной XY-модели, явно показывающая наличие эффектов огрубления

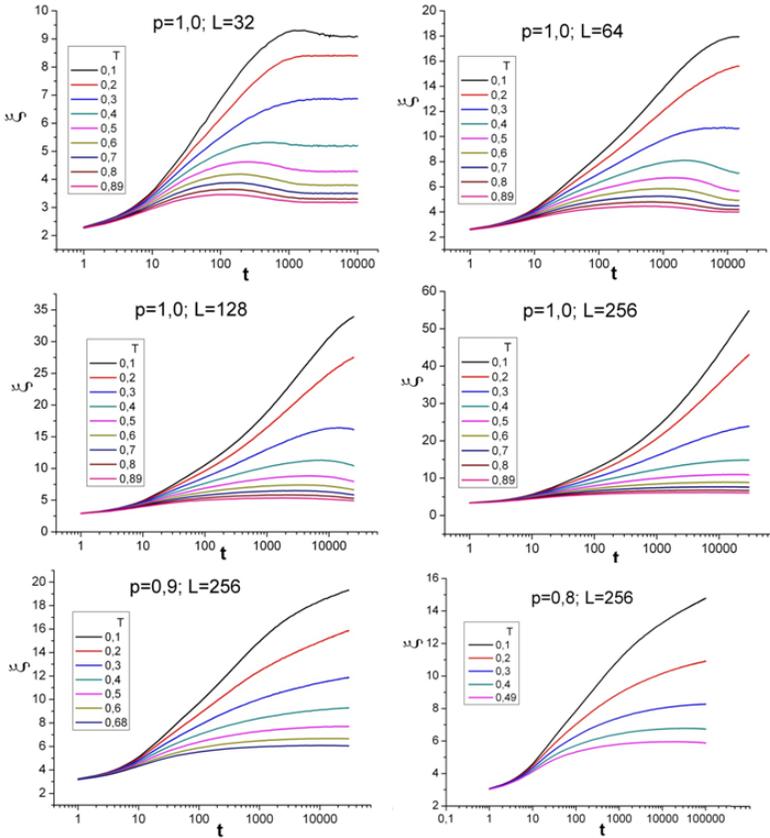


Рис. 2. Временная зависимость средневзвешенного размера областей квазидальнего порядка в системе с $p = 1,0$, $p = 0,9$ и $p = 0,8$ из начального высокотемпературного состояния для различных линейных размеров системы

В результате проведенной работы был разработан и программно реализован алгоритм выделения и определения параметров областей квазидального порядка в системе с непрерывной симметрией, а также выявлены и исследованы эффекты огрубления в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели, исследовано влияние дефектов структуры на эффекты огрубления.

Иван Сергеевич Попов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 год аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812) 644238,
petroff@mail.ru

Расчет из первых принципов намагниченности ферромагнитной пленки никеля на медной подложке

А. Ю. Савченко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. М. В. Мамонова

Из первых принципов в рамках теории функционала плотности исследованы адсорбционные свойства системы Ni/Cu для случаев образования моноатомной пленки на поверхности и структуры типа «сэндвич» с ориентацией поверхностной грани (100).

Расчеты физических свойств твердых тел «из первых принципов» стали в настоящее время доступными широкому кругу исследователей. Это связано с бурным развитием вычислительной техники и с появлением мощных программных комплексов. В данной работе использовался программный комплекс ABINIT. Такие расчеты дают очень ценную информацию как с теоретической, так и с практической точек зрения.

В основе расчетов лежит теория функционала электронной плотности ТФП (DFT, Density Functional Theory) совместно с приближением Обобщенного Градиента (GGA), а также метод проекционно-присоединенных волн (PAW).

Энергия адсорбции рассчитывается как разница полной энергии всей системы на один атом и энергий субстрата и адсорбата в отдельности.

В данной работе рассматривается система, состоящая из пленки никеля на медной подложке, в следующих случаях:

1) Равномерное распределение адсорбированных атомов на поверхности в виде монослоя. Такое явление носит название «неактивированная адсорбция»;

2) Замещение приповерхностных атомов подложки ионами адсорбата с выталкиванием их на поверхность и образованием структуры типа «сэндвич».

Параметр покрытия Θ , который представляет собой отношение числа адсорбированных атомов к числу атомов по-

верхности, принимается, равным единице. В этом случае адсорбат полностью повторяет структуру субстрата.

Рассматривался случай коллинеарного магнетизма, спины атомов пленки направлены вдоль оси Z . Магнитный момент атомов подложки принимался равным нулю.

Псевдоволновые функции электронов задавались разложением по плоским волнам вплоть до энергии обрезания 544 эВ, что обеспечивало точность расчета энергии адсорбции не хуже 10^{-4} эВ. Полная энергия рассчитывалась интегрированием по зоне Бриллюэна с использованием сетки точек $20 \times 20 \times 1$.

Нами проводилось исследование влияния количества атомных слоев в подложке на значения энергии адсорбции.

На рис. 1 показана зависимость энергии адсорбции от числа слоев в подложке. Данная зависимость имеет осциллирующий характер. Усреднение по семи слоям привело к относительной погрешности $\Delta = 1\%$.

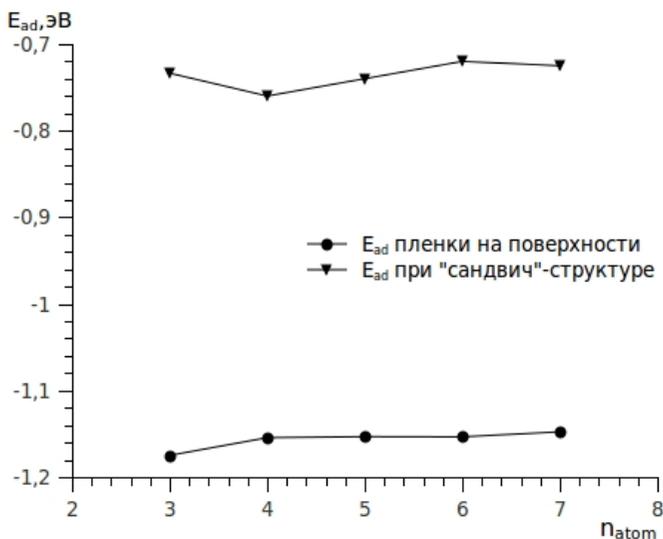


Рис. 1. Зависимость намагниченности пленки N_i от числа слоев в пленке

Рассчитанные значения энергии адсорбции для «сэндвич»-структуры на 0,4 эВ меньше (по модулю) чем значения энергии неактивированной адсорбции вычисленные для той же системы. Это указывает на то, что образование монослойной пленки на поверхности подложки энергетически более выгодно.

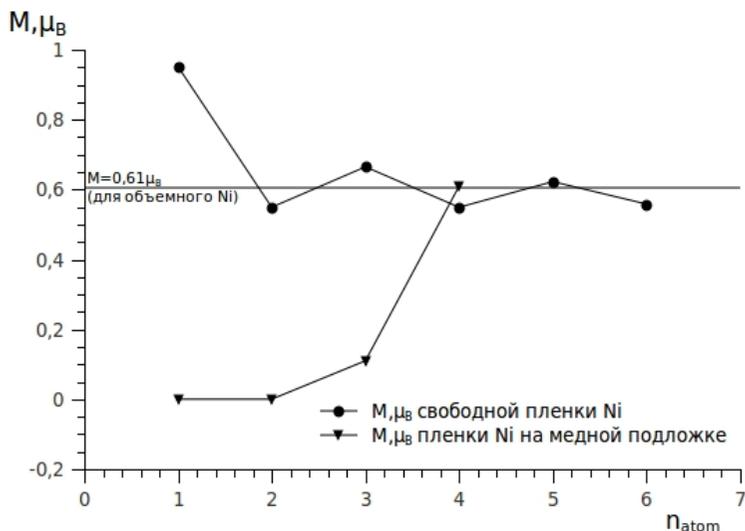


Рис. 2. Зависимость намагниченности пленки Ni от числа слоев в пленке

Намагниченность рассчитывалась как разница суммарного спина, направленного вверх, и суммарного спина, направленного вниз. Для монослойной пленки никеля на поверхности меди(100) магнитный момент близок к нулю, что согласуется с заключением об отсутствии намагниченности в данной системе [2]. Полученные при расчетах значения магнитного момента объемного никеля $M_0 = 0,61 \mu_B$ хорошо согласуются со значениями, полученными из эксперимента[1]. Как видно на рис. 2 увеличение числа слоев в пленке до трех приводит к появлению ненулевого магнитного момента ($M = 0,11 \mu_B$), при толщине равной четырем слоям магнитный момент атомов пленки достигает объемного значения ($M = 0,61 \mu_B$).

Частично результаты докладывались на международной научно-технической конференции [3] и на всероссийской студенческой конференции [4].

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Ney A. Scherz, et al.* Clarification of contesting results for the total magnetic moment of Ni/Cu(001) // *Phys. Rev. B* 65, 024411 (2001).

[2] *Huang F, Kief M T, et al.* Magnetism in the few-monolayers limit: A surface magneto-optic Kerr-effect study of the magnetic behavior of ultrathin films of Co, Ni, and Co-Ni alloys on Cu(100) and Cu(111) // *Phys. Rev. B.* 49, 3962 (1994).

[3] *Савченко А.Ю., Мамонова М.В.* Первопринципные расчеты энергии адсорбции монослойных металлических пленок // *Динамика систем, механизмов и машин: материалы VIII международной научно-технической конференции.* Омск: издательство ОмГТУ, 2012. С. 408–411.

[4] *Савченко А.Ю., Мамонова М.В.* Первопринципные исследования адсорбции монослойной ферромагнитной пленки никеля на медной подложке // *ВНКСФ-19: материалы Девятнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых учёных.* 2013. АСФ России. С. 136–137.

Александр Юрьевич Савченко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, +79139764410,
savchenko.au@gmail.com

**Секция
«ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА»**

Приближённый метод расчёта полосково-нагруженного диэлектрического волновода

В. В. Андреев

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Т. К. Болецкая

В работе используется следующий приближённый метод расчёта полосково-нагруженных диэлектрических волноводов: волновод сводится к четырёхслойному планарному волноводу и двум трёхслойным планарным волноводам, которые в свою очередь сводятся к симметричному трёхслойному волноводу. Этим методом получены зависимости нормированных постоянных распространения от нормированной частоты.

Ключевые слова: диэлектрические волноводы, многослойные планарные волноводы, эффективный показатель преломления.

Диэлектрические волноводы представляют собой структуры, которые служат для направления и ограничения света в устройствах интегральной оптики. К ним относятся оптические волокна, позволяющие передавать излучение на большие расстояния, а также планарные и полосковые волноводы, соединяющие оптические интегральные схемы.

Цель настоящей работы – расчёт постоянных распространения мод полоскового нагруженного волновода. Его поперечное сечение изображено на рисунке 1.

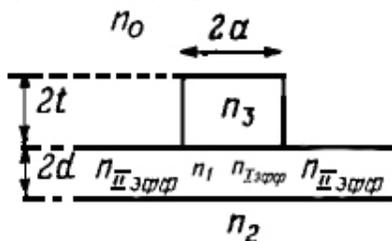


Рис. 1. Поперечное сечение полосково-нагруженного волновода

Планарный волновод ограничивает область, в которой распространяется свет, только в одном направлении, в направ-

лении x , перпендикулярном границам плёнки. Для уменьшения размеров волновода нужно ограничить область распространения излучения ещё в одном направлении. Это можно сделать, если заменить планарный волновод полосковым. Один из видов полосковых волноводов – полосково-нагруженный. В нём показатель преломления полоски n_3 меньше показателя преломления плёнки n_1 , но больше показателя преломления среды, расположенной над волноводом $n_0 < n_3 < n_1$. Поэтому волна, распространяясь в плёнке, в полосу вследствие эффекта Гуса-Хэнкена [1] проникает на большую глубину, чем в среду, находящуюся над волноводом. Таким образом, эффективная толщина плёнки под полоской больше, чем по обе стороны от неё. Следовательно, и эффективный показатель преломления области под полоской больше, чем эффективный показатель преломления областей слева и справа от неё: $n_{\text{эфф}} > n_{\text{эфф}}$. Из сказанного следует, что нагруженный полосковый волновод можно заменить эквивалентным трёхслойным планарным волноводом, изображённым на рисунке 2.

Для того чтобы найти эффективные показатели преломления, нужно вычислить постоянные распространения четырёхслойного и трёхслойного планарных волноводов, поперечные сечения которых изображены на рисунке 3.

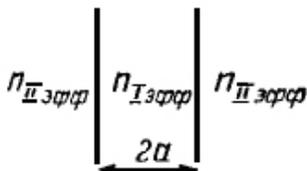


Рис. 2. Эквивалентный трёхслойный планарный волновод

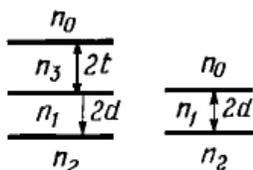


Рис. 3. Четырёхслойный и трёхслойный планарные волноводы

Постоянные распространения β для четырёхслойного планарного волновода находятся из уравнения [2]:

$$2h_1 d = \operatorname{arctg} \left(\frac{h_3}{h_1} \frac{1 - \eta e^{-4h_3 t}}{1 + \eta e^{-4h_3 t}} \right) + \operatorname{arctg} \frac{h_2}{h_1} + \pi M, \quad (1)$$

где $\eta = \frac{h_3 - h_0}{h_3 + h_0}$, $h_0^2 = \beta^2 - k^2 n_0^2$, $h_1^2 = k^2 n_1^2 - \beta^2$,
 $h_2^2 = \beta^2 - k^2 n_2^2$, $h_3^2 = \beta^2 - k^2 n_3^2$, M – целое число.

Если показатели преломления материалов полоски и подложки равны, т. е. $n_3 = n_2$, то уравнение (1) можно переписать в нормированных переменных:

$$2v_0 \sqrt{1 - x^2} = M\pi + \operatorname{arctg} \left(\frac{x}{\sqrt{1 - x^2}} \right) + \operatorname{arctg} \left(\frac{x}{\sqrt{1 - x^2}} \frac{1 - \eta e^{-4v_0 x t / d}}{1 + \eta e^{-4v_0 x t / d}} \right), \quad (2)$$

где $v_0^2 = k^2 d^2 (n_1^2 - n_2^2)$ – нормированная частота, $c_0^2 = \frac{n_1^2 - n_0^2}{n_1^2 - n_2^2}$ – параметр асимметрии, $x = w_0 / v_0$, $w_0^2 = d^2 (\beta^2 - k^2 n_2^2)$.

Задавая v_0 и t/d , решаем уравнение (2) и находим нормированную постоянную распространения $b_1 = x^2$. При $t = 0$ b_1 равно b_{II} – постоянной распространения асимметричного трёхслойного волновода.

