

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
им. Ф.М. ДОСТОЕВСКОГО

Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН

## **ФМХ ОмГУ – 2016**

**СБОРНИК СТАТЕЙ  
IV РЕГИОНАЛЬНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ  
МАГИСТРАНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ  
ПО ФИЗИКЕ, МАТЕМАТИКЕ И ХИМИИ**



2016

УДК 53+51+54  
ББК 22я43+24я43  
Ф739

*Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом ОмГУ*

*Рецензенты:*

канд. биол. наук, доц. ОмГУ им. Ф.М. Достоевского *М.Г. Потуданская*;  
канд. физ.-мат. наук, доц. ОмГУ им. Ф.М. Достоевского *С.А. Сычев*;  
канд. физ.-мат. наук, доц., ст. науч. сотр.  
ОФ Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН *Л.А. Заозерская*

Ответственный за выпуск:

*Г.М. Серопян*

**Ф739**      **ФМХ ОмГУ – 2016** : сборник статей IV Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии (Омск, 31 мая – 5 июня 2016 г.). – Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2016. – 148 с.

**ISBN 978-5-7779-2036-2**

В сборнике опубликованы статьи участников конференции, посвященные исследованиям в области математического моделирования, дискретной оптимизации, прикладной теоретической физики, экспериментальной физики, химии и химической технологии.

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

**УДК 53+51+54**  
**ББК 22я43+24я43**

ISBN 978-5-7779-2036-2

© Оформление. ФГБОУ ВО «ОмГУ  
им. Ф.М. Достоевского», 2016

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Организационный комитет</b> .....	6
--------------------------------------	---

### Секция

#### **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ**

<i>Веремчук Н.С.</i> О приближенном решении задачи Вебера на параллельных линиях с запрещенными зонами .....	7
<i>Кальчевская П.И.</i> Решение одной задачи размещения с ограничениями на объемы поставок .....	11
<i>Моришин А.В.</i> Алгоритм приближенного решения одной задачи кластеризации графа .....	15
<i>Пирогов А.Ю.</i> Анализ применения динамического программирования к задаче минимизации затрат на приобретение ресурсов .....	19
<i>Рогова Е.О.</i> Проектирование технических изделий с использованием методов дискретной оптимизации .....	23
<i>Чак Е.А.</i> О задаче размещения на сети с максиминным критерием .....	27
<i>Черных К.А.</i> Планирование инвестиционных проектов с независимыми работами единичной длительности .....	31

### Секция

#### **ПРИКЛАДНАЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА**

<i>Андрянов Н.С.</i> Первопринципные расчеты обменного интеграла системы $\text{Co}/\text{Cu}(100)$ .....	35
<i>Борзилов В.О.</i> Моделирование критических свойств ультратонких магнитных пленок с учетом одноосной анизотропии и диполь-дипольного взаимодействия .....	39
<i>Дергачёв В.О.</i> Метод Ванга – Ландау в спиновых стеклах .....	43
<i>Дубс В.В.</i> Ренорм-групповое описание влияния дефектов структуры на фазовый переход в сложных спиновых системах с одноионной анизотропией и дефектами структуры .....	47
<i>Ежков П.Ю.</i> Расчёт магнитных и энергетических характеристик многослойных адсорбированных ферромагнитных плёнок .....	52
<i>Кожухметов С.З.</i> Изучение влияния температуры на работу выхода электрона с поверхности монослойных пленок переходных металлов, адсорбированных на медной и вольфрамовой подложке .....	57
<i>Крижановский В.В.</i> Особенности неравновесной критической динамики в трёхмерной модели Изинга .....	61

<i>Лаврухин И.В.</i> Ренорм-групповое описание эффектов старения в критической динамике .....	65
<i>Ложников В.Е.</i> Параллельная реализация алгоритма Ванга – Ландау для исследования критических свойств спиновых систем .....	70
<i>Маяренко П.Н.</i> Численные исследования влияния различных начальных состояний на характеристики неравновесного критического поведения спиновых систем.....	74
<i>Папушин А.С.</i> Особенности динамики критического поведения трехмерной модели Изинга вблизи порога перколяции .....	79
<i>Пуртов А.Н.</i> Исследование эффектов старения в мультислойной магнитной структуре методами Монте-Карло .....	83
<i>Романовский Д.Е.</i> Вычисление коэффициента магнетосопротивления мультислойных магнитных структур .....	87
<i>Солдусова А.П.</i> Моделирование мультислойных структур с диполь-дипольным взаимодействием.....	91
<i>Стогова М.О.</i> Расчет энергетических и структурных характеристик монослойной пленки Co с учетом влияния ориентации поверхностной грани .....	95

#### Секция

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

<i>Голубева Я.Н.</i> Исследование напряженно-деформированного состояния черных металлов, облученных мощным ионным пучком.....	99
<i>Калинина Я.А.</i> Изучение термической устойчивости гидроксилapatита, синтезированного в присутствии желатина .....	104
<i>Кангер А.А.</i> Планирование на основе программного комплекса “FLUKA” адронной лучевой терапии для лечения злокачественных новообразований .....	108
<i>Кузнецов В.А.</i> Определение характеристик многолучевых каналов связи с помощью алгоритма ESPRIT.....	112
<i>Малышев А.С.</i> Исследование параметров лазерной плазмы зондовым методом при напылении тонких высокотемпературных сверхпроводящих пленок YBCO .....	116

#### Секция

### ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

<i>Бриленок Н.С., Бахарева М.В.</i> Интервальная оценка суммарного содержания антиоксидантов полифенольного типа по методу FRAP .....	120
---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----

<i>Бурюкина П.А.</i> Оценка суммарного содержания аренов в воде методом спектрофотометрии в сочетании с алгоритмом проекции на латентные структуры (PLS) .....	124
<i>Зайц А.В.</i> Исследование термических эффектов силикатсодержащих гидроксилпатитов .....	128
<i>Мацукевич М.В.</i> Синтез 2-арил(гетарил)замещенных антра[1,9,8- <i>cdef</i> ][1,7]нафтиридин-6,11(10H)-диононов .....	132
<i>Паламарчук И.В.</i> Синтез 4-(морфолинил)фенилзамещенного бензо[ <i>c</i> ][1,7]-нафтиридин-4(3H)-она .....	135
<i>Платонова Д.С., Цыганова О.Ю.</i> Извлечение редкоземельных металлов из отработанного катализатора крекинга нефти .....	139
<i>Шрайнер А.А.</i> Синтез бисдигидропиразола на основе 3,5-ди-ацетил-2,6-диметилпиридина .....	143

## Организационный комитет

---

<b>Колоколов Александр Александрович</b>	д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией дискретной оптимизации Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, заведующий кафедрой прикладной и вычислительной математики ОмГУ
<b>Прудников Владимир Васильевич</b>	д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики ОмГУ
<b>Потуданская Мария Геннадьевна</b>	канд. биол. наук, доцент, декан физического факультета ОмГУ
<b>Власова Ирина Васильевна</b>	д-р хим. наук, профессор, декан химического факультета ОмГУ
<b>Кулаков Иван Вячеславович</b>	д-р хим. наук, профессор кафедры органической химии ОмГУ
<b>Булучевский Евгений Анатольевич</b>	канд. хим. наук, заведующий кафедрой химической технологии ОмГУ
<b>Серопян Геннадий Михайлович</b>	канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры общей физики ОмГУ
<b>Леванова Татьяна Валентиновна</b>	канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ
<b>Романова Анна Анатольевна</b>	канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ

Секция  
**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ**

---

**О ПРИБЛИЖЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ ВЕБЕРА  
НА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЛИНИЯХ С ЗАПРЕЩЕННЫМИ ЗОНАМИ**

**Н.С. Веремчук**

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

Рассматривается задача оптимального размещения взаимосвязанных прямоугольников на параллельных отрезках с запрещенными зонами. Необходимо расположить прямоугольники вне зон так, чтобы они не пересекались между собой и с зонами, и суммарная стоимость связей прямоугольников между собой и с зонами была минимальной. Для одной линии приведен точный алгоритм, а для нескольких предложено алгоритм поиска приближенного решения.

*Ключевые слова:* задача размещения, взаимосвязанные объекты, прямоугольник.

Задача Вебера на параллельных линиях с запрещенными зонами формулируется следующим образом. Заданы  $q$  параллельных оси  $OX$  отрезков длины  $LS$  с координатами  $[(0; Ly_t), (LS; Ly_t)]$ ,  $t \in Q = \{1, \dots, q\}$ . На отрезках имеются запрещенные зоны и размещаются прямоугольники, центры которых связаны между собой и с зонами. Далее прямоугольники и зоны будем называть объектами. Необходимо расположить прямоугольники на отрезках вне зон так, чтобы они не пересекались между собой и с зонами, и суммарная стоимость связей между всеми объектами была минимальной.

Такая задача возникает, например, при размещении технологического оборудования в цехе [1; 2].

Обозначим через  $X_i$  прямоугольники с неизвестными координатами центров  $(x_i, y_i)$  и длинами  $l_i$ ,  $i \in I = \{1, \dots, n\}$ ;  $F_j$  – зоны,  $j \in J = \{1, \dots, m\}$ ;  $d(X_i, F_j)$ ,  $d(X_i, X_k)$  и  $w_{ij} \geq 0$ ,  $u_{ik} \geq 0$  – расстояния в некоторой метрике и удельные стоимости связей между  $X_i$  и  $F_j$ ,  $X_i$  и  $X_k$  соответственно,  $i, k \in I$ ,  $j \in J$ ,  $i < k$ . Необходимо разместить прямоугольники  $X_1, \dots, X_n$  на отрезках вне зон  $F_1, \dots, F_m$  так, чтобы они не пересекались, и суммарная стоимость связей между всеми объектами была минимальной. Математическая модель имеет вид:

$$G(x, y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w_{ij} d(X_i, F_j) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=i+1}^n u_{ik} d(X_i, X_k) \rightarrow \min, \quad (1)$$

$$\text{int } X_i \cap \text{int } F_j = \theta, \quad i \in I, j \in J, \quad (2)$$

$$\text{int } X_i \cap \text{int } X_k = \theta, \quad i, k \in I, i < k, \quad (3)$$

$$\frac{l_i}{2} \leq x_i \leq LS - \frac{l_i}{2}, \quad i \in I, \quad (4)$$

$$y_i \in \{Ly_t\}, \quad i \in I, t \in Q. \quad (5)$$

Первая составляющая в (1) – это суммарная стоимость связей между прямоугольниками и зонами; вторая – прямоугольников между собой; (2) и (3) – это ограничения на непересечение объектов.

Допустимая область задачи (1)–(5) несвязная и состоит из набора непересекающихся отрезков (блоков)  $B_1, \dots, B_r$ , в которые размещаются прямоугольники  $X_i$ ,  $i \in I$ . Задача NP-трудная для  $q = 1$ , поиск её допустимого решения – это построение одномерной упаковки в контейнеры. В [3] предложен алгоритм приближенного решения задачи для одной линии.

Опишем кратко двухэтапный алгоритм поиска точного решения для  $q = 1$ . На первом этапе находится очередное допустимое разбиение прямоугольников по блокам [3]. Для этого применяется схема последовательно-одиночного размещения. Объекты

и блоки упорядочиваются по невозрастанию длин. Для текущего прямоугольника находится очередной блок, в котором он фиксируется. Если такого блока нет, отменяется размещение предыдущего прямоугольника, и для него ведется поиск очередного блока. После отмены размещения предыдущего – для каждого следующего поиск блока начинается с первого. На втором этапе, для полученного разбиения, решается серия задач меньшей размерности в каждом блоке и таким образом находится локальный оптимум исходной задачи. Для решения задач в блоках можно применять, например, алгоритмы динамического программирования или ветвей и границ. Перебирая все возможные разбиения, получим точное решение задачи.

Опишем алгоритм поиска приближенного решения задачи (1)–(5) для  $q \geq 2$ . На первом этапе, как для одной линии, находится допустимое разбиение прямоугольников по блокам. При этом без ограничения общности, можно считать, что блоки  $B_1, \dots, B_r$  расположены на одной линии. Обозначим через  $I_k$  множество номеров прямоугольников в блоке  $B_k$  для некоторого разбиения. Далее рассматривается задача минимизации суммарной стоимости связей между объектами с помощью перестановки прямоугольников в каждом блоке отдельно.

