

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 2015

СБОРНИК СТАТЕЙ
III РЕГИОНАЛЬНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МАГИСТРАНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
ПО ФИЗИКЕ И МАТЕМАТИКЕ



2015

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 2015** : сборник статей III региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике и математике. – Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2015. – 112 с.

ISBN 978-5-7779-1894-9

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

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

УДК 53+51
ББК 22.3я43+22.1я43

ISBN 978-5-7779-1894-9

© Оформление. ФГБОУ ВПО
«ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», 2015

СОДЕРЖАНИЕ

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

Секция

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

<i>Барауля О. А.</i> Решение одной задачи формирования учебных групп с учетом международного фактора	7
<i>Боброва Е. А.</i> О задаче минимизации времени обработки идентичных деталей	10
<i>Веремчук Н. С.</i> Экспериментальное исследование алгоритмов поиска приближенного решения одной задачи Вебера на линии	14
<i>Гнусарев А. Ю.</i> Сравнительный анализ двух алгоритмов локального поиска для конкурентной задачи размещения и проектирования	17
<i>Пирогов А. Ю.</i> Алгоритм динамического программирования для решения одной задачи календарного планирования	21
<i>Тиховская С. В.</i> Двумерный аналог интерполяционной формулы для функции с погранслойной составляющей	25
<i>Яклюшин А. В.</i> Анализ в среднем множества допустимых решений одного класса обобщенных задач об упаковке множества	29

Секция

ПРИКЛАДНАЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

<i>Аяганова К.О.</i> Исследование влияния окисления поверхности на адгезионные свойства металлов	33
<i>Дудник В. В.</i> Нули статистической суммы и критическое поведение трехмерной неупорядоченной модели Изинга	37

Евдокимов Д. В. Оценка производительности современных вычислительных устройств и технологий параллельных вычислений в задачах моделирования фазовых превращений	41
Ежков П. Ю. Исследование влияния шероховатости поверхностей на магнитные и энергетические характеристики адсорбированных ферромагнитных плёнок.....	45
Елин А. С. Исследование эффектов памяти в неравновесном критическом поведении ультратонких магнитных пленок	50
Лаврухин И. В. Нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в магнитных системах в режиме неравновесной критической динамики	55
Маляренко П. Н. Численное исследование эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга.....	60
Пилипенко Д. В. Исследование областей существования ультратонких пленок ферромагнитных двухкомпонентных сплавов с неоднородным распределением намагниченности в зависимости от материала подложки.....	66

Секция

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

Гибашева И. В. Изучение температурных распределений биологических объектов, полученных тепловизорами ТКВр-ИФП СВИТ и ПергаМед	70
Драчёв К. А. Температурные распределения в точках акупунктуры меридиана органов дыхания и их окрестностях у условно здоровых людей молодого возраста.....	74
Клепикова Ю. Е. Исследование морфологии и наноструктуры электропроводящих марок технического углерода методом просвечивающей электронной микроскопии	79

Морозов И. В. Изучение влияния матрицы на интенсивность линий элементов при атомном эмиссионном спектральном анализе	83
Носковец Д. Ю. Моделирование и дозиметрическое планирование радиойодтерапии диффузного токсического зоба	87
Обрезанова И. П. Структурно-фазовый анализ гидроксилapatита, синтезированного из плазмы крови.....	91
Пирогова А. А. Получение и исследование золь-гель композита SnO ₂ /SiO ₂	95
Руренко Д. Д. Исследование воздействия мощного ионного пучка на двухслойные тонкопленочные металлические покрытия.....	99
Черноок Т. Н. Исследование морфологии и фазового состава костной ткани человека	104
Юшенков К. А. Формирование и исследование бионанокompозита на основе гемоглобина и углеродных нанотрубок	108

Организационный комитет

<i>Колоколов Александр Александрович</i>	д-р физ.-мат. наук, проф., зав. лабораторией дискретной оптимизации Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, заведующий кафедрой прикладной и вычислительной математики ОмГУ
<i>Прудников Владимир Васильевич</i>	д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий кафедрой теоретической физики ОмГУ
<i>Потуданская Мария Геннадьевна</i>	канд. биол. наук, доц., декан физического факультета ОмГУ
<i>Серолян Геннадий Михайлович</i>	канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры общей физики ОмГУ
<i>Леванова Татьяна Валентиновна</i>	канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ
<i>Романова Анна Анатольевна</i>	канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ

Секция
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

**Решение одной задачи формирования учебных групп
с учетом международного фактора**

О. А. Барауля

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, проф. А. А. Колоколов

В данной работе исследуется и решается задача формирования учебных групп для Омского автобронетанкового инженерного института с целью повышения эффективности процесса обучения. Построена математическая модель с учетом ряда факторов, в том числе международного. На основе предложенной модели проведены тестовые расчеты.

Вопросы формирования учебных групп являются весьма актуальными для многих учебных заведений. Сложность подобных задач заключается в том, что при проектировании групп необходимо учитывать несколько факторов, в частности уровень подготовки учащихся, размер групп, возможность конфликтов между студентами [1–3]. В вузах, в которых обучаются представители разных стран, особое значение приобретает международный фактор.

В данной работе предлагается подход к решению одной задачи формирования учебных групп в Омском автобронетанковом инженерном институте. Требуется распределить курсантов по

группам с целью повышения их однородности по таким показателям, как социально-экономическое развитие страны и уровень знания русского языка курсантом. При этом важно учитывать совместимость вероисповеданий студентов, распределенных в одну группу.

Для построения модели целочисленного линейного программирования, описывающей поставленную задачу, введем следующие обозначения. Пусть b_{in} – целочисленное значение признака n для учащегося i , $i \in I$, $n \in N$, α и β – нижняя и верхняя границы количества обучающихся в каждой группе. Множество E содержит все пары курсантов, которые не должны обучаться в одной группе. Введем переменные x_{ij} : $x_{ij} = 1$, если курсант i зачислен в группу j , и 0 в противном случае, $i \in I$, $j \in J$, а также переменные y_{ikj} , принимающие значение 1, если курсанты i и k зачислены в группу j , и 0 в противном случае, $i, k \in I$, $j \in J$. Пусть δ – уровень неоднородности. Тогда модель целочисленного линейного программирования будет выглядеть следующим образом:

$$\delta \rightarrow \min \quad (1)$$

при условиях

$$-\delta \leq (b_{in} - b_{kn})y_{ikj} \leq \delta \quad i, k \in I, n \in N, j \in J \quad (2)$$

$$x_{ij} + x_{kj} - 1 \leq y_{ikj} \leq \frac{x_{ij} + x_{kj}}{2} \quad i, k \in I, j \in J \quad (3)$$

$$\sum_{j \in J} x_{ij} = 1, \quad i \in I \quad (4)$$

$$\alpha \leq \sum_{i \in I} x_{ij} \leq \beta, \quad j \in J \quad (5)$$

$$x_{ij} + x_{kj} \leq 1, \quad (i, k) \in E, j \in J \quad (6)$$

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

$$y_{ikj} \in \{0, 1\}, \quad i, k \in I, j \in J \quad (8)$$

Условия (2) означают, что различия по всем признакам между курсантами, распределенными в одну группу, не будут превышать δ . Ограничения (3) определяют связь переменных x_{ij} и y_{ikj} .

Уравнения (4) гарантируют, что каждый студент будет определен в одну группу, неравенства (5) задают границы для количества учащихся в каждой группе. Наконец, система (6) обеспечивает обучение в разных группах пар студентов из множества E.

На основе построенной модели были проведены расчеты для тестовой задачи в системе моделирования GAMS[4]. Ведется подготовка данных для дальнейших исследований.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Афанасьева Л.Д., Колоколов А.А.* Исследование и решение одной задачи формирования производственных групп // Вестник УГАТУ. 2013. Т. 13. № 5 (58). С. 20–25.

[2] *Колоколов А.А., Соловьев А.А., Федоров А.Э., Дьякова В.И.* Проектирование учебного процесса в военном вузе с использованием моделей и методов дискретной оптимизации. Алматы: НЦ НТИ. С. 436–438.

[3] *Burkard R.E., Dell'Amico M., Martello S.* Assignment problems. Philadelphia: SIAM, 2009.

[4] GAMS Development Corporation: Website. URL: <http://www.gams.com>.

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

О задаче минимизации времени обработки идентичных деталей

Е. А. Боброва

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. В. В. Сервах

В работе исследуется сложность задачи обработки партии идентичных деталей с критерием минимизации общего времени обработки всех деталей. Доказана NP-трудность задачи в случае наличия четырех и более универсальных рабочих станций. Показана полиномиальная разрешимость задачи в случае использования одной универсальной рабочей станции.

Ключевые слова: идентичные детали, сложный технологический маршрут.

В работе рассматривается задача обработки идентичных деталей. На производстве в таком случае обычно используется конвейер, и за полиномиальное время можно построить расписание, минимизирующее общее время обработки всех деталей. Однако в современных условиях необходимо часто обновлять ассортимент производимой продукции. При этом экономически нецелесообразно при каждом изменении переоборудовать производственную линию, так как это требует больших финансовых и временных ресурсов. Вместо этого можно использовать более универсальные рабочие станции, способные выполнять множество различных операций. При этом деталь может несколько раз посетить каждую из универсальных рабочих станций для выполнения различных операций. В этом случае говорим, что деталь имеет сложный технологический маршрут.

Опишем математическую постановку задачи. Рассматривается задача обработки партии из N идентичных деталей. Детали имеют одинаковый технологический маршрут обработки, состоящий из n последовательно выполняемых операций O_1, O_2, \dots, O_n . Для каждой операции O_i заданы время выполнения p_i и рабочая

ных рабочих станций для того, чтобы задача минимизации общего времени обработки идентичных деталей стала NP-трудной.

Рассмотрим случай, когда существует ровно одна рабочая станция, на которую возвращается деталь при обработке (рис. 2). В общем случае деталь в процессе обработки может возвращаться на универсальную рабочую станцию любое число раз.

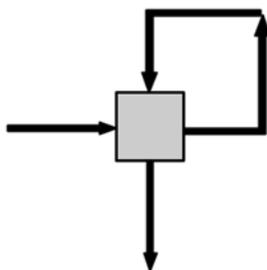


Рис. 2. Схема технологического маршрута с одним возвратом на универсальную рабочую станцию

В случае конвейерной линии существует оптимальное циклическое расписание, минимизирующее общее время обработки всех деталей. Доказано, что в случае, если используется ровно одна универсальная рабочая станция, можно построить оптимальное расписание, которое также будет циклическим. Такое расписание можно построить за полиномиальное время.

В заключение отметим основные результаты работы. Показано, что задача минимизации общего времени обработки партии идентичных деталей для случая производственной линии с одной универсальной рабочей станцией полиномиально разрешима. В случае четырех и более универсальных рабочих станций задача NP-трудна в обычном смысле. Остаются открытыми вопросы о сложности задачи при наличии двух или трех универсальных рабочих станций и о сильной NP-трудности задачи.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Boudoukh T., Penn M., Weiss G.* Scheduling jobshops with some identical or similar jobs // *Journal of Scheduling*. 2001. Vol. 4. P. 177–199.

[2] *Rao U., Jackson P.* Identical Jobs Cyclic Scheduling: Sub-problems, Properties, Complexity and Solution Approaches // Ithaca, NY: Cornell University Press, 1993.

[3] *Roundy R.* Cyclic schedules for job shops with identical jobs. // Mathematics of Operations Research. 1992. Vol. 17. № 4. P. 842–865.

[4] *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,
Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
аспирант III курса, Омск, ул. Певцова, 13, (3812)972251,
eabobrova88@gmail.com

Экспериментальное исследование алгоритмов поиска приближенного решения одной задачи Вебера на линии

Н. С. Веремчук

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, проф. Г. Г. Забудский

Рассматривается задача оптимального размещения взаимосвязанных прямоугольников на линии с запрещенными зонами. Разработаны алгоритмы поиска приближенного решения. Проведен вычислительный эксперимент с использованием предложенных алгоритмов и решения задачи с применением модели частично-целочисленного линейного программирования и пакета IBM ILOG CPLEX.

Ключевые слова: задача размещения, взаимосвязанные объекты, запрещенные зоны.

В данной работе рассматривается задача Вебера в следующей постановке. На линии с прямоугольными запрещенными зонами размещаются прямоугольники, центры которых связаны между собой и с зонами. Необходимо расположить прямоугольники на линии вне зон так, чтобы они не пересекались между собой и с зонами, и суммарная стоимость связей прямоугольников между собой и с зонами была минимальной [2]. Такую задачу необходимо решать, например, при размещении технологического оборудования в цехе [1].

Обозначим через X_1, \dots, X_n , F_1, \dots, F_m – прямоугольники и зоны с координатами центров x_i , b_j и длинами l_i , p_j $i \in I = \{1, \dots, n\}$, $j \in J = \{1, \dots, m\}$; $w_{ij} \geq 0$, $u_{ik} \geq 0$ – удельные стоимости связей между X_i и F_j , X_i и X_k , $i, k \in I$, $j \in J$, $i < k$. Математическая модель имеет вид:

$$G(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w_{ij} |x_i - b_j| + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=i+1}^n u_{ik} |x_i - x_k| \rightarrow \min,$$

$$|x_i - b_j| \geq (l_i + p_j)/2, \quad i \in I, j \in J,$$

$$|x_i - x_k| \geq (l_i + l_k)/2, \quad i, k \in I, i < k.$$

Сформулированная задача NP-трудная, поиск её допустимого решения – это построение одномерной упаковки в контейнеры. Допустимая область несвязная и состоит из набора непересекающихся отрезков (блоков), в которые размещаются прямоугольники $X_i, i \in I$.

Для поиска приближенного решения задачи предложены алгоритмы, каждая итерация которых состоит из двух этапов. На первом этапе находится очередное допустимое разбиение прямоугольников по блокам с помощью последовательно-одиночного размещения, а на втором – прямоугольники переставляются в блоках с целью минимизации суммарной стоимости связей. Предлагается два алгоритма минимизации с учетом длин прямоугольников (A2) и без учета (A3).

Алгоритмы реализованы в среде Borland C++ Builder Version 6.0. В программной реализации ввод данных тестируемых задач возможен вручную либо случайным образом, предусмотрена возможность экспорта полученных решений с целью их дальнейшей визуализации. Создана база тестируемых задач с помощью СУБД MS SQL Server 2000.

Проведен вычислительный эксперимент по сравнению приближенных решений, полученных предложенными алгоритмами, с точным. Такое решение находилось с применением пакета IBM ILOG CPLEX 12.2 с использованием модели частично-целочисленного линейного программирования. Исходные данные для эксперимента генерировались случайным образом. Протестировано свыше 200 задач, количество запрещенных зон варьировалось от 2 до 10, а прямоугольников от 5 до 40. Частично результаты сравнения решений, полученных с помощью алгоритма A2 и пакета, приведены в таблице, где G_2, G_{cplex} – значения целевых функций для соответствующих решений. В среднем относительная погрешность решений, найденных алгоритмом A2, составила 3%.

При поиске приближенных решений исследовалось влияние учета размеров прямоугольников. Для этого сравнивались решения алгоритмов А2 и А3. При разнице длин прямоугольников от 0 до 5 единиц, от 6 до 9, от 10 до 50 алгоритм с учетом длин (А2) находит решение на 1,4 %, 2,4%, 5,5% лучше, чем без учета (А3).

Сравнение решений алгоритма А2 с точным

№	n	m	G_2	$G_{срlex}$	Отн.погр.,%
1	4	3	4751,5	4751,5	0
2	5	4	15610	14802	5,5
3	4	3	7850,5	7787,5	0,8
4	5	3	1287	1287	0
5	6	5	7841,5	7841,5	0
6	5	5	15059,5	14996,5	0,4
7	6	5	16277,5	16277,5	0
8	8	2	12496,5	11760,5	6,3
9	8	2	27640	26250	5,3
10	7	4	29638,5	29638,5	0

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Забудский Г.Г., Амзин И. В.* Алгоритмы компактного размещения технологического оборудования на параллельных линиях // Сиб. журн. индустр. матем. 2013. Т. 16. № 3(55). С. 86–94.

[2] *Забудский Г.Г., Веремчук Н.С.* Алгоритмы поиска приближенного решения задачи Вебера на линии с запрещенными зонами // Математическое программирование и приложения: матер. XV Всерос. конф. Екатеринбург: ИММ УрО РАН, 2015. С. 133.

Наталья Сергеевна Веремчук,
 Омский филиал Института математики
 им. С.Л. Соболева СО РАН, II курс аспирантуры,
 644043, г. Омск 43, ул. Певцова 13, (3812)236739,
 n-veremchuk@rambler.ru

Сравнительный анализ двух алгоритмов локального поиска для конкурентной задачи размещения и проектирования

А. Ю. Гнусарев

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. Т. В. Леванова

В статье рассматривается конкурентная задача размещения и проектирования предприятий, описывается ее математическая модель. Предлагаются варианты алгоритмов локального поиска с чередующимися окрестностями и имитации отжига. Приводятся результаты экспериментального исследования и сравнительный анализ алгоритмов.

Ключевые слова: дискретная оптимизация, конкурентная задача размещения; локальный поиск с чередующимися окрестностями; имитация отжига.

Дискретные задачи оптимального размещения предприятий имеют широкий круг приложений. Заметный вклад в их исследование внесли ряд отечественных и зарубежных авторов (например, [1, 2, 8]). В большинстве своих случаев такие задачи NP-трудны и на практике имеют большую размерность, вследствие чего является перспективной разработка методов приближенного решения данного класса задач.

Рассматриваемая задача конкурентного размещения предприятий была предложена R. Aboolian, O. Verman, D. Krass в [5]. Этими авторами приводится постановка задачи, результаты ее исследования и сведения о NP-трудности. А также предлагаются два алгоритма ее приближенного решения.

В задаче участвуют два лица: конкурент и «новичок». Имеется дискретное множество точек спроса N . В некоторых из них $P \in N$ возможно размещение предприятий. Часть этих пунктов $C \subset P$ уже занята конкурентом, претендующим на долю спроса клиентов. «Новичку» необходимо открыть новые предприятия в

местах из множества $S = P \setminus C$ и выбрать для них соответствующий проект (сценарий развития) $r \in \{1, \dots, R\}$ так, чтобы удовлетворить наибольшую долю спроса с учетом установленного бюджета B . Для каждого $i \in N$ задан w_i – вес спроса в пункте; c_{jr} – стоимость размещения предприятия со сценарием r в пункте j ; переменные $x_{jr} = 1$, если предприятие в пункте j работает по проекту r , $j \in S$, $r \in R$.

Математическая модель задачи имеет вид:

$$\sum_{i \in N} w_i \cdot g(U_i) \cdot MS_i \rightarrow \max \quad (1)$$

$$\sum_{j \in S} \sum_{r=1}^R c_{jr} \cdot x_{jr} \leq B \quad (2)$$

$$\sum_{r=1}^R x_{jr} \leq 1, \quad j \in S, \quad (3)$$

$$x_{jr} \in \{0, 1\}, \quad j \in S, \quad r \in R, \quad (4)$$

где $g(U_i) = 1 - \exp(-\lambda_i U_i)$ функция спроса, а U_i – суммарный спрос пункта i , удовлетворяемый «новичком» и конкурентом. Доля открытых предприятий в общем объеме обслуживания на рынке обозначается

$$MS_i = \frac{U_i(S)}{U_i(S) + U_i(C)} = \frac{\sum_{j \in S} \sum_{r=1}^R k_{ijr} x_{jr}}{\sum_{j \in S} \sum_{r=1}^R k_{ijr} x_{jr} + \sum_{j \in C} u_{ij}}, \quad i \in N.$$

Сложность задачи заключается в ее целевой функции, которая имеет нелинейный характер, а также в том, что спрос не фиксирован и зависит от набора открытых предприятий. Поэтому для ее решения нельзя использовать методы линейного программирования.

Для решения указанной задачи разработаны два варианта алгоритмов локального поиска. Схема локального поиска с чередующимися окрестностями (VNS) [4; 6] заключается в следующем. В начале работы алгоритма определяется множество используемых окрестностей, порядок их просмотра. Выбирается допустимое исходное решение и вычисляется значение целевой функции, которое будет служить начальным рекордом. Алгоритм за один шаг специ-

альным образом просматривает список окрестностей и находит улучшающее решение. Поиск заканчивается в случае, если список окрестностей просмотрен и не найдено решение, лучше рекорда.

Алгоритм имитации отжига (SA) [3; 7] начинает работу с некоторого допустимого решения. На каждой итерации в его окрестности выбирается соседнее. Если оно лучше по целевой функции, то новое решение заменяет текущее. В противном случае переход осуществляется с некоторой вероятностью. После чего уменьшается значение параметра температуры по установленному закону и, если выполнен критерий остановки, то алгоритм заканчивает работу. При этом критериями остановки могут служить минимальная температура, предельное количество итераций и другие.

Экспериментальные исследования предложенных алгоритмов проводились с целью получения информации о точности решений и времени счета. Для этого были созданы тестовые примеры по правилам, предложенным в [5]. Рассматривалось два класса: с произвольными расстояниями и удовлетворяющими неравенству треугольника. Количество пунктов размещения было 60, 80, 100, 150, 200, 300. Все задачи имели с высокую чувствительность к расстоянию, т. е. $\beta = 2$. Для поиска рекордных решений использовалась система GAMS (CoinBonmin).

Большую роль в работе данных алгоритмов играет способ выбора окрестности текущего решения. При их реализации были предложены 4 вида окрестностей; в ходе эксперимента была использована еще одна – Лина-Кернагина. Локальный поиск с чередующимися окрестностями работал менее 1 секунды, в то время как имитация отжига порядка 51 сек. Для сравнения оба алгоритма были поставлены в равные условия по времени. На примерах с расстояниями, удовлетворяющими неравенству треугольника, поведение алгоритмов было одинаковое. На произвольных расстояниях средние отклонения приведены в таблице ниже.

Вычислительный эксперимент

Алгоритм	Среднее отклонение, %			
	1 секунда	5 секунд	10 секунд	20 секунд
SA	-0.91	-1.35	-1.71	-1.63
VNS	10.42	7.06	6.25	5.03

Эксперимент показал, что VNS на некоторых тестовых примерах находит новые рекорды. В целом, при заданных условиях SA работает лучше VNS. Первый алгоритм в большинстве случаев превосходит решатель CoinBonmin по значению рекорда и времени счета.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Береснев В.Л.* Дискретные задачи размещения и полиномы от булевых переменных. Новосибирск, 2005. 408 с.

[2] *Колоколов А.А., Леванова Т.В.* Декомпозиция Бендерса для задач размещения предприятий: учебно-методическое пособие. Омск, 2013. 57 с.

[3] *Леванова Т.В., Лореш М.А.* Алгоритмы муравьиной колонии и имитации отжига для задачи о р-медиане // Автомат и телемех. 2004. С. 80–88.