Через b_1 и b_{II} находим эффективную нормированную частоту:

$$v_{eff}^2 = a^2 k^2 (n_{I\text{эфф}}^2 - n_{II\text{эфф}}^2) = v^2 (b_1 - b_{II}), \quad (3)$$

где $v^2 = a^2 k^2 (n_1^2 - n_2^2)$.

Из уравнения (1) получаем характеристическое уравнение для симметричного трёхслойного планарного волновода, устремив t к бесконечности:

$$2u_{eff} = M\pi + 2\operatorname{arctg} \frac{w_{eff}}{u_{eff}}, \quad (4)$$

где $w_{eff}^2 = v_{eff}^2 - u_{eff}^2$.

Решая уравнение (4) при заданных v_{eff} , находим нормированную постоянную распространения $\mathbf{b} = 1 - u_{eff}^2 / v_{eff}^2$ для полосково-нагруженного волновода.

На рисунке 4 приведены зависимости \mathbf{b} от ν для двух значений постоянной асимметрии.

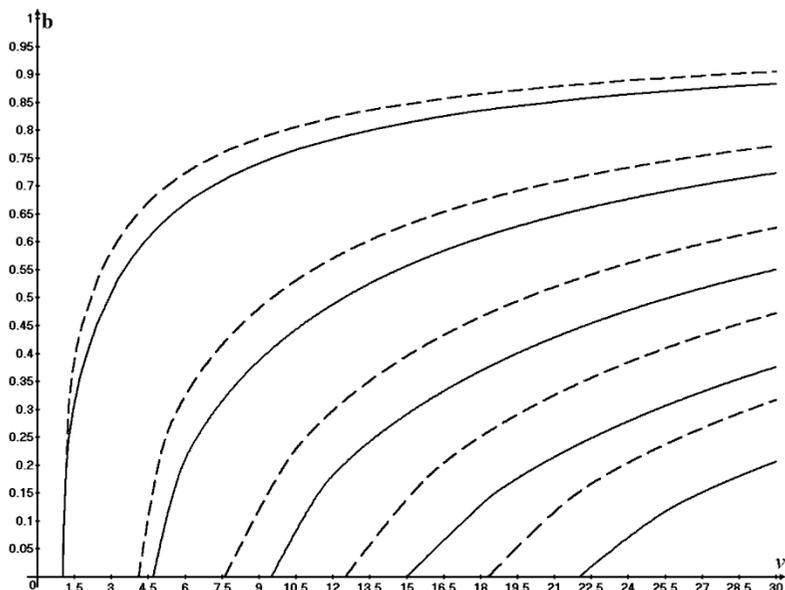


Рис. 4. Зависимости нормированных постоянных распространения \mathbf{b} от нормированной частоты ν_0 : $c_0^2 = 4$ (сплошные кривые), $c_0^2 = 44.8$ (пунктирные кривые)

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Унгер Х.* Планарные и волоконные оптические волноводы / пер. с англ. В.В. Шевченко. М.: Мир, 1980. 640 с.

[2] *Адамс М.* Введение в теорию оптических волноводов / пер. с англ. С.Г. Кривошлыкова. М.: Мир, 1984. 513 с.

Виктор Викторович Андреев,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)644492,
vit1992max@yandex.ru

Получение свободных нанопленок меди

И. А. Баканов

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. К. Н. Югай

Представлен обзор метода получения свободных нанопленок меди. В таких системах возможно возникновение явления баллистического транспорта. Предложен концептуальный метод измерения электрических параметров тонких пленок, не повреждая поверхность.

Ключевые слова: баллистический транспорт, свободные пленки, сверхток.

Тонкие пленки – основа современной микро и нанoeлектроники. Тонкопленочные технологии находят широкое применение при изготовлении изделий магнито-, крио-, оптоэлектроники и для получения широкого круга оптических покрытий различного назначения. Так же тонкие пленки являются плацдармом для изучения различных квантовых явлений. Тем более если эти пленки толщиной порядка 100 нм. Ведь именно в наноразмерных структурах проявляются квантовые эффекты, например, баллистический транспорт [2]. Этот эффект очень интересен для определения условий возникновения сверхтока. Как известно, тонкие пленки получают различными путями, будь то вакуумное напыление или химическое осаждение, в этом процессе участвует подложка из материала со своими особыми свойствами. Частицы подложки и пленки взаимодействуют между собой, что оказывает влияние на свойства самой пленки. Это может искажать картину проявлений квантово-размерных эффектов. В связи с этим логично будет исследовать структуру абсолютно свободную от подложки.

В данной работе рассматривается один из методов получения свободных пленок меди. Это чрезвычайно сложный процесс, связанный с множеством проблем, это больше связано с технологическими возможностями. Так же, возникают пробле-

мы с самим процессом отделения тонкой пленки меди от подложки, ведь толщина меньше 100 нм.

В качестве подложки были использованы пластинки из ситалла. Их поверхность более однородна, что в последующем уменьшит дефектность структуры получаемой пленки. Далее потребовалось напылить на подложку тонкий слой алюминия. Напыление происходило в камере магнетрона. Толщина составила порядка 7 мкм, хотя толщина алюминия не играет особой роли в получении свободной пленки. Малая толщина определенно облегчит процесс травления алюминия.

На следующем этапе на слой алюминия таким же образом наносилась медь, толщина которой контролировалась по кварцевому датчику. Стоит отметить, что обычно подложки подогреваются в камере установки, для лучшей адгезии материала подложки с распыляемым материалом. В данной работе необходимо было уменьшить влияние подложки на получаемую пленку, поэтому напыление проходило при комнатной температуре. Это впоследствии облегчает процесс «отрывания» пленки меди от подложки. Давление в камере составило $3,7 \cdot 10^{-3}$ Па.

Для дальнейших исследований свободной пленки будет интересовать особая геометрическая форма. Для этого был изготовлен фотошаблон (рис. 1).

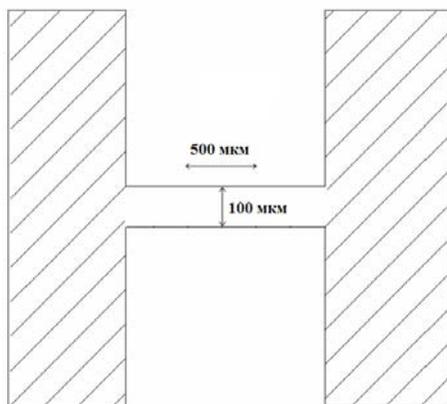


Рис. 1. Фрагмент фотошаблона – необходимая геометрическая форма получаемой пленки

Сверху на напыленную медь наносится фоторезист с использованием специальной центрифуги. Далее необходимо наложить фотошаблон и совместить его с краями подложки и провести экспонирование УФ-излучением. После чего удаляется засвеченные участки фоторезиста и травится незащищенная медь. В итоге образуется нужный рисунок меди на слое алюминия. Оставшийся фоторезист необходимо удалять очень аккуратно, протирать нельзя, так как можно повредить тончайший слой меди.

Для того, чтобы получить свободную пленку меди, следует просто отделить ее от слоя алюминия. Травление алюминия можно проводить в растворе NaOH [1], но обязательно нужно прикрыть поверхность подложки фильтровальной бумагой, что не позволит медной пленке всплыть, разлететься. После этого полученные образцы можно отжечь в печи, что может уменьшить дефектность пленки.

Для измерения сопротивления в тонких пленках используется метод 4-х зондов [3], но линейные размеры пленки не позволят провести эту операцию традиционно, также существует большая вероятность повреждения самой пленки. Требуется разработка специального устройства.

На прозрачной подложке формируется металлизированный рисунок (рис.2) определенной формы с четырьмя контактными площадками, которые будут заменять зонды.

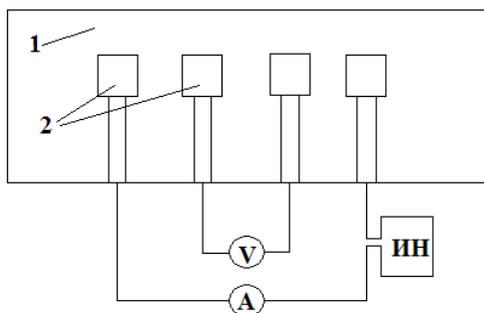


Рис. 2. Схема измерительного устройства:

1 – прозрачная подложка; 2 – металлизированные контакты (зонды);

V – вольтметр; A – амперметр;

ИН – источник постоянного напряжения

Подложка накладывается на пленку металлизацией вниз и совмещается под микроскопом. Именно поэтому устройство необходимо изготавливать на прозрачной основе.

Измеряя сопротивление свободной нанопленки, предполагается обнаружить явление баллистического транспорта электронов. Забегая вперед, можно отметить, что эксперимент проводился в недостаточно оптимальных условиях. Это обязательно скажется на высокой дефектности медной структуры, что сильно повлияет на результаты измерения сопротивления.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Беккерт М., Клемм Х.* Способы металлургического травления. М.: Металлургия, 1988. 400 с.

[2] *Мартинес-Дуарт Дж.М., Мартин-Палма Р.Дж., Агулло-Руедда Ф.* Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. М.: Техносфера, 2009. 368 с.

[3] *Павлов Л.П.* Методы измерения параметров полупроводниковых материалов: учеб. для студентов вузов. М.: Высш. шк., 1987. 238 с.

Игорь Александрович Баканов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
russianman91@mail.ru

Оценка изменения температуры при нагрузочных тестах в локализованных точках с помощью тепловизора ТКВр-ИФП СВИТ

И. В. Гибашева

Научный руководитель: к.б.н., доцент М. Г. Потуданская

Исследовано распределение температуры по поверхности верхних конечностей практически здоровых людей при физической нагрузке.

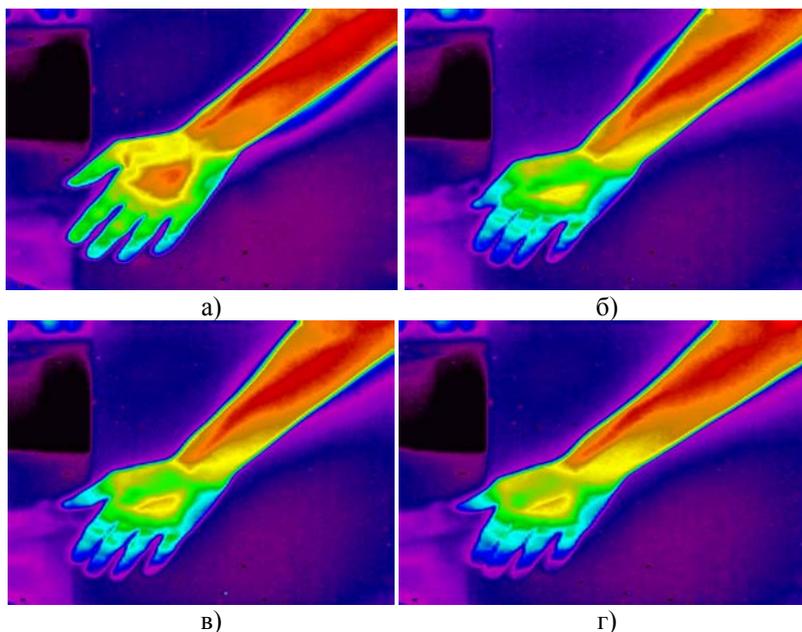
Ключевые слова: термография, тепловизор, распределение температур, нагрузочные тесты.

Введение. Важнейшей задачей современной медицины является быстрое, качественное, безболезненное для человека выявление патологических и предпатологических изменений организма на ранней, доклинической стадии [1]. Особенно важны скрининговые исследования, в том числе состояния сосудистого русла при заболеваниях, требующих постоянного контроля, например при сахарном диабете. Несомненно, наиболее информативным диагностическим методом является ультразвуковая доплерография артерий и вен верхних и нижних конечностей. Метод широко используется при выявлении периферических ангиопатий. Созданы и активно применяются компьютерные комплексы по УЗДГ [2], однако метод тепловизионной диагностики может использоваться как дополнительный, более простой и дешевый. Однако тепловизионным исследованиям кровотока уделяется на сегодняшний день недостаточное внимание. В связи с этим цель данной работы: оценить состояние системы микроциркуляции в локализованных точках с помощью тепловизора.

Материалы и методы. В эксперименте принимали участие здоровые индивидуумы в возрасте 18–20 лет в количестве 10 человек. Регистрация термограмм области верхних конечностей

стей до проведения нагрузочных тестов, непосредственно после нагрузочных тестов и в процессе восстановления в течение 3 минут производилась с помощью тепловизора ТКВр-ИФП Свит. Термограммы обрабатывались с помощью стандартного и оригинального программного обеспечения, разработанного в ОФ ИФП СО РАН.

Результаты и обсуждения. На рисунке приведена серия термограмм для одного обследованного.



Термограммы, записанные во время проведения нагрузочного теста для 2-го обследуемого:

- а) до начала нагрузки; б) непосредственно после нагрузки;
- в) через 1 мин после нагрузки; г) через 3 мин после нагрузки

В ходе исследования на термограммы поверхности верхней конечности наносилась сетка для определения температурного распределения. Основной проблемой получения температурных распределений являлось совмещение контуров руки для анатомического совпадения анализируемых точек. При реше-

нии этой проблемы использовалась методика совмещения по контурам и меткам одновременно. В результате получены температурные поля в виде совокупности графиков зависимости температуры от координаты.

Анализ графиков свидетельствует, что реакция на нагрузочные тесты носит индивидуальный характер для здорового человека. В области запястья максимальная разность температур до и после теста может достигать 3,43 °С, для ряда точек разница температур достоверно неразличима. Периода релаксации в 3 минуты для некоторых исследуемых оказалось недостаточно для полного восстановления температурного распределения. Изменение температуры при физической нагрузке может косвенно свидетельствовать о состоянии периферического кровотока. Полученные данные помогут сформировать пределы для определения изменения температурных распределений в норме.

Заключение. Произведена запись нагрузочных и постаналогических термограмм у здоровых людей. Апробировано программное обеспечение совмещения по контурам и меткам. Установлено, что дополнение термограмм контрастными термометками увеличивает точность совмещения термограмм. Сформирован банк данных температурных полей. Установлены границы изменения температур по заданным анатомическим линиям.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Вайнер Б.Г.* Матричное тепловидение в физиологии: Исследование сосудистых реакций, перспирации и терморегуляции у человека. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. 96 с.

[2] *Труханов А.И., Нагулин Н.Е., Кудрявцев П.С.* Компьютерные комплексы для ультразвукового доплеровского исследования кровотока // Медицинская техника. 1994. № 1. С. 15–18.

Ирина Валерьевна Гибашева,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812) 644238,
irina-gibasheva@mail.ru

Исследование влияния оксида кремния на морфологию поверхности кремния, облученного мощным ионным пучком

А. Г. Домрачев

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. В. С. Ковивчак

Исследовано влияние собственного и термически выращенного оксида кремния на формирование морфологии поверхности кремния при воздействии мощного ионного пучка. Исследованы поверхностные структуры, возникающие при таком воздействии. Рассмотрены возможные механизмы их формирования.