Будем говорить, что блоки  $B_k$  и  $B_s$  *пересекаются по  $x$  координате*, если их проекции на ось абсцисс имеют непустое пересечение. Для текущего блока  $B_k$  определим множества непесекающихся с ним блоков, расположенных слева и справа от него. Считаем, что указанные множества находятся на одной линии слева и справа от  $B_k$  соответственно. На втором этапе прямоугольники в  $B_k$  упорядочиваются с целью минимизации суммарной стоимости связей. Для этого в текущем блоке  $B_k$  строится задача с двумя «фиксированными объектами» – границами блока  $B_k$  и размещаемыми в нем прямоугольниками с номерами из  $I_k$ . Для каждого  $i \in I_k$  определяются суммарные стоимости связей  $Lw_i$ ,  $Rw_i$  с объектами, расположенными слева и справа от  $B_k$  соответственно. Множества объектов, расположенных слева и справа от  $B_k$ , опре-

деляются аналогично как непересекающиеся с  $B_k$  блоки. Прямоугольники в  $B_k$ , для которых  $Lw_i > Rw_i$  ( $Rw_i > Lw_i$ ), размещаются последовательно к левой (правой) границе блока по невозрастанию отношений  $(Lw_i - Rw_i)/l_i$  ( $(Rw_i - Lw_i)/l_i$ ). Прямоугольники, для которых  $Lw_i = Rw_i$ , располагаются в произвольном порядке между размещенными. После такого упорядочения в каждом блоке получаем приближенное решение задачи (1)–(5).

Проведен вычислительный эксперимент с использованием предложенного алгоритма поиска приближенного решения для одной линии. Точное решение задачи находилось с применением модели частично-целочисленного линейного программирования и пакета IBM ILOG CPLEX. Относительная погрешность предложенного алгоритма составила в среднем 3 %.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Веремчук Н.С.* Экспериментальное исследование алгоритмов поиска приближенного решения одной задачи Вебера на линии // Сборник статей III регион. конф. магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике и математике «ФМ ОмГУ 2015». Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2015. С. 14–16.

[2] *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.

[3] *Забудский Г.Г., Веремчук Н.С.* Алгоритм приближенного решения задачи Вебера на линии с запрещенными зонами // Дискрет. анализ и исслед. операций. 2016. Т. 23, № 1. С. 82–96. (An Algorithm for Finding an Approximate Solution to the Weber Problem on a Line with Forbidden Gaps // Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2016, Vol. 10, No. 1, pp. 136-144.)

---

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

# РЕШЕНИЕ ОДНОЙ ЗАДАЧИ РАЗМЕЩЕНИЯ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ НА ОБЪЕМЫ ПОСТАВОК

П.И. Кальчевская

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

В работе рассматривается применение приближенных методов решения одной задачи оптимального размещения. Предлагаются алгоритмы пчелиного роя и муравьиной колонии для задачи размещения предприятий с ограничениями на объемы поставок с критерием максимизации суммарной прибыли.

## Постановка задачи

Рассматривается задача размещения предприятий с ограниченными объемами производств и поставок [1; 2]. В ней даны пункты возможного размещения предприятий и множество потребителей (клиенты). Известны объемы производимого продукта на каждом предприятии, а также ограничения на количество перевозимого товара от каждого производства любому потребителю. Заданы штрафы за размещение предприятий, спрос клиентов и прибыль, получаемая при поставке единицы продукта от предприятий к потребителям. Необходимо разместить предприятия и прикрепить к ним клиентов так, чтобы удовлетворить спрос при соблюдении всех условий и получить наибольшую прибыль с учетом штрафов. Отличительными особенностями этой задачи являются наличие ограничений на объемы поставок и максимизация критерия поиска оптимального решения.

Введем следующие обозначения:

$I = \{1, \dots, m\}$  – множество возможных пунктов размещения предприятий;  $J = \{1, \dots, n\}$  – множество пунктов потребления. Далее всюду  $i \in I, j \in J$ .

Заданы:  $f_i \geq 0$  – затраты на размещение предприятия в пункте  $i$ ;

$b_j$  – объемы потребления продукта в пункте  $j$ ;

$g_{ij}$  – прибыль, получаемая при доставке единицы продукта из пункта  $i$  в пункт  $j$ ;

$d_i$  – ограничения на объемы производства в пункте  $i$ ;

$a_{ij}$  – ограничения на максимальный объем поставки продукта из пункта  $i$  в пункт  $j$ .

Переменные задачи:  $x_{ij}$  – количество единиц продукции, поставляемое из предприятия в пункте  $i$  потребителю  $j$ ;  $z_i = 1$ , если предприятие в пункте  $i$  открыто,  $z_i = 0$ , иначе.

Математическая модель задачи размещения предприятий с ограниченными объемами производств и поставок имеет вид:

$$F(z, X) = \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} x_{ij} g_{ij} - \sum_{i \in I} f_i z_i \rightarrow \max \quad (1)$$

при условиях

$$\sum_{i \in I} x_{ij} = b_j, \quad j \in J, \quad (2)$$

$$\sum_{j \in J} x_{ij} \leq d_i z_i, \quad i \in I, \quad (3)$$

$$0 \leq x_{ij} \leq a_{ij}, \quad i \in I, \quad j \in J, \quad (4)$$

$$x_{ij} \in \mathbf{Z}, \quad z_i \in \{0, 1\}, \quad i \in I, \quad j \in J. \quad (5)$$

Равенства (2) гарантируют удовлетворение спроса каждого потребителя. Условия (3) означают, что предприятие не может привезти продукции больше, чем оно производит. Неравенства (4) учитывают ограничения на максимальный объем поставки продукта.

Эта задача является NP–трудной, поскольку представляет собой обобщение простейшей задачи размещения, к которой сводится NP–трудная задача о вершинном покрытии [2].

### **Алгоритмы решения и вычислительный эксперимент**

В последнее время при решении сложных задач большое внимание уделяется методам приближенного решения. Особый интерес представляют алгоритмы, построенные на аналогиях с живой природой и физическими процессами [напр., 3; 6; 7]. В данной работе предложены варианты алгоритмов пчелиного роя (АПР) и муравьиной колонии (АМК) для описанной выше задачи.

Алгоритм пчелиного роя и алгоритм муравьиной колонии являются алгоритмами локального поиска. Отличительная черта АПР состоит в том, что поиск решения осуществляется в двух направлениях: во всей допустимой области и в окрестности лучшего решения, найденного в процессе работы алгоритма. Центральной идеей АМК является накопление и использование статистической информации, которую собирают искусственные муравьи, представляющие собой жадные вероятностные алгоритмы.

В последнее время изучение ландшафтов является одним из интересных направлений в комбинаторной оптимизации [4; 5]. Были построены ландшафты тестовых задач. В работе использовалась такая характеристика ландшафтов как расстояние Хэмминга между каждой парой локальных оптимумов. Эти данные позволили сделать вывод о целесообразности использования окрестности 3 – *Flip* для получения локальных максимумов.

Построенные алгоритмы реализованы на языке Java. С целью их апробации проведены численные эксперименты. Выполнен сравнительный анализ разработанных алгоритмов АМК и АПР с решателем CPLEX [9]. Экспериментальные исследования проведены на сериях задач из электронной библиотеки им. С.Л. Соболева СО РАН [8]. Размерность задач составила  $n = m = 100$ . Средняя погрешность алгоритмов на всех сериях задач не превысила 5%. Предложены рекомендации по настройке параметров и поиску начального допустимого решения в указанных алгоритмах.

Экспериментальные исследования показали, что АПР и АМК могут успешно применяться к задачам размещения для нахождения приближенных решений.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Вознюк И.П.* Аппроксимационный алгоритм для задачи размещения на максимум с ограниченными объемами производств и поставок // Изв. вузов. Мат., 2000. № 12. С. 15–20.

[2] *Вознюк И.П.* Задача размещения на сети с ограниченными пропускными способностями коммуникаций // Дискрет. анализ и исслед. операций. Сер. 2, 1999. Т. 6, № 1. С. 3–11.

[3] *Колоколов А.А., Леванова Т.В., Лореш М.А.* Алгоритмы муравьиной колонии для задач дискретной оптимизации: учебно-методическое пособие. Омск: ОмГУ, 2008. 32 с.

[4] *Кочетов Ю.А.* Вероятностные методы локального поиска для задач дискретной оптимизации // Дискрет. мат. и ее приложения: Сборник лекций молодежных науч. шк. по дискрет. мат. и ее приложениям. М.: МГУ, 2001. С. 84–117.

[5] *Кочетова Н.А.* Ландшафты дискретной задачи об (r|p) – центроиде // XV Байкальская междунар. шк.-семинар «Методы оптимизации и их приложения». Иркутск, 2011. С. 167–172.

[6] *Леванова Т.В., Ткачук Е.А.* Разработка алгоритмов пчелиного роя для задачи размещения предприятий с ограничениями на мощности производства // Труды XV Байкальской международной школы-семинара «Методы оптимизации и их приложения». Т. 4: Дискретная оптимизация. Иркутск, 2011. С. 185–190.

[7] *Lučić P., Teodorović D.* Bee system: Modeling combinatorial optimization transportation engineering problems by swarm intelligence // Preprints of the Tristan IV Triennial Symp. on Transportation Analysis, Portugal. 2001. P. 441–445.

[8] Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН // <http://math.nsc.ru/AP/benchmarks/>.

[9] The General Algebraic Modeling System (GAMS) <http://www.gams.com/>.

---

Полина Игоревна Кальчевская,  
Омский государственный университет им Ф.М. Достоевского,  
2 курс магистратуры, ИМИТ,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,  
[polina.kalchevskaya@yandex.ru](mailto:polina.kalchevskaya@yandex.ru)

# АЛГОРИТМ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ ОДНОЙ ЗАДАЧИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ГРАФА

А.В. Моршинин

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

В работе рассматривается задача кластеризации графа, известная также как задача аппроксимации графа. Для задачи кластеризации графа с числом кластеров, не превосходящим 3, предложен приближенный полиномиальный алгоритм с гарантированной оценкой точности.

*Ключевые слова:* граф, кластеризация, аппроксимация, NP-трудная задача.

## 1. Постановка задачи и известные результаты

В задаче кластеризации требуется разбить заданное множество объектов на несколько подмножеств (кластеров) только на основе сходства объектов друг с другом. Одной из наиболее наглядных формализаций задачи кластеризации является *задача кластеризации графа*. В этой задаче сходство объектов задается с помощью ребер графа, вершины которого соответствуют объектам.

Будем рассматривать только обыкновенные графы, т. е. графы без петель и кратных ребер. Обыкновенный граф называется *кластерным графом*, если каждая его компонента связности является полным графом. Обозначим через  $M_{l,k}(V)$  множество всех кластерных графов на множестве вершин  $V$ , имеющих не более  $k$  компонент связности,  $2 \leq k \leq |V|$ .

Если  $G_1 = (V, E_1)$  и  $G_2 = (V, E_2)$  – помеченные обыкновенные графы на одном и том же множестве вершин  $V$ , то расстояние  $\rho(G_1, G_2)$  между ними определяется как

$$\rho(G_1, G_2) = |E_1 \Delta E_2| = |E_1 \setminus E_2| + |E_2 \setminus E_1|.$$

Обозначим через  $D(G_1, G_2)$  граф на множестве вершин  $V$  с множеством ребер  $E_1 \Delta E_2$ .

**Задача GC<sub>1,k</sub>.** Дан обыкновенный граф  $G = (V, E)$  и целое число  $k$ ,  $2 \leq k \leq |V|$ . Найти такой граф  $M^* \in M_{1,k}(V)$ , что

$$\rho(G, M^*) = \min_{M \in M_{1,k}(V)} \rho(G, M).$$

В статьях [1; 2; 4; 5] доказано, что задача  $\mathbf{GC}_{1,k}$  является  $NP$ -трудной при любом фиксированном  $k \geq 2$ .

В 2004 г. Бансал, Блюм, Чаула [2] разработали 3-приближенный алгоритм для задачи  $\mathbf{GC}_{1,2}$ .