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

[5] *Aboolian R., Berman O., Krass D.* Competitive facility location and design problem // EJOR. 2007. Vol. 182. P. 40–62.

[6] *Hansen P., Mladenovic N., Moreno-Perez J.F.* Variable neighbourhood search: algorithms and applications // Ann. of Operations Research. 2010. Vol. 175. P. 367–407.

[7] *Kirkpatrick S., Gelatt C.D., Vecchi M.P.* Optimization by Simulated Annealing // Science. 1983. Vol. 220. P. 671–680.

[8] *Pitu B.* Mirchandani, Richard L. Francis. Discrete Location Theory. 1990. 576 p.

Александр Юрьевич Гнусарев,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
london_5.10@mail.ru

Алгоритм динамического программирования для решения одной задачи календарного планирования

А. Ю. Пирогов

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук А. А. Романова

В работе рассматривается задача календарного планирования с критерием минимизации затрат на приобретение ресурсов. Предлагается алгоритм динамического программирования решения задачи в случае возобновляемых ресурсов, который является псевдополиномиальным при фиксированной ширине частичного порядка.

1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу календарного планирования в следующей постановке. Имеется проект, состоящий из множества взаимосвязанных работ $V = \{1, \dots, n\}$. Для каждой работы $j \in V$ известна длительность ее выполнения $p_j \in \mathbf{Z}^+$. Прерывания выполнения работ не допускаются. Связи между работами задаются технологией выполнения проекта и определяются отношениями предшествования вида $i \rightarrow j$. Это означает, что работа j не может начаться до завершения работы i . Такую взаимосвязь можно изобразить с помощью ациклического ориентированного графа $G = (V, E)$, в котором вершины соответствуют работам, а дуги – отношениям предшествования. Таким образом, множество дуг E определяет частичный порядок на множестве работ. Также задан директивный срок T выполнения проекта, к которому все работы должны быть завершены.

Для выполнения работ требуются возобновляемые ресурсы m видов. Известна потребность q_{rj} работы j в ресурсе вида r в каждый период времени ее выполнения, $r = 1, \dots, m$; $j = 1, \dots, n$. Возобновляемые ресурсы характеризуются тем, что общее количество ресурса, требуемого для выполнения всех работ в момент времени t , не должно превосходить количества имеющего-

ся ресурса. К такому виду ресурсов можно отнести время работы различного оборудования, рабочую силу и т.д.

Ресурсы для выполнения работ проекта необходимо приобретать. В силу целочисленности длительностей работ будем считать, что закупка ресурсов производится в целочисленные моменты времени. При этом если объем покупаемого в некоторый момент времени ресурса r не превышает V_r^{norm} , то его можно приобрести по обычной цене C_r^{norm} за единицу. При превышении этого уровня устанавливается новая цена C_r^{over} за единицу ресурса. Будем считать, что $C_r^{over} < C_r^{norm}$. Таким образом, поставщик предоставляет скидку при покупке ресурса сверх нормы.

Расписание S определяется набором $\{s_j\}_{j=1}^n$ времен начала выполнения каждой из работ проекта. Кроме самого расписания, необходимо знать план закупок ресурсов, а именно величины b_{rt} – объем покупаемого ресурса r в период времени t , $r = 1, \dots, m$; $t = 1, \dots, T$. Расписание и план закупок определяют допустимое решение, если выполняются все ограничения предшествования, время завершения всего проекта не превышает T , и объем потребления каждого ресурса в период времени t не превосходит объема закупленного ресурса в этом периоде времени, $t = 1, \dots, T$.

Рассматриваемая задача заключается в нахождении допустимого решения, при котором суммарные затраты на приобретение ресурсов минимальны.

В [1] доказано существование оптимального расписания длины, равной критическому времени выполнения проекта; предложена модель целочисленного линейного программирования; разработан псевдополиномиальный алгоритм нахождения приближенного решения задачи.

2. Алгоритм динамического программирования

Для применения метода динамического программирования необходимо разбить частичный порядок на цепи. Цепь – это линейно упорядоченное множество работ. Разбить частичный порядок на минимальное количество цепей можно с помощью полиномиального алгоритма, представленного в [2; 3]. Пусть получилось

k цепей. Обозначим через P_l суммарную длительность работ в цепи l . Отметим, что при разбиении работы разных цепей могут находиться в отношении предшествования. Вектор $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$, $x_l \in \{0, 1, \dots, P_l\}$, $l = 1, 2, \dots, k$ задает состояние выполнения работ проекта, $\mathbf{0} = (0, \dots, 0)$ – начальное состояние, когда ни одна работа не начала выполняться, а $\mathbf{P} = (P_1, P_2, \dots, P_k)$ – конечное состояние, когда все работы завершены.

Определим понятия *допустимых* и *недопустимых* состояний. Работы каждой цепи выполняются последовательно. Однако, в отношении предшествования могут находиться работы разных цепей. Пусть, например, работа j_1 цепи P_1 предшествует работе j_2 цепи P_2 . Если состояние \mathbf{x} определяет, что первая из этих работ еще не завершена, а вторая уже начала свое выполнение, то в силу заданного на множестве работ частичного порядка состояние \mathbf{x} недопустимо. Остальные состояния считаются допустимыми. Обозначим через $L(\mathbf{x})$ наименьшие суммарные затраты на приобретение ресурсов от начала проекта до состояния \mathbf{x} . Булевы вектора $\delta = (\delta_1, \dots, \delta_k)$ – управления, которые определяют переход из состояния $\mathbf{x} - \delta$ в состояние \mathbf{x} . Процесс перехода соответствует одновременному выполнению работ тех цепей l , для которых $\delta_l = 1$. Пусть $\Delta_{\mathbf{x}}$ – множество допустимых управлений для состояния \mathbf{x} ; и N_{δ} – множество работ всех цепей, выполняющихся при управлении δ . Выпишем рекуррентное соотношение:

$$L(\mathbf{x}) = \min_{\delta \in \Delta_{\mathbf{x}}} \left(L(\mathbf{x} - \delta) + \sum_{r=1}^m C_r \left(\sum_{i \in N_{\delta}} q_{ri} \right) \right),$$

$$C_r(q) = \begin{cases} V_r^{norm} C_r^{norm} + (q - V_r^{norm}) C_r^{over}, & \text{если } q > V_r^{norm}; \\ q C_r^{norm}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

В начальном состоянии $L(\mathbf{0}) = 0$. Далее в порядке лексикографического возрастания перебираем все состояния и получаем $L(\mathbf{P})$.

Оценим время работы алгоритма. Для каждого состояния \mathbf{x} необходимо вычислить $L(\mathbf{x})$, что потребует перебора $2^k - 1$ буле-

вых векторов δ . При этом проверка допустимости вектора требует порядка $O(k^2n)$ операций. Всего состояний $(P_1 + 1), (P_2 + 1), \dots, (P_k + 1)$. На каждом шаге для каждого ресурса необходимо вычислять затраты на его приобретение, что потребует $O(m)$ операций. В итоге общая трудоемкость алгоритма решения рассматриваемой задачи составит $O(2^k k^2 nm P_1 \dots P_k)$ операций. Таким образом, предложенный алгоритм при фиксированной ширине k частичного порядка является псевдополиномиальным.

Алгоритм реализован. Проводится его экспериментальное сравнение с пакетом CPLEX 12.6 по времени работы. Разработанный алгоритм предполагается использовать для получения точного решения в качестве альтернативы пакета CPLEX 12.6.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Пирогов А.Ю., Романова А.А.* О задаче календарного планирования с критерием минимизации затрат на приобретение ресурсов // Проблемы оптимизации сложных систем: труды X Международной азиатской школы-семинара. Кыргызская республика, Иссык-Кульская область, 2014. Ч. 2. С. 545–550.

[2] *Пападимитриу Х.Х., Стайглиц К.* Комбинаторная оптимизация. Алгоритмы и сложность. М.: Мир, 1984. 512 с.

[3] *Романова А.А., Сервах В.В., Сергиенко Т.А.* Календарное планирование: учеб. пособие. Омск: Из-во Ом. гос. ун-та, 2015. 60 с.

Александр Юрьевич Пирогов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
pirogov.al.yu@gmail.com

Двумерный аналог интерполяционной формулы для функции с погранслошной составляющей*

С. В. Тиховская

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, проф. А. И. Задорин

Предложено обобщение равномерной по малому параметру одномерной интерполяции для функции с погранслошной составляющей на двумерный случай. Приводятся результаты численных экспериментов.

Ключевые слова: двумерная интерполяция, сингулярное возмущение, равномерная точность по малому параметру.

При решении сингулярно возмущенных краевых задач может возникать необходимость в интерполяциях, равномерных по малому параметру, например, при использовании двухсеточного метода [1].

Будем рассматривать функции $u(x, y)$, где $(x, y) \in [0, 1]^2$, с погранслошными составляющими $\Phi(x)$ и $\Theta(y)$, имеющие представления, аналогичные приведенным в [1, 2].

Обобщим формулу из [2] на двумерный случай и исследуем при $k = 2, 3, 5$ и различном выборе функций $\Phi(x)$ и $\Theta(y)$. Пусть $L_k(v, z_p, \dots, z_{p+k-1}, z)$ – многочлен Лагранжа с узлами z_p, \dots, z_{p+k-1} и $[z_p, \dots, z_{p+k-1}]v$ – разделенная разность для функции $v(z)$, тогда для $(x, y) \in [x_m, x_{m+k-1}] \times [y_l, y_{l+k-1}]$:

$$I_{\Phi, \Theta, k}(u, x, y) = L_{k-1}(u_{\Phi, k}, y_l, \dots, y_{l+k-2}, y) + \frac{[y_l, \dots, y_{l+k-1}]u_{\Phi, k}}{[y_l, \dots, y_{l+k-1}]\Theta} (\Theta(y) - L_{k-1}(\Theta, y_l, \dots, y_{l+k-2}, y)), \quad (1)$$

где

*Выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект № 15-01-06584.

$$u_{\Phi,k}(u, x) = L_{k-1}(u, x_m, \dots, x_{m+k-2}, x) + \frac{[x_m, \dots, x_{m+k-1}]u}{[x_m, \dots, x_{m+k-1}]\Phi} (\Phi(x) - L_{k-1}(\Phi, x_m, \dots, x_{m+k-2}, x)).$$

Отметим, что в случае, когда $\Phi(x) = x^{k-1}$ и $\Theta(y) = y^{k-1}$, получаем двумерную формулу полиномиальной интерполяции.

В работе [2] показано, что при $k=2$ одномерная формула (1) имеет ε -равномерную точность $O(\ln N / N)$, а при $k=3$ имеет точность $O(\ln^2 N / N^2)$.

В случае $k=5$ в [2] показано, что одномерная формула (1) будет иметь точность $O(\ln^4 N / N^4)$. Результаты численных экспериментов показывают, что эта оценка является ε -равномерной.

Приведем результаты численных экспериментов для функции

$$u(x, y) = \frac{(1 - e^{-x/\sqrt{\varepsilon}})(1 - e^{-(1-x)/\sqrt{\varepsilon}})(1 - e^{-y/\sqrt{\varepsilon}})(1 - e^{-(1-y)/\sqrt{\varepsilon}})}{(1 - e^{-1/\sqrt{\varepsilon}})(1 - e^{-1/\sqrt{\varepsilon}})} + \sin(\pi x)\sin(\pi y). \quad (2)$$

В табл. 1 при различных значениях N и ε приведены нормы погрешности метода интерполяции (1) при $k=2$ в случае $\Phi(x) = x$ и $\Theta(y) = y$ для функции (2). Отметим, что случае выбора

$$\Phi(x) = e^{-x/\sqrt{\varepsilon}} + e^{-(1-x)/\sqrt{\varepsilon}} \text{ и } \Theta(y) = e^{-y/\sqrt{\varepsilon}} + e^{-(1-y)/\sqrt{\varepsilon}} \quad (3)$$

погрешность получается того же порядка.

Таблица 1

Нормы погрешности $I_{\Phi, \Theta, 2}$ при $\Phi(x) = x$ и $\Theta(y) = y$

ε	N				
	64	128	256	512	1024
1	2.25e-3	6.31e-4	1.58e-4	3.94e-5	9.86e-6
10^{-3}	7.61e-2	2.40e-2	6.75e-3	1.79e-3	4.62e-4
10^{-6}	8.22e-2	3.42e-2	1.27e-2	4.31e-3	1.39e-3

Из табл. 1 следует, что точность формулы (1) при $k=3$ в случае $\Phi(x) = x^2$ и $\Theta(y) = y^2$ даже выше, чем теоретически обоснованная оценка $O(\ln N / N)$ и близка к $O(\ln^2 N / N^2)$.

В табл. 2 при различных значениях N и ε приведены нормы погрешности метода интерполяции (1) при $k=3$ в случае $\Phi(x) = x^2$ и $\Theta(y) = y^2$ для функции (2). Отметим, что в случае (3) погрешность получается того же порядка.

Таблица 2

Нормы погрешности $I_{\Phi, \Theta, 3}$ при $\Phi(x) = x^2$ и $\Theta(y) = y^2$

ε	N				
	64	128	256	512	1024
1	6.08e-5	7.48e-6	9.27e-7	1.15e-7	1.44e-8
10^{-3}	3.28e-2	4.95e-3	7.61e-4	1.06e-4	1.39e-5
10^{-6}	3.72e-2	8.65e-3	1.93e-3	3.91e-4	7.23e-5

Из табл. 2 следует, что точность формулы (1) при $k=3$ в случае $\Phi(x) = x^2$ и $\Theta(y) = y^2$ даже выше, чем теоретически обоснованная оценка $O(\ln^2 N / N^2)$ и близка к $O(\ln^3 N / N^3)$.

В табл. 3 при различных значениях N и ε приведены нормы погрешности метода интерполяции (1) при $k=5$ в случае $\Phi(x) = x^4$ и $\Theta(y) = y^4$ для функции (2).

Таблица 3

Нормы погрешности $I_{\Phi, \Theta, 5}$ при $\Phi(x) = x^4$ и $\Theta(y) = y^4$

ε	N				
	64	128	256	512	1024
1	2.74e-7	8.23e-9	2.51e-10	7.73e-12	2.40e-13
10^{-3}	6.24e-3	4.52e-4	1.69e-5	6.35e-7	2.21e-8
10^{-6}	7.32e-3	1.06e-3	8.96e-5	5.59e-6	3.45e-7

В табл. 4 при различных значениях N и ε приведены нормы погрешности метода интерполяции (1) при $k=5$ в случае (3) для функции (2).

Из табл. 3 и 4 следует, что точность формулы (1) при $k=5$ в случае выбора $\Phi(x)$ и $\Theta(y)$ с учетом вида областей больших гра-

диентов интерполируемой функции выше, чем $O(\ln^4 N / N^4)$ и близка к $O(\ln^5 N / N^5)$.

Таблица 4

Нормы погрешности $I_{\Phi, \Theta, 5}$

при $\Phi(x) = e^{-x/\sqrt{\varepsilon}} + e^{-(1-x)/\sqrt{\varepsilon}}$ и $\Theta(y) = e^{-y/\sqrt{\varepsilon}} + e^{-(1-y)/\sqrt{\varepsilon}}$

ε	N				
	64	128	256	512	1024
1	2.93e-7	8.86e-9	2.70e-10	8.38e-12	3.90e-13
10^{-3}	5.68e-6	1.61e-7	4.90e-9	1.50e-10	4.62e-12
10^{-6}	5.51e-4	4.35e-5	2.84e-6	1.65e-7	6.65e-9

Отметим, что интерполяционная формула (1) может быть успешно применена на кусочно-равномерных сетках типа Шишкина [3], при условии, что изменение шага будет происходить вне ячейки интерполяции.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Zadorin A.I., Tikhovskaya S.V., Zadorin N.A.* A two-grid method for elliptic problem with boundary layers // Applied Numerical Mathematics. 2015. Vol. 93. P. 270–278.

[2] *Zadorin A.I., Zadorin N.A.* Interpolation formula for functions with a boundary layer component and its application to derivatives calculation // Сибирские электронные математические известия. 2012. Т. 9. С.1–11.

[3] *Шишкин Г.И.* Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург, 1992. 234 с.

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

Анализ в среднем множества допустимых решений одного класса обобщенных задач об упаковке множества

А. В. Яклюшин

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. Л. А. Заозерская

Для класса обобщенных задач об упаковке множества со случайными исходными данными доказано свойство для вероятностей того, что булев вектор с фиксированным числом единиц удовлетворяет ограничениям задачи. На основе этого свойства могут быть получены верхние оценки среднего числа допустимых решений задач из рассматриваемого класса.

Ключевые слова: целочисленное линейное программирование, обобщенная задача об упаковке множества, оценки в среднем.

Рассматривается обобщенная задача об упаковке множества:

$$\max \{cx \mid Ax \leq b, x \in \{0,1\}^n\}, \quad (1)$$

где $A=(a_{ij})_{m \times n}$ – булева матрица, $c=(c_1, \dots, c_n)$, $b=(b_1, \dots, b_m)$ и все $c_j > 0, b_i > 0$ – целые, $x=(x_1, \dots, x_n)$ – вектор переменных.

Если все $b_i = 1$, то (1) есть известная NP-трудная задача об упаковке множества [1]. Одним из подходов к исследованию NP-трудных задач, является исследование в среднем классов задач при различных распределениях исходных данных и алгоритмов их решения.

В [2; 3] исследовался класс $G(n, p, B)$ задач вида (1), в которых a_{ij} – независимые случайные величины, причем $P\{a_{ij} = 1\} = p$, $P\{a_{ij} = 0\} = 1 - p$, а $p \in (0,1)$, $i = 1, \dots, m$, $j = 1, \dots, n$, а все $b_i = B$.

Для классической задачи об упаковке множества и ее обобщения (все $b_i = 2$) были установлены соотношения для n , m и p , при которых имеют место полиномиальные верхние оценки сред-

него числа итераций при решении их такими алгоритмами целочисленного линейного программирования, как метод ветвей и границ, алгоритмы отсечения (например, первый алгоритм Гомори), алгоритм перебора L -классов. Эти оценки получены на основе метода регулярных разбиений и верхних оценок среднего числа допустимых решений задач [2; 3].

В данной работе нами исследуется среднее число допустимых решений класса $G(n, p, B)$ обобщенных задач об упаковке множества, в котором $B \geq 3$.

Обозначим через x^s допустимый вектор задачи, имеющий ровно s единичных компонент, а через D_s – множество таких векторов. Далее, для простоты обозначений, будем считать, что все единичные компоненты вектора x^s , занимают первые s мест. Заметим, что вероятность того, что булев вектор x^s удовлетворяет i -му ограничению задачи, не зависит от выбора x^s . Обозначим эту вероятность через p_s . Очевидно, что

$$p_s = P\left\{\sum_{j=1}^s a_{ij} \leq B\right\} = \sum_{t=0}^B C_s^t p^t (1-p)^{s-t} \text{ для } s=0, \dots, n. \quad (2)$$

Тогда $E|D_s| = C_n^s (p_s)^m$, где $E(\xi)$ – математическое ожидание случайной величины ξ .

Отметим некоторые свойства для вероятности p_s .

- 1) $p_0 = p_1 = \dots = p_B = 1$;
- 2) $p_s \geq p_{s+1}$, $s = B+1, \dots, n-1$.

Для класса $G(n, p, B)$ справедлива следующая

Лемма. Пусть $B < n$, тогда

$$\frac{p_{s+1}}{p_s} \geq \frac{p_{s+2}}{p_{s+1}}, \text{ где } s = 0, 1, \dots, n-2. \quad (3)$$

Приведем основные этапы доказательства.

Для случая $s = 0, 1, \dots, B-1$ неравенство (3) очевидно. Для случая $s \geq B$ перепишем это неравенство в виде $p_{s+1}p_{s+1} \geq p_s p_{s+2}$.

Положим $a = p/(1-p)$. После преобразований, используя (2), получим:

$$\begin{aligned} & \sum_{t=0}^B a^t \sum_{q=0}^t C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} + \sum_{t=B+1}^{2B} a^t \left(\sum_{q=t-B}^B C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} \right) \geq \\ & \geq \sum_{t=0}^B a^t \sum_{q=0}^t C_s^q C_{s+2}^{t-q} + \sum_{t=B+1}^{2B} a^t \left(\sum_{q=t-B}^B C_s^q C_{s+2}^{t-q} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

Из свертки Вандермонда имеем $\sum_{q=0}^t C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} = \sum_{q=0}^t C_s^q C_{s+2}^{t-q}$.

Тогда неравенство (4) преобразуется в

$$\sum_{t=B+1}^{2B} a^t \left(\sum_{q=t-B}^B C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} \right) \geq \sum_{t=B+1}^{2B} a^t \left(\sum_{q=t-B}^B C_s^q C_{s+2}^{t-q} \right) \quad (5)$$

Перепишем его в более удобной форме

$$\begin{aligned} & \sum_{t=B+1}^{2B} a^t \left(\sum_{q=0}^t C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} - \sum_{q=0}^{t-B-1} 2C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} \right) \geq \\ & \geq \sum_{t=B+1}^{2B} a^t \left(\sum_{q=0}^t C_s^q C_{s+2}^{t-q} - \sum_{q=0}^{t-B-1} (C_s^q C_{s+2}^{t-q} + C_s^{t-q} C_{s+2}^q) \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Для $0 \leq q \leq t/2$ и $t = B+1, \dots, 2B$ рассмотрим уравнение

$$2C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} - C_s^q C_{s+2}^{t-q} + C_s^{t-q} C_{s+2}^q = 0.$$

Оно эквивалентно квадратному уравнению $q^2 - qt + (s+2)(t^2 - t)/(4s+6) = 0$ относительно переменной q . Равенство достигается при

$$q_1 = t/2 - \sqrt{(2(s+2)t - t^2)/(2s+3)}/2.$$

Если $t-B-1 \leq q_1$, то $\sum_{q=0}^{t-B-1} 2C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} < \sum_{q=0}^{t-B-1} (C_s^q C_{s+2}^{t-q} + C_s^{t-q} C_{s+2}^q)$, и нера-

венство (6) верно. При $t-B-1 > q_1$ получаем неравенство

$\sum_{q=t-B}^B C_{s+1}^q C_{s+1}^{t-q} > \sum_{q=t-B}^B C_s^q C_{s+2}^{t-q}$ и неравенство (5) верно. Так как неравен-

ства (5) и (6) верны, то верно и неравенство (4), а значит и вся лемма. Лемма доказана.

Из доказанной леммы нетрудно показать, что

$$\frac{E |D_{s+1}|}{E |D_s|} > \frac{E |D_{s+2}|}{E |D_{s+1}|}, \quad s = B, \dots, n-2.$$

Отметим, что последние соотношения для математических ожиданий мощности множеств D_s позволяют построить верхние полиномиальные оценки среднего числа множества допустимых решений для класса $G(n, p, B)$.

ЛИТЕРАТУРА

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

[2] Заозерская Л.А. Исследование среднего числа допустимых решений некоторых классов задач булева программирования // Проблемы оптимизации и экономические приложения: материалы V Всероссийской конф. Омск, 2012. С. 127.