Ключевые слова: мощный ионный пучок, кремний, диоксид кремния, морфология поверхности, волнообразный рельеф, поверхностные структуры.

Воздействие мощного ионного пучка (МИП) на металлы и сплавы может приводить к значительному изменению морфологии поверхности – чаще всего к формированию кратеров различной формы, реже к образованию волнообразного рельефа [1; 2]. Возникновение подобного поверхностного рельефа связывается с возбуждением поперечных волн на поверхности расплава вследствие действия локального импульса давления, вызванного испарением облучаемого материала. Сверхбыстрая кристаллизация расплава после окончания импульса облучения приводит к фиксации таких волн и появлению волнообразного рельефа [3].

Особенностью кремния является наличие на его поверхности стойкого собственного оксида, который, имея отличные от кремния термодинамические параметры, может влиять на морфологию поверхности кремния при воздействии МИП. Ранее было обнаружено, что при воздействии МИП на кремний наблюдаются разрушения поверхности, показанные на рис. 1. Наряду с трещинами видны сколы поверхностного слоя образца. Ромбическая форма разрушения обусловлена кристаллографической ориентацией кремния (111). На разрушенной поверхности кремния наблюдается возникновение специфических по-

верхностных структур, которые связаны с наличием на поверхности кремния слоя диоксида кремния (SiO_2) толщиной $\sim 2\text{--}4$ нм. При нагреве, из-за более высокого значения коэффициента термического расширения кремния, чем у двуокиси кремния происходит растрескивание оксида в такой сложной форме.

Более детальное рассмотрение рис. 1 показывает существование на поверхности звездообразных структур, которые, как мы предполагаем, могут быть основой образования кратера при более высоких плотностях тока пучка. Что касается временных параметров образования наблюдаемых структур, то можно их оценить исходя из того, что трещины на поверхности кремния проходят через уже образовавшуюся структуру. Трещины же образуются на этапе охлаждения поверхностного слоя в течение нескольких микросекунд после облучения.

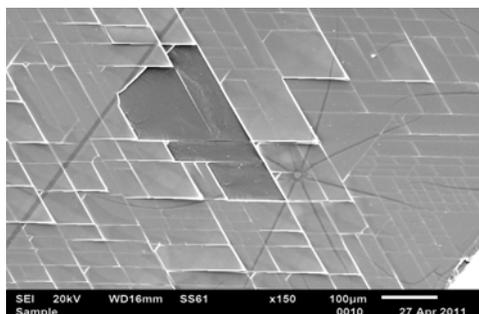


Рис. 1. Образование поверхностных повреждений при воздействии МИП ($j \approx 20 \text{ A/cm}^2$) на кремний (толщина слоя $\text{SiO}_2 \sim 4 \text{ нм}$)

Если слой оксида на кремнии больше естественного, то картина поверхностной морфологии кардинально меняется. При воздействии МИП на кремний с большей толщиной оксидного слоя на его поверхности образуется волнообразный рельеф (рис. 2а). Образование подобной структуры может быть связано как с действием на нагретый слой SiO_2 квазистатических напряжений, возникающих при таком облучении, так и с возникновением волн на границе раздела «слой SiO_2 /расплавленный кремний». При большей толщине слоя оксида (330 нм), пространственный период волнообразных структур меньше (рис. 2б).

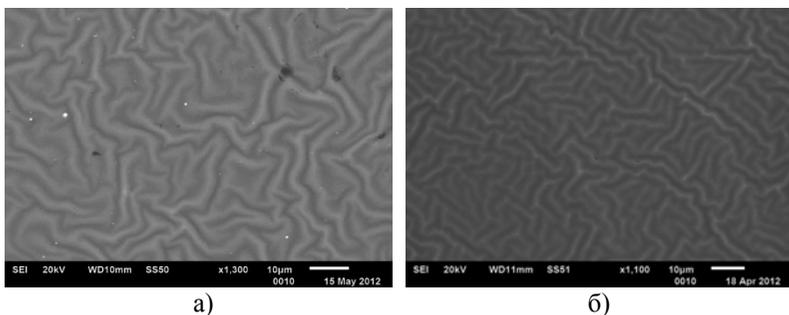


Рис. 2. Поверхность Si (толщина оксидной пленки а) 32 нм, б) 330 нм) после облучения с $j = 100 \text{ A/cm}^2$; $n = 1$

Облучение образцов кремния с толщиной слоя SiO_2 порядка 500 нм (рис. 3), что сравнимо с величиной проективного пробега ионов углерода пучка в диоксиде, приводит к нагреву только этого слоя и не вызывает плавления поверхностного слоя кремния и образования волнообразных структур не наблюдается. Образование пор в данном слое диоксида кремния, может быть вызвано его локальным радиационно-термическим разложением ($T_{\text{разл}} = 1997 \text{ }^\circ\text{C}$) и выбросом разнообразных продуктов и расплава с формированием пор, на что указывает характерный рельеф в области пор. Высокая локальная плотность выделившейся энергии, приводящая к достижению температуры разложения оксида, может быть вызвана, например, филаментацией мощного ионного пучка.

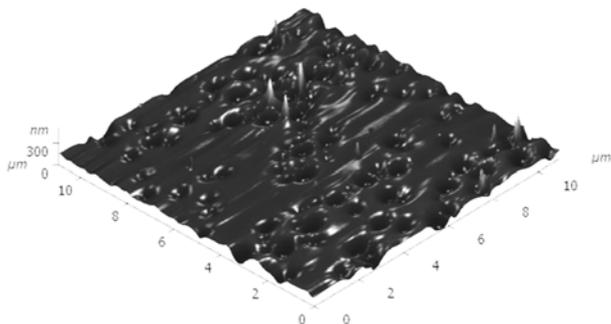


Рис. 3. 3D изображение поверхности Si с оксидной пленкой толщиной 500 нм после воздействия МИП с $j = 100 \text{ A/cm}^2$ и $n = 1$

Таким образом, при воздействии МИП на кремний с естественным слоем диоксида кремния (2–4 нм) наблюдаются разрушения поверхности, трещины, сколы поверхностного слоя образца, а так же звездообразные структуры. При увеличении слоя SiO₂ на кремнии (32 нм) подобные поверхностных структур не возникают, но наблюдается формирование волнообразного рельефа. При дальнейшем увеличении толщины этого слоя (330 нм) пространственный период волнообразных структур уменьшается. При увеличении толщины слоя SiO₂ до 500 нм, что сопоставимо с величиной проективного пробега ионов углерода пучка в диоксиде, формирование волнообразного рельефа не наблюдается. Отсутствие волнообразного рельефа объясняется малой толщиной (или даже отсутствием) расплава кремния на границе раздела оксид - кремний.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Кортаев А.Д., Тюменцев А.Н.* Физика металлов и металлословение. 2000. Т.89. № 1. С. 54-61.

[2] *Kovivchak V.S., Panova T.V., Burlakov R.B., Michailov K.A.* Surface morphology of zinc after irradiation by high power ion beam // Proc. VII Int. Conf. of modification of materials with particle beams and plasma flows. Tomsk, 2004. P. 201–202.

[3] *Ковивчак В.С., Панова Т.В., Михайлов К.А.* Поверхностное структурирование поликристаллического магния при воздействии мощного ионного пучка наносекундной длительности // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. Вып. 23. С. 55.

Артём Геннадьевич Домрачев,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
ArtyomHell@yandex.ru

Исследование лазерной абляции YBCO керамики повышенной пористости

Я. Ш. Загидулина

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Г. М. Серопян

Приведены результаты исследования переноса вещества сверхпроводящей керамической YBCO мишени на подложку при лазерной абляции. Эксперименты показали различия в размерах формируемых на подложке островков YBCO материала в зависимости от пористости мишени.

Ключевые слова: сверхпроводник, керамика, лазерная абляция, пористость.

Актуальность исследований связана с тем, что пленочные сверхпроводники на основе YBCO служат основой для сверхпроводящей электроники. Механизмы отрыва частиц от мишени и формирования и роста пленок на подложке определяют в конечном итоге качество получаемых пленок и структур на их основе [1]. После создания мощных лазеров началось интенсивное исследование круга явлений, сопровождающих взаимодействие излучения этих лазеров с разнообразными твердыми мишенями, плоскими поверхностями, аэрозольными частицами. Изучались процессы плавления, испарения, эмиссии заряженных частиц с поверхности и т. д. [2].

Проведенные ранее исследования зависимости ухода массы мишени от импульсной энергии лазерного излучения показали существование граничной энергии, выше которой уход массы резко увеличивается. Это нами было объяснено «включением» механизма «фазового взрыва» и его доминированием над остальными механизмами лазерного распыления. Целью данной работы является исследование взаимодействия лазерного излучения с YBCO мишенью повышенной пористости. Были проведены эксперименты по лазерной абляции YBCO мишени пористостью 17 и 43 %.

На рис. 1 и 2 показаны 2D изображения островков на подложке для времени напыления 5 с при энергии в импульсе 320 мДж, пористость YBCO мишени составляла 17 и 43 %.

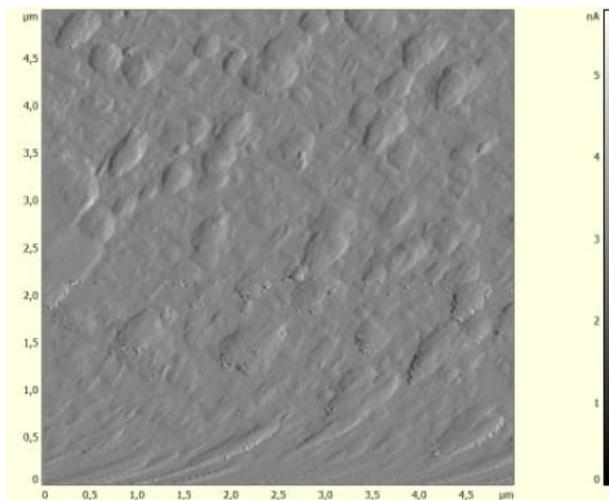


Рис. 1. 2D изображение островков для мишени пористостью 17%

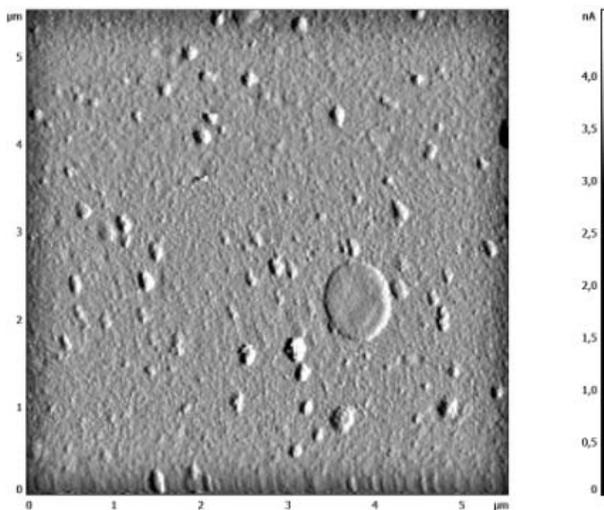


Рис. 2. 2D изображение островков для мишени пористостью 43%

Для данных образцов были построены распределения YBCO островков по размеру, представленные на рис. 3 и 4. Как видно из этих рисунков для мишени пористостью 17 % доля островков с размерами менее 100 нм составляет лишь 32 %, а большинство островков имеют размеры сотни нанометров, но не превышают 1 мкм. Для мишени пористостью 43 % доля островков с размерами менее 500 нм составляет около 70 %. Наблюдается значительное количество крупных островков размером 1–2 мкм.

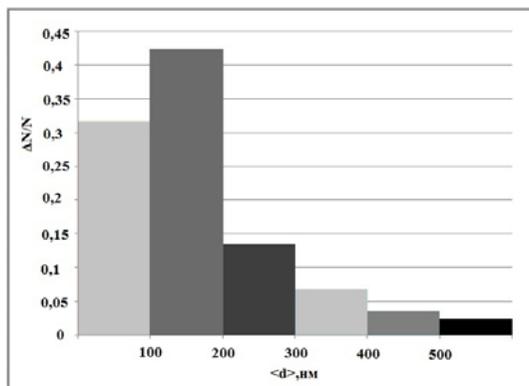


Рис. 3. Распределение YBCO островков по размеру для YBCO мишени пористостью 17 %

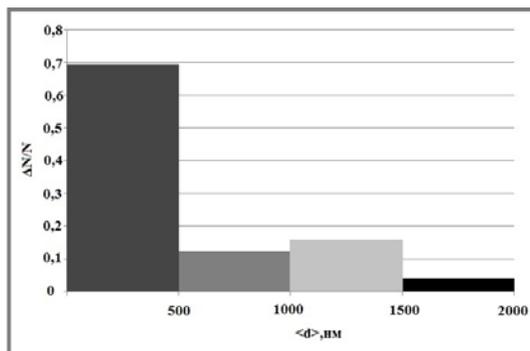


Рис. 4. Распределение YBCO островков по размеру для YBCO мишени пористостью 43 %

Таким образом, при увеличении пористости мишени от нее отрываюся и переносяся на подложку более крупные частицы. Это подтверждает механизм «фазового взрыва», при котором материал мишени распыляется эффективнее из-за микровзрывов в порах подповерхностных слоев мишени.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Воробьев В.С.* Плазма, возникающая при взаимодействии лазерного излучения с твердыми мишенями. УФН. 1993. Т. 16. №12. С. 51–83.

[2] *Сидоров Л.Н.* Эндоэдральные фуллерены // Соросовский образовательный журнал. 2001. № 8. С. 31.

Яна Шамильевна Загидулина,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)647787,
zagidylina@list.ru

Структурные преобразования глобул технического углерода после воздействия лазерным пучком различной энергии

И. В. Иванова

Научный руководитель: к.х.н., М. В. Тренихин

В работе используется метод просвечивающей электронной микроскопии для получения изображения морфологии глобул технического углерода. Приведены результаты расчетов по размерам частиц ТУ, расстояния между графеновыми слоями. Показана возможность применения лазерного облучения для изменения первичной структуры частиц ТУ.

Ключевые слова: глобулы технического углерода, графеновые слои, розоподобные и сфероидальные частицы.

Метод лазерного облучения имеет ряд преимуществ: непосредственная передача энергии в облучаемый материал, быстрый нагрев и переход вещества в парообразное состояние с последующей кристаллизацией углерода.

С целью определения структуры и морфологии глобул ТУ, исходных и обработанных лазерным излучением, проведено исследование образцов ТУ методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (ПЭМ). Объектом исследования в настоящей работе являются образцы низкодисперсного (НД) и высокодисперсного (ВД) ТУ. В работе проведены измерения и рассчитаны такие структурные параметры ТУ, как расстояние между графеновыми слоями (d_{002}), протяженность и кривизна графеновых слоев [1; 2].