В 2008 г. Коулман, Саундерсон и Вирт [3] предложили 2-приближенный алгоритм для задачи  $\mathbf{GC}_{1,2}$ , применив процедуру локального поиска к допустимому решению, полученному с помощью 3-приближенного алгоритма из статьи [2].

## 2. Приближенный полиномиальный алгоритм для задачи $\mathbf{GC}_{1,3}$

Через  $N_G(v)$  обозначим множество вершин в графе  $G = (V, E)$ , смежных с  $v$ .

Для множеств  $V_1, V_2, \dots, V_s \subseteq V$ , таких, что  $V_i \cap V_j = \emptyset$  для любых  $i, j \in \{1, \dots, s\}$  и  $V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_s = V$  обозначим через  $M(V_1, V_2, \dots, V_s)$  кластерный граф из класса  $M_{1,s}(V)$  с компонентами связности, порожденными множествами  $V_1, V_2, \dots, V_s \subseteq V$ . Некоторые из множеств  $V_i$  могут быть пустыми.

Представленный ниже алгоритм является полиномиальным приближенным алгоритмом решения задачи  $\mathbf{GC}_{1,3}$  с гарантированной оценкой точности.

### Алгоритм А.

Дан граф  $G = (V, E)$ ,  $|V| = n$ ,  $n \geq 2$ .

*Шаг 1.* Если  $n = 2$ , то  $M = G$ . Стоп.

*Шаг 2.* Для любой вершины  $w \in V$  выполнить

*Шаг 2.1.*  $V_1 = \{w\} \cup NG(w)$ . Если  $V_1 = V$ , то  $M_w$  – полный граф, иначе переход на шаг 2.2.

*Шаг 2.2.*  $G_1$  – подграф графа  $G$ , порожденный множеством  $V \setminus V_1$ . Приближенно решим задачу  $\mathbf{GC}_{1,2}$  на графе  $G_1$ .

*Шаг 2.2.1.* Для каждой вершины  $u \in V \setminus V_1$  определим кластерный граф  $M_u \in M_{1,2}(V \setminus V_1)$  следующим образом: вершина  $u$  и все смежные с ней вершины графа  $G_1$  принадлежат одной компоненте связности графа  $M_u$ , а все несмежные с  $u$  вершины – другой компоненте.

*Шаг 2.2.2.* Среди всех графов  $M_u$  выберем такой граф  $M'_1$ , что  $\rho(G_1, M'_1) = \min_{u \in V \setminus V_1} \rho(G_1, M_u)$ .

Далее используем 2-приближенный полиномиальный алгоритм локального поиска, предложенный Коулманом, Саундерсоном и Виртом [3]. Получим кластерный граф  $M_l = M(V_2, V_3)$  (может быть  $V_3 = \emptyset$ ). Полагаем  $M_w = M(V_l, V_2, V_3)$ .

*Шаг 3.* Среди всех  $M_w$  выберем ближайший к  $G$  кластерный граф  $M$ :

$$\rho(G, M) = \min_{w \in V'} \rho(G, M_w).$$

*Конец.*

**Теорема.** При  $n \geq 2$  для любого  $n$ -вершинного графа  $G$  имеет место оценка

$$\rho(G, M) \leq 6\rho(G, M^*),$$

где  $M$  – граф, построенный алгоритмом **A**,  $M^*$  – оптимальный кластерный граф в задаче **GC**<sub>1,3</sub>.

*Доказательство.* Пусть  $v$  – вершина минимальной степени в графе  $D = D(G, M^*)$ ,  $d_{min} = d_D(v)$ . Рассмотрим  $\bar{M} \in \mathbf{M}_{1,3}(V)$ , полученный из  $M^*$  путем переноса  $d_{min}$  вершин в другие компоненты графа  $M^*$ . Способом, аналогичным использованному в статье [2], можно доказать, что

$$\rho(G, \bar{M}) \leq 3\rho(G, M^*). \quad (1)$$

Пусть  $V_l = \{v\} \cup NG(v)$ . Возможны два случая.

а)  $V_l = V$ . Полагаем  $M_v = \bar{M}$ . Следовательно,

$$\rho(G, \bar{M}) \leq 3\rho(G, M^*) < 6\rho(G, M^*).$$

б)  $V_l \neq V$ . Обозначим через  $M_1^*$  оптимальное решение задачи **GC**<sub>1,2</sub> на графе  $G_l$ . Рассмотрим граф  $\tilde{M} = M(V_l) \cup M_1^*$ . Очевидно, что  $\rho(G, \tilde{M}) \leq \rho(G, \bar{M})$ . Следовательно, в силу (1)

$$\rho(G, \tilde{M}) \leq 3\rho(G, M^*). \quad (2)$$

Пусть  $M_l = M(V_2, V_3)$ . Положим  $M_v = M(V_l, V_2, V_3)$ .

Обозначим через  $s = s(v, G)$  сумму числа отсутствующих ребер в подграфе графа  $G$ , порожденном множеством вершин  $V_l = \{v\} \cup NG(v)$ , и величины разреза  $(V_l, V \setminus V_l)$  в графе  $G$ . Очевидно, что

$$\rho(G, M_v) = s + \rho(G_l, M_1) \text{ и } \rho(G, \tilde{M}) = s + \rho(G_l, M_1^*). \quad (3)$$

Если  $|V_l| \leq 2$ , то  $M_l = G_l$  и  $\rho(G_l, M_l) = \rho(G_l, M_l^*) = 0$ . Тогда в силу (2) и с учетом (3)

$$\rho(G, M_v) \leq 3\rho(G, M^*) \leq 6\rho(G, M^*).$$

Пусть  $|V_l| \geq 3$ . Тогда, как доказано в [3],

$$\rho(G_l, M_l) \leq 2\rho(G_l, M_l^*).$$

С учетом (3)

$$\begin{aligned} \rho(G, M_v) &= s + \rho(G_l, M_l) \leq s + 2\rho(G_l, M_l^*) \leq 2s + 2\rho(G_l, M_l^*) = \\ &= 2(s + \rho(G_l, M_l^*)) = 2\rho(G, \tilde{M}) \leq 6\rho(G, M^*). \end{aligned}$$

Последнее неравенство следует из (2). Теорема доказана.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Агеев А.А., Ильев В.П., Кононов А.В., Талевнин А.С. *Вычислительная сложность задачи аппроксимации графов* // Дискрет. анализ и исслед. операций. 2006. Серия 1. Т. 13, N 1. С. 3-11.
- [2] Bansal N., Blum A., Chawla S. *Correlation clustering* // Machine learning. 2004. V. 56. P. 89-113.
- [3] Coleman T., Saunderson J., Wirth A. *A local-search 2-approximation for 2-correlation-clustering* // Algorithms – ESA 2008: Lecture Notes in Computer Science. 2008. V. 5193. P. 308-319.
- [4] Giotis I., Guruswami V. *Correlation clustering with a fixed number of clusters* // Theory of Computing. 2006. V. 2, N 1. P. 249-266.
- [5] Shamir R., Sharan R., Tsur D. *Cluster graph modification problems* // Discrete Appl. Math. 2004. V. 144, N 1-2. P. 173-182.

---

Александр Владимирович Моршинин,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
1 курс магистратуры, ИМИТ,  
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,  
mater\_1234@mail.ru

# АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ К ЗАДАЧЕ МИНИМИЗАЦИИ ЗАТРАТ НА ПРИОБРЕТЕНИЕ РЕСУРСОВ

А.Ю. Пирогов

*Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. А.А. Романова*

В работе исследуется задача календарного планирования со складываемыми ресурсами и критерием минимизации затрат на их приобретение при условии изменения цены при достижении некоторого объема. Рассматриваются различные варианты скидки на единицу ресурса. Разработаны точные алгоритмы динамического программирования, проведены экспериментальные исследования.

## 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  $G = (V, E)$ . Также задан директивный срок  $T$  выполнения проекта, к которому все работы должны быть завершены.

Для выполнения работ требуются складываемые ресурсы  $m$  видов. Известна потребность  $q_{rj}$  работы  $j$  в ресурсе вида  $r$  в каждый период времени ее выполнения,  $r = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n$ . Складываемые ресурсы характеризуются тем, что излишек ресурса  $r$  может быть запасен на складе в количестве не большем  $V_r^{cont}$  для использования в будущем. В нашей работе рассматривается частный случай, когда  $V_r^{cont} = 0; r = 1, \dots, m$ .

Ресурсы для выполнения работ проекта необходимо приобретать. 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. Возможны два естественных варианта скидки:

1) скидка предоставляется на все единицы ресурса, приобретённые в данный период времени, если объем покупаемого в этот период времени ресурса  $r$  не меньше  $V_r^{norm}$ ;

2) скидка предоставляется только на единицы ресурса, приобретённые сверх  $V_r^{norm}$ .

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 [2] доказано существование оптимального расписания длины, равной критическому времени выполнения проекта, для скидки второго типа; предложена модель целочисленного линейного программирования; разработан псевдополиномиальный алгоритм нахождения приближённого решения задачи.

## 2. Алгоритмы 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 [3; 4]. Пусть получи-

лось  $k$  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. 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  $N_{\delta}$  – множество работ всех цепей, выполняющихся при управлении  $\delta$ . Выпишем рекуррентное соотношение:

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

В зависимости от типа скидки используется соответствующая функция  $C_r(q)$ .

$$\text{Для первого: } C_r(q) = \begin{cases} qC_r^{cover}, & \text{если } q \geq V_r^{norm}; \\ qC_r^{norm}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

$$\text{Для второго: } C_r(q) = \begin{cases} V_r^{norm} C_r^{norm} + (q - V_r^{norm}) C_r^{cover}, & \text{если } q \geq V_r^{norm}; \\ qC_r^{norm}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

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

Трудоёмкость алгоритмов показана в [1] и составляет  $O(2^k k^2 nm P_1 \dots P_k)$  операций. Таким образом, предложенные алгоритмы при фиксированной ширине  $k$  частичного порядка являются псевдополиномиальными.

Алгоритмы реализованы. В [1] представлены результаты сравнения работы с пакетом CPLEX 12.6 по времени работы. Так-

же было проведено дополнительное исследование возможностей алгоритмов, показавшее хорошие результаты для задач разных размерностей. В таблице представлены медиана, минимальное и максимальное время решения одной задачи для скидки второго типа:

$n$	30	60	90	120
Min time, мс	8	131	804	2933
Max time, мс	118	297	1389	3514
Медиана, мс	10	146	852	3109,5

Аналогичные результаты получены и для первого типа скидки. Благодаря этому можно сделать вывод об использовании алгоритмов для получения оптимального решения задачи в качестве альтернативы пакета CPLEX 12.6.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Пирогов А. Ю.* Алгоритм динамического программирования для решения одной задачи календарного планирования // ФМ ОмГУ 2015: сб. статей III рег. конф. магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике и математике. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2015. С. 21–24.

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

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

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

---

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

# ПРОЕКТИРОВАНИЕ ТЕХНИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ ДИСКРЕТНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Е.О. Рогова

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

Рассматриваются вопросы проектирования технических устройств, с применением методов дискретной оптимизации с логическими ограничениями. Приводится постановка задачи и модель целочисленного программирования.

*Ключевые слова:* автоматизация проектирования, дискретная оптимизация, целочисленное программирование, логические ограничения.

Развитие и применение компьютерных технологий открыло широкие возможности для решения достаточно сложных задач, возникающих при проектировании изделий. Проектирование изделий представляет собой трудоемкий процесс, на разных этапах которого приходится анализировать значительное число вариантов решений и выбирать из них наилучшее с учетом различных требований.

Актуальность данного направления обусловлена дискретным характером производства, частой сменяемостью моделей и разнообразием их элементов.

Идея одного из подходов к автоматизации проектирования сложных изделий состоит в использовании моделей дискретной оптимизации с логическими ограничениями, которые часто описываются с помощью логических формул и приводят к задаче выполнимости (SAT), а так же к задаче максимальной выполнимости (MAX SAT) [2].

Данный подход применяется при проектировании одежды, формировании производственных групп, технических устройств и др. [1]. Нами будет рассмотрена модель процесса проектирования изделия, которое формируется из множества составляющих, к ним относятся различные части технического устройства. Не все составляющие могут войти в изделие одновременно. Подобного типа условия могут быть отражены с помощью логических ограничений.