[3] Заозерская Л.А., Колоколов А.А. О среднем числе итераций некоторых алгоритмов для решения задачи об упаковке множества // Методы оптимизации и их приложения: труды XIV Байкальской Междунар. школы-семинара. Иркутск: ИСЭМ СО РАН, 2008. Т. 1. С. 388–395.

Александр Владимирович Яклюшин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры, ИМИТ,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
yaklushin@mail.ru

Секция ПРИКЛАДНАЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Исследование влияния окисления поверхности на адгезионные свойства металлов

К.О. Аяганова

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, доц. М.В. Мамонова

Выведено дисперсионное уравнение для поверхностных волн, для двух полубесконечных металлов, имеющих на поверхности полупроводниковый слой толщиной H . Исследованы когезионные свойства поверхности Ni с учётом окисла. Рассчитаны энергия и сила адгезионного взаимодействия ряда металлов с Ni в зависимости от толщины окисла.

Окисление металлов имеет большое значение в физике поверхности, так как оксиды металлов более стабильны, чем сами металлы в большинстве случаев, и определяют процессы, происходящие при коррозии и адгезии металлов.

При описании адгезионных свойств материалов, особенно эффективно для полупроводников, используется подход, основанный на диэлектрическом формализме. Данный подход позволяет с помощью модельных аппроксимаций для диэлектрических функций металлов определять закон дисперсии коллективных возбуждений в системе – плазмонов.

В данной работе будет рассмотрен случай контакта двух металлов с наличием слоя окисла на поверхности, разделенных вакуумным зазором h . Методика расчетов энергии и силы адгезионного взаимодействия металлов как функции величины зазора h , приведенная в работе [1], была развита на случай промежуточных

слоев полупроводниковых материалов, моделирующих слои окисла (рис. 1).

0	H ₁		H ₁ +h	H ₁ +h+H ₂
Me ₁	H ₁	h	H ₂	Me ₂
ε ₁	ε ₃		ε ₄	ε ₂

Рис. 1. Графическая модель контакта двух металлов, разделённых двумя слоями окисла толщиной H₁, H₂ с вакуумным зазором h

Решение системы уравнений Максвелла при использовании условий непрерывности были получены следующие дисперсионные соотношения для поверхностных плазменных волн в металлах:

$$\frac{A}{B} e^{2kh} = 1, \quad (1)$$

где использованы соотношения:

$$\begin{aligned}
 A &= (\varepsilon_1 - 1)(\varepsilon_2 - 1) * [(\varepsilon_4 + 1)^2 e^{-2kH_2} - (\varepsilon_4 + 1)^2] * \\
 &* [(\varepsilon_3 + 1)^2 - (\varepsilon_3 - 1)^2 * e^{-2kH_1}] - (\varepsilon_1 + 1)(\varepsilon_2 - 1) * \\
 &* [(\varepsilon_4 - 1)^2 e^{-2kH_2} - (\varepsilon_4 + 1)^2] * (\varepsilon_3^2 + 1)(1 - e^{-2k(H_1)}) + \\
 &+ (\varepsilon_1 - 1)(\varepsilon_2 + 1)(\varepsilon_4^2 - 1) * [(\varepsilon_3 + 1)^2 - (\varepsilon_3 - 1)^2 e^{-2k(H_1)}] * \\
 &* (1 - e^{-2k(H_2)}) - [(\varepsilon_1 + 1)(\varepsilon_2 + 1)(\varepsilon_3^2 - 1)(\varepsilon_4^2 - 1) * \\
 &* (1 - e^{-2k(H_2)})(1 - e^{-2k(H_1)})] \\
 B &= (\varepsilon_1 + 1)(\varepsilon_2 - 1) * (\varepsilon_4^2 - 1)[(\varepsilon_3 - 1)^2 * (\varepsilon_3 + 1)^2 * e^{-2kH_1}] - \\
 &- (\varepsilon_1 - 1)(\varepsilon_2 - 1)(\varepsilon_3^2 - 1)(\varepsilon_4^2 + 1)(1 - e^{-2k(H_2)})(1 - e^{-2k(H_1)}) - \\
 &- (\varepsilon_1 - 1)(\varepsilon_2 + 1)(\varepsilon_4^2 - 1) * [(\varepsilon_4 + 1)^2 e^{-2k(H_2)} - (\varepsilon_4 - 1)^2] * \\
 &* [(\varepsilon_3^2 - 1)(\varepsilon_3^2 + 1)]
 \end{aligned}$$

Энергия адгезии двух различных материалов принимает вид:

$$E_a^{(12)}(h) = \hbar \sum \int_0^{k_c^{(\min)}} [\omega_{si}(k, \infty) - \omega_{si}(k, h)] \frac{kdk}{2\pi}, \quad (2)$$

где $\omega_{si}(k, h)$, $\omega_{si}(k, \infty)$ – нули и полюса уравнения (1). Выражения для диэлектрических проницаемостей металлов и полупроводников в приближении хаотических фаз приведены в [1].

Поверхностная энергия может быть выражена через энергию адгезии одинаковых материалов (энергию когезии) следующим соотношением:

$$\sigma = \frac{1}{2} E_a^{(11)}(h = 0) \quad (3)$$

Таблица 1

Плазменные частоты ω р и поверхностные энергии σ для Ni без окисла, NiO, Ni с окислом толщиной $H = 0,1$ а.е.

Величина	ω р, эВ	σ , мДж/м ²
Ni без окисла	22.1	2613,4
Ni с окислом	24.0	2566,9
NiO	24.0	2602,8

Результаты расчётов значений поверхностной энергии (табл. 1) показали, что наличие окисла приводит к уменьшению поверхностной энергии.

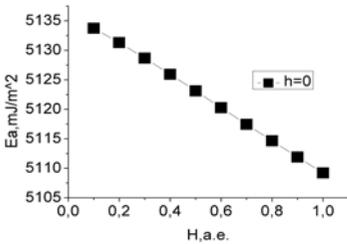


Рис. 2. Зависимость энергии когезии E_a от толщины слоя окисла при $h = 0$

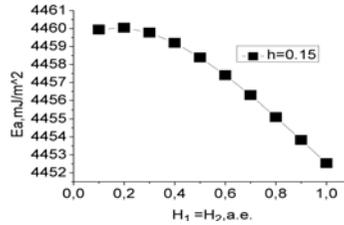


Рис. 3. Зависимость энергии когезии E_a от толщины слоя окисла при $h = 0.15$

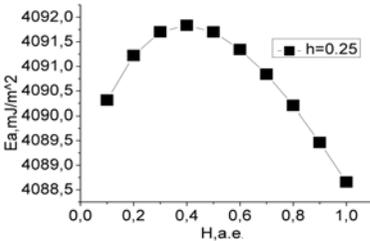


Рис. 4. Зависимость энергии когезии E_a от толщины слоя окисла при $h = 0.25$

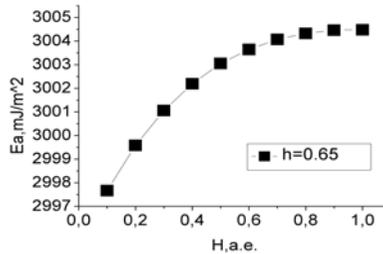


Рис. 5. Зависимость энергии когезии E_a от толщины слоя окисла при $h = 0.65$

Таблица 2

**Значения энергии адгезии E_a и силы адгезии F_a
с учётом и без учёта окисла
при величине зазора $h = 0,15$, толщине окисла $H1 = 0,2$ а.е.**

<i>Величина</i>	<i>Ni-Ag</i>	<i>Ni-Au</i>	<i>Ni-Cu</i>	<i>Ni-W</i>
$E_a, \text{мДж/м}^2$	4667	4870	3620	4724
$F_a, 10^8 \text{ Н/м}^2$	-863	-907	-632	-877
$E_{aox}, \text{мДж/м}^2$	4566	4768	3600	4624
$F_{aox}, 10^8 \text{ Н/м}^2$	-872	-917	-650	-884

Полученные результаты поверхностной энергии позволяют сделать следующий вывод, что наличие окисла приводит к уменьшению поверхностной энергии на 2 %. Исследование когезионных свойств поверхности Ni с учётом окисла (рис. 2–5) показало, что в зависимости энергии когезии от толщины окисла наблюдается максимум при величине зазора от $h = 0,15$ – $0,6$. С увеличением зазора максимум смещается в область больших толщин. Исследование адгезионных свойств Ni с рядом металлов (табл. 2), показало, что наличие окисла приводит к уменьшению энергии адгезии на 2 % и увеличению силы адгезии на 1 %.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Вакилов А.Н., Мамонова М.В, Прудников В.В. Адгезионные свойства металлов и полупроводников в рамках диэлектрического формализма // Поверхность. 1998. № 10. С. 55–61.

Кымбат Оразбаевна Аяганова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238.

Нули статистической суммы и критическое поведение трехмерной неупорядоченной модели Изинга

В. В. Дудник

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. А. Н. Вакилов

Цель работы: найти нули статистической суммы неупорядоченной модели Изинга и определить критический индекс ν для концентраций $p = 0.95; 0.8; 0.6; 0.5$.

В последние годы наблюдается неизменный интерес к получению точных оценок критических параметров трехмерных Изинго-подобных систем на основе высокопроизводительных методов моделирования.

Распространенным способом получения информации о фазовых переходах из моделирования Монте-Карло является конечно-размерный скейлинг, например, анализ статсуммы нулей в комплексной температурной плоскости. Важным инструментом для получения высокоточных данных в трехмерных системах является представленный Ферренбергом и Свендсенем метод повторного взвешивания (метод гистограмм) [1].

Статистическая сумма и гамильтониан взаимодействия для системы определяются следующим образом [2]:

$$Z(\beta) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_E p(E, \beta) e^{-\beta E} \quad (1)$$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum_i h_i S_i \quad (2)$$

Нули Фишера задаются как комплексные числа β в следующем виде:

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

Как только будут получены несколько нулей, их необходимо упорядочить по величине модуля полученных значений

$$|\beta^{(1)}(L)| < |\beta^{(2)}(L)| < |\beta^{(3)}(L)| < \dots \quad (4)$$

Для аналитического продления:

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \sum_E p(E, \beta) e^{-\beta E} = \sum_E p(E, \beta) e^{-(\eta+i\xi)E} = \\ &= \sum_E p(E, \beta) e^{-\eta E} [\cos(\xi E) - i \sin(\xi E)] \end{aligned} \quad (5)$$

Масштабируя по $Z[\text{Re}(\beta)]$, получим:

$$\begin{aligned} R &= \frac{Z(\beta)}{Z[\text{Re}(\beta)]} = \frac{\sum_E p(E, \beta) e^{-\eta E} [\cos(\xi E) - i \sin(\xi E)]}{\sum_E p(E, \beta) e^{-\eta E}} = \\ &= \langle \cos(\xi E) \rangle_\eta - i \langle \sin(\xi E) \rangle_\eta \end{aligned} \quad (6)$$

Получив, что $R = \langle \cos(\xi E) \rangle_\eta - i \langle \sin(\xi E) \rangle_\eta$, можно оценить нули, минимизируя

$$R^2 = \langle \cos(\xi E) \rangle_\eta^2 + \langle \sin(\xi E) \rangle_\eta^2 \quad (7)$$

Известно поведение действительной части нулей:

$$\text{Re}(\beta) - \beta_c(\infty) \sim L^{-1/\nu} \quad (8)$$

и мнимой части:

$$\text{Im}(\beta) \sim L^{-1/\nu} \quad (9)$$

Нули Фишера получены при помощи метода гистограмм из следующих соотношений:

$$\langle \cos(\xi E) \rangle_\eta = \frac{\sum_E \sin(\xi E) e^{(\eta - \beta_c) \Delta E}}{\sum_E e^{(\eta - \beta_c) E}} \quad (10)$$

$$\langle \sin(\xi E) \rangle_\eta = \frac{\sum_E \sin(\xi E) e^{(\eta - \beta_c) \Delta E}}{\sum_E e^{(\eta - \beta_c) E}} \quad (11)$$

Вид полученных гистограмм для рассматриваемой системы представлены на рис. 1–4.

Таблица 1

Действительная и мнимая части нулей статистической суммы для системы с разными линейными размерами решетки для спиновой концентрации $p = 0,95$

L	Re	Im
20	0.35036	0.00867
24	0.35712	0.00689
28	0.36614	0.00529
32	0.37006	0.00445

Таблица 2

Значения критического индекса ν , полученные из поведения действительной и мнимой части нулей статистической суммы в сравнении с экспериментальными результатами [3]

ν (Re)	ν (Im)	ν
0.67763	0.68876	0.69

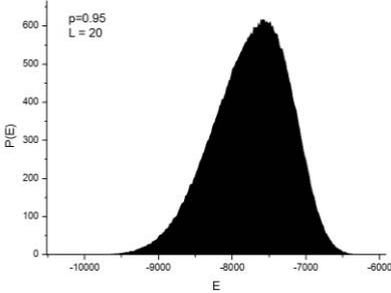


Рис. 1. Вид гистограммы для трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией $p = 0,95$ и линейным размером решетки $L = 20$

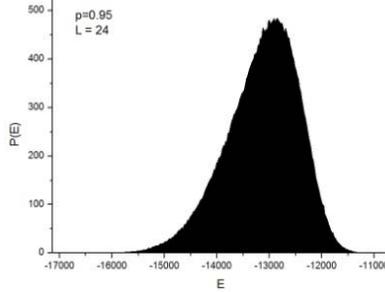


Рис. 2. Вид гистограммы для трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией $p = 0,95$ и линейным размером решетки $L = 24$

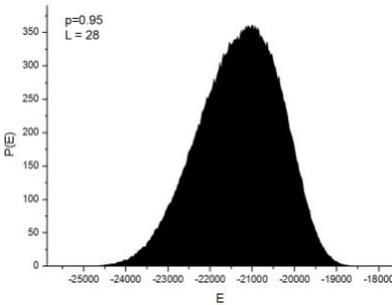


Рис. 3. Вид гистограммы для трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией $p = 0,95$ и линейным размером решетки $L = 28$

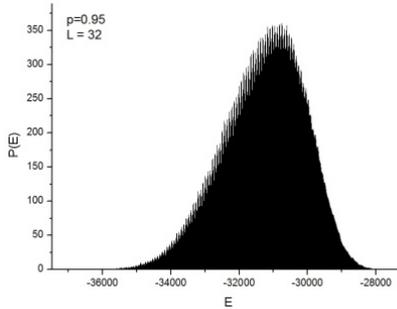


Рис. 4. Вид гистограммы для трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией $p = 0,95$ и линейным размером решетки $L = 32$

В данной работе были получены нули статистической суммы для неупорядоченной модели Изинга ($p = 0,95$), определена величина критического индекса ν для $p = 0,95$. В настоящее время определяются нули для $p = 0,5; 0,6; 0,8$ и $L = 48, 64, 72$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Ferrenberg R.H., Swendsen R.H.* New Monte Carlo Technique for Studying Phase Transitions // *Phys. Rev. Lett.* 61. 1988. P. 2635–2638.

[2] *Gordillo-Guerrero A., Kenna R.* Universal amplitude ratios in the Ising model in three dimensions // *Phys. Rev* 22. 2011. P. 1–16.

[3] *Прудников В.В., Прудников П.В., Вакилов А.Н., Криницин А.С.* // *ЖЭТФ.* 2007. Т. 132. С. 162.

Виктор Викторович Дудник,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира, 55А, (3812)647787,
rabotnikov90@mail.ru

Оценка производительности современных вычислительных устройств и технологий параллельных вычислений в задачах моделирования фазовых превращений

Д. В. Евдокимов

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, проф. П. В. Прудников

Осуществлена сравнительная оценка производительности сопроцессора Nvidia Tesla c1060 с использованием технологий параллельного программирования CUDA и OpenCL, Intel Xeon Phi 5110P с использованием технологии OpenCL, а также сервера IBM S822 с использованием технологии MPI, путём оценки среднего значения времени, уходящего на переворот спина в 2D модели Изинга при поиске критической температуры в ферромагнетике методом кумулянтов Биндера.

В последние годы резко возрос интерес к технике использования устройств архитектуры SIMD для выполнения параллельных расчётов в приложениях для общих вычислений, которые обычно проводна устройствах, архитектуры SISD. Принципиально SIMD-устройства отличаются параллелизмом на уровне инструкций. Уже 20 процентов суперкомпьютеров, входящих в топ 500 самых мощных компьютеров в мире, построены на основе SIMD-устройств и это число продолжает расти, равно как и продолжает расти производительность новых моделей SIMD-устройств, попадающих на рынок. Однако, несмотря на разгульную производительность, разработка вычислительных программ, оптимизированных для выполнения на SIMD-устройствах, затруднена наличием более сложной по сравнению с SISD-устройствами программной моделью, учитывающей особенности архитектуры. В связи с этим интерес к таким многоядерным серверным системам, как IBM Power, пригодным для проведения многопоточных вычислений, но относящимся к устройствам, построенным на SISD-архитектуре, не ослабляется.

Интерес к применению SIMD-устройств в научных исследованиях привёл к появлению серии видеокарт NVIDIA Tesla, предназначенных для научных вычислений, а также сопроцессоров Intel Xeon Phi. В последние годы выходит достаточно большое количество статей, посвящённых применению SIMD-устройств в численном исследовании физических моделей. Описанное в них применение графического процессора позволяет как ускорить процесс вычисления на 1-4 порядка [1–3], так и рассмотреть спиновые системы больших (с $L > 512$) размеров [4].

Выбор 2D модели Изинга для оценки производительности обусловлен тем, что она является одной из классических моделей теоретической физики. Рассмотрим решетку, состоящую из спинов. В случае 2D модели Изинга решётка содержит $N = L * L$ узлов (L -- линейный размер решётки). Свяжем с каждым узлом решетки спин S_i . $S_i = +1$, если спин ориентирован вверх, и $S_i = -1$, если ориентирован вниз. Любая конкретная конфигурация, т.е. микросостояние решетки, задается набором переменных $S_1, S_2, S_3, \dots, S_N$ для всех узлов решетки. Макроскопические свойства системы определяются свойствами ее возможных микросостояний. При этом необходимо знать зависимость энергии системы E от конфигурации спинов. Так, полная энергия при наличии магнитного поля h в модели Изинга:

$$E = -J \sum_{i,j}^N \vec{S}_i \vec{S}_j - h \sum_i^N \vec{S}_i,$$

где первая сумма берётся по всем ближайшим соседним парам спинов, а вторая – по всем спинам решетки. Константа обменного взаимодействия J является мерой силы взаимодействия между ближайшими соседними спинами. Если $J > 0$, то состояния, которые характеризуются одинаковой ориентацией спинов ближайших соседей, энергетически выгоднее состояний, у которых соседние спины направлены в противоположные стороны.

Следовательно, можно ожидать, что для $J > 0$ состояние с наименьшей энергией является ферромагнитным, т.е. в среднем суммарное число спинов, ориентированных в одном направлении, не равно нулю. Если $J < 0$, то с энергетической точки зрения предпочтительнее состояния, для которых соседние спины антипарал-

лельны, и можно ожидать, что состояние с наименьшей энергией является антиферромагнитным, т.е. упорядочены через один. В данной работе рассматриваются решётки в ферромагнитном состоянии, т.е. при $J > 0$. Для вычисления критической температуры фазового перехода второго рода в 2D и модели Изинга используют метод кумулянтов Биндера. Сущность метода заключается в вычислении значений кумулянта Биндера 4-го порядка:

$$U_4(L, T) = 1 - \frac{\langle M(T)^4 \rangle}{3 \langle M(T)^2 \rangle^2}$$

для решёток разных линейных размеров. Вследствие влияния конечности системы графики зависимости $U_4(L, T)$ не совпадают на всём температурном интервале, кроме критической температуры T_c (рис.).

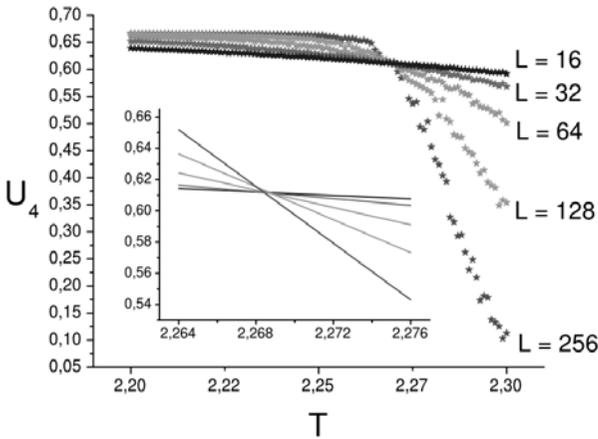


График кумулянтов Биндера четвертого порядка для решёток с линейными размерами 16, 32, 64, 128, 256 для 2D модели Изинга

В данном исследовании рассмотрен температурный интервал $[2.2, 2.3] J/K_b T$, линейные размеры решётки $L = 256, 512, 1024, 2048$. На достижение системой состояния теплового равновесия отводилось 10.000 шагов Монте-Карло. Статистическое усреднение значений кумулянтов проводилось по 100.000 шагам Монте-Карло.

Для моделирования на графическом процессоре была разработана программа на CUDA. Затем данная программа была преоб-

разована в программу на OpenCL. Подобное преобразование возможно в следствии сходства программ на OpenCL и CUDA на уровне исходных текстов. Это позволило произвести моделирование не только на GPU, но и на сопроцессоре Intel Xeon Phi. Также была разработана MPI-программа для запуска на серверной системе IBM Power S822. Результаты оценки полученной производительности приведены в таблице.

**Время, уходящее на переворот одного спина в нс
в зависимости от линейных размеров решётки для C1060,
5110P, S822**

L	t _{CUDA} , нс	t _{OpenCL} , нс	t _{MPI} , нс
256	1.8 (C1060)	2.1 (C1060) 2.0 (5110P)	4.3 (S822)
512	2.0 (C1060)		4.8 (S822)
1024	2.0 (C1060)		5.3 (S822)
2048			6.3 (S822)

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Preis T., Virnau P., Paul W., Schneider J.J.* GPU accelerated Monte Carlo simulation of the 2D and 3D Ising model // *Journal of Computational Physics*. 2009. V. 228. P. 4468–4477.

[2] *Komura Y., Okabe Y.* GPU-based single-cluster algorithm for the simulation of the Ising model // *Journal of Computational Physics*. 2012. V. 231. P. 1209–1215.

[3] *Komura Y., Okabe Y.* GPU-based Swendsen–Wang multi-cluster algorithm for the simulation of two-dimensional classical spin systems // *Computer Physics Communications*. 2012. V. 183. P. 1155–1161.

[4] *Kaupuzs J., Rimsans J.* Parallelization of the Wolff single-cluster algorithm // *Physical Review E*. 2010. V. 81. P. 026701-10–026701-10.