Обработка изображения проведена с использованием программного обеспечения Digital Micrograph "Gatan". Из анализа результатов ПЭМ следует, что диаметр глобул ТУ для НД от 100 до 300 нм, для ВД от 10 до 50 нм. В глобулах наблюдается низкая упорядоченность графеновых кластеров (рис. 1), что видно из анализа ЭМ изображений и электронограмм, полученных методом Фурье-преобразования от ЭМ изображений графеновых

слоев. Более протяженные графеновые слои с длиной 1–2 нм характерны для НД ТУ, в сравнении с ВД ТУ с длиной до 1 нм, d_{002} варьируется от 0.38–0.44 нм для ВД ТУ и 0.36–0.37 нм для НД ТУ (рис. 3). Средняя величина кривизны слоёв НД ТУ, вычисленная по методике Мюллера составила 0.66 [1; 2].

Облучение образцов ТУ проводили с помощью импульсного лазера с Nd:YAG стержнем при следующих параметрах излучения: длина волны 1064 нм, частотой 10 Гц, энергия в импульсе от 0.4 до 1 Дж. Среднее время облучения 15 минут. Лазерная установка располагалась в вертикальном положении, образец облучался в суспензии этилового спирта без использования линз. После облучения образцов наблюдалась глубокая структурная перестройка углеродного материала. Образцы ВД ТУ содержали сферические частицы диаметром 10–30 нм с оболочкой из 4–10 графеновых слоев. Подобная морфология в литературе получила название «нанокapsулы». При облучении НД ТУ происходит образование глобулярных структур диаметром 100–500 нм, состоящих из рядов параллельных протяженных графеновых слоев (d_{002} составляло 0.36 нм), которые объединены в оболочки, вложенные одна в другую. Такие частицы имеют литературное название розоподобных частиц (рис. 2).

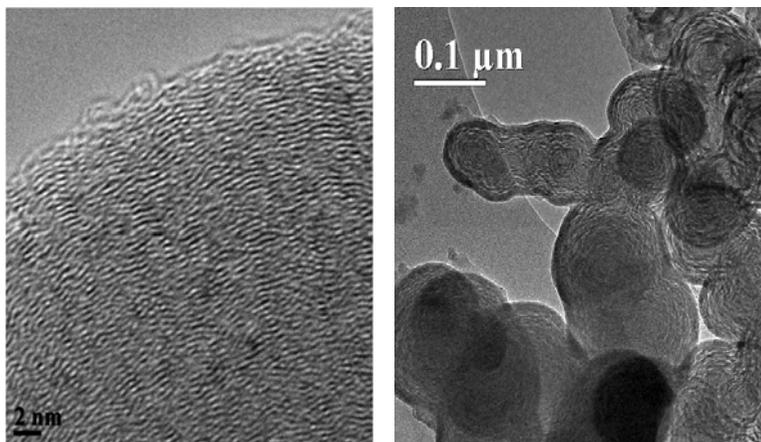


Рис. 1. Электронно-микроскопическое изображение морфологии глобул ТУ до и после облучения лазером

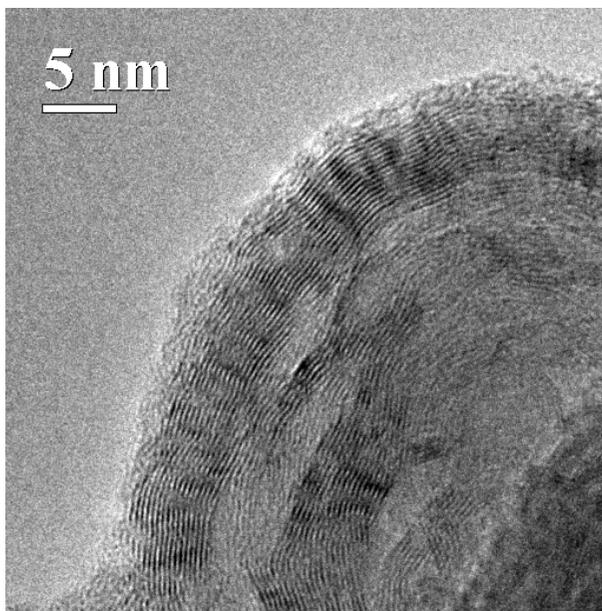


Рис. 2. Электронно-микроскопическое изображение графеновых слоев розоподобной частицы после облучения лазером

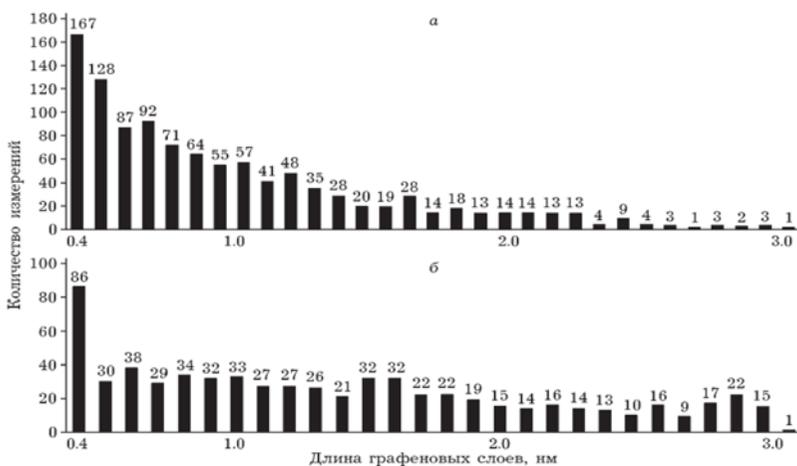


Рис. 3. Гистограммы длин графеновых слоев для ВД (а) и НД (б) ТУ

При облучении ТУ большой энергией (1Дж) наблюдается более рыхлая структура графеновых слоев для розоподобных частиц.

При лазерном облучении ТУ в зависимости от диаметра первичных частиц и особенностей их структуры формируются 2 типа УНМ: нанокапсулы (при облучении частиц 10–30 нм), розоподобные частицы (при облучении частиц 100–300 нм).

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Carbon Nanotechnology. Recent Development in Chemistry, Physics, Materials Science and Device Application* / Ed. by Liming Dai. Dayton: Elsevier, 2006. 733 p.

[2] *Кряжев Ю.Г., Коваль Н.Н., Лихолобов В.А., Тересов А.Д., Дроздов В.А., Тренихин М.В. // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. № 7. С. 1–6.*

Ирина Вячеславовна Иванова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)644492,
vit1992max@yandex.ru

Разработка конструкции высокоэффективной системы охлаждения для блока фильтра гармоник мощного РПДУ

А. С. Кнор

Научный руководитель: преп. Е. Г. Абрамова

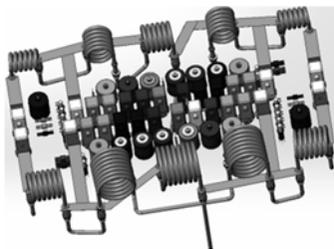
Тепловой режим РЭУ зависит от многих факторов, а именно: мощности и распределения активных источников энергии; конструкции и габаритов РЭУ; физических свойств материалов, из которых состоит РЭУ; физических параметров окружающей среды; системы вынужденного охлаждения, если такая система специально предусмотрена.

В данной статье проанализированы варианты реализации конструкции контура жидкостного охлаждения блока фильтра гармоник РПДУ высокой мощности, проведены модельные расчеты системы при различных условиях окружающей среды с использованием средств инженерного анализа и сделаны выводы о факторах, влияющих на эффективность работы системы.

После оптимизации схемы фильтра гармоник разработчики остановились на схеме состоящий из двух поддиапазонов, в основе которых лежит полосовая схема с дискретными конденсаторами (рис.) [1]. Каждый поддиапазон состоит из 5 катушек индуктивностей, последовательно соединенных друг с другом и реализованных из медной трубки диаметром 9,52 мм. Конструкция фильтра, построенного по такой схеме, является более простой в изготовлении и экономичной. Однако при всех достоинствах недостатком данной схемы является увеличение токов, протекающих через элементы.

Методика исследования катушки с воздушным охлаждением представляет собой следующую последовательность [2]:

1. Построение модели катушки индуктивности в специализированной САПР инженерного анализа процессов гидро- и газодинамики.



Фильтр гармоник РПДУ на 20 кВт

2. Задаем физические свойства вещества, материалы конструкций, граничные условия и параметры расчета.

Анализ катушки производился при температуре окружающей среды равной $+20^{\circ}\text{C}$. Рабочее вещество – атмосферный воздух.

Использовались два типа граничных условий.

Первое граничное условие – массовый расход газа во входном патрубке кондиционера.

Второе граничное условие – атмосферное давление на выходе из коробки

Давление не изменялось.

3. Задаем мощность на катушке.

4. Далее осуществляется непосредственно расчет модели методом конечных элементов.

5. После расчета происходит обработка полученных данных и отображение необходимых результатов.

Преимущества жидкостных систем охлаждения:

- У воды более высокая теплоемкость, чем у воздуха.
- Уровень шума значительно ниже, чем при использовании принудительного воздушного охлаждения.

• Естественная и принудительная конвекция требует объема, более чем 50 раз превышающего объема жидкостного охлаждения.

Но существуют и недостатки:

- Возрастают затраты на электроэнергию.
- Высокая цена при разработке новых конструктивных вариантов водоблоков.

Методика исследования при жидкостном охлаждении:

1. Построение модели катушки индуктивности в специализированной САПР инженерного анализа процессов гидро- и газодинамики.

2. Задаем физические свойства вещества, материалы конструкций, граничные условия и параметры расчета.

Анализ производился при температуре окружающей среды равной $+20^{\circ}\text{C}$. Рабочее вещество – масло ПМС-50.

Использовались два типа граничных условий [3].

Первое граничное условие – массовый расход жидкости во входной трубке катушки индуктивности.

Второе граничное условие – атмосферное давление на выходе из трубки катушки индуктивности.

Давление не изменялось.

3. Задаем мощности на катушках.

4. Далее осуществляется непосредственно расчет модели методом конечных элементов.

5. После расчета происходит обработка полученных данных и отображение необходимых результатов.

Расчет модели производился для каждого из поддиапазонов при различных расходах жидкости (0,3; 0,6; 2 л/мин).

В результате моделирования конструкции фильтра гармоник было определено оптимальное соотношение между расходом жидкости, температурой и давлением в системе охлаждения, также в ходе работы был найден способ упрощения конструкции фильтра с точки зрения его изготовления без ухудшения электрических характеристик. При расходе жидкости 2 л/мин, давление воды возросло до 5 атм., что неблагоприятно сказывается на системе жидкостного охлаждения. При значении 0,6 л/мин атмосферное давление остается в пределах нормы до 1,5 атм. Температура жидкости не превышает 100°C , что соответственно удовлетворяет требованиям по температурной стабильности. В результате моделирования конструкции фильтра гармоник было определено оптимальное соотношение между расходом жидкости, температурой и давлением в системе охлаждения, также в ходе работы был найден способ упрощения конструкции фильтра с точки зрения его изготовления без ухудшения электрических характеристик.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Годов А.Н.* Конструкции корпусов и тепловые свойства полупроводниковых приборов Н.Н. Горюнов, В.С. Громов, А.И. Курносков, В.А. Мозгалева / под общ. ред. Н.Н. Горюнова. М.: Энергия, 1972. 120 с.
- [2] *Дульнев Г.Н., Тарановский Н.Н.* Тепловые режимы электронной аппаратуры. JL: Энергия, 1971. 247 с.
- [3] *Дульнев Г.Н.* Теплообмен в радиоэлектронных устройствах. М.: Гос-энергоиздат, 1963. 288 с.

Артур Сергеевич Кнор,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)647787,
art-knor@yandex.ru

Исследование влияния УФ излучения на газовый состав гемоглобина

Д. В. Осенник

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Е. Ю. Мосур

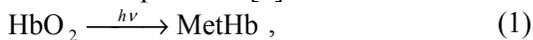
Исследована динамика содержания основных производных гемоглобина в цельной крови и ее растворах при воздействии УФ излучения. Показано, что фотопревращения производных гемоглобина в растворах крови происходят более интенсивно, чем в цельной крови.

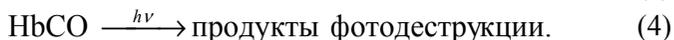
Ключевые слова: основные производные гемоглобина, УФ излучение, экспозиционная доза, количественный спектрофотометрический анализ.

Актуальность изучения механизмов действия света на кровь вызвана распространением в клинической практике различных методов ультрафиолетового облучения. Главным объектом воздействия УФ света являются эритроциты, содержащие гемоглобин, для инактивации которого не требуется большого количества энергии, тогда как нарушение его структуры и функций вызывает огромный биологический эффект. Неоднозначность эффектов облучения делает необходимым контроль содержания производных гемоглобина. Необходимо отметить, что в большинстве работ, посвященных исследованию влияния УФ облучения на гемоглобин, используются растворы крови [1–3]. Цель данной работы – исследование фотопревращений производных гемоглобина в цельной крови и ее растворах.

Основными производными гемоглобина являются: оксигемоглобин (HbO_2), дезоксигемоглобин (Hb), карбоксигемоглобин ($HbCO$) и метгемоглобин ($MetHb$).

Фотохимия превращения гемоглобина включает в себя следующую последовательность реакций [4]:





В работе использовались цельная венозная кровь и ее 1%-ые растворы, приготовленные по стандартной методике. Спектры поглощения исследуемых образцов регистрировались в диапазоне длин волн 510÷650 нм в кварцевых кюветах с оптической длиной пути 0,01 см (для цельной крови) и 1 см (для растворов крови) посредством спектрофотометра СФ-56. В качестве источника непрерывного излучения использовалась ртутная лампа ДРГС-30 (для выделения УФ излучения применялся светофильтр УФС-1). Определение содержания основных производных гемоглобина осуществлялось с помощью компьютерной программы “НемоSpectr” [5].

По данным количественного спектрофотометрического анализа построены зависимости содержания основных производных гемоглобина от экспозиционной дозы УФ излучения.

На рис. 1 представлена динамика изменения содержания основных производных для цельной крови. Заметно, что с увеличением дозы уменьшается содержание оксигемоглобина и дезоксигемоглобина (концентрация карбоксигемоглобина снижается незначительно) на фоне роста содержания метгемоглобина.

Принципиально отличается зависимость содержания основных производных гемоглобина при воздействии УФ излучения на раствор крови, показанная на рис. 2. В том же диапазоне доз УФ излучения, что и для цельной крови, содержание HbO_2 резко уменьшается с 86,7 % до 11,9 % при сопутствующем значительном росте уровня MetHb (до 61,0 %), концентрация HbCO практически не изменяется, а содержание Hb постепенно увеличивается.

Очевидно, что при использованном в настоящей работе интервале доз УФ излучении в цельной крови преобладает реакция (1), а в растворе крови протекают реакции (1) и (2), что позволяет сделать вывод о более высокой интенсивности фото-процессов в растворе.