Требуется спроектировать техническое устройство – системный блок, состоящий из следующих деталей: корпус, материнская плата, процессор, видеокарта, блок питания, жесткий диск и оперативная память. Каждая деталь может быть выбрана из некоторого перечня возможных вариантов этой детали. Так для детали корпус доступны 3 варианта: standart, mini и micro, каждому из которых присваиваем переменную  $x_1$ ,  $x_2$  и  $x_3$  соответственно. Аналогично поступаем со всеми вариантами для каждой детали (табл. 1).

Таблица 1

### Перечень деталей системного блока

Корпус			Материнская плата								Процессор				Видеокарта				Блок питания			ЖД		Оперативная память		
$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$	$x_7$	$x_8$	$x_9$	$x_{10}$	$x_{11}$	$x_{12}$	$x_{13}$	$x_{14}$	$x_{15}$	$x_{16}$	$x_{17}$	$x_{18}$	$x_{19}$	$x_{20}$	$x_{21}$	$x_{22}$	$x_{23}$	$x_{24}$	$x_{25}$	$x_{26}$	$x_{27}$
standart	mini	micro	1155	1150	AM3+	FM2+	1155*	1150*	AM3+*	FM2+*	1155	1150	AM3+	FM2+	Sapphire RADEON R7 360 OC	ASUS GeForce GTX 750	ASUS RADEON R7 360	ASUS GeForce GTX 650	Palit GeForce GTX 750 KalmX	Sapphire RADEON R7 250	350W	500W	400W	.	1333	1600

Логическая переменная  $x_j$  принимает значение истина, если деталь с номером  $j$ ,  $j = 1, \dots, 27$  включается в изделие. В противном случае – значение ложь.

В ходе построения модели возникают ограничения следующих типов:

1. Несовместимость из-за размеров.
2. Возможность исключения из набора одного из элементов при выборе некоторого типа другого элемента.
3. Детали разных производителей могут быть несовместимы, такие как, процессор и материнская плата.

Так, например выбор некоторой материнской платы из-за своего размера влечет за собой ограничения на корпус. Платы, соответствующие, переменным  $x_{8,\dots,11}$ , могут быть включены в изделие с любым корпусом. А с материнскими платами, соответствующими переменным  $x_{4,\dots,7}$ , совместим лишь один корпус, ему отвечает переменная  $x_1$ , что приводит к следующим ограничениям (табл. 2).

Таблица 2

### Ограничения несовместимости корпуса и материнских плат

Логическая формула		Линейное ограничение
$x_4 \rightarrow x_1$	$\bar{x}_4 \vee x_1$	$y_4 - y_1 \leq 0$
$x_5 \rightarrow x_1$	$\bar{x}_5 \vee x_1$	$y_5 - y_1 \leq 0$
$x_6 \rightarrow x_1$	$\bar{x}_6 \vee x_1$	$y_6 - y_1 \leq 0$
$x_7 \rightarrow x_1$	$\bar{x}_7 \vee x_1$	$y_7 - y_1 \leq 0$

Также существует возможность исключения из набора одного из элементов при выборе некоторого типа другого элемента. Так при выборе процессора, соответствующего переменной  $x_{15}$ , возникает условие того, что в изделие можно не включать элемент «Видеокарта»  $x_{16,\dots,19}$ .

Ставится задача формирования исходного множества альтернатив в принятии решения с выбором наилучшей из них.

При проектировании данного изделия устанавливается минимальное требуемое значение FPS (FramesperSecond) – это количество кадров в секунду на экране монитора, выдаваемых видеокартой и компьютером, равное  $\alpha$ , характеризующее производительность компьютера, и с учетом данного ограничения минимизируется стоимость изделия. Пусть  $y_j = \{0; 1\}$ ,  $j = 1, \dots, n$  – переменная, соответствующая детали устройства,  $c_j$ ,  $j = 1, \dots, n$  – цена соответствующей детали,  $h_i = (y_1, \dots, y_n)$ ,  $i = 1, \dots, m$  – изделие удовлетворяющее системе ограничений  $C_k$ ,  $k = 1, \dots, p$ . Модель для сформулированной выше задачи целочисленного программирования имеет вид:

$$\sum_{y_j \in h_l} c_j y_j \rightarrow \min, j = 1, \dots, n \quad (1)$$

при условии

$$\tilde{h}_l \in \tilde{H} : fps(h_l) \geq \alpha, l = 1, \dots, s \quad (2)$$

При решении данной задачи был найден набор, состоящий из 360 векторов, удовлетворяющих ограничениям  $C_k$ ; таким, например,  $(0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1)$  является вектор

Таким образом, при проектировании сложных изделий приходится перебирать и сравнивать большое количество вариантов изделия, поэтому в ряде случаев достаточные интересные и перспективные модели сложных изделий могут оказаться не рассмотренными, а выбранные варианты не всегда будут наилучшими. В связи с наличием ограничений различного типа и является актуальным совершенствование процесса автоматизации проектирования.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Артемова А.В.* Решение оптимизационных задач при разработке средств вычислительной техники: учеб. пособие / А.В. Артемова, А.А. Колоколов, В.И. Потапов. Омск, 2012. 88 с.

[2] *Колоколов А.А.* Разработка и анализ дискретной моделей оптимизации для проектирования одного класса сложных изделий / А.А. Колоколов, Т.М. Орлова // Омский научный вестник. 2012. № 2 (110). С. 22–24.

---

Евгения Олеговна Рогова,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского  
I курс магистратуры, ИМИТ,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,  
rogova.evgenya.314159@mail.ru

# О ЗАДАЧЕ РАЗМЕЩЕНИЯ НА СЕТИ С МАКСИМИННЫМ КРИТЕРИЕМ

Е.А. Чак

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

Рассматривается задача размещения объекта на плоской сети с максиминным критерием и ограничением на транспортные затраты. Предложен алгоритм поиска точного решения для частного случая.

*Ключевые слова:* алгоритм Дейкстры, евклидова метрика, максиминная задача.

Рассматривается максиминная задача размещения объекта на сети в следующей постановке. В районе имеются населенные пункты, соединенные сетью дорог. Известно расстояние между пунктами и задана численность населения, проживающего в каждом из них. Требуется разместить на сети объект, который обслуживает пункты, как можно дальше от них, и чтобы затраты на обслуживание не превосходили заданного бюджета.

Поставим в соответствие пунктам и дорогам сеть, вершины которой соответствуют населенным пунктам, а дуги – дорогам. Веса вершин – это количество проживающих в населенных пунктах, а веса дуг – расстояния между пунктами. Требуется разместить объект на сети как можно дальше от его вершин с учетом их весов так, чтобы выполнялось ограничение на транспортные затраты.

Обозначим через  $G = (V, E)$  – связанную неориентированную сеть с вершинами  $V = \{v_i\}$ ,  $i \in N = \{1, \dots, n\}$ ;  $z$  – размещаемый объект,  $W_i$  – вес вершины  $v_i$ ,  $T$  – бюджет на транспортные затраты,  $d(z, v_i)$  – расстояние между  $z$  и вершиной  $v_i$ , измеряемое по сети  $G$ ,  $\rho(z, v_i)$  – расстояние между  $z$  и вершиной  $v_i$ , измеряемое в евклидовой метрике.

Математическая модель имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{i \in N} \left( \frac{\rho(z, v_i)}{W_i} \right) \rightarrow \max, \\ \sum_{i \in N} W_i d(z, v_i) \leq T, \\ z \in G \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (1) \\ (2) \\ (3) \end{array}$$

Условие (1) означает максимизацию минимального взвешенного расстояния от размещаемого объекта до фиксированных; выражение (2) гарантирует выполнение ограничения на транспортные затраты; условие (3) означает, что объект размещается на сети  $G$ .

Отметим некоторые свойства задачи, в частности, если бюджетное ограничение нарушается для смежных вершин, то эту дугу можно не рассматривать при поиске оптимального решения. В работе [1] описан алгоритм поиска приближенного решения задачи. Задачи близкие к сформулированной, без учета бюджетного ограничения, исследовались, например, в работе [3].

Отметим, что в общем случае при размещении объекта  $z$  на дуге  $(v_p, v_q)$  значение функции (1) определяется не только вершинами  $v_p$  и  $v_q$ . Влияние на целевую функцию могут оказывать другие вершины.

*Определение.* Вершина  $v_k$  влияет на расположение объекта на дуге  $(v_p, v_q)$ , если  $\exists z' \in (v_p, v_q)$  такая, что выполняется неравенство

$$\frac{\rho(v_k, z')}{W_k} < \min \left\{ \frac{\rho(v_p, z')}{W_p}, \frac{\rho(v_q, z')}{W_q} \right\}.$$

Если вершина влияет, будем называть её влияющей, иначе невливающей.

Приведем алгоритм исключения невливающих вершин для дуги  $(v_p, v_q)$ . Пусть  $v_k$  – проверяемая вершина.

*Шаг 1.* Строим уравнение прямой  $L_1$ , проходящей через  $v_p$  и  $v_q$ .

*Шаг 2.* Находим уравнение прямой  $L_2$ , проходящей через вершину  $v_k$  перпендикулярно  $L_1$ .

*Шаг 3.* Находим  $k'$  – точку пересечения  $L_1$  и  $L_2$ .

*Шаг 4.* Если  $k' \notin (v_p, v_q)$  или  $\rho(v_k, k') \geq \frac{\rho(v_p, v_q)}{2}$ , то вершина  $v_k$  невливающая.

Опишем алгоритм решения задачи (1)–(3) для случая, когда для каждой дуги существует не более одной влияющей вершины и  $W_i = 1, i \in N$ .

Идея алгоритма заключается в следующем. На первом этапе решается задача 1-медиана с помощью алгоритма Дейкстры [2]. Если затраты в ней не превышают бюджета, то задача разрешима, переходим на следующий этап. На следующем этапе удаляем из рассмотрения дуги, на которых нет допустимых решений. Это дуги, в вершинах которых значения транспортных затрат превышают бюджет. При нахождении транспортных затрат также используется алгоритм [2]. Таким образом, уменьшается количество дуг для поиска решения задачи. Далее ищем решение с помощью следующего алгоритма.

Пусть  $y = kx + b$  – это уравнение прямой, проходящей через вершины  $v_p$  и  $v_q$ .

Если нет влияющей вершины, то решение – середина дуги. Если  $v_k$  влияющая вершина, то в случае  $\rho(v_q, k') \geq \rho(v_p, k')$  решаем систему

$$\begin{cases} \rho(v_q, z) = \rho(v_k, z) \\ y = kx + b \end{cases},$$

иначе

$$\begin{cases} \rho(v_p, z) = \rho(v_k, z) \\ y = kx + b \end{cases}$$

Просмотрев таким образом каждую дугу, выбираем точку с максимальным значением целевой функции.

Рассматривалась максиминная задача размещения на сети. Введено определение влияющих вершин и предложен алгоритм

исключения множества невливающих вершин. Разработан алгоритм решения для невзвешенного варианта задачи с не более чем одной влияющей вершиной.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Забудский Г.Г.* Максиминные задачи размещения в сетях / Г.Г. Забудский // Анализ, моделирование, управление, развитие социально-экономических систем: сборник научных трудов IX Международной школы-симпозиум. Севастополь, 2015. С. 120–121.

[2] *Кристофидес Н.* Теория графов. Алгоритмический подход. М.: Мир, 1978. 432 с.

[3] *Burkard R.E., Dollani H., Lin Y., Rote G.* The obnoxious center problem on a tree // *SIAM J. on Discrete Mathematics*, 2001, Vol. 14, P. 498–509.

---

Елена Андреевна Чак,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
1 курс магистратуры, ИМИТ,  
644077, Омск 77, пр. Мира 55А, (3812)644238,  
e.a.chak@mail.ru

# ПЛАНИРОВАНИЕ ИНВЕСТИЦИОННЫХ ПРОЕКТОВ С НЕЗАВИСИМЫМИ РАБОТАМИ ЕДИНИЧНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

К.А. Черных

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

Рассматривается задача календарного планирования инвестиционных проектов с критерием максимизации чистой приведенной прибыли при возможности кредитования и реинвестирования дохода, получаемого в процессе реализации проекта. Для идентичных работ единичной длительности в непрерывном случае получено оптимальное решение в аналитическом виде, для дискретного варианта предложен алгоритм полиномиальной трудоемкости.