Дмитрий Владимирович Евдокимов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
dmitriy.evdokimov@nibiru.pro

Исследование влияния шероховатости поверхностей на магнитные и энергетические характеристики адсорбированных ферромагнитных плёнок

П. Ю. Ежков

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. М. В. Мамонова

В рамках метода функционала плотности с учётом температурных эффектов осуществлено исследование поведения полной межфазной энергии, энергии адсорбции и относительной доли атомов адсорбата в плёнке для монослойной системы Fe/W(110). Был проведён учёт влияния межфазной шероховатости поверхностей и эффектов перемешивания адатомов с атомами подложки. Построено пространственное распределение намагниченности в системе.

Развитие современной микроэлектроники характеризуется переходом к наномасштабам. При этом роль поверхности, межфазного взаимодействия разнородных материалов вдоль границы раздела во влиянии на физические свойства элементов малых размеров становятся значительными и зачастую определяющими. Поэтому особый интерес представляет изучение свойств ультратонких плёнок, образующихся на поверхности различных материалов в результате напыления или адсорбционных процессов.

В последние десятилетия в результате развития теоретических методов описания адсорбции и экспериментальных исследований стало ясно, что приповерхностный слой подложки и сама плёнка терпят реконструкцию на атомном уровне, а также, что происходят тепловые процессы перемешивания атомов адсорбата и субстрата с осуществлением активированной (заместительной) адсорбции. Кроме того, реальные поверхности не являются абсолютно гладкими, т. е. имеют некоторую шероховатость.

Среди теоретических методов исследования адсорбции в тонких металлических плёнках хорошо себя зарекомендовал метод функционала спиновой плотности (МФП) [1–3].

В данной работе исследуется в рамках МФП при учёте температурных эффектов поведение полной межфазной энергии σ , энергии активированной адсорбции E_{ads} , а также распределение намагниченности в системе 1 ML Fe/W (110), полученное в рамках двумерной модели Изинга. При этом проводится учёт влияния межфазной шероховатости поверхностей путём введения в модель между подложкой и плёнкой вакуумного зазора полушириной D . В расчёте распределения намагниченности был проведён учёт эффектов перемешивания в рамках модели описания поверхностных бинарных растворов, изложенной в [1].

Исследовалась система, состоящая из 5 подобластей, конфигурация которой представлена на рис. 1.



Рис. 1. Конфигурация исследуемой системы

На рис. 1 обозначены: n_1 , n_2 , n_3 – характерные значения электронной плотности; p , p' – относительная доля атомов адсорбата в плёнке и в приповерхностном слое, соответственно; A – адсорбат; S – субстрат. Пространственное распределение намагниченности выбиралось пропорционально распределению электронной плотности адсорбата.

На рис. 2 представлены графики зависимости σ от D для температур 100 К и 500 К для различных параметров покрытия θ . Видно, что существуют два граничных значения параметра покры-

тия: $\theta_{\min}(T)$ такое, что при $\theta < \theta_{\min}$ межфазная энергия не имеет минимума в положительной области D , и $\theta_{\max}(T)$ такое, что при $\theta > \theta_{\max}$ минимум межфазной энергии имеет отрицательное значение. Таким образом, введение зазора приводит к появлению интервала существования плёнки по параметру покрытия, зависящего от T .

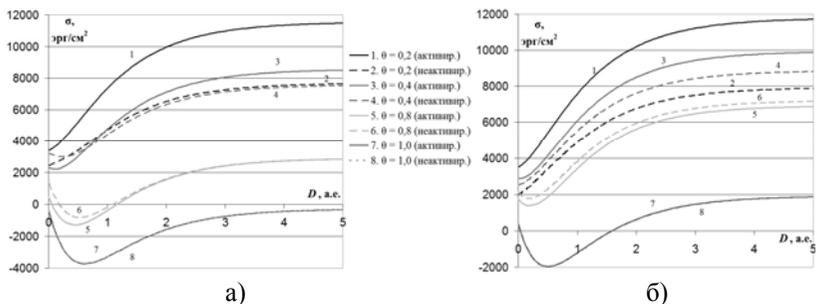


Рис. 2. Полная межфазная энергия как функция полуширины зазора: а) $T = 100$ К; б) $T = 500$ К

Полученные значения θ_{\min} и θ_{\max} для активированной и неактивированной адсорбции представлены на рис. 3.

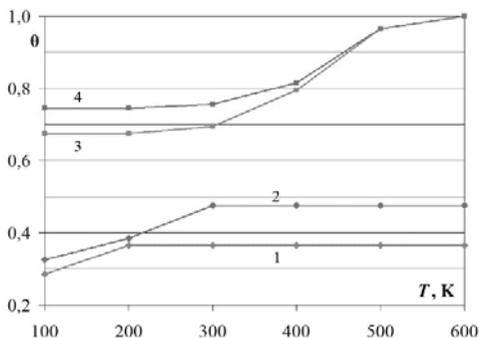


Рис. 3. Параметры покрытия θ_{\min} (1, 2) и θ_{\max} (3, 4).

Кривые 1 и 3 соответствуют активированной адсорбции, 2 и 4 – неактивированной адсорбции

На рис. 4 представлена зависимость E_{ads} от θ как с учётом, так и без учёта шероховатости поверхностей. Из него видно, что

учёт шероховатости повышает энергию адсорбции. С увеличением θ растёт разница между шероховатым и шероховатым случаями (соответственно, $D = 0$ и $D = D_0$, где D_0 – зазор, на котором достигается минимум σ), достигая $\sim 1,3$ эВ при $T = 400$ К и $\theta = 1,0$.

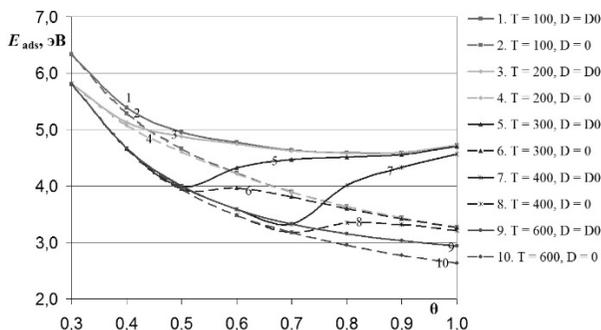


Рис. 4. Зависимость энергии активированной адсорбции от θ . Сплошными линии соответствуют равновесному зазору, прерывистые – нулевому

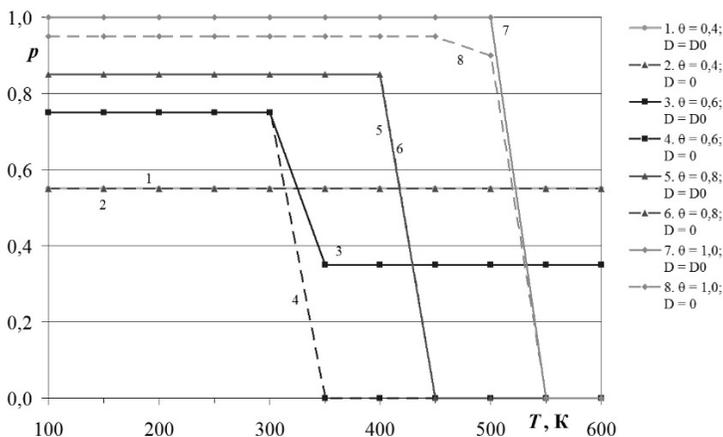


Рис. 5. Зависимость относительной доли атомов адсорбата в плёнке от температуры

На рис. 5 представлена зависимость параметра p от температуры для различных θ . Показаны случаи $D = 0$ и $D = D_0(T, \theta)$ (соответственно, штриховая и сплошная линии). Как и ожидалось,

рост температуры увеличивает перемешивание (понижает p), т. е. ухудшает магнитные свойства плёнки. Учёт шероховатости, наоборот, приводит к улучшению магнитных свойств. Графики распределения намагниченности в системе для случаев $T = 100$ К, $\theta = 1,0$; $T = 500$ К, $\theta = 1,0$ представлены на рис. 6.

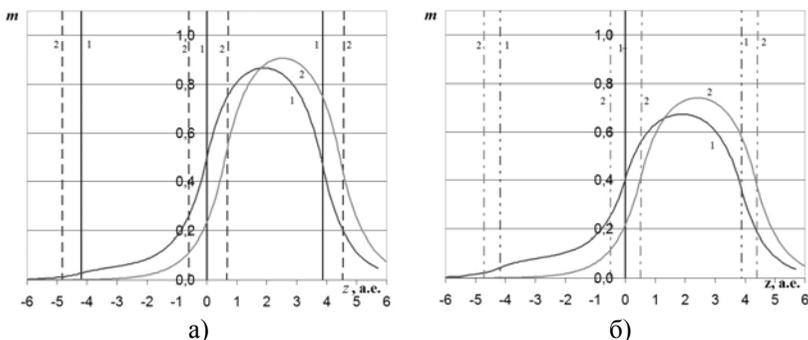


Рис. 6. Распределение намагниченности $m(z)$ в системе:

а) $T = 100$ К, $\theta = 1,0$; б) $T = 500$ К, $\theta = 1,0$.

1 соответствует нулевому зазору, 2 – равновесному D_0 .

Вертикальные линии обозначают границы подобластей в системе.

Как видно, учёт шероховатости увеличивает максимальное значение намагниченности в плёнке, тем самым улучшая её магнитные свойства.

ЛИТЕРАТУРА

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

[2] *Прудников В.В., Мамонова М.В., Климов С.П., Морозов Н.С.* // Вестн. Ом. ун-та, 2009. № 2. С. 81–87.

[3] *Мамонова М.В., Прудников В.В., Климов С.П.* // Вестн. Ом. ун-та, 2010. № 4. С. 50–56.

Павел Юрьевич Ежков,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)647787,
ezhkov.pavel@gmail.com

Исследование эффектов памяти в неравновесном критическом поведении ультратонких магнитных пленок

А. С. Елин

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, проф. П. В. Прудников

Осуществлено компьютерное моделирование неравновесного критического поведения изингоподобных ферромагнитных пленок. Проведено исследование эффектов старения и эффектов памяти.

Изучение ультратонких магнитных пленок представляет большой интерес. В них могут наблюдаться новые физические явления и реализовываться такие состояния, которые не наблюдаются в объемных образцах. Возможная область применения тонкопленочных магнитных структур простирается от технологий записи высокой плотности до устройств спинтроники [1].

Главной особенностью неравновесного поведения систем с медленной динамикой является нарушение трансляционной инвариантности во времени за счет долговременного влияния неравновесных начальных состояний таких систем. Это находит проявление прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как корреляционные функции и функции отклика. В таких системах наблюдаются свойства старения [2].

В данной работе рассматривается модель изингоподобной ферромагнитной пленки на кубической решетке с линейным размером L и наложенными периодическими граничными условиями в направлениях x и y и свободными граничными условиями в направлении оси z . Гамильтониан системы записывается в виде

* Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 14-12-00562. Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова [3].

© А. С. Елин, 2015

$$H = -J_{xy} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_z \sum_{(xy)} S_i S_j, \quad (1)$$

где $S_i = \pm 1$, $J_{xy} = 1$ и $J_z = 1$ интегралы обменного взаимодействия спинов в слое и между слоями, соответственно, $\langle i, j \rangle$ – сумма по ближайшим соседям в плоскости, а (i, j) – сумма по ближайшим спинам вдоль направления z.

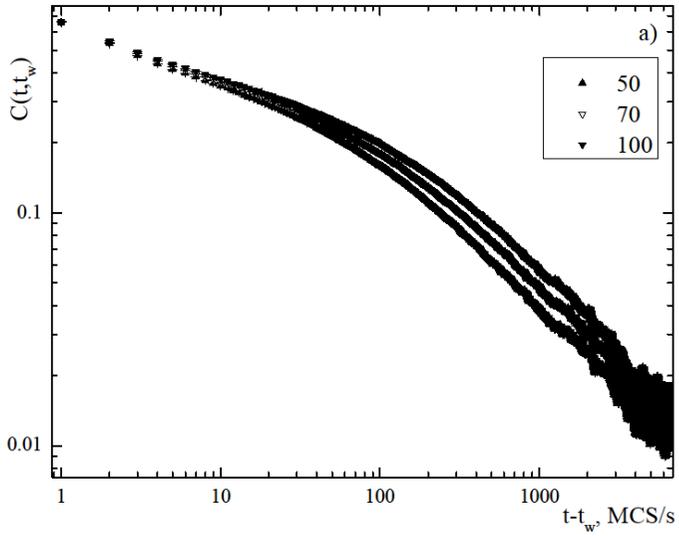
Моделирование проводилось для систем размера $L \times L \times N$, где L – линейный размер слоя, а N – число слоев. Для обновления спиновой конфигурации использовался алгоритм Метрополиса.

Для исследования эффектов старения в неравновесном критическом поведении ферромагнитной пленки производился расчет двухвременной автокорреляционной функции

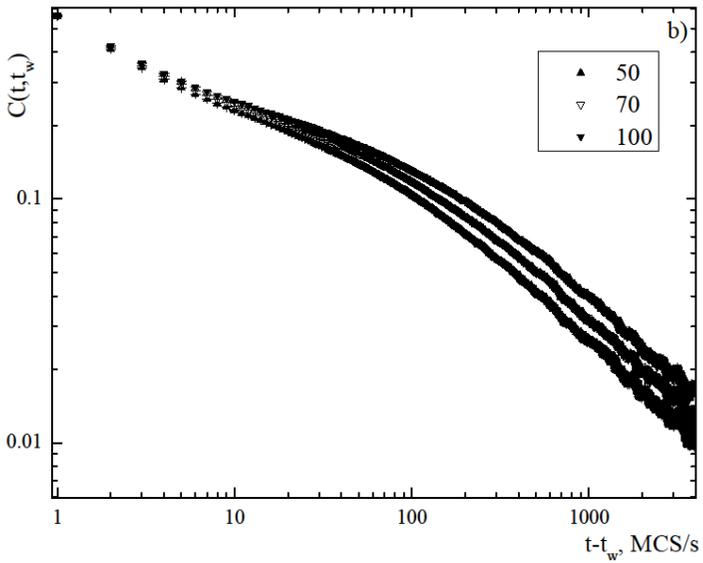
$$C(t, t_w) = \langle \frac{1}{N} \sum_i S_i(t) S_i(t_w) \rangle - \langle M(t) \rangle \langle M(t_w) \rangle, \quad (2)$$

где t_w – время ожидания («возраст образца»); t – время с момента приготовления образца. Системе предоставлялась возможность свободно эволюционировать из начального состояния до момента времени t_w , начиная с которого производилось вычисление автокорреляционной функции. Мы рассмотрели системы размером $L = 128$ и $N = 2; 4; 6; 8; 10$. Была исследована эволюция тонкой пленки как из высокотемпературного ($m_0 \ll 1$), так и низкотемпературного ($m_0 = 1$) начальных состояний. Стартуя из начальной конфигурации, конфигурация системы обновлялась алгоритмом Метрополиса при критических температурах $T_c = 3.2076(4)$ для $N = 2$, $T_c = 3.8701(3)$ для $N = 4$, $T_c = 4.1179(3)$ для $N = 6$, $T_c = 4.2409$ для $N = 8$ и $T_c = 4.3117(3)$ для $N = 10$ [4]. Моделирование выполнялось до 10000 шагов Монте-Карло на спин (MCs/s).

Из рис. 1 видно, что с увеличением времени ожидания процесс степенной релаксации системы как при эволюции из высокотемпературного состояния, так и из низкотемпературного состояния, замедляется (т.е. имеют место эффекты старения).



а



б

Рис. 1. Временные зависимости двухвременной автокорреляционной функции при эволюции из высокотемпературного (а) и низкотемпературного (б) начальных состояний для системы с $N = 2$

Было проведено исследование эффектов памяти в критическом поведении ферромагнитной пленки. Под эффектами памяти понимают явление того, что система способна сохранять память о состоянии, которое у неё было до начала циклического температурного воздействия [5]. При исследовании данных эффектов производился расчет автокорреляционной функции в зависимости от времени в критической точке ($T = T_c$). При этом в определенный момент времени t_{start} производилось скачкообразное изменение температуры ΔT . Температура $T + \Delta T$ держалась до момента времени t_{end} , после чего она скачкообразно изменялась до первоначального значения.

На рис. 2 видно, что после циклического температурного воздействия поведение автокорреляционной функции является практически таким же, как если бы не было циклического температурного воздействия. Таким образом, в неравновесной критической эволюции ультратонких изинговских пленок из высокотемпературного состояния наблюдаются эффекты памяти.

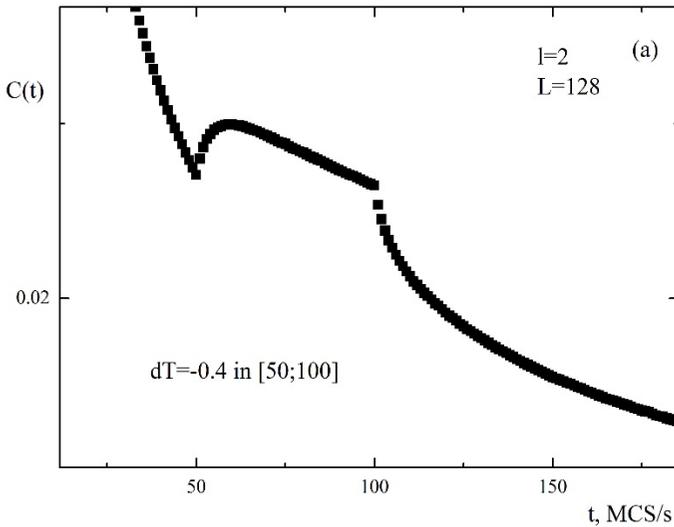


Рис. 2. Поведение автокорреляционной функции $C(t)$ для двухслойной пленки при $T = T_c$

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Mangin S. et al.* Current-induced magnetization reversal in nanopillars with perpendicular anisotropy *Nat. Mater.* 2006. V. 5. P. 210–215.
- [2] *Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F.* Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state *J. Stat. Mech.* 2006. V. 6. P. 1–34.
- [3] *Воеводин Вл.В. и др.* Открытые системы. 7 (2012).
- [4] *Laosiritaworn Y., Poulter J., Staunton J.B.* Magnetic properties of Ising thin films with cubic lattices // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 70. P. 104413-1-12.
- [5] *F. Lefloch et al.* *Europhy. Let.* (1992).

Алексей Сергеевич Елин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)647787.

Нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в магнитных системах в режиме неравновесной критической динамики

И. В. Лаврухин

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, проф. В. В. Прудников

Приведена методика и результаты ренормгруппового описания неравновесной критической релаксации модели А с эволюцией из начального высокотемпературного состояния. Выявлены нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в критическом режиме и двухвременная зависимость для корреляционной функции и функции отклика. Для универсального флуктуационно-диссипативного отношения проведен расчет флуктуационных и примесных поправок в двухпетлевом приближении при фиксированной размерности пространства $d=3$. Для вычисления предельного значения флуктуационно-диссипативного отношения применен метод суммирования рядов Паде-Бореля.

Системы, испытывающие фазовый переход второго рода, вблизи критической температуры характеризуются аномально большими временами релаксации. Одним из наиболее интересных явлений, проявляющихся на неравновесном этапе их эволюции, является эффект *старения*: корреляционная функция и функция отклика системы проявляют нетривиальную двухвременную зависимость от времен s и $t > s$, где s – возраст системы, время, прошедшее с момента приготовления системы до начала измерения ее свойств, а t – время измерения. При этом время релаксации системы тем больше, чем она «старше». Для равновесной динамики данные функции зависят только от временного промежутка $t - s$.

Явление старения сопровождается нарушением флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ), для описания которого вво-

дятся такие новые понятия, как флуктуационно - диссипативное отношение (ФДО) [1] и эффективная температура [2,3].

Пусть система, описываемая гамильтонианом Гинзбурга – Ландау – Вильсона, приведена в критическое состояние из начального состояния ($t = 0$), соответствующего неупорядоченной фазе ($T \gg T_c$)

$$\hat{H} = \int d^3x \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} (r_0 + \psi(x)) \phi^2 + \frac{1}{4!} g_0 \phi^4 \right]. \quad (1)$$

Здесь ϕ – параметр порядка, $r_0 \sim T - T_c$ – приведенная температура, $\psi(x)$ – поле дефектов структуры с гауссовым распределением

$$\langle \psi(x) \rangle = 0, \quad \langle \psi(x) \psi(y) \rangle = \nu \delta(x - y), \quad (2)$$

где ν – положительная константа, пропорциональная концентрации дефектов и квадрату величины их потенциала. Для случая систем без примесей $\psi(x) \equiv 0$.

Функция отклика системы $R(t, s)$ показывает реакцию параметра порядка во время t на малое возмущение внешнего поля h , приложенное в момент времени s

$$R_{i,j}(t, s) = \left. \frac{\delta \langle \phi_i(h) \rangle}{\delta h_j(s)} \right|_{h=0}, \quad (3)$$

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

$$C_{i,j}(t, s) = \langle \phi_i(t) \phi_j(s) \rangle. \quad (4)$$

Связь этих двух функций определяется флуктуационно - диссипативной теоремой

$$R_{i,j}(t, s) = \frac{1}{T} \frac{\partial C_{i,j}(t, s)}{\partial s}, \quad (5)$$

где T – температура.

Однако на неравновесном этапе релаксации ФДТ может нарушаться, поэтому для описания системы вводят флуктуационно -

но-диссипативное отношения в пространстве координат и импульсном пространстве

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

предельное значение которых

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

как было показано в [4; 5], является универсальной характеристикой неравновесного поведения в рамках определенной релаксационной модели.

С учетом временной зависимости приведенной температуры в критическом режиме $r_t \sim t^{-1/(z\nu)} \sim t^{-1}$, были получены затравочные корреляционная функция и функция отклика в импульсном пространстве

$$R_q^0(t, s) = \theta(t-s) \frac{s}{t} e^{-q^2(t-s)}, \quad (8)$$

$$R_q^0(t, s) = \theta(t-s) \frac{s}{t} e^{-q^2(t-s)}, \quad (9)$$

дающие значения предельного ФДО $X_{q=0}^\infty = 1/2$ и $X_{q \neq 0}^\infty = 1$, что свидетельствует о нарушении ФДТ для моды параметра порядка с $q = 0$.

Учет взаимодействия флуктуаций параметра порядка и наличия примесей на функцию отклика и корреляционную функцию можно представить в виде разложения в ряд по степеням вершин взаимодействия g_0 и v_0 . Коэффициенты при них будут определяться диаграммами Фейнмана с соответствующими симметричными множителями

$$R = R^0 - g_0 R^{1,1} + g_o^2 \sum_i R^{2,i} - v_0 R_d^{1,1} + g_0 v_0 \sum_i R_d^{2,i} + v_o^2 \sum_i R_{dd}^{2,i} \quad (10)$$

$$C = C^0 - g_0 C^{1,1} + g_o^2 \sum_i C^{2,i} - v_0 C_d^{1,1} + g_0 v_0 \sum_i C_d^{2,i} + v_o^2 \sum_i C_{dd}^{2,i} \quad (11)$$

Нами были получены значения предельного флуктуационно-диссипативного для однородных систем (табл. 1) как с помощью прямой подстановки функций $R(t, s)$ и $C(t, s)$ в выражение (6) для ФДО, так и через отношение амплитуд скейлинговых форм [6].