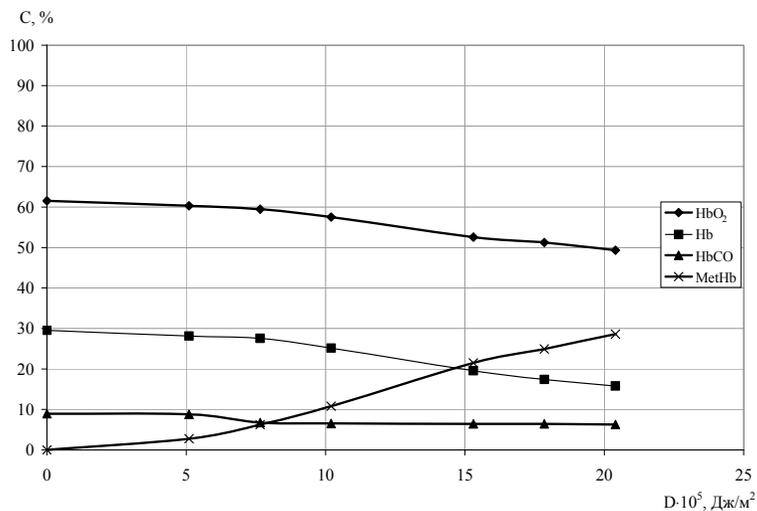


Рис. 1. Зависимость содержания основных производных гемоглобина в цельной крови от экспозиционной дозы УФ излучения

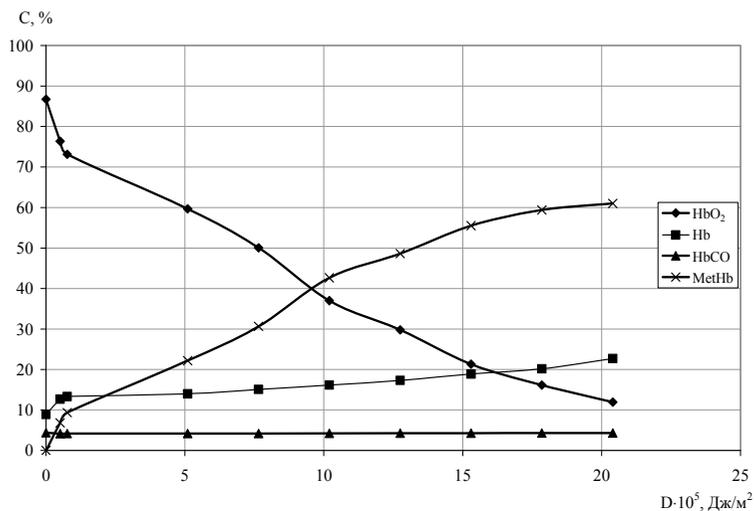


Рис. 2. Зависимость содержания основных производных гемоглобина в растворе крови от экспозиционной дозы УФ излучения

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Тарасьев М.Ю., Рыльков В.В.* Фотопревращения форм гемоглобина в буферных растворах под действием ультрафиолетового и видимого излучений // Биохимия. 1991. Т. 56. № 2. С. 273–280.

[2] *Артюхов В.Г., Калаева Е.А., Путинцева О.В., Преображенский А.П.* Параметры кислородсвязывающей функции гемоглобина человека, модифицированного оксидом углерода и УФ-светом // Радиационная биология. Радиоэкология. 2008. Т. 48. № 2. С. 177–184.

[3] *Артюхов В.Г., Лавриненко И.А., Вашанов Г.А.* О вкладе прямого и косвенного действия УФ-излучения в изменение содержания основных лигандных форм гемоглобина в растворе // Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация. 2003. № 2. С. 95–100.

[4] *Тарасьев М.Ю., Рыльков В.В.* Особенности фотохимических свойств гемоглобина в нативных условиях // Биохимия. 1991. Т. 56. № 7. С. 1296–1303.

[5] *Мосур Е.Ю.* Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ "НемоSpectr" № 2001610571 / Омский государственный университет (Россия). Заявка № 2001610305 от 19.03.2001; зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 17.05.2001.

Дарья Валерьевна Осенник,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, (3812) 64-77-87,
dasha_osennik@mail.ru

Исследование взаимодействия излучения второй гармоники Nd:YAG лазера с длиной волны 532 нм с пленками YBCO

П. Е. Павлюченко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. С. А. Сычев

Целью данной работы являются исследования взаимодействия зеленого лазерного излучения с тонкими пленками YBCO и влияния интенсивности излучения на процесс травления тонкой пленки YBCO для создания тонкопленочных микроструктур методом лазерной литографии, а также исследования, направленные на повышение качества получаемых микроструктур. Источником излучения служил твердотельный лазер Nd:YAG с длиной волны 532 нм.

Ключевые слова: YBCO пленки, Nd:YAG лазер, порог лазерной абляции, микромостики, трансформатор потока, лазерная литография.

В настоящее время необходимость непрерывного повышения степени интеграции и информационной емкости микросхем приводит к разработке новых и усовершенствованию уже существующих технологий изготовления тонкопленочных микроструктур из высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). Поэтому очень важны исследования механизмов формирования тонкопленочных микроструктур ВТСП различными методами, в частности, с применением метода лазерной литографии. Получаемые микроструктуры представляют практический интерес при создании элементов сверхпроводниковой электроники [1; 2].

В данной работе исследовалось взаимодействие зеленого лазерного излучения с пленками YBCO. Источником излучения служил лазер Nd:YAG со следующими характеристиками: длина волны излучения $\lambda = 532$ нм, длительность импульса $\tau = 12$ нс, энергия в импульсе до 60 мДж.

Экспериментально обнаруженный порог лазерной абляции для пленок в широком диапазоне толщин от 30 до 200 нм

оказался равным $7,1 \cdot 10^7$ Вт/см². Это указывает на то, что в указанном диапазоне толщин YBCO пленка имеет достаточно высокий коэффициент поглощения зеленого излучения, следовательно, данное излучение можно применять для формирования микроструктур из YBCO пленок в широком диапазоне толщин.

На рис. 1 представлены микромостик шириной 4 мкм и трансформатор потока размером 5 мм, полученные методом лазерной литографии с длиной волны излучения 532 нм, импульсной энергией 10 мДж, частотой 50 Гц, плотностью мощности излучения $1,7 \cdot 10^8$ Вт/см².

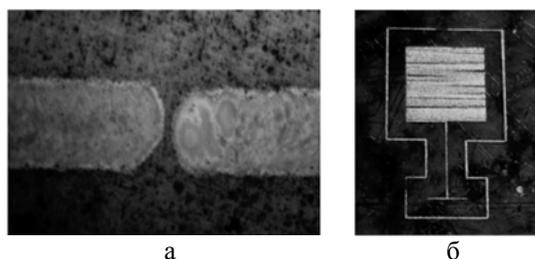


Рис. 1. Микроструктуры на YBCO пленке толщиной 200 нм: а) микромостик, б) трансформатор потока

Зачастую в процессе лазерной абляции вследствие неправильного подбора параметров лазерного излучения, выбора толщины пленки снижается качество получаемых микроструктур. В основном это связано с возникновением разного рода дефектов, продуктов испарения и ореолов на границе лазерного реза. На рис. 2. представлен ореол на границе лазерного реза, приводящий к браку микромостика.

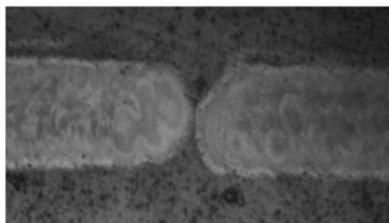


Рис. 2. Ореол на границе реза, приводящий к браку микромостика

Для изучения оптимальных параметров для создания микроструктур на основе YBCO пленок и особенностей прямой и обратной литографии была использована двухсторонняя пленка, выращенная на подложке LaAlO₃. С прямой стороны пленка однородная по толщине, с обратной стороны – неоднородная, напыленная клином.

Для проведения обратной литографии использовалось лазерное излучение с длиной волны 532 нм, импульсной энергией 50 мкДж, частотой 50 Гц, плотностью мощности $1,7 \cdot 10^9$ Вт/см². Микрофотографии обратной литографии YBCO пленки переменной толщины приведены на рис. 3. Диаметр лазерного реза составляет 17 мкм. Лазерный рез обладает высоким качеством, на границе отсутствуют ореолы. График зависимости толщины пленки от расстояния от края подложки представлен на рис. 4.

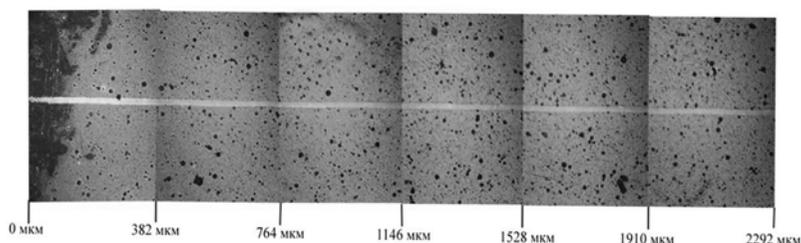


Рис. 3. Микрофотографии обратной литографии YBCO пленки переменной толщины

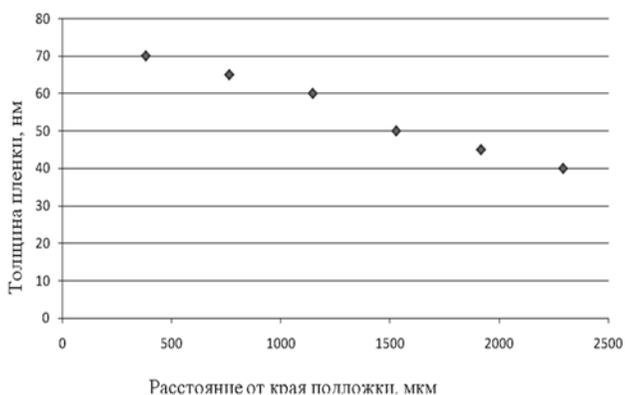


Рис. 4. Зависимость толщины пленки от расстояния от края подложки

Для проведения прямой литографии использовалось лазерное излучение с длиной волны 532 нм, импульсной энергией 50 мкДж, частотой 50 Гц. Для уменьшения диаметра пятна была использована диафрагма с диаметром отверстия 2 мм, что позволило минимизировать ширину лазерного реза с 16 мкм до 9 мкм. Импульсная энергия с использованием диафрагмы составила 29 мкДж. На рис. 5. Приведены микрофотографии прямой литографии YBCO пленки.

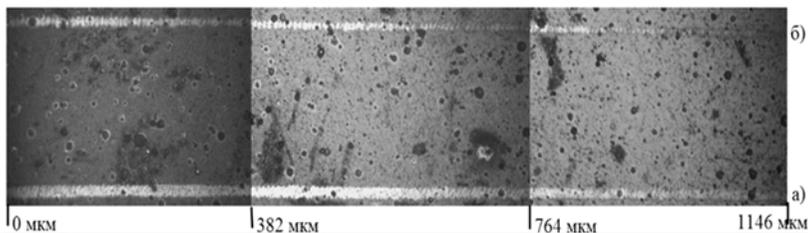


Рис. 5. Микрофотографии прямой литографии YBCO пленки:
а) лазерный рез шириной 16 мкм без использования диафрагмы;
б) лазерный рез шириной 9 мкм с использованием диафрагмы

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Захаров А.В. и др.*// Сверхпроводящие тонкие пленки иттрий-бариевого купрата, выращенные на напряженных подложках // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2008. Т. 3. Вып. 4. С. 25–32.

[2] *Сычев С.А., Серопян Г.М.* Фотолитографический метод создания тонкопленочных ВТСП структур // Ом. гос. ун-т, 2004.

Полина Евгеньевна Павлюченко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, 89609809830,
polina.pavluchenko@mail.ru

Разработка коаксиально-волноводного зондового перехода

И. Е. Пальчик

Научный руководитель: д.т.н. В. А Майстренко

Рассматривается процесс разработки и моделирования конструкции зондового коаксиально-волноводного перехода с использованием ПО Ansoft HFSS. Коаксиально-волноводный переход выполнен из волновода круглого сечения. Зонд имеет форму стержня цилиндрической формы. Расчет геометрических параметров перехода произведен на частоту 10,3 ГГц для моды типа H11. Результаты моделирования коаксиально-волноводного перехода показали: а) переход обеспечивает рабочую полосу частот 10,1–10,55 ГГц, при КСВН ≤ 2 ; б) увеличение широкополосности перехода потребует изменение конструкции зонда.

Ключевые слова: КВП, коаксиально-волноводный переход, возбуждение волновода.

В волноводе круглого сечения (радиусом a) могут распространяться как электрические волны типа E (TM), так и магнитные типа H (TE). Наибольшую критическую длину волны в волноводе круглого сечения (или самую низкую критическую частоту) имеет магнитная волна H11 (рис. 1а). Из электрических волн наиболее низкую частоту имеет волна типа E01 (рис. 1б).

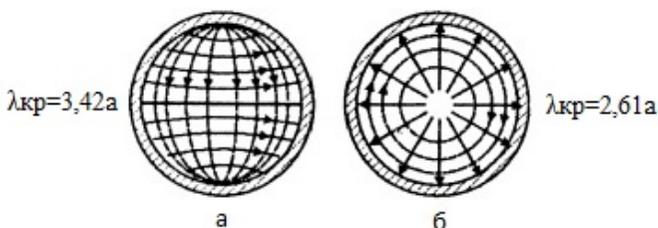


Рис. 1. Структуры поля (моды) в круглых волноводах:
а) H11; б) E01

Значения критических длин волн в волноводе круглого сечения для волн типа Н11 и Е01 приведены на рис. 1. Распространение электромагнитной энергии в волноводе круглого сечения возможно, если его радиус не менее $0,293\lambda$ [2].

Для расчета возьмем моду Н11 ($\lambda_{кр} = 3,42a$). В качестве волновода используется тонкостенная трубка по ГОСТ 11383-75 диаметр которой 20 мм, а толщина стенки 0,7 мм.

Зондовый переход, схема которого показана на рис. 2, по существу представляет собой антенну (передающую или приемную в зависимости от направления распространения волны). Расчет зонда ведется из условия его согласования с коаксиальной линией и волноводом.