Имеется  $N$  технологически независимых работ единичной длительности,  $k_j$  – капиталовложения, необходимые для выполнения работы  $j$ . В модели предполагается, что эти деньги необходимо иметь к моменту старта работы. По ее завершению получаем доход в размере  $c_j$ . Инвестор обладает начальным капиталом  $K_0$ . Имеется возможность кредитования по ставке  $r$  за единичный период времени. Для сравнения денег в различные моменты времени используем операцию дисконтирования. Ставка альтернативного безрискового ликвидного размещения капитала равна  $r_0$ . Требуется составить расписание выполнения работ, при котором чистая приведенная прибыль всего проекта будет максимальной.

Приведем интерпретацию этой задачи. Инвестор владеет участком земли, на котором хочет построить коттеджный поселок из  $N$  домов. Каждый дом возводится независимо от других, и начало его возведения зависит исключительно от финансирования. При его наличии материалы закупаются, рабочие нанимаются. По завершению строительства дом продается. Полученные от продажи деньги могут быть вложены в строительство остальных домов. Возможно использование кредитов. Необходимо определить сроки возведения домов, при которых общая прибыль всего проекта будет максимальной.

Очевидно, что для всех  $j = 1, 2, \dots, N$  имеет место неравенство  $c_j \geq k_j(1 + r_0)$ , иначе работа  $j$  совсем не будет выполняться, так как при размещении денег на рынке под ставку  $r_0$  полученная прибыль будет больше. Кроме того, для запуска проекта необходимо либо наличие начального капитала, либо, чтобы прибыльность хотя бы одной работы была выше ставки по кредиту, то есть  $c_j \geq k_j(1 + r)$ .

Сложность задачи с зависимыми работами исследовалась в [1–3]. В данной работе исследована задача с идентичными независимыми работами. В этом случае  $k_j = k$ ,  $c_j = c$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ .

Рассмотрим сначала непрерывный случай, который аппроксимирует задачу при больших значениях  $N$ . Будем считать, что начальный капитал отсутствует. Пусть  $x_t$  – доля работ, начинающихся в момент  $t$ . Необходимо определить срок завершения проекта  $T$  и вектор  $(x_0, x_1, \dots, x_{T-1})$  такой, что  $\sum_{t=0}^{T-1} x_t = 1$ , при которых приведенная к начальному моменту прибыль будет максимальной.

**Утверждение 1.** В оптимальном решении кредит берем только в начальный момент времени.

**Утверждение 2.** В оптимальном решении баланс платежей в любой момент времени, кроме последнего, равен нулю.

Из утверждения 2 получаем  $x_1 = x_0 \cdot (a - 1 - r)$ ,  $x_t = x_0 \cdot (a - 1 - r) \cdot (a)^{t-1}$ , где  $a = \frac{c}{k}$ . Тогда целевая функция принимает вид

$$NPV = \frac{1}{(1+r_0)^T} \cdot \frac{a^{T-1}(a-1-r)(a-1)}{a-1+(a-1-r)(a^{T-1}-1)} \rightarrow \max_r.$$

Оптимальное решение этой функции достигается при  $T = \log_a \left( \frac{r}{a-1-r} \cdot (\log_{1+r_0} a - 1) \right)$ .

*Приведем небольшой пример.*

Пусть  $k = 1$ ;  $c = 1,4$ ;  $r = 0,2$ ;  $r_0 = 0,1$ . Оптимальное значение  $T \approx 3,2$ . Оптимальное целочисленное значение  $T^* = 4$ . Опти-

мальное решение  $(x_0, x_1, x_2, x_3) = (0, 534; 0, 107; 0, 150; 0, 209)$ . Значение прибыли при  $T = 1, 2, 3, 4, 5$  равно, соответственно: 0,189; 0,193; 0,199; **0,203**, 0,200.

При ненулевом начальном капитале выкладки аналогичны.

Перейдем к описанию алгоритма решения задачи в дискретном случае. Используем схему динамического программирования. Для ее реализации необходимо оценить срок завершения проекта. При условии  $c \geq k(1+r)$  достаточно взять  $T_{max} = N$ . Пусть  $R(t, n)$  – максимальный размер капитала на момент  $t$ , если к этому моменту завершилось  $n$  работ. Переменная  $x_t$  обозначает количество работ, начинающих выполнение в момент времени  $t$ . Запишем уравнение Беллмана

$$R(t+1, n) = \max_{x_t=0,1,\dots,n} \{ (R(t, n-x_t) - kx_t)(1+s) + cx_t \},$$

где  $s = r$ , если  $R(t, n-x_t) - kx_t < 0$ , и  $s = r_0$  иначе.

Для реализации алгоритма для каждого  $n = 1, 2, \dots, N$  задаем начальные условия  $R(1, n) = (K_0 - nk)(1+s) + nc$  и организуем двойной цикл по  $t = 1, 2, \dots, T_{max} - 1$  и  $n = 1, 2, \dots, N$ , вычисляя значение  $R(t+1, n)$  по выписанной выше рекуррентной формуле. Восстановление оптимального решения осуществляем стандартным способом.

Трудоёмкость алгоритма не превышает  $O(N^3)$  операций. Для проекта  $N = 5; k = 3; c = 5; r = 0,2; r_0 = 0,1; K_0 = 0$  оптимальное решение достигается при  $T = 3$ . Оптимальное количество выполняемых работ равно  $(N_0, N_1, N_2) = (3, 1, 1)$ . При этом в начальный момент времени оформляется кредит в размере 9 единиц, а остальные две работы выполняются за счет реинвестирования дохода. Чистая приведенная прибыль этого проекта равна  $NPV = 6,5$ . Если полностью выполнять все пять работ в первом временном интервале за счет кредитов, то прибыль составит 6,36 единиц.

**Теорема.** *Задача максимизации чистой приведенной прибыли инвестиционного проекта с идентичными независимыми работами единичной длительности при возможности использования кредитов является полиномиально разрешимой.*

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Гимади Э.Х.* Полиномиальная разрешимость задач календарного планирования со складываемыми ресурсами и директивными сроками / Э.Х. Гимади, В.В. Залюбовский, С.В. Севастьянов // Дискретный анализ и исследование операций. Новосибирск, 2000. Сер. 2. Т. 7. № 1. С. 9–34.

[2] *Сервах В.В.* О сложности задачи календарного планирования проектов / В.В. Сервах, Т.А. Щербинина // Вест. НГУ. Сер. Математика, механика, информатика, 2008. Т. 8, Вып. 3. С. 105–111.

[3]. *Казаковцева Е.А.* Сложность задачи календарного планирования с кредитами / Е.А. Казаковцева, В.В. Сервах // Дискретный анализ и исследование операций, 2015. Т. 22, № 4. С. 35–49.

---

Ксения Андреевна Черных,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
1 курс магистратуры, ИМИТ,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,  
ksech@bk.ru

**Секция**  
**ПРИКЛАДНАЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА**

---

**ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ  
ОБМЕННОГО ИНТЕГРАЛА СИСТЕМЫ СО/СУ(100)\***

**Н.С. Андриянов**

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

С применением программного комплекса VASP в рамках метода функционала плотности осуществлены расчеты обменного интеграла пленки Со толщиной в два и три атомарных слоя адсорбированных с обеих сторон медной пластины с ориентацией грани (100).

*Ключевые слова:* первопринципные расчеты, ультратонкие пленки, обменный интеграл, межслоевая релаксация.

Магнитные пленки кобальта находят широкое применение при создании спинтронных наносистем. Наибольшее распространение получили магниторезистивные структуры, обладающие эффектом гигантского магнитного сопротивления (ГМС). Их используют для создания высокочувствительных датчиков магнитного поля, способных реагировать на его ничтожно малое изменение.

Расчеты физических свойств твердых тел «из первых принципов» (ab-initio) [1] в настоящее время доступны широкому кругу исследователей. Это связано с бурным развитием вычислительной техники и с появлением мощных программных комплексов. В данной работе использовался программный комплекс VASP [2; 3], основанный на методе функционала плотности, с применением приближения PAW-GGA-PBE. В расчетах учитывалось коллинеар-

---

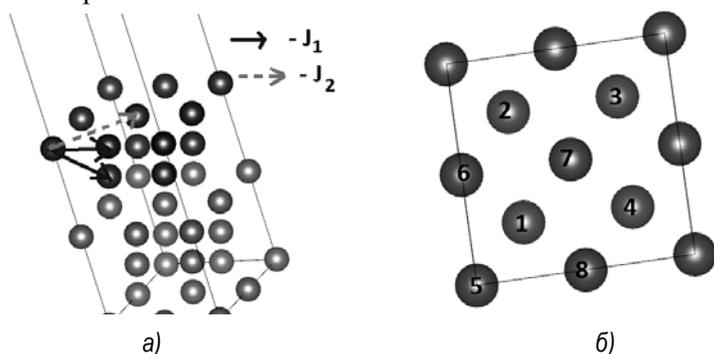
© Н.С. Андриянов, 2016

---

\* Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 14-12-00562.

ное магнитное взаимодействие, с ориентацией спинов перпендикулярно поверхности. Для релаксации сил, действующих на ионы, использовался метод сопряженных градиентов.

Система моделировалась с помощью периодической 24 и 32-атомной суперячейки (2×2), состоящей из трех атомарных слоев меди и двух и трех атомарных слоев кобальта с обеих сторон пластины (рис. 1). Постоянная решетки  $a_{cell}=3,61\text{\AA}$  соответствовала постоянной решетки меди. Толщина вакуумного слоя равная  $3\text{\AA}$  выбиралась таким образом, чтобы две поверхности, образованные пластиной, не взаимодействовали друг с другом из-за периодических граничных условий. Расчеты электронной структуры осуществлялись интегрированием в зоне Бриллюэна с использованием k-сетки, построенной по методу Монкхорста-Пака. Размерность k-сетки была выбрана  $8\times 8\times 1$  при энергии обрезания базиса плоских волн равной 350 эВ.



**Рис. 1.** Схематичное изображение системы с двухатомной пленкой: а) направления обменного взаимодействия; б) пленка – плоскость XY

Записав гамильтониан обменного взаимодействия в модели Гейзенберга в виде:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad (1)$$

можно получить формулу для вычисления обменного интеграла:

$$N_{ij} J_i = \Delta E_i \triangleright, \quad (2)$$

где  $N_{ij}$  – количество пар ближайших соседей с противоположно направленными спинами, где  $i, j = 2$  различные антиферромагнит-

ные спиновые состояния;  $\Delta E_i$  – разность энергий между антиферромагнитным и ферромагнитным состоянием,  $J_1, J_2$  – интегралы обменного взаимодействия между ближайшими соседями и следующими за ближайшими соседями соответственно, схематично изображены на рис. 1а. Рассмотренные антиферромагнитные состояния приведены в табл.1-2. Знаком ‘+’ обозначено направление проекции спина – вверх, знаком ‘-’ направление вниз. Порядок чередования знаков соответствует нумерации атомов, пример которой для двухатомной пленки приведен на рис. 1б.

Таблица 1

**Значения обменного интеграла и параметров, необходимых для их расчетов, для двух атомарных слоев**

Проекция спина атомов в пленке 1–4 1 слой 5–8 2 слой									$\Delta E, eV$	$N_1$	$N_2$	$J_1, mRy$	$J_2, mRy$
+	-	+	-	-	+	-	+		2.74 <u>2.27</u>	26	0	0.24	0.3
+	+	-	-	-	-	+	+		2.74 <u>2.27</u>	16	8	<u>0.21</u>	<u>0.23</u>

Таблица 2

**Значения обменного интеграла и параметров, необходимых для их расчетов, для трех атомарных слоев**

Проекция спина для 12 атомов в пленке												$\Delta E, eV$	$N_1$	$N_2$	$J_1, mRy$	$J_2, mRy$
+	-	+	-	-	+	-	+	+	-	+	-	4.15 <u>3.23</u>	44	0	0.14	0.09
+	+	-	-	-	+	+	+	+	-	-		4.15 <u>3.23</u>	36	12	<u>0.11</u>	<u>0.08</u>

Таблица 3

**Значения магнитных моментов для двух и трех атомарных слоев ( $\mu_i$  – магнитный момент атома в  $i$ -ом слое,  $\mu_{tot}$  – средний магнитный момент атома)**

	$\mu_1, \mu_B/at$	$\mu_2, \mu_B/at$	$\mu_3, \mu_B/at$	$\mu_{tot}, \mu_B/at$
2MLCo/Cu(100)	1.746	1.545		1.65
	1.813[4]			1.652[4]
3MLCo/Cu(100)	1.825	1.580	1.602	1.67

В табл. 1, 2 представлены рассчитанные значения обменного интеграла для двух и трех атомарных слоев без учета и с учетом релаксации. Подчеркнутые значения – значения, полученные с учетом релаксации. Видно, что учет релаксации приводит к уменьшению обменного интеграла на 12–23 %.