Также представлены значения X^∞ , полученные в рамках применения метода ε -разложения [7] и метода Монте-Карло [8; 9].

Таблица 1

Значения ФДО для однородных систем

N	$X_{d=3}^\infty$ (6)	$X_{d=3, \text{ампл}}^\infty$	X_ε^∞ [7]	X_{MC}^∞ [8]	X_{MC}^∞ [9]
1	0.416(29)	0.471(3)	0.429(6)	0.380(13)	0.390(12)
2	0.400(27)	0.465(5)	0.416(8)	–	–
3	0.386(23)	0.468(8)	0.405(10)	–	–

Наличие примесей, согласно критерию Харриса, будет оказывать существенное влияние только на системы, описываемые моделью Изинга. Для них было вычислено предельное значение ФДО с учетом соотношения $t \gg s$.

Таблица 2

Значения ФДО для примесной модели Изинга

$X_{d=3}^\infty$	X_ε^∞ [7]	X_{MC}^∞ [8]	X_{MC}^∞ [9]
0.446(59)	0.416	0.413(11)	0.415(18)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Cugliandolo L.F., Kurchan J. // Phys.Rev.Lett. 1993. V. 71. P. 173.*
- [2] *Cugliandolo L.F., Kurchan J. // Phys.Rev. E. 1997. V. 55. P. 3898.*
- [3] *Cugliandolo L.F. // AIP Conf. Proc. 1999. V. 484. P. 238.*
- [4] *Calabrese P., Gambassi A. // Phys.Rev. E. 2002. V. 65. P. 066120.*
- [5] *Godrèche C., Luck J.M. // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. V. 14. P. 1589.*
- [6] *Godrèche C., Luck J.M. // J. Phys. A: Math. Gen. 2000. V. 33. P. 9141.*
- [7] *Calabrese P., Gambassi A. // Phys.Rev. E. 2002. V. 66. P. 066101.*

[8] Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Том 98. Вып. 10. С. 693–699.

[9] Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Pospelov E.A. // Prog. Theor. Exp. Phys. 2015. V. 2015. 053A01. P. 1–20.

Иван Владимирович Лаврухин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс аспирантуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)647787,
jovanni.omsu@gmail.com

Численное исследование эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга

П. Н. Маляренко

Науч. рук. д-р физ.-мат. наук, проф. В. В. Прудников

Осуществлено исследование методами Монте-Карло влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Изинга при ее эволюции из низкотемпературного начального состояния. На основе анализа двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости для систем с различными спиновыми концентрациями выявлены эффекты старения, характеризующиеся аномальным замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания, и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы.

В последние годы исследование систем с медленной динамикой вызывает значительный интерес. Это обусловлено наблюдаемыми в них свойствами старения при медленной эволюции из неравновесного начального состояния и нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы [1]. Данные особенности неравновесного поведения могут наблюдаться в системах при фазовых переходах второго рода [2], так как их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации.

Эффекты старения проявляются на неравновесном этапе эволюции системы. Они выражаются в существовании двухвременных зависимостей таких функций, как корреляционная функция и функция отклика, зависящих от времени ожидания t_w и времени наблюдения $t-t_w$. Время ожидания характеризует время, прошедшее с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. В течение $t-t_w \ll \tau_{rel}$, где τ_{rel} – время релаксации системы, во временном поведении системы проявляется влия-

ние начальных состояний системы и эффектов старения, характеризующихся замедлением релаксационных процессов с увеличением t_w .

Флуктуационно-диссипативная теорема (ФДТ) связывает функцию отклика системы на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ и корреляционную функцию $C(t, t_w)$:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (1)$$

где $X(t, t_w)$ – флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО). ФДТ утверждает, что в равновесном состоянии $X(t > t_w >> \tau_{rel}) = 1$. Предельное значение

$$X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w) \quad (2)$$

может быть использовано в качестве универсальной характеристики неравновесного поведения.

Функция отклика $R(t, t_w)$ спиновой системы на внешнее магнитное поле, приложенное к системе в момент времени t_w , определяется соотношением ($t > t_w$)

$$R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \frac{\delta \langle S(x, t) \rangle}{\delta h(x, t)} \Big|_{h=0}. \quad (3)$$

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

$$\chi(t, t_w) = \int_0^{t_w} dt' R(t, t') \quad (4)$$

В данной работе проведены исследования эффектов старения в неравновесном критическом поведении трехмерной однородной и структурно неупорядоченной модели Изинга. Гамильтониан модели задаётся выражением

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} p_i p_j S_i S_j, \quad (5)$$

где суммирование проводится по ближайшим соседям, $S_i = \pm 1$.

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

$$C(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle \right] - \left[\left\langle \sum_{i=1}^N S_i(t) \right\rangle \left\langle \sum_{i=1}^N S_i(t_w) \right\rangle \right] \quad (6)$$

и динамической восприимчивости [1]:

$$\chi(t, t_w) = \frac{1}{TN} \sum_{i=1}^N \left[\langle p_i S_i(t) \Delta S_i(t_w) \rangle \right], \quad \Delta S_i(t_w) = \sum_{s=0}^{t_w} [S_i(s) - S_i^W(s)] \quad (7)$$

где $N = pL^3$ – число спинов, функция $\Delta S_i(t_w)$ вычисляется в процессе моделирования с момента времени $t = 0$ до $t = t_w$, $S_i^W = th(J \sum_{m \neq i} p_m S_m / T)$.

Моделирование систем проводилось на кубической решетке с линейным размером $L = 128$ со спиновыми концентрациями $p = 1, 0; 0,95; 0,8; 0,6; 0,5$ при соответствующих критических температурах T_c . Формировалось низкотемпературное (при $T = 0$) начальное состояние системы с значением намагниченности, равным единице, которое для исследуемого (при $T = T_c$) критического режима является существенно неравновесным. Поведение автокорреляционной функции и динамической восприимчивости исследовалось для различных времён ожидания.

В режиме старения $t \sim t_w \sim t_w$ корреляционная функция и восприимчивость описываются соотношениями [1]:

$$C(t, t_w) \sim t_w^{-(1+\eta)/z} F_C(t/t_w); \quad \chi(t, t_w) \sim t_w^{-(1+\eta)/z} F_\chi(t/t_w) \quad (8)$$

Для проверки этих соотношений были построены зависимости $t_w^{(1+\eta)/z} C(t, t_w)$ и $t_w^{(1+\eta)/z} \chi(t, t_w)$ от $(t-t_w)/t_w$, показанные на рис. 1 и демонстрирующие «коллапс» полученных данных для различных t_w на соответствующих различным спиновым концентрациям p универсальных кривых.

Для «чистой» системы скейлинговые функции $F_{C,\chi}$ на долговременном этапе $t-t_w \gg t_w$ характеризуются зависимостью $F_{C,\chi} \sim (t/t_w)^{-\varphi}$, где показатель $\varphi = 1 + \beta(\delta + 2)/z\nu$. В структурно неупорядоченных системах значения показателей для автокорреляционной функции и восприимчивости на долговременном этапе значительно отличаются. Так, степенное поведение скейлинговой функции F_C характеризуется показателем c_a : $F_C \sim (t/t_w)^{-c_a}$ с

$c_a = \beta l(vz)$. Эти изменения связаны с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы при переходе от однодоменного состояния при $T = 0$ к многодоменной флуктуационной структуре при $T = T_c$.

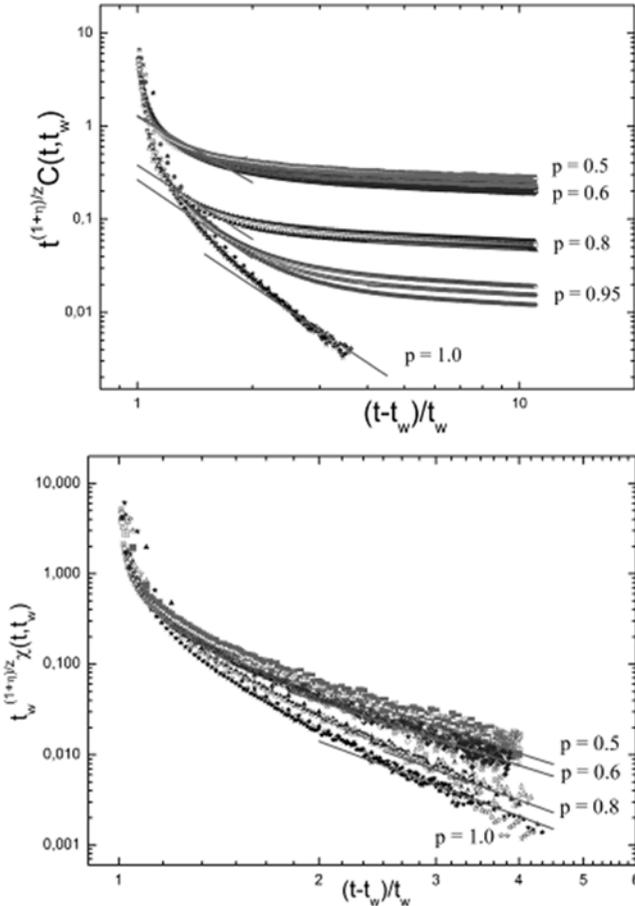


Рис. 1. Скейлинговые зависимости для автокорреляционной функции $t_w^{(1+\eta)/z} C(t, t_w)$ и восприимчивости $t_w^{(1+\eta)/z} \chi(t, t_w)$ от $(t-t_w)/t_w$, демонстрирующие «коллапс» полученных для различных t_w данных

Чтобы вычислить ФДО, нужно выразить $T\chi(t, t_w)$ как функцию $C(t, t_w)$ и выделить значение

$$X^\infty(t_w) = \lim_{C \rightarrow 0} \frac{d(T\chi)}{dC} \quad (9)$$

Получив $X^\infty(t_w)$ для различных времён ожидания t_w и осуществив экстраполяцию $X^\infty(t_w \rightarrow \infty)$, определяют искомое предельное ФДО X^∞ . Из представленных на рис. 2 графиков зависимостей $T\chi$ от C видно, что для «чистой» системы эта зависимость имеет линейный характер для временного интервала $t - t_w \gg t_w$ изменения автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и характеризуется предельным значением ФДО $X^\infty = 0,784(7)$, которое находится в хорошем согласии с теоретико-полевым $X^\infty \simeq 0,78$ [1]. Однако для структурно неупорядоченных систем за счет пиннинга доменных стенок на дефектах проявляется наличие двух линейных участков: первый участок соответствует изменению автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ на временах $t - t_w \sim t_w$, а второй – долговременному этапу эволюции $t - t_w \gg t_w$. Первые участки характеризуется наклоном, близким к среднеполевым значениям предельного ФДО $X^\infty = 0,8$ [1], тогда как вторым участкам соответствует $X^\infty = 0$.

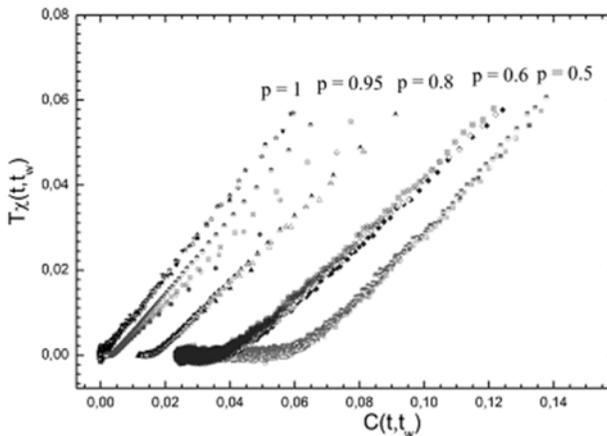


Рис. 2. Зависимости восприимчивости от автокорреляционной функции, определяющие флуктуационно-диссипативное отношение

В данной работе выявлено существенное влияние дефектов на неравновесную критическую динамику трехмерной модели Изинга при ее эволюции из низкотемпературного состояния. Показано, что с ростом концентрации дефектов происходит усиление эффектов старения. Вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах наблюдается сильное замедление эффектов корреляции в структурно неупорядоченных системах по сравнению с «чистой» системой, а предельные значения ФДО, определяемые динамикой доменов в долговременном режиме, становятся равными нулю.

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] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Pospelov E.A., Malyarenko P.N., Vakilov A.N.* Aging and non-equilibrium critical phenomena in Monte Carlo simulations of 3D pure and diluted Ising models // *Prog. Theor. Exp. Phys.* 2015. 053A01. P. 1–20.

Петр Николаевич Маляренко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)647787,
petr.malyarenko@yandex.ru

**Исследование областей существования
ультратонких пленок ферромагнитных
двухкомпонентных сплавов
с неоднородным распределением намагниченности
в зависимости от материала подложки**

Д. В. Пилипенко

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. М. В. Мамонова

Данная работа посвящена теоретическому исследованию влияния различных подложек на область существования пленок сплава Fe_xNi_{1-x} , на примере Cu[111], W[110] и Ag[111], 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, пленки, ферромагнетики.

Ультратонкие магнитные пленки являются объектом интенсивных исследований, что во многом определяется возможностями применения ферромагнитных пленок. В настоящее время самыми востребованными являются не чистые пленки, а сложные многокомпонентные пленки. Так, сплав из $Fe_{20}Ni_{80}$ известен как пермаллой и широко применяется в радиотехнике, технике связи и автоматике, 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 линейаризованного уравнения Томаса-Ферми. Согласно МФСП электронная плотность определяется как сумма плотностей 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 1–3.

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 $\theta \geq 0.5$, на $Ag[111]$ при $\theta \geq 0.8$, а с ростом температуры область существования сужается. При значениях $\theta = 1$, на медной подложке образуются пленки для всех концентраций железа в пленке, на подложке из вольфрама только при малых $x \leq 20$, а на подложке серебра, наоборот, при больших концентрациях железа $x > 80$. 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 , а у Ag она в 2,5 раз меньше чем у W , кроме того W имеет ОЦК структуру, а Cu , Ag – ГЦК. Не смотря на схожие структуры и примерно равные поверхностные энергии у Ag и Cu , их электронные плотности отличаются в 3 раза.

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

Таблица 3

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

T, K	θ	X, %	T, K	θ	X, %
0	0.8	40	300	0.8	[80,100]
				0.9	[60,80]
100	0.7	[0,40]		1	[40]
	0.8	[40,80]	400	0.9	[80,100]
	0.9	[100]		1	[80]

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 Co_xNi_{1-x} and Fe_xNi_{1-x} ultrathin films on Cu // Phys. Rev. B. V. 56. P. 2668.

Дмитрий Викторович Пилипенко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
virgo54@mail.ru

Секция ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

Изучение температурных распределений биологических объектов, полученных тепловизорами ТКВр-ИФП СВИТ и ПергаМед

И. В. Гибашева

Науч. рук. канд. биол. наук, доц. М. Г. Потуданская

Исследованы температурные распределения у биологических объектов, полученные при синхронной записи двумя тепловизорами. Оценена возможность использования банка термограмм, полученный тепловизором ТКВр-ИФП СВИТ, для тепловизора ПергаМед.

Ключевые слова: терморграфия, тепловизор, распределение температур.

Тепловидение относится к одному из современных методов дистанционной диагностики в медицине. Распределение и интенсивность теплового излучения в норме определяются особенностью физиологических процессов, происходящих в организме, как в поверхностных, так и в глубоких органах [1]. Достигнутая сегодня в приемниках инфракрасного излучения и матричных тепловизорах температурная чувствительность на уровне сотых долей градуса при быстром действии десятки и сотни кадров в секунду [2], безусловно, привлекательна для использования этих систем в нуждах медицины. Однако на сегодняшний день нет атласов термограмм, включающих варианты нормы и типичные случаи термограмм заболеваний, диагностируемых с помощью тепловизора.

Цель работы – сравнить температурные распределения, полученные с помощью тепловизоров ТКВр-ИФП СВИТ и ПергаМед. Для этого необходимо осуществить запись термограмм биологических и небиологических объектов тепловизорами ТКВр-ИФП СВИТ и ПергаМед; выделить анализируемые области обеих термограмм и произвести сравнения температурных распределений; определить возможность совместного использования банка термограмм обоих тепловизоров.

Для эксперимента были выбраны 3 объекта исследования: медицинский термометр, чаша с водой и поверхность кисти руки здорового индивидуума, не имеющий нарушений периферического кровотока. Запись термограмм производилась с использованием стандартных методик одновременно двумя тепловизорами. На рис. 1 представлены исследуемые термограммы.

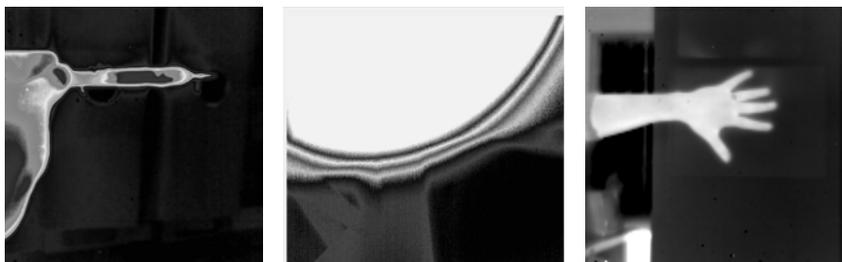


Рис. 1. Исследуемые образцы: медицинский термометр, чаша с водой и поверхность тыльной стороны кисти руки

Тепловизионные камеры были установлены на специализированных штативах на одном и том же уровне и направлены на исследуемый объект под одним и тем же углом. Каждый тепловизор был подключен к своему ПК, и записанные термограммы обрабатывались с помощью соответствующих ПО [2]. Температуры каждого образца регистрировали при разных условиях.

Медицинский термометр был помещен в чашу с тепловой водой. При показаниях термометра $36\text{ }^{\circ}\text{C}$, производилась запись термограмм. Запись производилась на расстоянии 0,2 метра от исследуемого объекта до регистрирующего устройства тепловизора. Исследовались две области размера 6×7 температурных точек. Под

температурной точкой подразумевается одна ячейка тепловизионной матрицы тепловизора.

Для чаши с водой эксперименты проводили при 36°C и при 27 °С. Температуру замеряли лабораторным термометром. Для предотвращения бликов при регистрации, камеры и чаша с водой были накрыты покрывалом. Расстояние от поверхности воды до камер было ~5 см. Исследовали одну области размера 20x12 температурных точек.

Поверхность тыльной стороны кисти руки регистрировалась в спокойном состоянии, без физической нагрузки, при постоянной температуре окружающей среды. Расстояние от камеры до поверхности кисти руки составляло 0,5 метра. Исследовали 5 областей размера 6 x 10 температурных точек.

На рис. 2, 3 и 4 изображены графически распределения температур для исследуемых образцов. Тёмная область – область термограммы, записанной при помощи тепловизора ПергаМед. Светлая область – область термограммы, записанной при помощи тепловизора ТКВр-ИФП СВИТ.

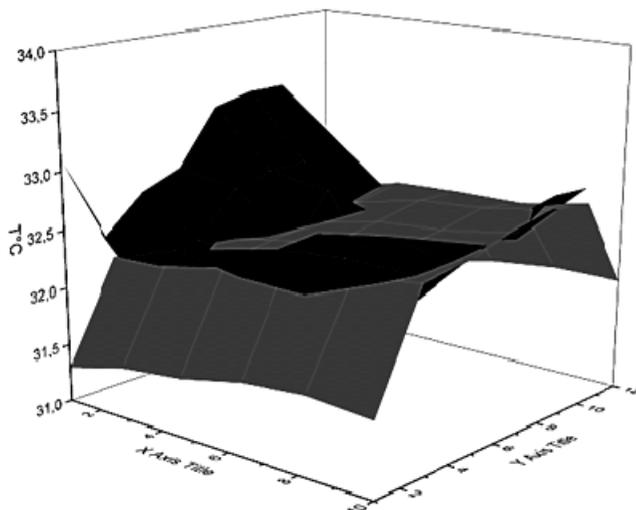


Рис. 2. Графическое представление матриц температур для области поверхности термометра

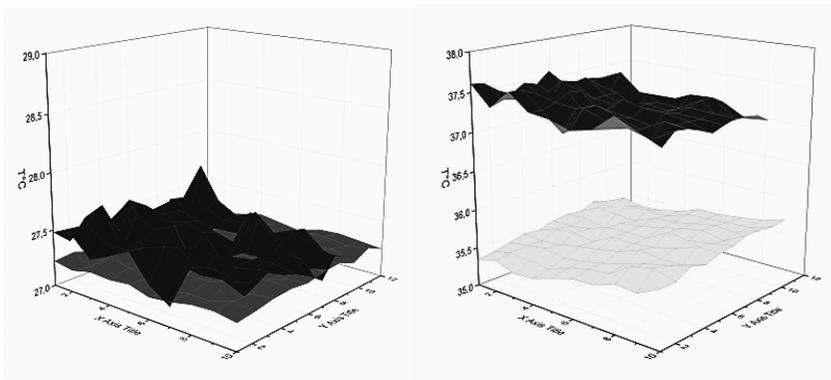


Рис. 3. Графическое представление матриц температур для поверхности воды при температуре термометра $T = 27\text{ }^{\circ}\text{C}$ и $T = 36\text{ }^{\circ}\text{C}$ соответственно

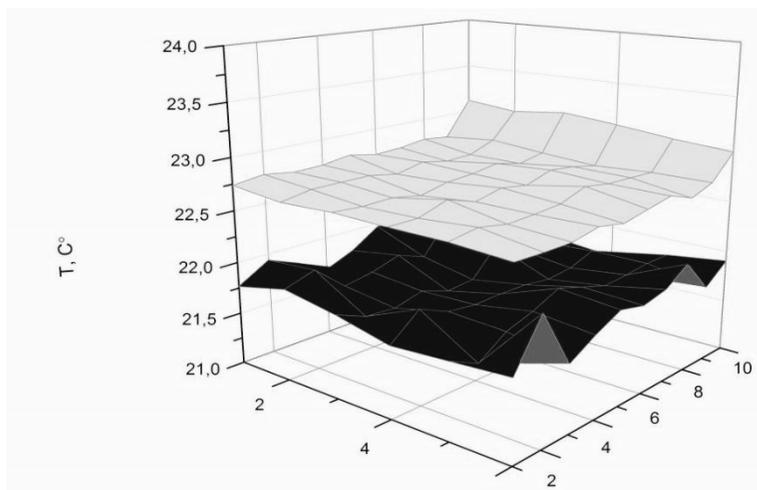


Рис. 4. Графическое представление матриц распределения температур для 1-й области поверхности кисти

В ходе исследования были получены термограммы одних и тех же объектов тепловизорами ТКВр-ИФП СВИТ и ПергаМед. Установили, что минимальная разница температур $\Delta T_{\min}=0.00\text{ }^{\circ}\text{C}$, а максимальная разница $\Delta T_{\max}=1.39\text{ }^{\circ}\text{C}$. Полученная разница температур не позволяет использовать банк термограмм, сформирован-

ный для тепловизора ТКВр-ИФП СВИТ в качестве термограмм сравнения для тепловизора ПергаМед.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Курышев Г.Л., Ковчавцев А.П., Вайнер Б.Г.* Медицинский тепловизор на основе матричного ФПУ для диапазона 2,8–3,05 мкм // Автометрия. 1998. № 4. 27 с.