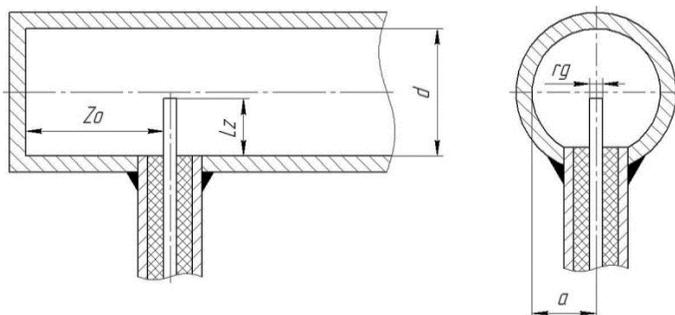


Рис. 2. Схема коаксиально-волноводного перехода

Для нахождения параметров перехода требуется решить следующую систему уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{60\Delta}{(\pi a)^2} \times \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi d}{\lambda}\right)}{1 + \cos\left(\frac{2\pi d}{\lambda}\right)} \times \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi a}{d}\right)}{2} \times \sin\left(\frac{2\pi}{\Delta}\right) \times Z_0 = \rho_k; \\ \lambda \times \frac{60\Delta}{(\pi a)^2} \times \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi d}{\lambda}\right)}{1 + \cos\left(\frac{2\pi d}{\lambda}\right)} \times \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi a}{d}\right)}{2} \times \sin\left(\frac{4\pi Z_0}{\Delta}\right) - \rho_3 \times \frac{\cos\left(\frac{2\pi L_z}{\lambda}\right)}{\sin\left(\frac{2\pi L_z}{\lambda}\right)} = 0, \end{array} \right.$$

где a – радиус волновода; Z_0 определяет положение зонда в волноводе; L_z – длина зонда; ρ_k – волновое сопротивление кабе-

ля (50 Ом); ρ_3 – волновое сопротивление зонда ($\rho_3 = 60 \times \ln(\lambda / (\pi \times rg) - 0,577)$); где rg – радиус зонда) [1].

Так как неизвестных величин три (L_z , a , Z_0), то задав одну из них, например a , находятся две другие. Взяв $a = 9,3$ (мм), получаем $L_z = 4,8$ (мм) и $Z_0 = 19,9$ (мм).

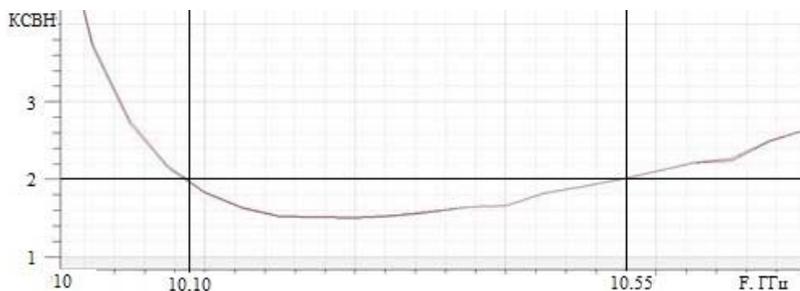


Рис. 3. Характеристика перехода (КСВН от частоты)

Анализируя результаты моделирования коаксиально-волноводного перехода можно сделать вывод о том, что переход обеспечивает рабочую полосу частот 10,1–10,55 ГГц, при $КСВН \leq 2$. Зондовый переход цилиндрической формы узкополосен. Для увеличения полосы зонду придают каплевидную форму или выполняют его в виде несимметричного конического вибратора [1].

ЛИТЕРАТУРА

[1] Жук М. С., Молочков Ю. Б. Проектирование линзовых, сканирующих, широкодиапазонных антенн и фидерных устройств. М.: Энергия, 1973. 440 с.

[2] Фролов О.П., Вальд В.П. Зеркальные антенны для земных станций спутниковой связи. М.: Горячая Линия - Телеком, 2008. 544 с.

Илья Евгеньевич Пальчик,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, 8(950)7824801,
elijahnot@gmail.com

Клиническая дозиметрия в рентгенотерапии

Я. С. Позыгун

Научный руководитель: к.б.н., доцент М. Г. Потуданская

Исследовано распределение поглощенной дозы по глубине тканезквивалентных фантомов из разных материалов вблизи поверхности (до 1 см) при облучении на рентгенотерапевтическом аппарате Xstrahl-300. Измерения выполнены в твердотельных пластинчатых фантомах из материалов ПММА и «Virtual Water» с помощью ионизационной камеры мягкого рентгеновского излучения РТW 23342. Для разных комбинаций режимов работы аппарата и референсного аппликатора получены зависимости поглощенной дозы от глубины фантома и проведено сравнение с имеющимися литературными данными для близких условий облучения.

Ключевые слова: клиническая дозиметрия, близкофокусная рентгенотерапия, распределение поглощенной дозы по глубине, тканезквивалентный фантом, ионизационная камера.

Введение. Короткодистанционная рентгенотерапия является одним из ведущих методов лечения различных новообразований и неопухолевых заболеваний кожи и слизистых [1].

Основное преимущество близкофокусной рентгенотерапии заключается в высоком градиенте дозы и при этом максимальном поглощении излучения на расстояниях до 10 мм от поверхности, в связи с этим одной из главных дозиметрических задач в рентгенотерапии является определение значений глубинной дозы [2].

На сегодняшний день в российских онкологических учреждениях при проведении рентгенотерапии используются методики, разработанные ещё в 50–80-х годах прошлого столетия, которые основаны на дозиметрических данных, полученных в водных фантомах, с использованием специальных дозиметров, разработанных в Московском НИИ Рентгено-радиологии в 70-х годах прошлого столетия, со сцинтилляционными датчиками с точностью измерения $\pm 10\%$ [3].

В связи с этим целью данной работы является проведение измерений глубинных поглощенных доз в тканеэквивалентных твердотельных фантомах, изготовленных из разных материалов, и сравнение полученных данных с табличными данными, традиционно применяемыми для расчета очаговых доз.

Материалы и методы. Измерения проводились на рентгентерапевтическом аппарате Xstrahl-300 (Великобритания) при режимах работы 60 кВ, 80 кВ и 100 кВ с аппликатором, имеющим фокусное расстояние 30 см и диаметр сечения 3 см. Толщина используемых фильтров составляла 1,5; 2,5; 3 мм алюминия.

Для измерений был использован клинический дозиметр «Sun nuclear Electrometer» (США) с плоскопараллельной ионизационной камерой PTW 23342 (Германия), предназначенной для низкоэнергетического рентгеновского излучения, с диаметром собирающего электрода 3 мм и объемом полости 0,02 см³.

Модель тканеэквивалентного пластинчатого представляла собой набор пластин размерами 30х30 см разной толщины. Для сравнения были выбраны пластины из полиметилакрилата со следующим процентным составом (в скобках указана весовая доля элемента в смеси): Н(0,0805), С(0,5998), О(0,3196) и плотностью материала 1,190 г/см³, и пластины «Virtual Water» или «Твердая вода» с процентным составом: Н(0,0770), С(0,6874), О(0,1886), N(0,0227), Cl(0,0013), Са(0,0231) и плотностью материала 1,030 г/см³. Пластины изготавливаются из водозквивалентных материалов и проходят специальную обработку, чтобы исключить наличие примесей и воздуха [4].

Ионизационная камера помещалась в полости соответствующей формы на поверхности адаптерной пластины толщиной 2 см, под ней располагалось несколько сантиметров толщины для обеспечения обратного рассеяния, а над ней добавлялись слои разной толщины размерами 30х30 см с шагом 1 мм. Сверху стопки пластин устанавливался аппликатор рентгеновской трубки аппарата.

Результаты и обсуждения. На рисунках 1–3 приведено сравнение экспериментальных данных, полученных для тканеэквивалентных фантомов из материалов ПММА и «Virtual Water» и значений дозных зависимостей для водного фантома, построенные по клинически используемым табличным данным

(соответствующие размеры поля и шаг по глубине получены интерполяцией). На рисунках видно, что табличные данные отличаются от данных, полученных в ходе эксперимента.

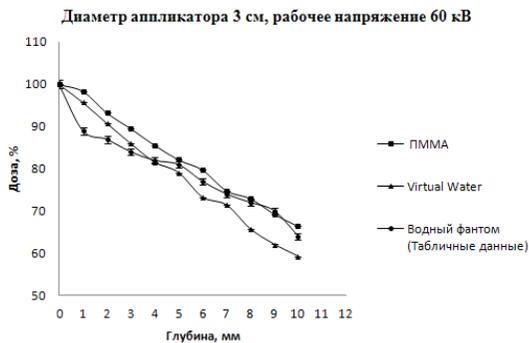


Рис. 1. Зависимость глубинных доз для режима работы 60 кВ

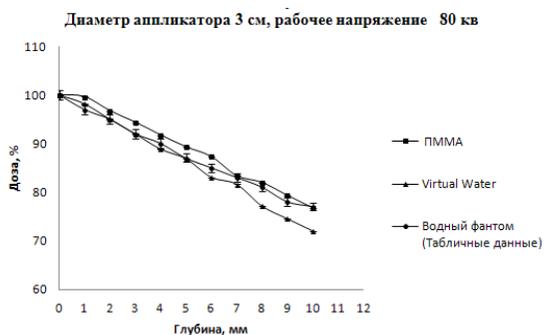


Рис. 2. Зависимость глубинных доз для режима работы 80 кВ

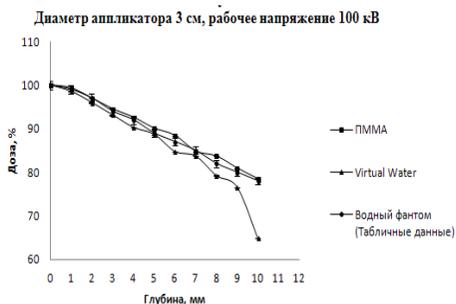


Рис. 3. Зависимость глубинных доз для режима работы 100 кВ

Из графиков видно, что распределения доз различны в зависимости от плотности фантома: значения глубинных доз для фантома «виртуальная вода» ниже, чем для фантома ПММА. Значения дозных зависимостей для водного фантома, построенные по клинически используемым табличным данным, должны быть ниже значений дозных распределений изученных фантомов, так как плотность воды значительно ниже плотности тканеэквивалентных фантомов, но в данном исследовании это не подтверждается. Погрешность табличных значений поглощенных доз в зависимости от глубины лежит в интервале от 2% до 10 % и отличается от погрешности значений поглощенных доз, полученных в данной работе для тканеэквивалентных фантомов из разных материалов, на 5–8 %. Погрешности значений глубинных доз для фантома ПММА и для фантома «Virtual Water» отличаются на 2–8 %, поэтому для большей точности лучше использовать тканеэквивалентный фантом «Virtual Water».

Выводы.

1. В ходе исследования были получены данные по глубинному распределению дозы мягкого рентгеновского излучения в твердотельной тканеэквивалентной среде для различных режимов работы аппарата.

2. Показано, что распределения глубинных доз различны в зависимости от плотности фантома: значения доз для фантома «виртуальная вода» ниже, чем для фантома ПММА.

3. Значения дозных зависимостей для водного фантома, построенные по клинически используемым табличным данным, отличаются от распределений дозы в тканеэквивалентном фантоме на 5–8 %.

4. Необходимо сформировать табличные данные дозных распределений для новых современных аппаратов, которые отличаются комплектацией аппликаторов и режимов работы от рентгенотерапевтических аппаратов прошлого поколения.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Кронгауз А.Н., Петров В.А., Линчевская Г.А., Палладиева Н.М.* Измерение и расчет поглощенных доз при внешнем и внутреннем облучении. М.: Медгиз, 1963. 134 с.

[2] *Кронгауз А.Н., Гусев Н.Г.* Таблицы относительных глубинных доз рентгеновского излучения. М., 1948. 71 с.

[3] *Подляшук Е.Л., Устинова В.Ф., Фролова А.В.* Короткодистанционная рентгенотерапия на аппарате РУМ-21: методические указания. М., 1975. 15 с.

[4] IAEA TRS-398. Absorbed dose determination in external beam radiotherapy. Vienna, 2000.

Янина Станиславовна Позыгун,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет, 644077, г. Омск
77, пр. Мира 55-А, (3812) 647787,
Pozigun.yanina@mail.ru

Пучковые неустойчивости в плазме, помещенной в магнитное поле

А. Л. Романенко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Т. К. Болецкая

Исследуется переход к хаосу в диоде Пирса при наличии внешнего магнитного поля. Рассчитаны напряженность электрического поля на входной сетке и время движения электрона через диод. Подтверждено существование каскада удвоений периода при изменении индукции магнитного поля при постоянном значении параметра Пирса.

Ключевые слова: пучковые неустойчивости в плазме, диод Пирса, магнитное поле, каскад удвоений периода.

Удобной моделью СВЧ генераторов, возбуждаемых электронными пучками, является диод, заполненный плазмой, состоящий из двух металлических сеток, между которыми распространяется электронный пучок. Такая модель называется диодом Пирса. При некоторых значениях параметра Пирса α в этой динамической системе имеет место так называемая пучковая неустойчивость Пирса [1–3].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния на динамику диода Пирса внешнего магнитного поля. Предполагается, что диод представляет собой две бесконечных плоских заземленных сетки, пространство между которыми заполнено плазмой. Ионы неподвижны. Расстояние между электродами L , плотность ионов n_i . Из входного электрода инжектируется пучок моноэнергетических электронов со скоростью \vec{v}_0 , перпендикулярной сеткам, и постоянной концентрацией $n_0 = n_i$. Индукция магнитного поля перпендикулярна \vec{v}_0 . Используется приближение холодной плазмы.

Полная система уравнений, описывающая диод Пирса в гидродинамическом приближении содержит уравнение движения, непрерывности и Пуассона.

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{e}{m} E - \omega_c^2 x, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nv)}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{e(n - n_0)}{\varepsilon_0}. \quad (3)$$

с граничными условиями:

$$\varphi(0) = \varphi(L) = 0, \quad n(0) = n_0, \quad v(0) = v_0, \quad (4)$$

где $e > 0$ – элементарный заряд, m – масса электрона, ε_0 – электрическая постоянная, v и E – проекции скорости и напряженности электрического поля на ось x , перпендикулярную к сеткам, φ – потенциал электрического поля, n – плотность электронов, $\omega_c = eB/m$ – циклотронная частота, B – индукция магнитного поля.

От эйлеровых переменных x и t переходим к переменным t и t_0 . t_0 – момент времени, в который электрон вылетает из входной сетки. Тогда от системы уравнений (1)–(3) можно перейти к уравнению

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \omega^2 x = \omega_p^2 v_0 (t - t_0) - \frac{e}{m} E_0(t), \quad (5)$$

где $\omega^2 = \omega_p^2 + \omega_c^2$, ω_p – плазменная электронная частота, $E_0(t)$ – напряженность электрического поля на входной сетке.

Решая уравнение (5), используя граничные условия (4) и переходя к безразмерным величинам, получаем пару интегральных уравнений, из которых можно определить $E_0(t)$:

$$\tau_L(t) = \alpha B_2^2 - B_1^2 B_2^{-1} \sin(B_2 \tau_L) - B_2 \int_{t - \tau_L(t)}^t E_0(t') \sin[B_2(t - t')] dt',$$

$$\alpha E_0(t) = \frac{\alpha^2}{2} - \frac{1}{2} B_2^{-2} \tau_L^2 - B_1^2 B_2^{-3} \tau_L \sin(B_2 \tau_L) -$$

$$-B_1^2 B_2^{-4} [\cos(B_2 \tau_L) - 1] - B_2^{-1} \int_{t - \tau_L(t)}^t (t - t') E_0(t') \sin[B_2(t - t')] dt',$$

где $\tau_L(t)$ – время, необходимое электрону, чтобы достичь выходного электрода, $\alpha = \omega_p L / v_0$ – параметр Пирса, $B_1 = \omega_c / \omega_p$, $B_2 = \omega / \omega_p = \sqrt{1 + B_1^2}$.