Данные табл. 3 показывают хорошее согласие результатов наших расчетов с приведенными в [4] значениями магнитного момента системы 2MLCo/Cu(100). Сравнение значений магнитных моментов атомов в разных слоях позволяет сделать вывод, что наибольшим моментом обладают атомы наиболее удаленные от подложки.

### ЛИТЕРАТУРА

[1] *X. Gonze, J.-M. Beuken*. First-principles computation of material properties :the ABINIT software project // *Computational Materials Science* 25. 2002. P. 478.

[2] *G.Marsman, M.Kresse*. VASP the GUIDE // *Universitat Wien Sensengasse 8/12.A-1090 Wien*. P. 208.

[3] *G. Kresse, D. Joubert*, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // *Phys. Rev. B* 59. 1999. P. 1758.

[4] *R. Pentcheva, M. Scheffler*, Stable and metastable structures of Co on Cu(001): An ab initio study // *Phys. Rev. B* 61. 2000. P. 2211.

---

Никита Сергеевич Андриянов,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
Физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
andriyanov\_7@mail.ru

# МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УЛЬТРАТОНКИХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК С УЧЕТОМ ОДНООСНОЙ АНИЗОТРОПИИ И ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В.О. Борзилов

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

В данной статье представлено моделирование методом Монте-Карло критических свойств ультратонких магнитных пленок на основе анизотропной модели Гейзенберга. Проведен анализ температурной зависимости намагниченности и кумулянтов Биндера с целью определения значения критической температуры.

Современные технологии позволяют создавать на основе тонких пленок магнитные сверхструктуры, которые имеют высокое прикладное значение для создания устройств спинтроники [1].

В данной работе исследуются критические свойства магнитной пленки, которая моделируется, как решетка спинов толщиной в один монослой и с линейным размером  $L$ . В направлении  $X$  и  $Y$  используются периодические граничные условия и открытые граничные условия вдоль направления  $Z$ . Модель описывается гамильтонианом [2]

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - A \sum_i S_i^2 + D \sum_{i \neq j} \left( \frac{S_i S_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(S_i r_{ij})(S_j r_{ij})}{r_{ij}^5} \right), \quad (1)$$

где  $S_i$  – трёхмерный спин в  $i$ -ом узле решётки,  $J$  – константа обменного взаимодействия,  $A$  – константа характеризующая одноосную анизотропию, создаваемую подложкой вдоль оси перпендикулярной плоскости монослоя,  $D$  – константа диполь-дипольного взаимодействия.

В работе проводился расчет намагниченности  $m$  и проекций  $m_z, m_{xy}$

$$m = \left\langle \frac{1}{N_S} \sum_i \sqrt{S_{i,x}^2 + S_{i,y}^2 + S_{i,z}^2} \right\rangle,$$

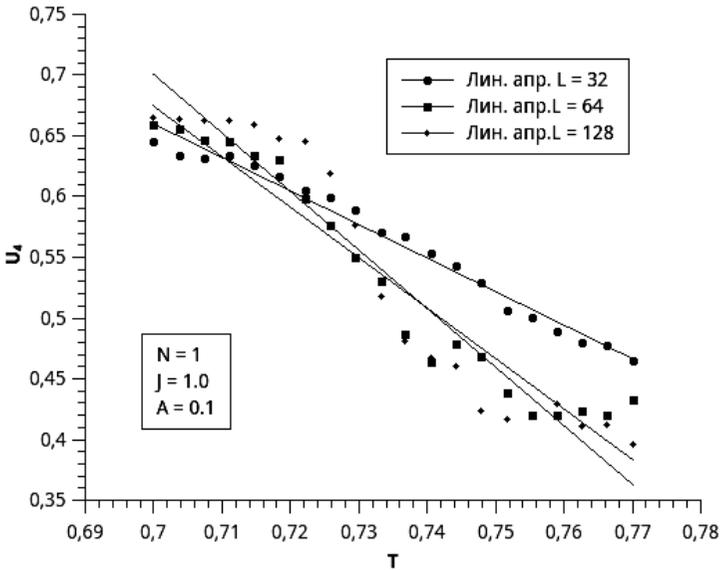
$$m_z = \left\langle \frac{1}{N_S} \sum_i S_{i,z} \right\rangle, \quad m_{xy} = \left\langle \frac{1}{N_S} \sum_i \sqrt{S_{i,x}^2 + S_{i,y}^2} \right\rangle, \quad (2)$$

где  $N_S = L^2$  – число спинов в плёнке, угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают статистическое усреднение.

Для определения критической температуры фазового перехода использовались температурные зависимости кумулянтов Биндера

$$U_4(L, T) = 1/2 \left[ 3 - \langle m^4(T, L) \rangle / \langle m^2(L, T) \rangle^2 \right]. \quad (3)$$

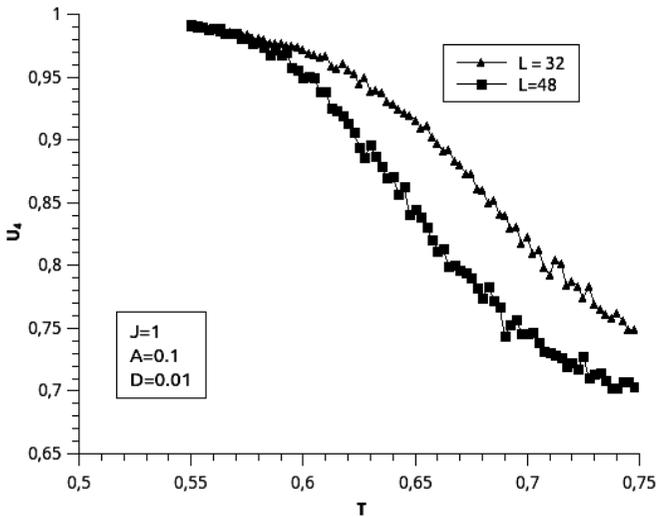
Для расчета критической температуры для монослойной пленки с  $A = 0,1$  без учета диполь-дипольного взаимодействия рассматривались решётки с линейным размером  $L = 32, 64, 128$ . Усреднение проводилось по 100 статистическим конфигурациям. Пересечение температурных зависимостей кумулянта Биндера для различных  $L$ , представлено на рис. 1. Нахождение центра тяжести треугольника пересечения позволяет оценить значение  $T_c = 0,72(2)$ .



**Рис. 1.** Линейная аппроксимация температурной зависимости кумулянтов Биндера

При моделировании монослойной пленки с учетом диполь-дипольного взаимодействия использовались решётки с линейными размерами  $L = 24, 32, 48$ . Так как при учете дальнедействующего диполь-дипольного взаимодействия идет суммирование по всем спинам решетки, то время моделирования существенно возрастает. Моделирование проводилось для значений  $A = 0,1$ ;  $D = 0,01$ . Усреднение проводилось по 20 статистическим прогонам.

Включение диполь-дипольного взаимодействия сдвигает критическую температуру в область более низких значений как показано на рис. 2. Представленные зависимости позволяют оценить значение  $T_c = 0,57(2)$ .



**Рис. 2.** Зависимость кумулянтов Биндера от температуры

Проведенные исследования были поддержаны грантом Президента РФ № МД-6024.2016.2, проектом Министерства образования и науки РФ №1627, в рамках государственного задания ВУЗам в части проведения научно-исследовательских работ на 2014-2016 гг. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории ОмГУ, суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН Москвы и Санкт-Петербурга.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] Mukherjee T., Pleimling M., Binek Ch. Probing equilibrium by nonequilibrium dynamics: Aging in Co/Cr superlattices. *Phys. Rev. B*. 2010. V. 82. P. 134425.

[2] Soldusova A.P., Prudnikov P.V., Prudnikov V.V. Monte-Carlo investigation of competition between uniaxial anisotropy, exchange and dipolar interactions in critical behavior of ultrathin magnetic films. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2016. V. 681. P. 012017.

---

Вадим Олегович Борзилов,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
1 курс магистратуры, Физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,  
vadimborzilov@gmail.com

## МЕТОД ВАНГА – ЛАНДАУ В СПИНОВЫХ СТЕКЛАХ

В.О. Дергачёв

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

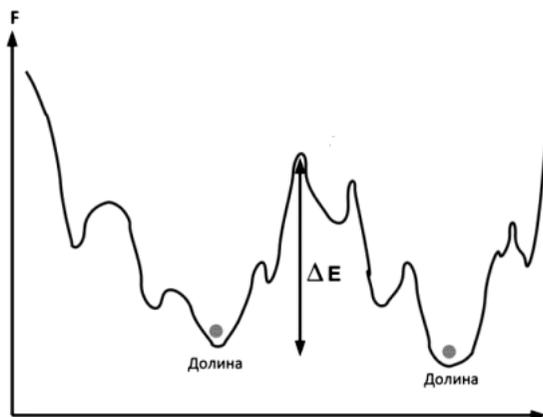
В данной статье описывается принцип использования метода Ванга-Ландау в спиновых стеклах на примере изинговой модели Эдвардса-Андерсона. Раскрываются преимущества использования метода Ванга-Ландау в спиновых стеклах. А так же приводятся вычисления некоторых термодинамических величин.

*Ключевые слова:* спиновые стекла, метод Ванга – Ландау, термодинамические величины, параметр порядка Паризи.

Спиновыми стеклами называют неупорядоченные магнетики, в которых энергия обменного взаимодействия случайным образом меняет не только величину, но и знак. В таких системах с конкурирующими взаимодействиями, в отличие от обычных магнетиков, с понижением температуры дальнего магнитного порядка не возникает. Но не происходит и медленного постепенного замораживания спинов. Ниже некоторой, достаточно хорошо фиксируемой на эксперименте температуры магнетик переходит в новое состояние, не имеющее аналогов в упорядоченных системах. Характерным свойством этого состояния является чрезвычайно медленная релаксация. Типичные времена установления равновесия, во всяком случае, превосходят  $10^4$ – $10^5$ с. Одновременно наблюдаются явления необратимости статических свойств.

В отличие от обычных магнитоупорядоченных фаз, в спиновых стеклах фрустрированное основное состояние имеет в пространстве конфигураций магнитных моментов не один глобальный минимум энергии, а макроскопически большое (растущее экспоненциально с ростом числа магнитных моментов  $N$ ) число локальных минимумов (долин), обладающих иерархической (ультраметрической) структурой (рис. 1). Система магнитных моментов спиновых стекол испытывает случайную диффузию в пространстве долин, преодолевая потенциальные барьеры различной высоты (в пределе больших  $N$  сколь угодно высокие). Этим объяс-

няется практически непрерывный широкий диапазон времён магнитной релаксации [1].



**Рис. 1.** Энергетическое пространство долин в спиновой конфигурации спинового стекла

Основное состояние спиновых стекол при  $T < T_g$  вырождено или квазивырождено. Вырождение основного состояния связано с тем, что в магнетике с конкурирующими обменными взаимодействиями неизбежно возникают фрустрации (неудовлетворенные связи), т. е. пары спинов, энергия взаимодействия которых не соответствует минимуму.

Основное состояние системы имеет сложную и необычную иерархическую структуру, присущую, по-видимому, всем случайным системам, в которых наложенные связи не могут быть удовлетворены одновременно. Неудивительно поэтому, что идеи теории молекулярного поля и полученные результаты оказались полезными для различных проблем биологии, теории комбинаторной оптимизации и т. д. [2].