[2] *Вайнер Б.Г.* Матричные тепловизоры, открывающие путь к новым методологическим подходам в медицинской диагностике // Новое оборудование и технологии в медицине: сборник докладов СО РАН обзорно-презентационной научно-практической конференции / СО РАН. Новосибирск, 2006. 45 с.

Гибашева Ирина Валерьевна,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812) 647787

**Температурные распределения
в точках акупунктуры меридиана органов дыхания
и их окрестностях у условно здоровых людей
молодого возраста**

К. А. Драчёв

Науч. рук. канд. биол. наук, доц. М. Г. Потуданская

Исследованы температурные распределения в биологически активных точках и их окрестностях меридиана легких у условно здоровых людей.

Ключевые слова: биологически активная точка, терморегуляция, тепловизор, распределение температур.

Цель исследования состоит в изучении температурного распределения в точках акупунктуры меридиана легких с использованием тепловизионного метода в норме, то есть у условно здоровых людей молодого возраста. Для этого необходимо: изучить топографию и методику локализации точек акупунктуры меридиана легких человека; осуществить запись термограмм и определить температуру в окрестностях точек и непосредственно в 5 точках меридиана (1. Точка “*Кун-цзуй*” (P 6); 2) Точка “*Ле-цзюе*” (P 7); 3) Точка “*Тай-юань*” (P 9); 4) Точка “*Тай-юань*” (P 10); 5) Точка “*Шяо-шан*” (P 11)); провести анализ температурного распределения с целью выявления достоверных различий температурных распределений в окрестностях точки и непосредственно в самой биологически активной точке.

На рис. 1 представлены исследуемые точки меридиана легких.

В исследовании участвовала группа условно здоровых мужчин – 32 человека в возрасте 17–23 года. Запись термограмм проводилась одномоментно для всех точек. Для осуществления записи термограмм в акупунктурных точках фиксировались две термограммы: одна без термоизолирующих меток, вторая с термоизоли-

рующими метками, локализация которых определялась аппаратом для рефлексотерапии «Светером-2» [1].

Совмещение термограмм производилось при помощи стандартного [2] и оригинального программного обеспечения (рис. 2).

В таблице представлены температуры в 1-й биологически активной точке для 2-го обследованного. В таблице цветом выделена область, непосредственно относящаяся к биологически активной точке.

На рис. 3 графически представлено распределение температур в представленной в таблице биологически активной точке.

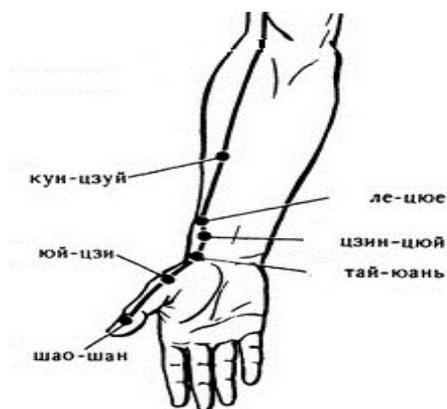


Рис. 1. Исследуемые биологически активные точки меридиана легких

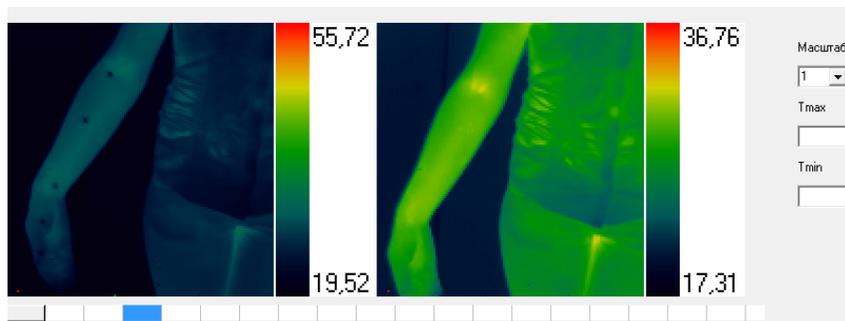


Рис. 2. Пример совмещения термограмм для определения температуры под метками

**Распределение температур в 1-й биологически активной точке
и ее окрестностях**

29,22	29,31	29,4	29,66	30,1	30,11	30,16	29,89
29,15	29,33	29,46	29,56	29,83	30,13	30,01	30,19
29,18	29,32	29,44	29,64	29,78	29,6	30,15	30,13
29,19	29,37	29,4	29,6	29,73	29,81	30,09	29,87
29,22	29,34	29,46	29,68	29,77	29,79	29,84	29,85
29,25	29,41	29,53	29,65	29,72	29,8	29,83	29,84
29,36	29,46	29,57	29,75	29,7	29,86	29,83	29,86
29,35	29,51	29,64	29,63	29,72	29,79	29,85	29,86

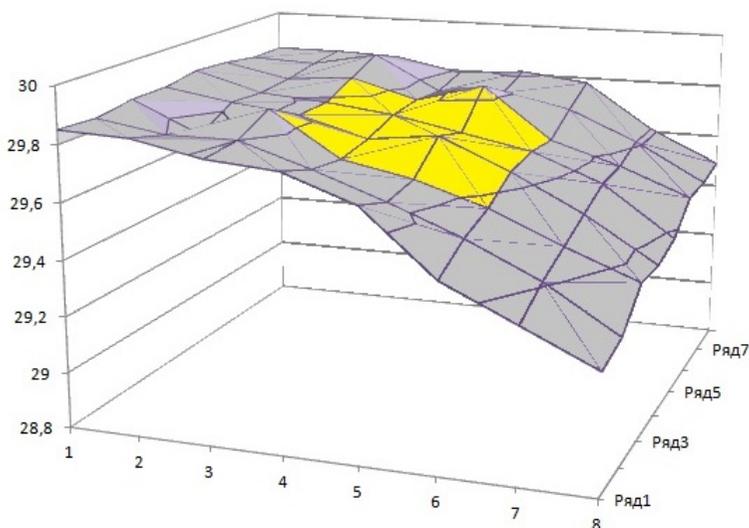


Рис. 3. Графическое представление матриц распределения температур для 1-й биологически активной точки

Аналогичные температурные распределения получены для каждой биологической точки каждого обследованного. Для области точки и области в окрестностях точки вычислялись математические ожидание и дисперсия температуры. Достоверность различий проверялась по критерию Стьюдента ($\alpha = 0,05$). Ни для одного обследованного ни в одной анализируемой биологически активной точке температура достоверно не различалась в точке и ее окрестности.

Таким образом, при исследовании температурной чувствительности в биологически активных точках легочного меридиана, у индивидов исследуемой группы выявлено, что температура в локализованной точке достоверно неотличима от температуры окрестности точки, следовательно, тепловизионный метод не может быть использован для локализации точек акупунктуры. Распределение температуры в точках носит индивидуальный характер.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Шапкин В.И.* Рефлексотерапия в комплексном лечении заболеваний и травм нервной системы. Т.: Медицина. 1987. 287 с.

[2] Руководство пользователя и описание программного обеспечения тепловизора компьютерного для изучения в реальном масштабе времени ТКВр-ИФП. Новосибирск, 2005. 45 с.

Драчев Кирилл Анатольевич,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры,
644077, Омск, пр. Мира 55А, (3812)647787

Исследование морфологии и наноструктуры электропроводящих марок технического углерода методом просвечивающей электронной микроскопии

Ю. Е. Клепикова

Науч. рук. канд. хим. наук, ст. науч. сотр. М.В. Тренихин

Методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения исследованы особенности структуры и морфологии частиц (глобул) образцов технического углерода (ТУ) электропроводного марок П-267Э, П-367Э, высокодисперсного N-234 и низкодисперсного Т-900. Проведена компьютерная и статистическая обработка полученных результатов с использованием программного пакета Digital Micrograph «Gatan». Получены измерения графеновых слоев, вычислено среднее значение для каждого из марок, построены гистограммы длины и проведена корреляция между протяженностью графеновых слоев и электропроводностью.

Ключевые слова: глобулы технического углерода, протяженность графеновых слоев, просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения, электропроводность технического углерода.

Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) является в настоящее время эффективным и универсальным методом исследования материалов, во многих случаях являясь единственным источником получения информации о внутреннем строении и структуре границ раздела многих нанообъектов [1]. Чтобы понять поведение материалов в тех или иных условиях и обеспечить создание новых материалов с улучшенными свойствами, их состав и микроструктура должны быть изучены при максимально возможном разрешении. Это делает электронный микроскоп незаменимым методом, обеспечивающим многие потребности физического и химического анализа.

В современной технике существуют задачи экранирования датчиков и конструкций радиоэлектронной аппаратуры, оптимальным решением для которых является применение электропроводных полимерных композиционных материалов (ПКМ). В качестве матрицы в ПКМ используется полимер, а наполнителем является токопроводящий порошок. В качестве наполнителей для полимерных материалов широко используют технический углерод. К примеру, высокое содержание электропроводных углеродных наполнителей позволяет значительно увеличить электропроводность полимерного материала.

Целью работы являлось изучение свойств, исследование структурных и морфологических характеристик ТУ. В качестве объектов исследования были использованы образцы наноглобул высокодисперсного ТУ марки N 234, низкодисперсного ТУ марки Т 900, электропроводных марок П 267Э и П 367Э.

Исследование особенностей структуры графеновых слоев и морфологии ТУ проводили с использованием просвечивающего электронного микроскопа JEM-2100 «JEOL» (ускоряющее напряжение 200 кВ, разрешение 0.145 нм). С помощью программного пакета Digital Micrograph «Gatan» [2, 3] на ЭМ изображениях глобул(а) были выделены наиболее характерные участки графеновых слоев(б), произведено контрастирование снимков, фильтрация изображения и получен массив данных по длинам графеновых слоев, а в компьютерной программе OriginPro 8 построены гистограммы длины графеновых слоев(с).

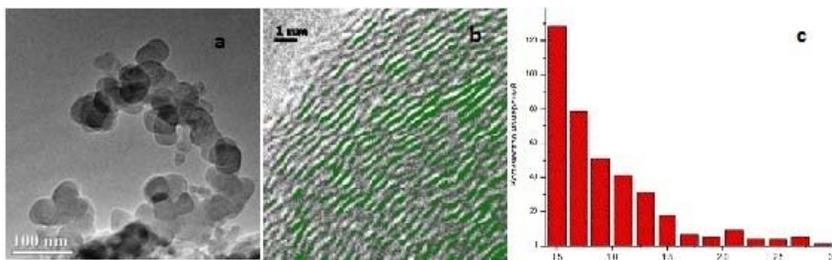


Рис. 1. ЭМ изображения и гистограмма длины графеновых слоев ТУ марки П 267-Э

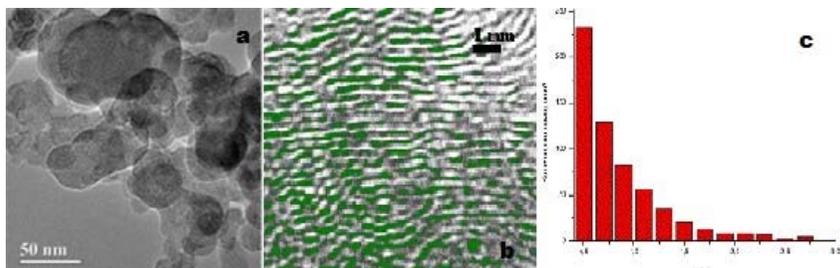


Рис. 2. ЭМ изображения и гистограмма длины графеновых слоев ТУ марки П 367-Э

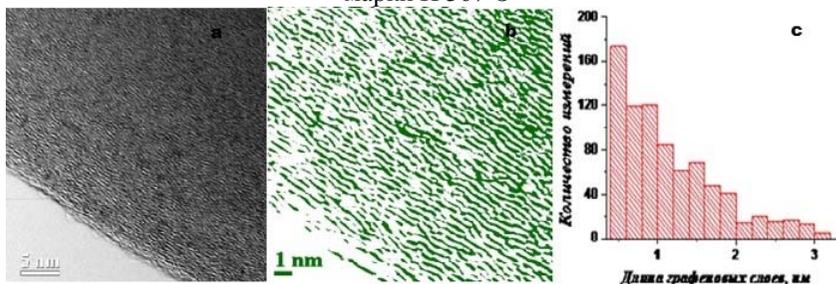


Рис. 3. ЭМ изображения и гистограмма длины графеновых слоев ТУ марки N 234

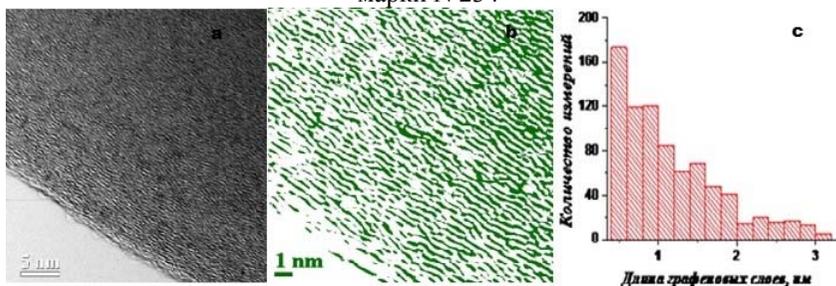


Рис. 4. ЭМ изображения и гистограмма длины графеновых слоев ТУ марки T 900

Из анализа полученных ЭМ снимков следует, что все образцы состоят преимущественно из частиц (глобул), форма которых близка к шарообразной. Так же наблюдается невысокая степень упорядоченности структуры графеновых слоев. Проведенная статистическая обработка результатов измерения длин графеновых слоёв показала, что у электропроводных марок ТУ протяженность графеновых слоев выше, чем у высокодисперсного.

Образец	Средний размер агрегатов частиц (нм)	Средний размер глобул (нм)	Среднее расстояние между графеновыми слоями (нм)	Удельное объемное электросопротивление ТУ (Ом*м, для плотности 0,5 г/см ³) [4]
П 267-Э	227	25	0,37	$2 \cdot 10^{-3}$
П 367-Э	275	32	0,37	$2,5 \cdot 10^{-3}$
N 234	257	25	0,39	$9 \cdot 10^{-3}$
T 900	–	250	0,37	$4,3 \cdot 10^{-3}$

Таким образом, в настоящей работе проведены исследования структуры графеновых слоев электропроводящего ТУ марок П-267Э, П-367Э, высокодисперсного ТУ марки N-234 и низкодисперсного ТУ марки Т-900. Определены средние значения длины и расстояния между графеновыми слоями для указанных марок ТУ. Анализ полученных данных показал, что протяженность графеновых слоев электропроводных марок ТУ выше, чем у высокодисперсного ТУ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Rouzaud Jean-Noël, Clinard Christian*. Quantitative high-resolution transmission electron microscopy: a promising tool for carbon materials characterization. *Fuel Processing Technology*. 2002. V. 77–78. P. 229–235.

[2] *Zhu Weizhong, Miser Donald E., Chan W. Geoffrey, Hajaligol Mohammad R*. HRTEM investigation of some commercially available furnace carbon blacks. *Carbon*. 2004. V. 42. P. 1841–1845.

[3] *S. Hong-Shig, Hurt Robert H., Yang Nancy Y.C*. A methodology for analysis of 002 lattice fringe images and its application to combustion-derived carbons. *Carbon*. 2000. V. 38. P. 29–45.

[4] *Корнев А.Е.* Эластомерные электропроводные и магнитные материалы и изделия многоцелевого назначения // Вестник МИХТХ: Синтез и переработка полимеров и композитов на их основе. 2009. № 2. С. 3–8.

Юлия Евгеньевна Клепикова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
Julia-Condratova@mail.ru

Изучение влияния матрицы на интенсивность линий элементов при атомном эмиссионном спектральном анализе

И. В. Морозов

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. Б.Т. Байсова

В ходе работы проводилось исследование зависимости интенсивностей спектральных линий элементов от тока разряда и основного компонента пробы. Были получены экспериментальные данные о температуре плазмы, концентрации электронов и степени ионизации элементов в плазме дуги переменного тока. Произведена оценка влияния вышеперечисленных факторов на интенсивности атомных и ионных линий элементов в различных матрицах.

Ключевые слова: эмиссионный анализ, матричные влияния.

Количественный анализ основан на монотонной зависимости интенсивности спектральной линии определяемого элемента от его содержания в пробе. Теоретически связать интенсивность линии с концентрацией элемента невозможно, так как интенсивность зависит от многих факторов, трудно поддающихся точной оценке. Получение точной количественной зависимости интенсивности линий от состава плазмы затрудняется сложностью связи между составом пробы и составом плазмы дуги [1–2].

Поэтому становится актуальным проведение исследований по оценке влияния валового состава пробы на интенсивность аналитических спектральных линий элементов при спектральном анализе порошковых проб с целью устранения этого влияния.

Исследование осуществлялось путём сравнения интенсивностей в спектрограммах, полученных при испарении проб на основе различных матриц (окись кремния, окись кальция, графитовый порошок). Приготовление проб производилось путем добавления в матрицы исследуемых элементов (Al, Cr, Fe, Mg,

Mn, Mo, Ti) в виде окислов в различных концентрациях (0,1 масс.%; 0,3 масс.%; 0,5 масс.%; 0,7 масс.% и 1 масс.%) каждого.

В работе были задействованы следующие приборы и оборудование:

- Универсальный стационарный генератор УГЭ-4;
- Дифракционный спектрограф СТЭ-1;
- Анализатор атомно-эмиссионных спектров (МАЭС);

Возбуждение спектров проб производилось из нижнего электрода дуги переменного тока, питаемой от источника возбуждения спектра ПРИМА М, при силе тока в диапазоне от 11 до 19 А. Испарение проб и эталонов производилось из канала нижнего электрода, который включался в электрическую цепь в качестве анода. Верхний подставной электрод был заточен на усечённый конус. Дуговой промежуток между электродами составлял 5 мм. Излучение разряда с помощью системы конденсоров фокусировалось в узкий пучок и направлялось на щель спектрографа СТЭ-1 с фотоэлектрической регистрацией спектра с помощью анализатора МАЭС. Дальнейшая компьютерная обработка спектров проводилась с помощью программного пакета «Атом 3.0[®]». Продолжительность экспозиции устанавливалась по времени полного выгорания пробы.

Средние значения температуры плазмы дугового разряда за время полного испарения пробы были рассчитаны по относительным интенсивностям спектральных линий железа методом Орнштейна. Концентрация электронов определялась по отношению интенсивностей атомной и ионной линий железа Fe II: 324,372 нм – Fe I; 321,404 нм.

Степени ионизации элементов определялись по формуле:

$$\lg \frac{x}{(1-x)} = \lg \frac{I_i}{I_a} - \lg \frac{(g \cdot A \cdot \nu)_i}{(g \cdot A \cdot \nu)_a} - \frac{5040}{T} \cdot (\varepsilon_a - \varepsilon_i)$$

Для выяснения характера влияния различных основ и токов дуги, были построены соответствующие графики зависимости интенсивности линии элементов от тока разряда. Графики строились как для атомных, так и для ионных линий. Один из графиков представлен на рисунке.

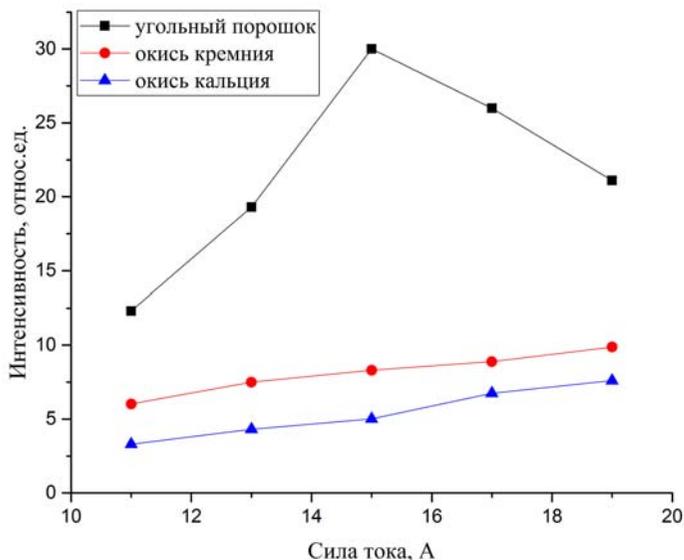


График зависимости интенсивности линии от тока разряда для атомной линии Mo I: 295.584 нм

Исходя из полученных нами экспериментальных данных с ростом тока дуги мы наблюдали рост температуры плазмы в не зависимости от основного компонента пробы. Наибольшая температура, а также и интенсивность атомных линий характерна для основы из угольного порошка. Однако, для интенсивности линии элементов в угольном порошке, имелся максимум на 15А, после чего наблюдался спад интенсивности. Для основ из оксида кальция и оксида кремния при меньшей температуре плазмы дуги, интенсивности линий были меньше, наблюдался их монотонный рост, максимум отсутствовал. Было установлено, что с ростом тока разряда происходит снижение концентрации электронов вне зависимости от основного компонента пробы. Максимальная степень ионизации была характерна для основы из угольного порошка, и составляла порядка 70–95 % . Для основы из оксида кремния максимальные значения степени ионизации элементов не превышали 68 %, для оксида из оксида кальция не более 63 %.

Для случая ионных линий элементов наблюдался монотонный рост интенсивности, максимум характерный для атомных линий здесь отсутствовал.

Падение интенсивности атомных линий для основы из угольного порошка можно объяснить влиянием температуры и степени ионизации элементов. Как уже было сказано, для основы из угольного порошка была характерна наивысшая температура и степень ионизации элементов. Значение степени ионизации элементов для токов 17 и 19А была максимальной, порядка 95%, в результате чего мы наблюдали рост интенсивностей ионных и спад интенсивностей атомных линий элементов. Падение интенсивности атомных линий элементов объясняется тем, что с ростом температуры возрастает количество ионов, и следовательно концентрация ионизированных атомов превалирует над концентрацией возбужденных атомов, как следствие мы получаем спад интенсивности атомных линий.

Полученные результаты могут быть использованы с целью выбора оптимальных условий при разработке методик анализа объектов различных по химическому составу.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Мандельштам С.Л.* Введение в спектральный анализ. М., 1946.
- [2] *Орешенкова Е.Г.* Спектральный анализ. М.: Высшая школа, 1982.