Полученные результаты (см. рис. 1–2) подтверждают существование каскада удвоений периода при изменении индукции магнитного поля при постоянном значении параметра Пирса.

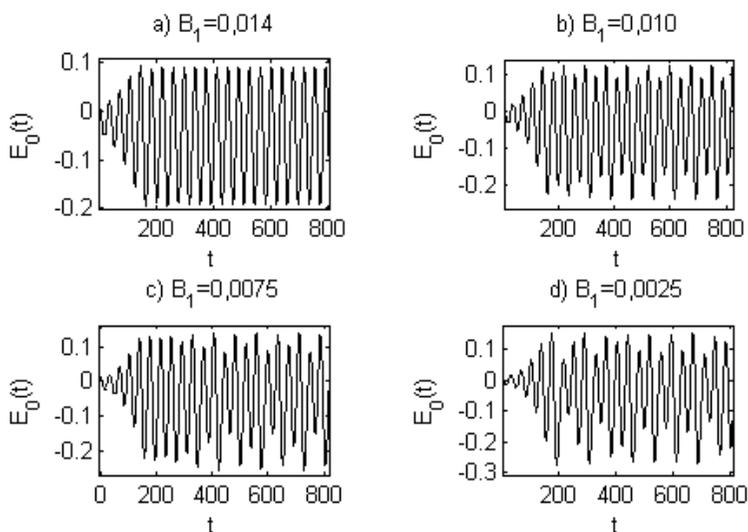


Рис. 1. Графики зависимости E_0 от t при $\alpha = 2,885\pi$ и различных значениях B_1 :

- a) $B_1 = 0,014$, цикл с периодом 1; б) $B_1 = 0,010$, цикл с периодом 2;
 в) $B_1 = 0,0075$, цикл с периодом 4; д) $B_1 = 0,0025$, хаос

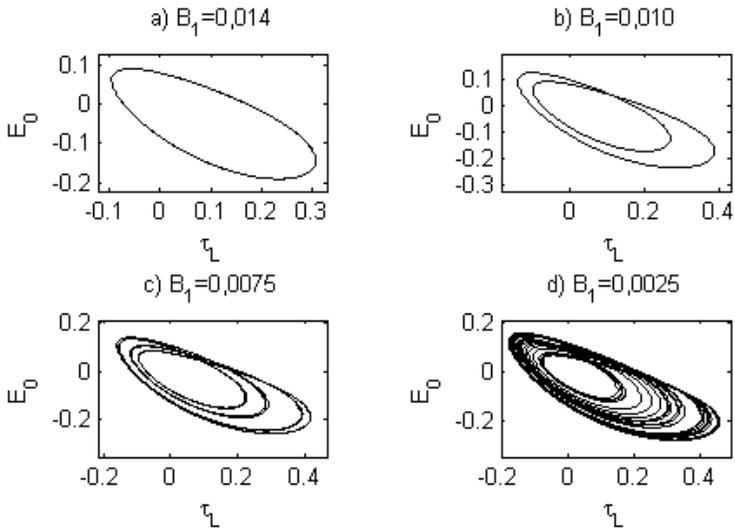


Рис. 2. Графики зависимости E_0 от τ_L при $\alpha = 2,885\pi$ и различных значениях B_1 :

- a) $B_1 = 0,014$, цикл с периодом 1; б) $B_1 = 0,010$, цикл с периодом 2;
 в) $B_1 = 0,0075$, цикл с периодом 4; д) $B_1 = 0,0025$, хаос

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Matsumoto H., Yokoyama H., Summers D.*, Computer simulations of the chaotic dynamics of the Pierce beam-plasma system // *Phys. Plasmas*. 1996. № 3. P. 177–191.

[2] *Krahnstover N., Klinger T., Greiner F., Piel A.*, Controlling chaos in the Pierce diode // *Phys. Lett. A*. 1998. Vol. 239. P. 103–108.

[3] *Godfrey B.B.*, Oscillatory nonlinear electron flow in a Pierce diode // *Phys. Fluids* 30 (5). 1987. P. 1553–1560.

Андрей Леонидович Романенко,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 1 курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)644492,
 Lord.Andre.First@yandex.ru

Оптимизация выбора материала и толщины экрана

А. Л. Шрайбер

Научный руководитель: д.т.н., проф. В. П. Кисмерешкин

Изложен метод расчета оптимальных параметров экранирования элементов схемы, причем эффективность экранирования задается заказчиком, а целевой функцией является стоимость экрана.

На основе экспериментальных данных получены аппроксимации для плотности материала экрана q ($[q] = \frac{\hat{e}\tilde{a}}{\ddot{a}i^3}$) [1; 2]:

$$q = 4,9 + 2,43 \arctg(\mu - 3,2), \quad (1)$$

где μ – относительная магнитная проницаемость среды и стоимости одного килограмма материала экрана (руб./кг) c :

$$c = 1,02\mu + 276. \quad (2)$$

Вес экрана P :

$$P = \frac{4}{3}\pi[(r+t)^3 - r^3]q = \frac{4}{3}\pi[3r^2t + 3rt^2 + t^3],$$

где t – толщина экрана, r – радиус сферы.

Пусть F – стоимость экрана (руб.) – целевая функция:

$$F = P \cdot c. \quad (3)$$

Задача состоит в минимизации F по двум параметрам – t и μ :

$$F \rightarrow \min_{t, \mu}. \quad (4)$$

Ограничение $1 + \frac{0,66\mu t}{r} = a$ – задаваемый заказчиком ко-

эффициент (эффективность экранирования) [3].

Применяя метод множителей Лагранжа, будем искать безусловный минимум функции Лагранжа L [4]:

$$L = F + \lambda \left(a - 1 - \frac{0,66\mu t}{r} \right), \quad (5)$$

где λ – множитель Лагранжа.

$$L'_i = \frac{4}{3} \pi [3r^2 + 6rt + 3t^2] \cdot c \cdot q + \lambda \left(-\frac{0,66\mu}{r} \right) = 0. \quad (6)$$

$$L'_\mu = \frac{4}{3} \pi [3r^2t + 3rt^2 + t^3] \cdot \left[1,02 \cdot q + \frac{2,43 \cdot c}{1 + (\mu - 3,2)^2} \right] - \frac{0,66\lambda t}{r} = 0.$$

Задача сводится к решению системы из пяти уравнений с пятью неизвестными:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{4}{3} \pi [3r^2 + 6rt + 3t^2] \cdot c \cdot q = \frac{0,66\lambda\mu}{r}, \\ \pi [3r^2t + 3rt^2 + t^3] \cdot \left[1,02 \cdot q + \frac{c \cdot 2,43}{1 + (\mu - 3,2)^2} \right] = \lambda \frac{0,99t}{r}, \\ 1 + \frac{0,66\mu t}{r} = a, \\ q = 4,9 + 2,43 \operatorname{arctg}(\mu - 3,2), \\ c = 1,02\mu + 276. \end{array} \right.$$

Для расчёта можно принимать $a = 10, 50, 100$.

Решение находится с помощью MathCAD; при $a = 10$ оптимальные значения равны: $\mu_{\text{опт}} = 520$, $t_{\text{опт}} = 1,5$ мм.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Higgins J.A.* Modelling the influence of carrier profiles on MEFSET characteristics // IEEE Trans. 2009. № 6. P. 1066–1073.

[2] *Dimmey L.J., Jones P.L., Cocks H.F.* Magnetic field enhancement of amorphous silicon deposition rates // Thin Solid Films. 2010. № 1. P. 13–15.

[3] *Шануро Д.Н.* Основы теории электромагнитного экранирования. Л.: Энергия, 1975. С. 41.

[4] *Taxa X.* Введение в исследование операций. М.: Мир, 1985. Т. 2. С. 386.

Анна Леонидовна Шрайбер,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644292,
ann-schr@mail.ru

Нековалентная иммобилизация транспортных белков крови на поверхность углеродных нанотрубок

К. А. Юшенков

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. Н. А. Давлеткильдеев

Представлены результаты исследования прямой нековалентной иммобилизации молекул гемоглобина на азот-легированные углеродные нанотрубки.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, гемоглобин, нековалентная иммобилизация, атомно-силовая микроскопия

Гибридные наноматериалы на основе углеродных нанотрубок (УНТ) и молекул белков имеют перспективу применения в биосенсорах, биотопливных ячейках, системах доставки лекарств и биомедицинской диагностики. Формирование таких материалов происходит посредством закрепления молекул на поверхности УНТ с использованием методов ковалентной и нековалентной иммобилизации. Нековалентная иммобилизация молекул имеет преимущества перед ковалентной, так как не приводит к нарушению конформационной структуры молекул и изменению электронной системы графеновых слоев УНТ. Недостатком данных методов является нестабильность закрепления молекул на УНТ и их потеря в процессе эксплуатации структур [1].

Связывание основным транспортным белком крови – гемоглобином (Hb) кислорода, моноокисей азота и углерода приводит к изменению его электрических и магнитных свойств, что позволяет использовать Hb в качестве активного компонента биосенсоров. В настоящей работе исследуется возможность стабильного закрепления молекул Hb посредством прямой физической адсорбции на поверхности УНТ, легированных азотом.

Водные растворы Hb были приготовлены путем осмотического гемолиза эритроцитов человеческой крови. Эритроциты отделялись центрифугированием от плазмы крови и трехкратно отмывались в изотоническом растворе NaCl. Гемолиз

эритроцитов осуществлялся добавлением равного объема дистиллированной воды. Полученный гемолизат центрифугировали для отделения гемоглобина от стромы эритроцитов. Надосадочная фракция представляла собой водный раствор Hb с концентрацией 75 мг/мл и pH = 6,1. Для определения диаметра молекул Hb производилось их осаждение из раствора на свеже-расщепленную слюду.

Слои УНТ синтезировались методом CVD на подложках SiO₂/Si в результате пиролиза паров ацетонитрила при 850°C с добавлением ферроцена в качестве катализатора. Согласно данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии концентрация азота в слоях УНТ составила 4 ат. %.

Слои УНТ выдерживались в дистиллированной воде и водном растворе гемоглобина в течение 1 часа, затем промывались и высушивались. Образцы для исследования готовились путем осаждения монослоя УНТ на подложку SiO₂/Si из суспензии, полученной путем ультразвукового диспергирования слоев УНТ в дистиллированной воде в течение 20 минут. Полученные образцы исследовались методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) с помощью сканирующего зондового микроскопа SOLVER PRO (NT-MDT).

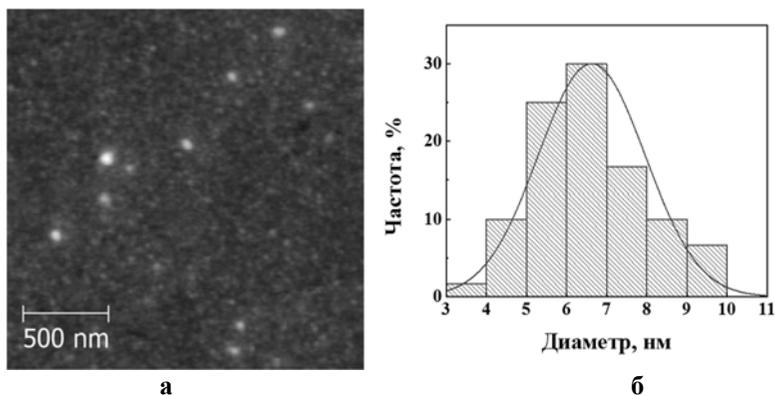


Рис. 1. АСМ изображение молекул Hb на слюде (а) и распределение молекул Hb по диаметрам (б), полученное на основе измерения высот их АСМ изображений

Анализ высот АСМ изображений молекул Hb, подобных рис. 1а, показал, что их средний диаметр составил $6,7 \pm 1,3$ нм (рис. 1б), что хорошо согласуется с литературными данными. Анализ высот АСМ изображений УНТ показал, что их внешний диаметр находится в диапазоне 5–25 нм. Для УНТ, экспонированных в дистиллированной воде, характерными являются однородный контраст изображения, четкие ровные контуры нанотрубок. Для УНТ, выдержанных в растворе Hb, подобной однородности контуров и контраста изображений не наблюдается из-за наличия рельефных образований вдоль поверхности УНТ. На рис. 2 представлено АСМ изображение тонкой (диаметром 6 нм), изогнутой нанотрубки, покрытой отдельными хорошо различимыми частицами и их агрегатами. О том, что частицы представляют собой молекулы гемоглобина, свидетельствуют их морфологические характеристики. Высота частиц над подложкой и открытыми участками трубки составляет в среднем $7,2 \pm 2,3$ нм, что соответствует диаметру молекул Hb. Размытость изображения частиц может быть связана с распаковкой глобулярной структуры молекулы при ультразвуковой обработке, а также со сдвиговой деформацией молекул зондом АСМ при сканировании. Наиболее четкое изображение отдельных молекул можно видеть в правой части рис. 2, там, где агрегат молекул частично касается подложки и, поэтому, незначительно деформировался в процессе сканирования.

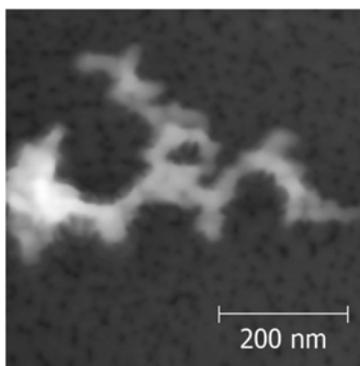


Рис. 2. АСМ изображение изогнутой УНТ с иммобилизованными на ней молекулами гемоглобина

Согласно принятым представлениям, прямая физическая адсорбция белков на поверхности УНТ может определяться следующими нековалентными взаимодействиями: π - π стекингом, гидрофобными и электростатическими [1]. Вклад гидрофобного взаимодействия, рассматриваемого многими авторами как доминирующий тип нековалентного взаимодействия УНТ с белками, в случае легированных УНТ может существенно снижаться вследствие уменьшения их гидрофобности. Использование в эксперименте легированных УНТ может существенно увеличить вклад электростатического взаимодействия. Атом азота, замещая атом углерода в стенке нанотрубки, формирует квазисвязанное донорное состояние, которое локально увеличивает электронную плотность и создает на поверхности УНТ аналог отрицательно заряженной функциональной группы [2]. При $\text{pH} = 6,1$ молекулы Hb в растворе имеют слабый положительный заряд (pI для Hb равна 6,8–7). Электростатическое взаимодействие положительно заряженной молекулы белка с отрицательно заряженными участками локализации атома азота в стенке УНТ может приводить к эффективному связыванию гемоглобина с УНТ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Saifuddin N., Raziah A.Z., Junizah A.R.* Carbon Nanotubes: A Review on Structure and Their Interaction with Proteins // *Journal of Chemistry*. 2013. V. 2013. Article ID 676815.