Наиболее используемая модель спинового стекла – это модель Эдвардса-Андерсона (модель Изинговского спинового стекла), где гамильтониан системы приобретает вид:

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

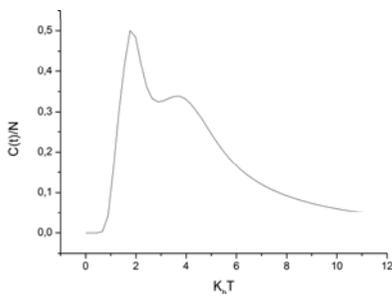
где  $J_{ij}$  принимает случайное значение  $-1$  или  $1$  с вероятностью  $1/2$ .

При температурах, близких к критической, прослеживаются эффекты критического замедления, что очень сильно увеличивает машинное время. Эти особенности не влияют на метод Ванга–Ландау, так как плотность состояния энергии рассчитывается, основываясь на следующем наблюдении: если при случайных блужданиях в пространстве энергии вероятность посещения энергетического уровня обратно пропорциональна плотности состояний при этой энергии, то гистограмма посещений будет плоской.

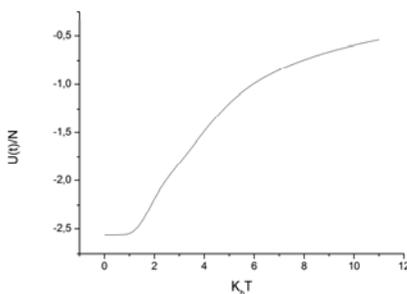
**Алгоритм:**

Изначально,  $g(E)$  (плотность состояния энергии) неизвестна, предположим, что  $g(E) = 1$  для всех. После переворота спина сравниваем энергии, если  $E_2$  меньше, то перемножается на модификатор  $f > 1$ .  $g(E_2) = f * g(E_2)$ , и обновляется  $H(E_2) = H(E_2) + 1$ . В противном случае модифицируется  $g(E_1) = f * g(E_1)$  и гистограмма  $H(E_1) = H(E_1) + 1$ . Данные действия выполняются, пока не получится плоская гистограмма посещений. Понижается модификатор  $f_1 = \sqrt{f_0}$ , сбрасывается гистограмма. Конфигурация спинов остается такой же.

Определение плотности состояния для различных энергий дает возможность вычислить любую термодинамическую величину при любой температуре [3].



**Рис. 2.** Теплоемкость  $L = 4$



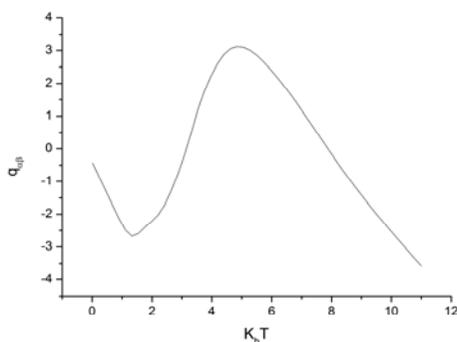
**Рис. 3.** Внутренняя энергия  $L = 4$

Намагниченность не является параметром порядка в спиновых стеклах. Физическую интерпретации параметр порядка предложил Паризи (Температурная зависимость п.п. Рис. 4). Его идея состоит в том, что параметр порядка спинового стекла должен со-

держат информацию о бесконечно большом вырождении основного состояния. Каждое состояние, которое мы будем нумеровать индексом  $\alpha$ , определяется набором чисел заполнения  $m_i^\alpha = \langle \sigma_i^{\alpha z} \rangle_\tau$ ,  $i$  – номер узла [1].

$$q^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i m_i^\alpha m_i^\beta. \quad (2)$$

Что характеризует перекрытие разных состояний. Очевидно, что  $q^{\alpha\alpha} = \frac{1}{N} \sum_i (m_i^\alpha)^2$  совпадает с параметром Эдвардс – Андерсона.



**Рис. 4.** Параметр порядка Паризи  $L = 4$

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Коренблит И.Я., Шендер Е.Ф.* Спиновые стекла и неэргодичность // *Успехи физических наук.* 1989. Т. 157. Вып. 2. С. 267–310.  
 [2] *Peter Young*, Phase Transitions in Spin Glasses, Talk at Academia Sinica, Taipei, December 14, 2009.  
 [3] *Am. J. Phys.*, Vol. 72, No. 10, October 2004.

---

Вячеслав Олегович Дергачёв,  
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
 II курс магистратуры, прикладная теоретическая физика,  
 644000, Омск, пр. Мира 55-А, 89507927242,  
 mr.hadros@gmail.com

# РЕНОРМ-ГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В СЛОЖНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМАХ С ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ И ДЕФЕКТАМИ СТРУКТУРЫ

**В.В. Дубс**

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

Впервые осуществлено теоретико-полевое описание фазового перехода в аморфном магнетике с эффектами случайной анизотропии и влиянием дефектов структуры в рамках двухпетлевого приближения при фиксированной размерности  $d = 3$ . Для данной многовершинной модели определена система неподвижных точек ренорм-групповых уравнений и проведен расчет показателей их устойчивости с применением метода суммирования Паде-Бореля. Показана роль дефектов структуры как стабилизирующих факторов при реализации фазовых переходов второго рода.

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

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

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

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

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

$$\beta_u = -\{u - \frac{1}{6}[2(m+2)uv + 2vw + 4uw + 6uy + 2(m+1)uz + \\ + 2vz + 2wz + 3z^2 + 8u^2] + \frac{1}{9}[56u^2w + 28w^2u + 24(m+2)u^2v + \\ + 6(m+1)v^2u + 12v^2w + 60u^2y + 18y^2u + 40uvw + 18uyv + \\ + 40uwy + 28z^3 + 28uwz + 20uyz + 20vwz + 6vyz + 20wyz + \\ + 6(m+1)uvz + 4w^2v + 44u^3]I_1 + \frac{2}{9}[2u^3 + 2w^2u + 6uvw + 4u^2w + \\ + 6uvy + 6uwy + 3y^2u + 6zuy + 6uzw2(m+2)z^2 + (m+2)uzv + \\ + 8(m+2)z^2u + 2(m+2)v^2u]I_2\}, \\ \beta_v = -\{v - \frac{1}{6}[(m+8)v^2 + 12uv + 4vw + 6vy + 6yz + (2m+10)vz] + \\ + \frac{1}{9}[2(5m+22)v^3 + 8(3m+15)v^2u + 84u^2v + 24w^2v + 72v^2w + \\ + 72v^2y + 18y^2v + 72uvw + (5m+22)v^2z + (5m+22)z^2v + 36vwy + \\ + 28z^2y36y^2z + 4(m+26)vuz + 48vwz + 72vyz + 48yzu + 24yzw_1 + \\ + 72vuy]I_1 + \frac{2}{9}[(m+2)v^3 + 2(m+2)v^2u + 2u^2v + 2w^2v + 6v^2w + \\ + 4vuw + 6vuy + 6v^2y + 6vwy + 3y^2v + 6vzy + 6vzw + 2(m+2)vzu + \\ + (m+2)v^2z + 8(m+2)z^2v]I_2\}$$

$$\begin{aligned}
\beta_w = & -\{w - \frac{1}{6}[8w^2 + 12uw + 4uw + 4vw + 6yw + 10wz + 6yz] + \\
& + \frac{1}{9}[84w^3 + 28u^2w + 56w^2u + 2(m+6)v^2w + 60w^2v + 18y^2w + \\
& + 2(6m+36)wuv + 60wuy + 18wvy + (m+6)z^2w + 44w^2z + 18y^2z + \\
& + 20z^2y + 28wuz + (m+6)wvz + 20wyz + 32yzu + 6yzv]I_1 + \\
& + \frac{2}{9}[(m+2)v^2w + 2(m+2)vuw + 2u^2w + 2w^3 + 6w^2v + +6vyw + \\
& + 4w^2u + 6wuy + 6w^2y + 3y^2w + 6wzy + 6w^2z + 2(m+2)wzu + \\
& + (m+2)vzw + 8(m+2)z^2v]I_2\} \\
\beta_y = & -\{y - \frac{1}{6}[9y^2 + 8vw + 12uy + 12vy + 12wy + 6yz] + \frac{1}{9}[108y^3 + \\
& + (4m+72)v^2w + 48w^2v + 72u^2y + (6m+84)v^2y + 72w^2y + 108y^2u + \\
& + 108y^2w + 72uvw + 2(6m+84)uvy + 72vwy + 72uwy + 24z^2y + \\
& + 72y^2z + 24yuz + 36yvy + 48yvw + 24vwz]I_1 + \frac{2}{9}[2u^2y + 2(m+2)vuy + \\
& + (m+2)v^2y + 6vwy + 2w^2y + 4uwy + 6y^2u + 6y^2v + 6y^2w + 3y^3 + \\
& + 6y^2z + 6zwy + 2(m+2)zuy + (m+2)zvy + 8(m+2)z^2y]I_2\} \\
\beta_z = & -\{z - \frac{1}{6}[(m+4)z^2 + 12uz + 4zw + 4vz] + \frac{1}{9}[(5m+22)z^3 + \\
& + 28u^2z + 2(3m+15)z^2u + 2(3m+15)v^2z + 40z^2v + 28w^2z + \\
& + 56w^2z + 20z^2y + 28zuw + 20zvw + 108zuy + 4(3m+15)zuv + \\
& + 20zwy + 6zyv]I_1 + \frac{2}{9}[2u^2z + 2(m+2)uvz + (m+2)v^2z + 6vwz + \\
& + 2w^2z + 4uwz + 6uyz + 6vyz + 6wyz + 3y^2z + 6z^2y + z^2w + \\
& + 2(m+2)z^2u + (m+2)z^2v + 8(m+2)z^3]I_2\} \\
\gamma_\phi = & -\frac{1}{9}[2u^2 + 2(m+2)uv + (m+2)v^2 + 6vw + 2w^2 + 4uw + 6uy + \\
& + 6vy + 6wy + 3y^2 + 6zy + 6zw + 2(m+2)zu + (m+2)zv + 2(m+2)z^2]I_2,
\end{aligned}$$

$$\chi_{\phi^2} = \frac{1}{3} \left[ \frac{1}{2} (2u + (m+2)v + 2w + y + (m+2)z) - (wu^2 + 2(m+2)uv + (m+2)v^2 + 6vw + 2w^2 + 4uw + 6uy + 6vy + 6wy + 3y^2 + 2(m+2)zu + (m+2)zv + 6zw + 6zy + 2(m+2)z^2) \right] I_1,$$

где  $I_1(d=3)=1/5$  и  $I_2(d=3)=-2/27$  [1].

Исследование устойчивости неподвижных точек системы ренорм-групповых уравнений при фиксированной размерности  $d = 3$  с помощью многопараметрического метода Паде-Бореля показало, что за счет влияния дефектов структуры и соответствующей им вершины  $z$  приобретает устойчивость примесная неподвижная точка для  $m = 3$  (случай кубической анизотропии). Следовательно, для данного случая дефекты структуры становятся стабилизирующим фактором для реализации фазового перехода второго рода в системе. В устойчивой неподвижной точке для  $m = 3$  можно вычислить критические индексы  $\eta$  и  $\nu$ :

$M$	$u^*$	$v^*$	$w^*$	$y^*$	$z^*$	$\eta$	$\nu$
3	1.3995	0	0	0	-0.9482	0.026(3)	0.678(4)

Значения остальных статических критических индексов для аморфных магнетиков с эффектами случайной кубической анизотропии и влиянием дефектов структуры могут быть получены на основе значений критических индексов  $\eta$  и  $\nu$  при использовании скейлинговых соотношений [3; 5], связывающих критические индексы между собой.

В результате проведенных исследований на примере многовершинной модели аморфного магнетика показана стабилизирующая роль дефектов структуры при реализации фазового перехода второго рода в системе с многокомпонентным параметром порядка.

## ЛИТЕРАТУРА

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

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

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

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

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

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

---

Вадим Викторович Дубс,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
аспирант 3-го года обучения,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, +79620406056,  
soranoo@mail.ru

# РАСЧЁТ МАГНИТНЫХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОСЛОЙНЫХ 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 многослойной системы Co/Cu(100). Был проведён учёт влияния эффектов перемешивания адатомов с атомами подложки. Построено пространственное распределение намагничённости в системе.

*Ключевые слова:* адсорбция, энергия адсорбции, ферромагнетизм, многослойные плёнки, метод функционала плотности.