Иван Владимирович Морозов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
ivan_6965-1991@mail.ru

Моделирование и дозиметрическое планирование радиойодтерапии диффузного токсического зоба

Д. Ю. Носковец

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. А. В. Матвеев

На основе законов химической кинетики и принципов фармакокинетического моделирования предложена физико-математическая модель кинетики транспорта тиреотропного радиофармпрепарата (натрия йодид – 131) при радионуклидной терапии заболеваний щитовидной железы с гипертиреозидным состоянием. Разработан алгоритм и программа идентификации параметров физико-математической модели по экспериментальным данным о накоплении изотопа I-131 в щитовидной железе. В модели учтены процессы абсорбции, распределения, биотрансформации и экскреции перорально вводимого в организм пациента радиофармпрепарата, а также его элиминация, обусловленная радиоактивным распадом изотопа I-131. В рамках данной модели осуществлен расчет поглощенных радиационных доз для критических органов и эффективной дозы для всего организма, проанализирована методика дозиметрического планирования радионуклидной терапии для больных с диффузно-токсическим зобом.

Ключевые слова: моделирование, радиоактивность, радиофармпрепарат, радиойодтерапия, дозиметрия.

Радионуклидная терапия (РНТ) – лечение пациентов радиофармацевтическими препаратами (РФП), введенными в их организм (перорально, ингаляционно, внутривенно) и накапливающимися выборочно в клетках патологической ткани. Для заболеваний щитовидной железы чаще всего применяют РФП, меченные изотопом I-131, а само лечение носит название радиойодтерапии. В данной работе в качестве такого препарата используется натрия йодид-131, вводимый пациенту *per os* натошак в форме раствора

или капсул с терапевтической радиоактивностью около 1 ГБк. Изотоп йода распадается по схеме $^{131}\text{I} \rightarrow ^{131}\text{Xe} + e^- + \nu + \gamma$, что обуславливает преимущественно β излучение данного РФП. Успешность проведения РНТ зависит от того, удалось ли реализовать лечебную поглощенную дозу в критическом органе (щитовидная железа), которая в свою очередь зависит от того, насколько точно определена кинетика накопления радиоактивного йода в нем. В нашей стране основной опыт и знания о клинических и физико-технических аспектах РНТ с I-131 сосредоточены в Медицинском радиологическом научном центре (г. Обнинск) [1], хотя в последние годы активно появляются подобные центры и в других регионах, что обусловлено чрезвычайной важностью данной проблемы в здравоохранении. Обобщение физико-технических аспектов РНТ позволит выявить общие и специфические вопросы для каждого из заболеваний независимо от частных медицинских задач.

Дозиметрическое планирование является одним из наиболее важных этапов РНТ. Задача медицинского физика – обеспечение назначенной поглощенной дозы в критическом органе пациента. Гарантии клинического предсказания РНТ могут быть обеспечены только при последовательном применении методик индивидуального дозиметрического планирования. В настоящее время в клинической практике используются весьма упрощенные методики определения дозиметрических характеристик [1], чем объясняется значительное количество неэффективных случаев прогноза РНТ. Стандартное радиометрическое оборудование позволяет определять лишь общую радиоактивность накапливаемого в щитовидной железе йода, что не охватывает всего возможного разнообразия клинических ситуаций. Таким образом, остается до сих пор не решенным ряд проблем, связанным с дозиметрическим планированием – проблема индивидуального дозиметрического планирования; существенное различие в величине формирующейся локальной поглощенной дозы и усредненной по щитовидной железе дозы, обычно используемой в клинической практике; невозможность однозначно связать величину поглощенной радиационной дозы с результатом лечения.

Целью нашей работы стало создание физико-математической модели фармакокинетики тиреотропного РФП (NaI-131),

определение транспортных констант абсорбции, тиреоидного обмена и экскреции при сопоставлении модельных результатов с количественными радиометрическими данными радиоiodтерапии пациентов с тиреотоксическим зобом, дозиметрическое планирование и расчет поглощенных доз в критических органах (верхние отделы желудочно-кишечного тракта, щитовидная железа, кровь, мочевыделительная система). Нами были использованы принципы и методы фармакокинетики (камерное моделирование) [2], метод Хука-Дживса для нахождения минимума функции нескольких переменных при определении значений транспортных констант с использованием количественных данных радиометрии щитовидной железы пациентов с введенным РФП и методика расчета поглощенных доз через найденные в процессе моделирования функции активностей введенного РФП в критических органах. Наша модель при пероральном введении NaI-131 включает камеру желудка и тонкого кишечника (удельная активность РФП в ней F_0), камеру крови (F_H), камеру щитовидной железы (F_T) и камеру мочевыделительной системы (F_U). Соответствующие транспортные константы – константа абсорбции K_0 , константы тиреоидного обмена K_{HT} , K_{TH} , константа экскреции K_{HU} . Также учтен радиоактивный распад изотопа I-131, постоянная распада которого $\lambda = 0,0036 \text{ ч}^{-1}$. В качестве количественных клинических данных радиометрии области щитовидной железы были использованы доступные нам из литературы результаты скинтиграфического исследования трёх пациентов с ДТЗ в течение недели (см. [1] и ссылки в ней).

Для осуществления процедуры численного решения дифференциальной системы, минимизации и определения транспортных констант, а также расчета поглощенных доз нами была разработана и написана консольная программа на языке C++. В дальнейшем планируется усовершенствование разработанного нами программного обеспечения до оконного приложения.

Значения транспортных констант, рассчитанные для всех пациентов, удовлетворяют соотношениям: $K_0 > K_{HT} > K_{HU} > K_{TH}$. Зная их, рассчитываются периоды полувыведения, времена максимального накопления РФП и его концентрации в разные моменты времени, а также распределение радиоактивности в критиче-

ских органах и тканях, т.е. кривые Активность-Время. Например, для одного пациента мы получили, что за первые 20 часов большая часть препарата накапливается в щитовидной железе, другая часть в мочевом пузыре. Поскольку константа $K_{тн}$ мала, то большую часть времени РФП находится и распадается в самой щитовидной железе (что и обуславливает радиотерапевтический эффект), не успев покинуть ее в виде гормонов. Полученные расчетные данные кинетики I-131 позволили рассчитать поглощенные дозы в щитовидной железе, крови, желудке, мочевом пузыре и эффективную дозу на весь организм пациента. Подробнее ознакомиться с моделью и методикой дозиметрического планирования, основными выводами и анализом полученных результатов, их применением для оценки эффективности лечения можно в нашей работе [3].

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Липанова Н.Н.* Радиобиологическое и дозиметрическое обоснование радионуклидной терапии заболеваний щитовидной железы: дис. ... канд. физ.-мат. наук. М., 2012. 115 с.
- [2] *Бондарева И.Б.* Математическое моделирование в фармакокинетике и фармакодинамике: дис. ... д. б. н. М., 2001. 373 с.
- [3] *Матвеев А.В., Носковец Д.Ю.* Фармакокинетическое моделирование и дозиметрическое планирование радиойодтерапии тиреотоксикоза // Вестн. Ом. ун-та. 2014. № 4. С. 57–64.

Дмитрий Юрьевич Носковец,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, Мира 55А, +79139789148,
noskovec93@mail.ru

Структурно-фазовый анализ гидроксилapatита, синтезированного из плазмы крови

И. П. Обрезанова

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. Т.В. Панова

На основе экспериментального материала рассмотрен комплекс проблем, связанных с особенностями кристаллизации гидрофосфата кальция, синтезированного из модельного раствора плазмы крови. Методом рентгенофазового анализа изучен фазовый состав образцов в условиях увеличения времени выдержки и варьировании степени пересыщения.

Ключевые слова: патогенные минеральные образования, гидроксилapatит, моделирование, условия синтеза, кристаллизация, метод РФА.

Процессы кристаллизации малорастворимых соединений всегда привлекали внимание исследователей. Интерес вызван тем, что данные соединения входят в состав патогенных минералов и являются болезнями организма человека. За последние годы увеличился процент патогенного минералообразования в кровеносных сосудах, сердечных клапанах, почках. Это связано с целым рядом особенностей. Чаще всего в организме человека кристаллизуются фосфаты кальция, и в частности гидроксилapatит – $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$. Поэтому изучение процессов его кристаллизации с целью профилактики и предотвращения заболеваний является перспективным направлением исследований. Кроме того, изучение малорастворимых соединений вызывает интерес при синтезе перспективных биоматериалов. Достижение увеличения качества и продолжительности жизни человека предполагает, в частности, создание материалов для искусственных органов и тканей. Синтезированный гидроксилapatит может использоваться для замены костей. Основной сложностью при изучении таких соединений

является их состав. Биологические жидкости, в свою очередь, состоят из множества компонентов, как неорганических, так и органических. Сведения о кристаллизации патогенных и физиогенных малорастворимых соединений из биологических жидкостей весьма малочисленны.

Целью настоящей работы являлось исследование особенностей кристаллизации растворов, моделирующих состав биологических жидкостей человека, в условиях, близких к физиологическим. Для получения в лабораторных условиях раствора, моделирующего состав плазмы крови, в качестве исходных соединений были выбраны хорошо растворимые в воде соли $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{K}_2\text{HPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, NaHCO_3 , NaCl , Na_2SO_4 . Кристаллизацию проводили при пересыщении по гидрофосфату кальция. Для расчета состава систем использовали значения средней концентрации неорганических веществ, входящих в плазму крови человека. Таким образом, экспериментальным путем были получены следующие серии растворов по степеням пересыщения:

1. $S = 10$ (время выдержки: 1 неделя, 2 недели, 3 недели, 1 месяц, 2 месяца);
2. $S = 50$ (время выдержки: 1 месяц, 2 месяца);
3. $S = 100$ (время выдержки: 1 неделя, 2 недели, 3 недели, 1 месяц, 2 месяца);

После приготовления проводилась корректировка pH каждого раствора до 7,4 с помощью концентрированной соляной кислоты HCl и 30%-го гидроксида натрия NaOH , предварительно поместив стакан с раствором в механическую мешалку. Затем растворы смешивались и оставлялись на необходимое время выдержки. После смешивания одинаковых объемов растворов получался раствор с заданной концентрацией компонентов и необходимым пересыщением (с учетом разбавления в два раза массы реагентов для приготовления растворов должны быть взяты в двукратном избытке). После истечения срока растворы были отфильтрованы для получения осадков, которые в последствие высушивались при температуре 80 градусов в сушильном шкафу и были взвешены. Высушенные порошковые осадки были измельчены в ступке и подготовлены для рентгенофазового анализа, который проводился на дифрактометре ДРОН-3М.

Качественный фазовый анализ был проведен с использованием программного обеспечения Search-Match. Расчет величины кристаллитов определялся по формуле Дебая-Шеррера. В результате проведенного исследования выяснилось, что увеличение степени пересыщения в пределах одной серии образцов по времени выдержки не влияет существенно на характер спектров полученных дифрактограмм (рис. 1).

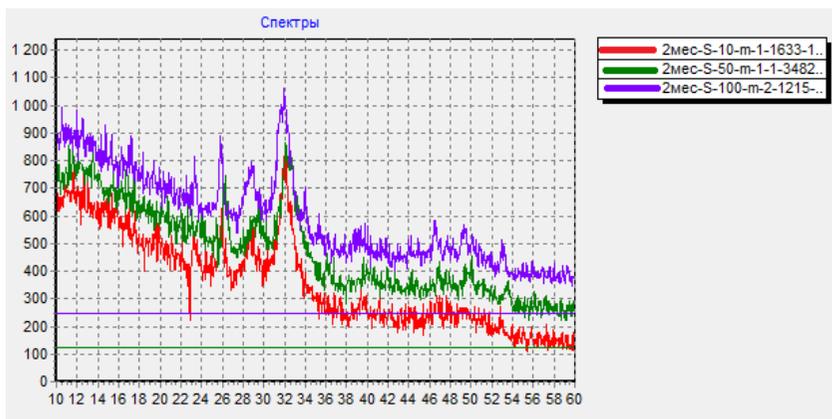


Рис. 1. Спектры образцов, полученных при пересыщениях $S = 10$, $S = 50$ и $S = 100$ со временем выдержки в 2 месяца

В ходе качественного анализа всех образцов были выявлены 4 разных фазы: витлокит ($\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2\text{H}_2(\text{PO}_4)_{14}$), неопределенная фаза Calcium Magnesium Hydrogen Phosphate ($\text{Ca}_{19-68}\text{Mg}_{12}\text{H}_{1-8}(\text{PO}_4)_{13-80}$), далее будем называть её КМГФ, и 2 фазы коллинсита ($\text{Ca}_2\text{Mg}(\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{MgCa}_2(\text{PO}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_2$), которые условно обозначим коллинсит 1 и коллинсит 2 соответственно. Характеристика размеров кристаллитов высушенных осадков представлена на гистограмме (рис.2), из которой видно, что при недельных выдержках как таковой зависимости между степенью пересыщения и размерами кристаллитов нет. Более того, при пересыщении $S=10$ (время выдержки – 3 недели) наблюдается резкий скачок размеров до 8 нм, хотя в целом размеры кристаллитов колеблются в значениях $\sim 1,5$ нм. Наиболее стабильные зависимости отображают образцы со временами выдержки 1 и 2 месяца.

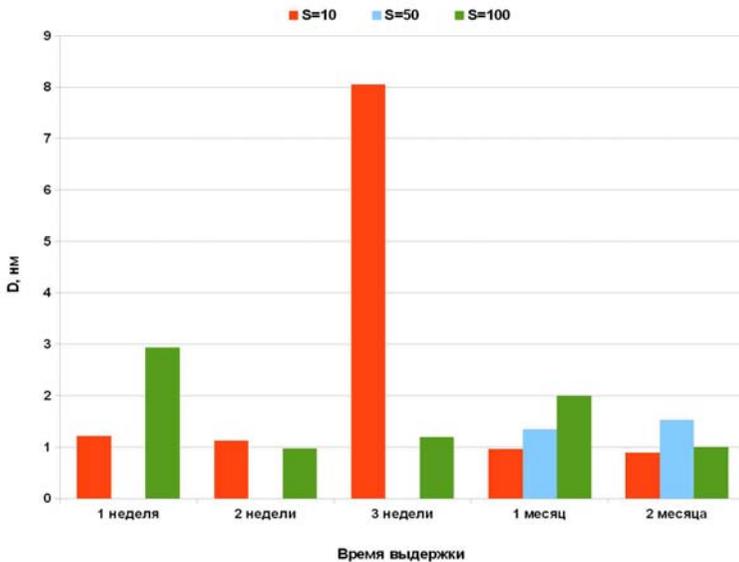


Рис. 2. Зависимости размеров кристаллитов порошка от времени выдержки для разных степеней пересыщения

Таким образом, исходя из всего выше сказанного, следует отметить, что синтез фаз ГА при пересыщении $S = 100$ со временами выдержки 1 и 2 месяца требует дальнейшего исследования. Именно эти условия будут применяться при варьировании температуры сушения осадков, полученных после фильтрования растворов.

Ирина Павловна Обрезанова,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 I курс магистратуры, физический факультет,
 644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
 Irina_Ob_2014@mail.ru

Получение и исследование золь-гель композита $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$

А. А. Пирогова

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. О. В. Кривоzubов

В данной работе исследован $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$ золь-гель композит, полученный из водного геля нанодисперсного SiO_2 и золя $[\text{SnCl}_2] \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ в этиловом спирте, отожженный при 350–450 °С. Методами атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопий исследована морфология полученного композита. Методом рентгеновской дифракции изучена его структура. Измерен импеданс спектр сендвич-структур на основе $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$ композита.

Ключевые слова: диоксид олова, золь-гель композит, импеданс спектр.

В настоящее время в качестве твердотельных газовых сенсоров используют различные модификации и структуры на основе диоксида олова. Золь-гель технология является одной из наиболее перспективных для создания материалов с заданным набором свойств, прежде всего, наноматериалов [1]. В этой связи получение и исследование свойств нового золь-гель композита на основе проводящего оксида олова и диэлектрического диоксида кремния является актуальной задачей.

Композит получали следующим образом. Водный гель нанодисперсного коллоидного SiO_2 сушили на воздухе и отжигали в муфельной печи при 350 °С, до образования ксерогеля SiO_2 . Далее полученные образцы пропитывали золем оксида олова. Золь формировался в растворе $[\text{SnCl}_2] \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ в этиловом спирте.

Исследование рентгеновской дифракции порошка композита производили на дифрактометре Дрон-3М, с использованием медного катода с длиной волны 1,5418 Å, в брэгговском диапазоне углов 2θ : 10–80° с шагом 0.02°. На дифрактограмме наблюдаются только пики тетрагональной фазы диоксида олова, наиболее интенсивные в направлении (110), (101), (211) (рис. 1). Для оценки среднего размера кристаллитов использовали формулу Дебая-Шерера. Кристалли-

ты формируемой SnO_2 фазы в композите имеют величину порядка $\sim 5\text{--}7$ нм, что хорошо согласуется с данными работы [2].

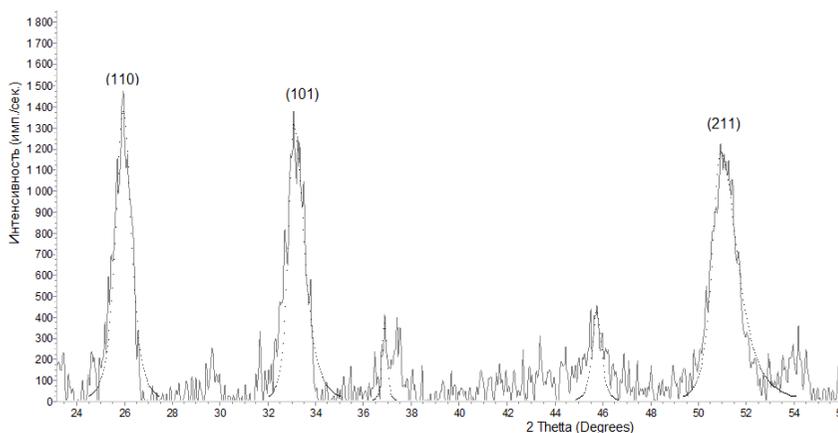


Рис. 1. Участок дифрактограммы золь-гель композита $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$, отожженного при $450\text{ }^\circ\text{C}$

Исследование морфологии $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$ золь-гель композита проводили с использованием сканирующего электронного микроскопа JEOL JSM6610LV и методом сканирующей зондовой микроскопии, в полу контактном режиме, на атомно-силовом микроскопе Solver Pro. Совместное использование этих методов показало, что полученный композит представляет собой пористый материал. Частицы “каркаса” объединены в сфероидальные образования с характерным размером $1,7\text{--}6,2$ мкм, которые в свою очередь состоят из более мелких частиц с характерным размером $0,15\text{--}0,71$ мкм, состоящих из еще более мелких наноразмерных структур.

Метод энергодисперсионного анализа, с использованием приставки Inca 350 к сканирующему электронному микроскопу JEOL, показал равномерность распределения оксида олова в композите. Концентрация Sn в разных точках крупных частиц составляет $0,94\text{--}1,02$ ат. %. Таким образом, видно, что морфологическая структура композита обусловлена пористой структурой ксерогеля SiO_2 со встроенными в нее агломератами нанокристаллического SnO_2 , образующими проводящий кластер.

Изучение проводимости $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$ проводили на сэндвич-структурах. Композит формировали в виде "таблетки" диаметром 1,5 и толщиной 0,4 см. В качестве контактов использовали In-Ga пасту. Вольт-амперные характеристики структур в диапазоне 0-200 В были линейными. При изменении влажности от 80% до 100% эффективное удельное сопротивление композита уменьшается от $\sim 10^8$ до $\sim 10^6$ Ом*см. Десорбция влаги при помещении образца на воздух приводит к плавному восстановлению сопротивления. Таким образом, сорбция либо десорбция молекул воды в местах контактов кристаллитов оксида олова, «открывает» (сорбция) либо «перекрывает» (десорбция) каналы электронного транспорта в проводящей сетке оксида олова.

Измерение импеданса сэндвич-структур проводили с использованием импеданс-спектрометра Agilent E4980A, в частотном диапазоне от 10 кГц до 2 МГц. Амплитуда синусоидального сигнала составляла 10 мВ. Годограф импеданса структуры с $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$ золь-гель композитом изображен на рис. 2. Видно, что с ростом частоты сигнала (вниз вдоль кривой) полный импеданс структуры плавно уменьшается. Годограф можно представить в виде участка полуокружности при высоких частотах, плавно переходящий в прямолинейный участок при низких частотах.

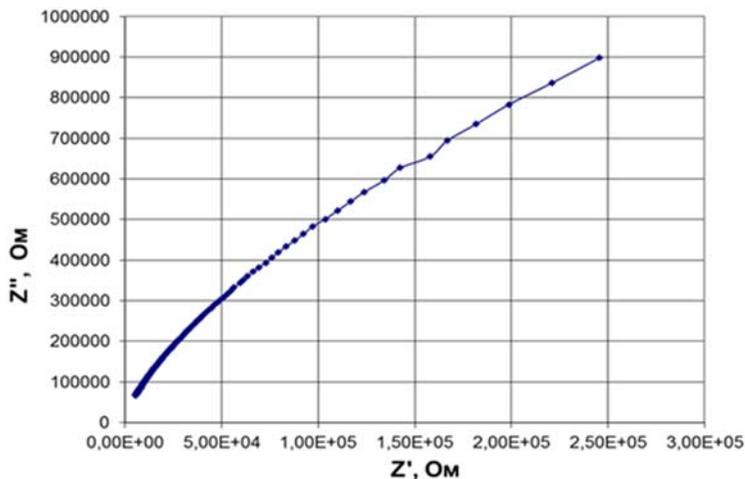


Рис. 2. Годограф импеданса сэндвич-структуры на основе $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$ золь-гель композита отожженного при 450 °C

Годограф импеданса композиционных материалов на основе полупроводниковых оксидов представляет собой, как правило, переходящие одна в другую, две полуокружности [3]. Низкочастотная связывается с электронными процессами в области электронной нейтральности кристаллитов, а высокочастотная полуокружность с электронным транспортом через энергетические барьеры (типа барьера Шоттки) между кристаллитами. В нашем случае полученный годограф может быть грубо представлен в виде суммы двух годографов, соответствующих двум последовательно включенным параллельным RC-цепочкам, с сильно различающимися временами релаксации. Высокочастотный участок годографа соответствует релаксационным процессам внутри кластеров оксида олова, низкочастотный – релаксационным процессам между кластерами SnO_2 и SiO_2 .

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Аверин И.А., Карманов А.А., Мошников В.А., Печерская Р.М., Пронин И.А.* Особенности синтеза и исследования нанокompозитных плёнок, полученных методом золь-гель-технологии // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2012. № 2. С. 155–163.

[2] *Feng Y.S., Zhou S.M., Li Y., Zhang L.D.* Preparation of the $\text{SnO}_2/\text{SiO}_2$ xerogel with a large specific surface area // Materials Letters. 2003. №57. P. 2409–2412.