[2] *Zhang R., Li L., Chen L., Zhang G., Shi K. J.* N-doped carbon nanotubes synthesized in high yield and decorated with CeO_2 and SnO_2 nanoparticles // *Journal of Alloys and Compounds*. 2011. V. 509. P. 8620.

Константин Андреевич Юшенков,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55А, (3812) 224972,
improvizrus@mail.ru

Секция
«СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
ОБРАЗОВАНИЯ»

Развитие памяти у студентов младших курсов на материале физики

Я. Р. Кутафина

Научный руководитель: д.п.н., доц. М. П. Ланкина

Излагаются результаты диагностики различных видов памяти у студентов первого курса физического факультета. Показано, что у них наиболее слабо развита смысловая память. Предложены приемы развития памяти у студентов в процессе обучения общему курсу физики.

Ключевые слова: смысловая память, диагностика, система повторения учебного материала по физике.

Сегодня проблема развития памяти актуальна как никогда. Память имеет очень большое значение в жизни и деятельности человека. Особо важную роль память играет в учебной работе, в процессе которой учащиеся должны усваивать и прочно запоминать большое количество учебного материала. Поэтому педагогически важно развивать у учащихся хорошую память. Однако исследования показывают, что у многих студентов очень плохо развита память: они с трудом осваивают теоретический материал, не могут осмыслить его и быстро забыть. Поэтому цель нашей работы – выявить возможности развития различных видов памяти у студентов непосредственно в процессе обучения физике.

Объект исследования: процесс обучения физике студентов младших курсов. Предмет исследования: развитие памяти студентов младших курсов на материале физики.

Задачи работы:

1. Определить критерии оценки развития памяти у студентов младших курсов.
2. Выявить методику определения уровня памяти и провести тестирование в группе.
3. Разработать систему повторения учебного материала по общему курсу физики, способствующую развитию памяти.

В зависимости от приемов заучивания различают механическую и логическую память. Особенностью *механической памяти* является запоминание учебного материала в той его форме, в которой он воспринимается. *Логическая память* направлена на запоминание не внешней формы, а самого смысла изучаемого материала. Она предполагает предварительную работу мышления. По самой распространенной классификации существует три типа памяти: зрительная, слуховая и смешанная. *Зрительная память* – способность человека воспринимать и удерживать в памяти зрительные образы, воспроизводить их в своём сознании. *Слуховая память* – одна из разновидностей образной памяти, связанная с сохранением, воспроизведением слуховых образов. У людей со *смешанным типом* памяти не наблюдается преимущественного развития какого-либо одного вида памяти. Эти люди в своей практической деятельности в равной степени пользуются несколькими видами памяти.

Для изучения развития памяти у студентов младших курсов воспользуемся несколькими методиками:

1. Тест «Цезарь» – для диагностики объема оперативной памяти [1].
2. Методика «10 слов» – для изучения слуховой и зрительной памяти [2].
3. Методика «Пары слов» – для определения, память какого вида развита лучше – логическая или механическая [3].
4. Методика для определения объема смысловой памяти [4].

Все тесты построены на материале общего характера.

На констатирующем этапе нами проведены 3 серии эксперимента с группой из 19 студентов первого курса физического факультета. В каждой серии используются различные тесты, участвуют одни и те же студенты.

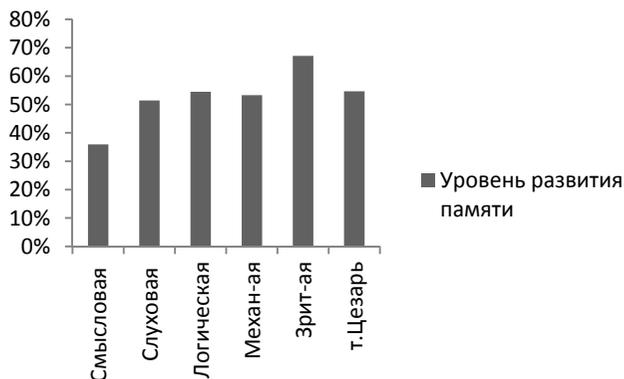
Первая серия. Изучение логической, механической и смысловой памяти.

В качестве примера опишем методику диагностики смысловой памяти. Экспериментатор читает текст, в котором содержится 20 смысловых единиц (фрагментов содержания), все они находятся в некоторой логической связи. Студенты должны

внимательно прослушать текст, а затем в течение пяти минут записать его содержание. Главное – передать смысл. Слова можно сокращать. Объем смысловой памяти равен количеству воспроизведенных смысловых единиц.

Вторая серия. Изучение слуховой и зрительной памяти.

Третья серия. Определение объема оперативной памяти.



Данная диаграмма показывает результаты констатирующего этапа нашего эксперимента – уровень развития разных видов памяти у испытуемых. Оказалось, что наиболее высоко развита зрительная память. Оперативная, механическая и логическая память развита примерно на одном уровне. Смысловая память находится на более низком уровне развития.

Учитывая, что у испытуемых уровень развития зрительной памяти достаточно высок, в рамках учебного процесса мы решили провести поисковый этап эксперимента, который заключался в следующем – студентам были предложены учебные тексты с контрольными вопросами по ранее изученным темам: «Первое начало термодинамики», «Энтропия идеального газа», «Коэффициент полезного действия цикла Карно для идеального газа», которые можно было использовать при выполнении самостоятельных и контрольных работ. Раздаточный материал по каждой последующей теме включал содержание предыдущих тем, таким образом, происходило накопительное повторение теоретического материала перед выполнением контрольной ра-

боты. Предварительные результаты показали, что только 16 % студентов смогли улучшить свои результаты контрольной работы, используя раздаточный материал. У остальных 84 % результат не изменился.

На основе проведенного исследования можно сделать вывод, что студенты возрастной группы 18–20 лет имеют наиболее развитую зрительную память. Данный вывод основан на результатах проведенного тестирования по методике «10-ти слов». Наихудший результат получен при выполнении теста на определение объема смысловой памяти по методике восстановления парных слов одной смысловой группы. На основе полученного результата можно сделать вывод о наименьшей степени развития смыслового аспекта памяти. Развитие смысловой памяти, безусловно, требует дальнейшего детального изучения, а также выявления новых методик формирования смысловой памяти как условия развития мыслительных способностей студентов в целом.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Форма А*. [Электронный ресурс] / А. Я. Психология (azps.ru): [web-сайт]. URL: http://azps.ru/tests/kit/caesar_a.html (дата обращения: 22.05.2014).

[2] Заучивание 10 слов (А.Р. Лурия) / Альманах психологических тестов. М., 1995. С. 92–94.

[3] *Форма А* [Электронный ресурс] / А. Я. Психология (azps.ru): [web-сайт]. URL: http://azps.ru/tests/tests3_slojnan.html (дата обращения: 22.05.2014).

[4] Методика определения кратковременной памяти // Альманах психологических тестов. М., 1995. С. 88.

Яна Рубеновна Кутафина,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
студентка 4 курса, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812) 647787,
ahyana789@gmail.com

Формирование рефлексии школьников в ходе научно-исследовательской деятельности

А. В. Москвитин

Научный руководитель: д.п.н., доц. М. П. Ланкина

Рассматривается влияние участия школьников во внеурочной научно-исследовательской деятельности на становление их рефлексии и критического мышления. Приводятся статистические данные.

Ключевые слова: рефлексия, критическое мышление, научно-исследовательская деятельность.

ФГОС общего образования обозначил новую концепцию развития образовательного процесса, в которой на первое место ставится всестороннее развитие личности ученика. Современная система образования призвана помочь обучающимся «обрести себя», выбрать и выстроить собственный мир ценностей, овладеть творческими способами решения как учебных, научных, так и жизненных проблем.

Неотъемлемой частью образовательного процесса в школе является внеурочная деятельность, которая направлена на достижение личностных, метапредметных и предметных результатов освоения основной образовательной программы различных ступеней образования. Одной из форм познавательной и проектной внеурочной деятельности является участие обучающихся в работе научного общества учащихся (НОУ). В процессе участия в НОУ школьники решают исследовательские задачи, которые предполагают работу с новыми или мало изученными на уроках объектами исследования. При решении таких задач обучающийся накапливает знания и понятия по дисциплинам, смежным с областью исследования, определяет условия применимости различных концепций и законов [3].

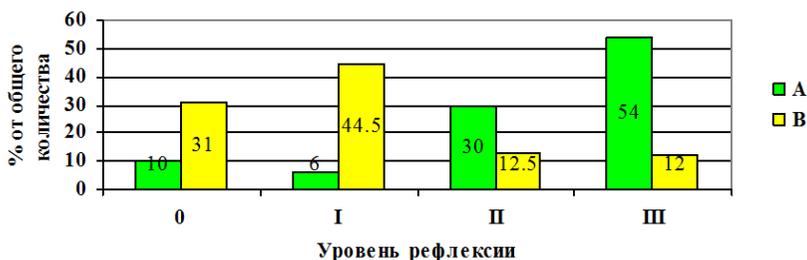
ФГОС предъявляет высокие требования не только к структуре и содержанию образовательных программ, целей и задач образования, но и предполагает перенос акцентов с информационной сферы деятельности обучающихся на смыс-

лопоисковую, для которой характерно умение осознавать постигаемую действительность, ее ценности, искать причины и смысл происходящего вокруг, иначе говоря, умение критически мыслить – *рефлексировать*. Дисциплинами, обладающими как наибольшим потенциалом для развития критического мышления, так и для проведения научно-исследовательских работ, являются дисциплины естественнонаучного цикла, в частности, физика. Изучение физики предполагает высокий уровень как предметных знаний, так и умений и навыков не только найти нужную информацию из большого объема данных, но и грамотно ее проинтерпретировать, проанализировать и сделать соответствующие выводы. Нами была разработана система уровней сформированности рефлексии, дополненная данными из диссертационного исследования Н.П. Микушевой [1]. Данная система включает 4 уровня развития рефлексии: от нулевого – отсутствия рефлексии до высокого – осознания своих учебных действий на материале любой дисциплины [2].

Ежегодно в г. Омске проводится конференция школьников, занимающихся учебно-исследовательской деятельностью, «Шаги в науку». Данная конференция включает в себя два этапа: I этап – конференция в образовательном учреждении, II этап – муниципальный, состоит из двух туров (заочного и очного). В 2013–2014 учебном году для участия в заочном туре II этапа конференции в секцию «Физика» поступило 50 работ. Каждая работа оценивалась в баллах тремя членами жюри. Кроме того, для каждого участника (или группы участников) был определен уровень сформированности рефлексии в соответствии с системой уровней [2]. Оценка уровня сформированности рефлексии показала, что лишь 10% респондентов характеризуются нулевым уровнем сформированности рефлексии, 6% – низким уровнем (экстенсивная рефлексия), 30% – средним уровнем (интенсивная рефлексия) и 54% – высшим уровнем сформированности рефлексии (конструктивная рефлексия).

На протяжении многих лет лаборатория методики преподавания физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского исследует различные психолого-педагогические характеристики школьников и студентов, влияющие на успешное освоение обучающимися различных образовательных программ. Мониторинг абитуриен-

тов 2013–2014 учебного года показал, что 31 % респондентов характеризуются нулевым уровнем сформированности рефлексии, 44,5 % – низким уровнем, 12,5 % – средним уровнем и лишь 12 % – высшим уровнем сформированности рефлексии (общее количество испытуемых 124 человека). Данная статистика показывает, что обучающиеся, проявляющие интерес к научно-исследовательской и проектной деятельности в среднем обладают лучшим развитием критического мышления и, соответственно, способностью к успешному освоению образовательных программ, осознанному выбору дальнейшей профессии и успешной реализации в будущей деятельности по сравнению со среднестатистическими учащимися школ.



Распределение обучающихся
(в процентах от общего количества испытуемых)
по уровням сформированности рефлексии:

- А – обучающиеся, занимающиеся научно-исследовательской и проектной деятельностью;
- В – обучающиеся, не заинтересованные в научно-исследовательской деятельности

Для оценки связи между уровнем сформированности рефлексии и баллами, полученными за научно-исследовательскую работу в заочном туре II этапа конференции, использовался коэффициент взаимной сопряженности Пирсона P . Его значение оказалось равным 0,80, что свидетельствует о высокой степени связи между этими двумя параметрами. К участию в очном туре II этапа в соответствии с количеством набранных в заочном туре баллами были допущены работы участников конференций, характеризующихся высокими уровнями сформированности ре-

флексии (14 % характеризуются II уровнем, 86 % – III уровнем сформированности рефлексии).

Для определения лауреатов конференции учитывались баллы заочного и очного туров II этапа. Лауреатами конференции стали участники, набравшие высокие баллы по результатам заочного и очного туров II этапа и характеризующиеся высокими уровнями сформированности рефлексии (12,5 % – II уровень сформированности рефлексии, 87,5 % – III уровень сформированности рефлексии).

Таким образом, можно сделать вывод о положительном влиянии участия в научно-исследовательской и проектной внеурочной деятельности на формирование научного критического мышления школьников. Обучающиеся, обладающие высшими уровнями сформированности рефлексии, являются более интеллектуально и личностно развитыми индивидуумами, имеющими потенциально большие возможности для достижения успеха в учебной, профессиональной и внепрофессиональной деятельности.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Микушева Н.П.* Задачи «на многозначность» как средство развития рефлексии учащихся при обучении геометрии: автореф. дис. ... канд. пед. наук. СПб., 2005. 20 с.

[2] *Москвитин А.В.* Научно-исследовательская деятельность школьников как условие становления их рефлексии // Психодидактика среднего и высшего образования. Часть 2. Материалы десятой юбилейной международной научно-практической конференции (Барнаул, 15–17 апреля 2014 г). Барнаул: АлтГПА, 2014. С. 74–80.

[3] *Lankina M.P.* One educational-research problem for students of physics // Вестник Ом. ун-та. 1998. № 1. С. 26–28.

Александр Владимирович Москвитин,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
аспирант 1 года обучения, физический факультет,
644077, г. Омск 77, пр. Мира 55-А, (3812)647787,
alexmoskwitin@gmail.com

Научное издание

ФМ ОмГУ 2014

Сборник статей
II Региональной конференции
магистрантов, аспирантов
и молодых ученых
по физике и математике

Издается в соответствии с оригиналом,
предоставленным оргкомитетом конференции,
при участии Издательства ОмГУ

Подписано в печать 23.07.2014. Формат бумаги 60x84 1/16.
Печ.л. 10,5. Усл.печ.л. 9,8. Уч.-изд.л. 9,0. Тираж 80 экз. Заказ 136.

*Издательство Омского государственного университета
644077, Омск-77, пр. Мира, 55а
Отпечатано на полиграфической базе ОмГУ
644077, Омск-77, пр. Мира, 55а*