[3] *Ponce M.A., Bueno P.R., Varela J., Castro M.S., Aldao C.M.* Impedance spectroscopy analysis of SnO_2 thick-films gas sensors // J Mater Sci: Mater Electron, 19. 2008. P.1169–1175.

Анастасия Александровна Пирогова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
anastasya77792@mail.ru

Исследование воздействия мощного ионного пучка на двухслойные тонкопленочные металлические покрытия

Д. Д. Руренко

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. Т.В. Панова

Проведено исследование двухслойных пленочных покрытий на диэлектрических подложках, облученных мощным ионным пучком наносекундной длительности. Обнаружено, что при облучении МИП тонких металлических пленок формируется капельная фаза, размеры и состав которых зависят от теплофизических характеристик исследуемых покрытий.

Целью работы является исследование морфологии двухслойных пленочных покрытий после облучения мощным ионным пучком (МИП). Пленки получали методом термического вакуумного испарения металла. Облучение проводилось на ускорителе "ТЕМП" протон-углеродным пучком ($70\% C^+ + 30\% H^+$) с энергией $E = 300$ кэВ при плотности тока $j \leq 150$ А/см² импульсами длительностью $\tau_b = 60$ нс.

Проводилось исследование двух систем: «пленка V-Al – подложка LiNbO₃» и «пленка V-Ni – ситалловая подложка». Пленка системы «V-Al – подложка LiNbO₃» толщиной (h_v) 0,1 мкм и (h_{Al}) 0,3 мкм после облучения МИП ($n=1$), с плотностью тока $j = 150$ А/см², исследовалась с помощью электронного микроскопа. После облучения МИП (рис. 1) наблюдали трансформацию пленки в отдельные капли разной размерности от 0,5 до 5,5 мкм. Почти все капли имеют правильную овальную форму. Вокруг каждой капли видны области подплавленной подложки из оксида ниобата, образующую сетку между каплями. На увеличенном изображении видны волнообразные структуры поверхности капли, вокруг каждой крупной капли собрались множество мельчайших капель, размеры которых составляют десятые доли микронов. Среднее количество этих капель сосредоточенных около одной крупной варьи-

руется от 17 до 50 единиц. Хорошо заметно растрескивание подложки, связанное с температурным режимом и появляющимися напряжениями.

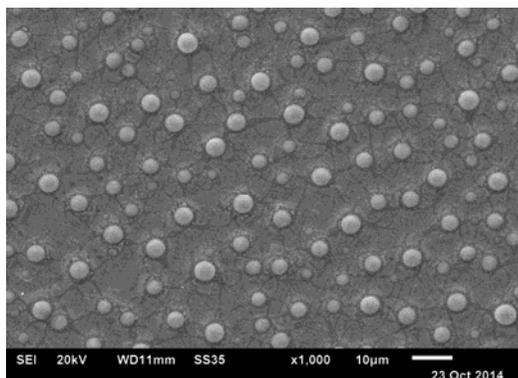


Рис. 1. Морфология поверхности подложки из LiNbO_3 с пленкой V-Al толщиной (h_v) 0,1 мкм и (h_{Al}) 0,3 мкм после облучения МИП с плотностью тока $j = 150 \text{ A/cm}^2$

Анализ химического состава этой системы после облучения, проведенный с помощью INCA, показал, что в составе структуры крупных капель преобладает в большом количестве алюминий (от 75 %). В областях между каплями не наблюдается пленки ванадия. Это свидетельствует о том, что во время облучения пленка ванадия практически полностью испарилась с поверхности.

Из гистограммы (рис. 2) видно, что максимальное количество капель формируется с размерами 0,5, 1 и 4,5 мкм.

Поскольку при облучении МИП максимум энергии приходится примерно на середину пленок этой системы, прогрев их будет равномерный, следовательно, и равномерное испарение материала со всей поверхности. Из-за существенной разницы теплофизических свойств алюминий расплавляется первым. Ванадий же при таких температурах становится открытым по отношению к пучку и удаляется с подложки.

Исследование системы «пленка V-Ni – ситалловая подложка» с толщинами – (h_v) 0,1 мкм и (h_{Ni}) 0,5 мкм после облучения МИП ($n = 1$), с плотностью тока $j = 150 \text{ A/cm}^2$ показало, что после

облучения (рис. 3.) наблюдается трансформация пленок в отдельные капли разной размерности, на данной фотографии наблюдаются капли размерами от 0,5 до 8,5 мкм.

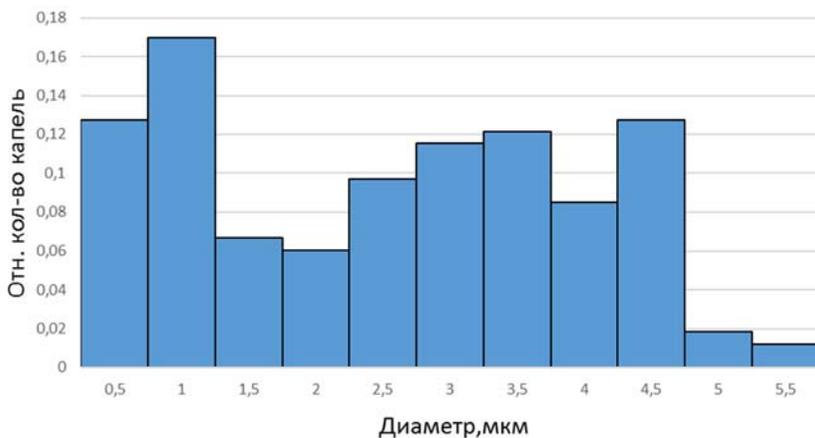


Рис. 2. Зависимость размера капель от их относительного числа

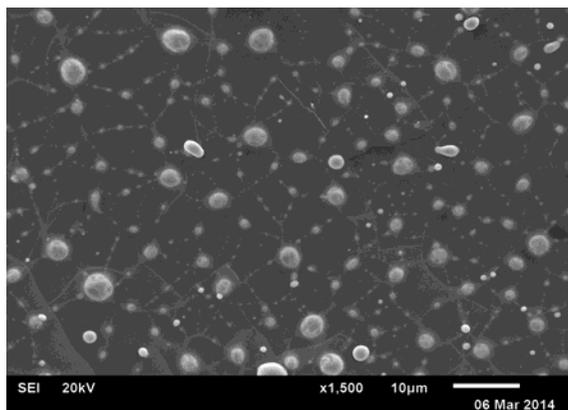


Рис. 3. Морфология поверхности подложки из стекла с пленкой V-Ni толщиной (h_v) 0,1 мкм и (h_{Ni}) 0,5 мкм после облучения МИП

При сравнении с системой «подложка из ниобата лития-пленка из V-Al», можно заметить, что форма капель имеет менее правильную форму. Анализ химического состава системы до об-

лучения, проведенный с помощью INCA, показал, что необлученная поверхность имеет однородный состав. Процентное соотношение Ni к V составило $R \approx 8/1$. После облучения в областях между каплями наблюдается пленка из ванадия, в отличие от первого исследования. Процентное соотношение Ni к V в зависимости от размера капли составило $R \approx 7/1$; $R \approx 3/1$; $R \approx 1,6/1$. Чем крупнее капля, тем больше в ней присутствует Ni и V в процентном соотношении, В мелких каплях доминирует присутствие O и Si. Что говорит о получении информации с ситалловой подложки. Максимальное количество капель имеет размер 1 мкм.

При облучении этой системы максимум энерговыделения приходится примерно на середину пленки никеля, на пленку ванадий будут в основном воздействовать ионы водорода. Поэтому, вначале расплавляется пленка из никеля, а затем происходит подплавление пленки ванадия.

Таким образом, при исследовании морфологии двухслойных пленочных систем на диэлектрических подложках после облучения мощным ионным пучком, установлено, что происходит диспергирование верхней пленки исследуемых систем независимо от теплофизических параметров пленок. В системе «диэлектрическая подложка-пленка из V-Al» после облучения МИП происходит формирование крупных и мелких капель алюминия и удаление пленки ванадия, связанное по видимому увеличенным временем существования открытого подслоя ванадия с последующим его испарением. В системе «диэлектрическая подложка-пленка из V-Ni» после облучения МИП происходит формирование в основном крупных капель и подслоя из ванадия не удаляется, благодаря тому, что максимум энерговыделения приходится в основном на верхний слой никеля.

Дмитрий Дмитриевич Руренко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,
Ukyo-rurenko@mail.ru

Исследование морфологии и фазового состава костной ткани человека

Т. Н. Черноок

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. Т. В. Панова

Приведены результаты исследования костной ткани тазобедренного сустава человека методами рентгенофазового анализа, оптической и электронной микроскопии. Показано, что при заболевании коксартроз происходит рассасывание костного вещества, приводящее к увеличению пористого пространства, что в конечном итоге приводит к замене головки тазобедренного сустава.

Ключевые слова: имплантант, костная ткань человека, коксартроз, кристаллическая фаза, поры, гидроксилapatит, гидрофосфат.

Имплантаты, используемые в современной медицине, изготавливаются на основе различных материалов – металлов, керамики, полимеров. Эти материалы должны быть способны выдерживать значительные механические нагрузки, прикладываемые к костному сегменту в процессе жизнедеятельности организма и обладать высокой биосовместимостью для уменьшения вероятности отторжения. При создании имплантатов необходимо проводить расчет конструкции с учетом физико-механических нагрузок, испытываемых в процессе жизнедеятельности того или иного органа. Для задания расчетных данных требуются определенные характеристики реальных органов и тканей человека. Целью работы является исследование морфологии и фазового состава костной ткани человека.

Была исследована партия костной ткани головок бедренных костей мужчин и женщин, удаленных вследствие заболевания коксартроз. Для изучения динамики заболевания были получены по 3 горизонтальных среза с каждой головки – верхний, средний и

нижний, которые в дальнейшем анализировали на пористость и проводили качественный фазовый анализ. Порошковые рентгеновские данные минерального состава проб образцов получены с помощью рентгенофазового анализа, проводимого на дифрактометре «ДРОН-3М» с использованием $\text{CuK}\alpha$ излучения, при длине волны $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$ в интервале $10 \leq 2\theta \leq 60^\circ$, с шагом 0,02 и экспозицией 15с. Морфология поверхности исследовалась на электронном микроскопе SEM-515 и оптическом микроскопе NEOPHOT-2 с цифровой видеокамерой.

В таблице представлен анализ дифрактограмм образцов естественной кости тазобедренного сустава человека в норме как для костей с органической и неорганической составляющей, так и для костей с частично удаленной органической составляющей. Для анализа дифрактограмм использовалась элементная база для «P, Ca, O, H». При наложении двух дифрактограмм обнаружено, что после частичного удаления органической составляющей интенсивность пиков от неорганической части возросла. В целом фазовый состав идентичен. У необезжиренной костной ткани содержание кристаллической фазы составило 47 %, а содержание аморфной фазы – 53 %. Однако содержание аморфной составляющей после обезжиривания уменьшилось – 48 %, а кристаллической увеличилось – 52 %.

Качественный состав кристаллической фазы обезжиренной и необезжиренной кости тазобедренного сустава человека

Тип кости	Фазы		
Органическая+ +Неорганическая	$\text{Ca}_9\text{HPO}_4(\text{PO}_4)_5\text{OH}$ (Calcium Hydrogen Phosphate Hydroxide)	$\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ (Calcium Hydrogen Phosphate)	$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (Calcium Hydroxide Phosphate Hydroxylapatite)
Неорганическая	$\text{Ca}_9\text{HPO}_4(\text{PO}_4)_5\text{OH}$ (Calcium Hydrogen Phosphate Hydroxide)	$\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ (Calcium Hydrogen Phosphate)	$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (Calcium Hydroxide Phosphate Hydroxylapatite)

Для изучения пористости костной ткани из бедренных головок (мужчины и женщины) получали три среза: верхний, средний

и нижний. Анализ проводился с использованием электронной и оптической микроскопии. На рис. 1 представлена морфология среза верхней части головки тазобедренного сустава мужчины в норме. Видно, что в верхней части головки тазобедренной кости без патологии отсутствуют крупные поры, и морфология этой части кости представляется собой в основном губчатое вещество.

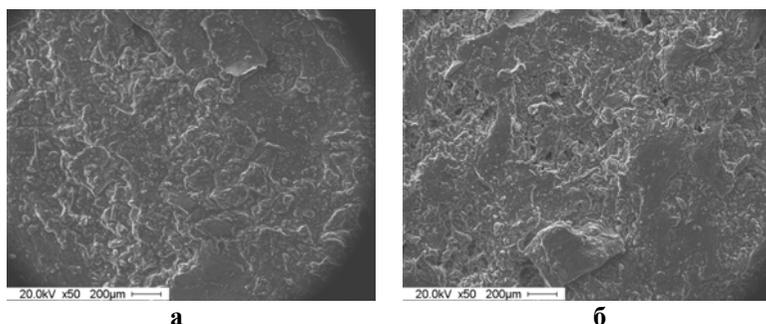


Рис. 1. Морфология поверхности среза костной ткани верней части головки тазобедренного сустава в норме (а) и на ранних стадиях заболевания (б)

На ранних стадиях заболевания происходит рассасывание костного вещества (так называемый процесс костной резорбции), и в толще кости образуются мелкие поры. Обнаруживаются нарушения сплошности кости. Помимо этого, обнаруживаются выделения кристаллов гидроксилapatита, образующиеся на коллагеновых волокнах в ходе процесса биоминерализации кости.

На рис. 2 представлены фотографии участков головки тазобедренной кости на поздних стадиях заболевания. Отчётливо видны крупные поры, пронизывающие исследуемые образцы. Анализ пористости в зависимости от среза головки для женщин и мужчин показал, что срез верхней части головки тазобедренного сустава женщины с заболеванием коксартроз содержит в основном поры с размерами ~ 73 мкм, а у мужчины ~ 46 мкм. Наибольшее количество пор в срезе средней части головки тазобедренного сустава женщины с заболеванием коксартроз наблюдается с размерами 91 мкм, и у мужчины также наибольшее количество пор встречаются с размерами 91 мкм.

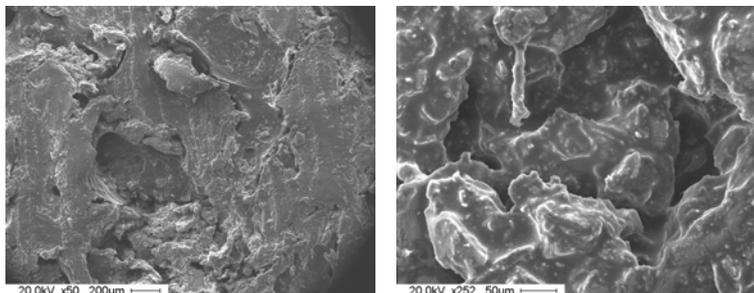


Рис. 2. Крупные поры в толще головки тазобедренной кости на поздних стадиях заболевания коксаортрозом

В срезе нижней части головки тазобедренного сустава женщины наибольшее количество пор встречаются с размерами 82 мкм и 91 мкм, а у мужчины наибольшее количество встречается с размерами 73 мкм. Таким образом, в кости без патологии присутствует лишь естественная пористость, а на ранних стадиях заболевания в кости появляются мелкие поры. В процессе развития патологии поры пронизывают губчатое вещество кости, начиная от периферийных областей и заканчивая центральными. Происходит рассасывание костного вещества, приводящее к увеличению пористого пространства, что в конечном итоге привело к замене головки тазобедренного сустава.

В результате проделанной работы было установлено, что костная ткань состоит из аморфной составляющей и кристаллической, представляющей собой стехиометрический гидроксилapatит и гидрофосфаты кальция. Измерения пористости показали, что объемное содержание открытых пор увеличивается при патологиях и зависит от места среза и от пола пациента.

Тамара Николаевна Черноок,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
I курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (8913)6089742,
toma.9308@inbox.ru

Формирование и исследование бионанокompозита на основе гемоглобина и углеродных нанотрубок

К. А. Юшенков

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. Н. А. Давлеткильдеев

Представлены результаты исследования эффективности прямой нековалентной иммобилизации молекул гемоглобина на нелегированные и легированные азотом углеродные нанотрубки при формировании бионанокompозита «углеродные нанотрубки – белок».

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, гемоглобин, нековалентная иммобилизация, эффективность адсорбции, спектрофотометрия.

Бионанокompозиты 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 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 гемоглобином (Hb) O₂, NO и CO приводит к изменению его электрических свойств, что позволяет использовать Hb в качестве активного компонента электрохимических биосенсоров. УНТ, обладая уникальными свойствами и морфологией, могут выступать в роли носителя для молекул Hb и служить медиатором переноса заряда от белка к электроду.

Ранее [2] была показана возможность стабильного закрепления молекул Hb на поверхности легированных азотом УНТ посредством прямой физической адсорбции. Целью данной работы является исследование эффективности прямой нековалентной иммобилизации Hb на нелегированные УНТ и легированные азотом УНТ (N-УНТ) путем определения концентрации неадсорбированного белка в растворе после взаимодействия с УНТ.

УНТ синтезировались методом CVD в результате пиролиза паров толуола (для нелегированных УНТ) и ацетонитрила (для N-УНТ) при 850 °С с добавлением ферроцена в качестве источника катализатора Fe. По данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии концентрация азота в N-УНТ составила 4 ат. %. Для получения водных суспензий УНТ навески УНТ массой 1 мг диспергировались ультразвуком в 1 мл деионизованной воды. Суспензии УНТ с рН 6,2 и 8,3 смешивались в равной пропорции с водным раствором Hb с концентрацией 150 г/л и выдерживались в течение 1 часа для осаждения УНТ с адсорбированным на них Hb. Для определения концентрации белка измерялись спектры оптической плотности контрольного раствора Hb и надосадочной фракции раствора, содержащей неадсорбированный Hb. Спектры регистрировались на спектрофотометре СФ-56 (ЛОМО) в диапазоне длин волн 510÷650 нм в кварцевых кюветах с длиной оптического пути 2 мм. Расчет общей концентрации и содержания основных производных Hb производился методом наименьших квадратов посредством оригинальной программы «HemoSpectr» (автор Е.Ю. Мосур). Относительная погрешность определения общей концентрации Hb составила 2 %, абсолютная погрешность определения долевой концентрации производных Hb используемым методом составила 1 %.

В качестве примера на рис. 1 представлены спектры оптической плотности контрольного раствора Hb и растворов Hb после взаимодействия с нелегированными и легированными УНТ. Видно, что после экспозиции с УНТ оптическая плотность растворов в области полос поглощения Hb уменьшается, что обусловлено снижением общей концентрации гемоглобина в растворах за счет его адсорбции на УНТ. Наибольшая убыль концентрации Hb наблюдается для растворов, взаимодействовавших с N-УНТ.

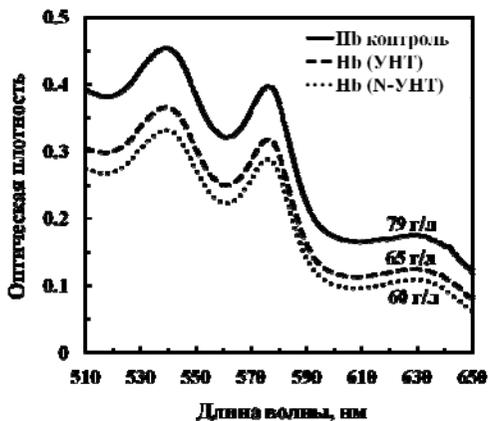


Рис. 1. Спектры оптической плотности контрольного раствора Hb и растворов Hb после взаимодействия с нелегированными и легированными азотом УНТ (справа у каждого из спектров показана рассчитанная общая концентрация Hb)

На рис. 2 представлены усредненные по нескольким измерениям данные по доли Hb, адсорбированного на УНТ из раствора с рН больше (8,3) и меньше (6,2) изоэлектрической точки Hb (7). Более существенная доля адсорбированного Hb в случае N-УНТ свидетельствует о более высокой эффективности адсорбции на них.

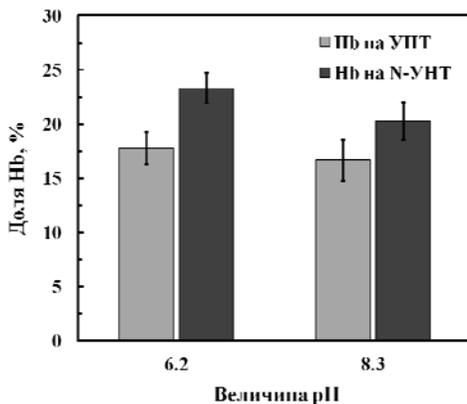


Рис. 2. Доля адсорбированного Hb на УНТ и N-УНТ при двух значениях рН раствора

Наибольшая эффективность адсорбции Hb на N-УНТ наблюдается при pH 6,2, т.е. при pH меньше изоэлектрической точки для Hb, когда молекула белка в растворе имеет положительный заряд. Это подтверждает ранее высказанное предположение [2] о том, что электростатическое взаимодействие положительно заряженной молекулы Hb с отрицательно заряженными участками локализации азота в стенке УНТ приводит к эффективному связыванию гемоглобина с N-УНТ.

Изменение долевой концентрации основных производных Hb в растворе после взаимодействия с УНТ и N-УНТ

	<i>Hb контроль</i>	<i>Hb (УНТ)</i>	<i>Hb (N-УНТ)</i>
HbO ₂ , %	25	29	30
Hb, %	6	3	3
HbCO, %	2	2	2
MetHb, %	67	66	65

Анализ основных производных Hb в растворах показывает (табл.), что они содержат в основном метгемоглобин (до 67 %) и оксигемоглобин (до 30 %), доля последнего увеличивается после экспозиции 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] *Юшенков К.А.* Нековалентная иммобилизация транспортных белков крови на поверхность углеродных нанотрубок // *ФМ ОмГУ 2014: сборник статей II Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике и математике*. Омск, 2014. С. 153–156.

Константин Андреевич Юшенков,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
II курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55А, (3812) 224972,
improvizrus@mail.ru

Научное издание

ФМ ОмГУ 2015

СБОРНИК СТАТЕЙ
III РЕГИОНАЛЬНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МАГИСТРАНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
ПО ФИЗИКЕ И МАТЕМАТИКЕ

Издается в соответствии с оригиналом,
предоставленным оргкомитетом конференции,
при участии Издательства ОмГУ

Технический редактор *Е.В. Лозовая*
Дизайн обложки *З.Н. Образова*

Подписано в печать 17.08.2015. Формат бумаги 60x84 1/16.
Печ.л. 7,0. Усл.печ.л. 6,5. Уч.-изд.л. 6,0. Тираж 70 экз. Заказ 168.

Издательство Омского государственного университета
644077, Омск-77, пр. Мира, 55а
Отпечатано на полиграфической базе ОмГУ
644077, Омск-77, пр. Мира, 55а