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. Представляют большую важность исследования по выявлению условий реализации полезных с практической точки зрения свойств магнитных плёнок, обуславливающих их применение, в частности, их зависимость от числа монослоёв адсорбированной плёнки.

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, имеются исследования, показывающие, что многослойные плёнки начинают приобретать свойства объёмного материала уже при числе монослоёв, меньшем 10 [1].

---

© П.Ю. Ежков, 2016

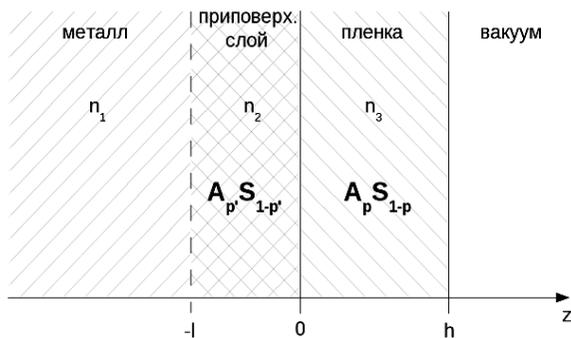
---

\* Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 14-12-00562.

Среди теоретических методов исследования адсорбции в тонких металлических плёнках хорошо себя зарекомендовал метод функционала спиновой плотности (МФП) [2–3].

В данной работе исследуется в рамках МФП при учёте температурных эффектов для параметра покрытия  $\theta = 1,0$  поведение полной межфазной энергии  $\sigma$ , энергии активированной адсорбции  $E_{\text{ads}}$ , относительной доли атомов адсорбата в плёнке, а также распределение намагниченности в многослойной системе Co/Cu (100). В расчёте распределения намагниченности был проведён учёт эффектов перемешивания в рамках модели описания поверхностных бинарных растворов, изложенной в [2], а также было учтено на основе результатов работы [1] явление кроссовера в описании зависимости критической температуры и индекса намагниченности ферромагнетика от числа монослоёв. Пространственное распределение намагниченности выбиралось пропорционально распределению электронной плотности адсорбата.

Исследовалась система, состоящая из 4 подобластей, конфигурация которой представлена на рис. 1.



**Рис. 1.** Конфигурация 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.

На рис. 2 и 3 представлены графики зависимости  $\sigma$  и  $E_{\text{ads}}$  от числа монослоёв  $N$  для температур 100–600 К. Видно, что обе величины перестают существенно изменяться уже при толщине 4..5

монослоёв. С падением температуры наблюдается снижение межфазной энергии, причем для более тонких плёнок это эффект носит более выраженный характер. В поведении энергии адсорбции наблюдается хорошо заметный минимум при  $N = 2$ . Также важно отметить то, что с ростом температуры для монослойной плёнки данная величина падает, а для двухслойной – растет (кроме случая  $T = 600$  К), что делает минимум по  $N$  менее выраженным.

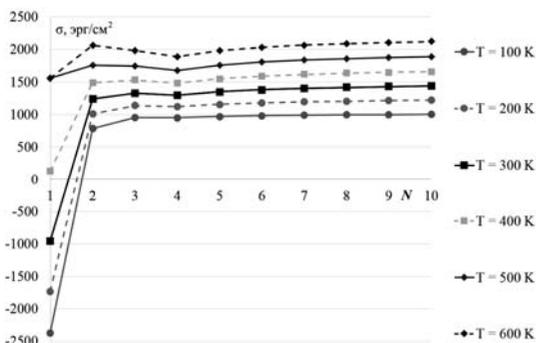


Рис. 2. Зависимость полной межфазной энергии от  $N$

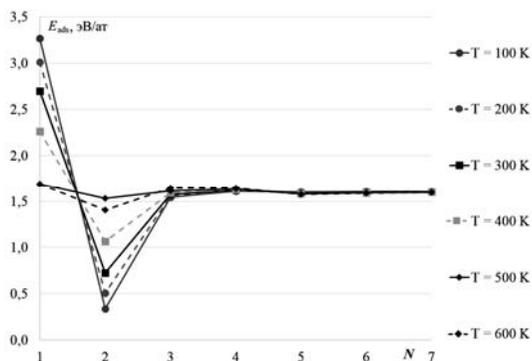


Рис. 3. Зависимость энергии адсорбции от  $N$

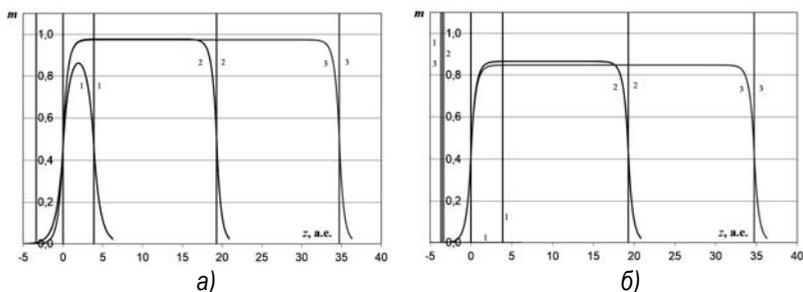
Результаты расчётов для относительной доли атомов адсорбата в плёнке  $p$ , характеризующей перемешивание атомов субстрата и адсорбата, представлены в таблице. Видно, что, начиная с температуры 500 К и выше, в первом монослое наблюдается пе-

ремешивание атомов подложки и плёнки. Подобное поведение подтверждается в эксперименте [4].

### Зависимость параметра $\rho$ от числа слоёв и температуры

$N$	$T, K$					
	100	200	300	400	500	600
1	1,0	1,0	1,0	1,0	0,4	0,4
2	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
3	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
4	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
5	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
6	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
7	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
8	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
9	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
10	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0

Графики распределения намагниченности в системе для температур  $T = 100 K$ ,  $500 K$  представлены на рис. 4. Как видно, многослойные плёнки имеют большее максимальное значение намагниченности в плёнке по сравнению с монослойными, что ценно с практической точки зрения. Кроме того, в случае более высоких температур более предпочтительными в этом отношении становятся плёнки с промежуточными толщинами ( $1 < N < 9$ ).



**Рис. 4.** Пространственное распределение намагниченности  $m(z)$  в системе: а)  $T = 100 K$ , б)  $T = 500 K$ .

*Примечание.* Вертикальные линии обозначают границы подобластей в системе. Цифры соответствуют числу монослоёв: 1)  $N = 1$ ; 2)  $N = 5$ ; 3)  $N = 9$ .

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Li Yi, Baberschke K.* Dimensional crossover in ultrathin Ni(111) films on W(110) // *Phys. Rev. Lett.*, 1992. V. 68. № 8. P. 1208–1211.

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

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

[4] *Ney A.* A New Design of an UHV-High-Tc-SQUID Magnetometer. Absolute Determination of Magnetic Moments of 3d-Transition Metal Films, 2001.

---

Павел Юрьевич Ежков,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
физический факультет, аспирант I года обучения,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, тел. (3812) 64-77-87,  
ezhkov.pavel@gmail.com

# ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА РАБОТУ ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА С ПОВЕРХНОСТИ МОНОСЛОЙНЫХ ПЛЕНОК ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ, АДсорБИРОВАННЫХ НА МЕДНОЙ И ВОЛЬФРАМОВОЙ ПОДЛОЖКЕ

**С.З. Кожухметов**

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

В данной работе, в рамках вариационного метода функционала спиновой плотности, исследовано влияние заместительной адсорбции монослойных плёнок кобальта и никеля на работу выхода электрона с плотноупакованной грани поверхностей Cu и W с учетом температурных эффектов.

*Ключевые слова:* активированная адсорбция, работа выхода электрона, магнитные ультратонкие пленки.

Современные экспериментальные исследования поверхностного распределения адатомов выявили такие эффекты, как выталкивание атомами адсорбата атомов подложки на поверхность с осуществлением заместительной адсорбции и образование поверхностных «островов» из атомов адсорбата и подложки [1–3]. При этом поверхность испытывает значительную реконструкцию, что существенно сказывается на работе выхода электронов [4].

Исследование поверхностных свойств материалов и энергетических характеристик адсорбции атомов и молекул различных веществ является актуальной проблемой как с точки зрения фундаментальных представлений об изменении свойств кристаллов приповерхностной области, так и с прикладной точки зрения модификации свойств материалов за счет напыления покрытия с необходимыми заданными свойствами.

Одной из важных поверхностных характеристик является работа выхода электрона с поверхности металла. Особое внимание следует уделить температурным эффектам, определяющим магнитные свойства пленок и образование различных приповерхностных структур, что ведет к изменению величины работы вы-

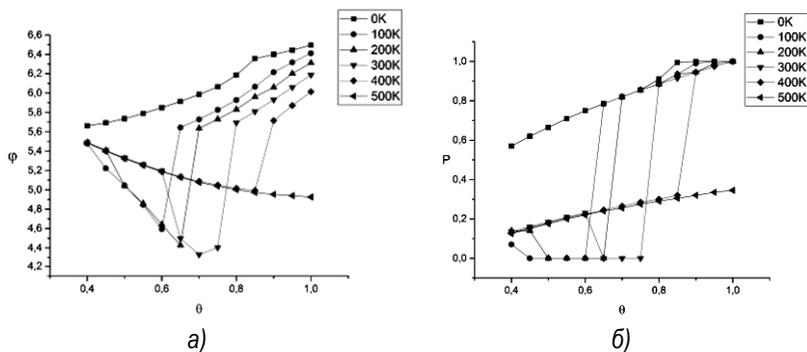
хода. Таким образом, данная работа посвящена изучению влияния температуры на работу выхода электрона с поверхности монослойной пленки с учетом активированной адсорбции переходных металлов на металлической подложке.

В данной работе были произведены расчеты работы выхода для Co, Ni на медной Cu(111) и вольфрамовой W(110) подложке. Работа выхода рассчитывалась по формуле:

$$\varphi(\theta, T) = D - \mu(T),$$

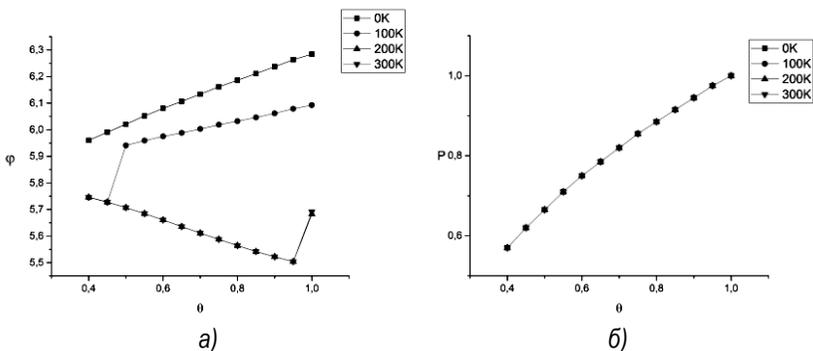
где  $D$  – высота дипольного барьера с учетом электрон-ионных вкладов, а  $\mu$  – химический потенциал, включающий обменно-корреляционные и температурные поправки.

На рис. 1а) видно, что ферромагнитное упорядочение приводит к росту работы выхода с увеличением параметра покрытия  $\theta$ . Для парамагнитного случая наблюдается обратная тенденция, обусловленная образованием «сэндвич» структуры с  $P = 0$ , как видно на рис. 1б) для  $\theta < 0,8$  и  $T > 0$ .



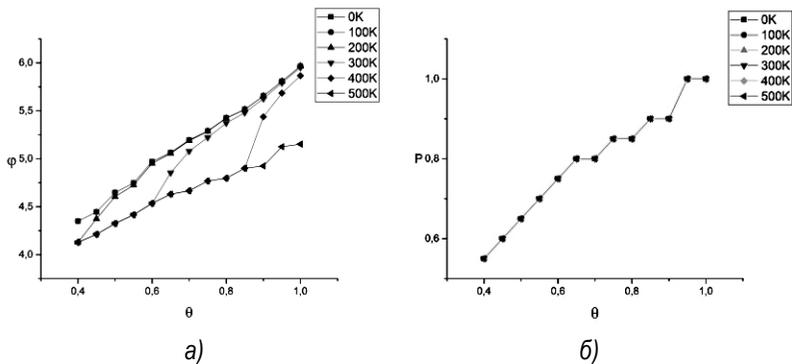
**Рис. 1.** Изображены графики зависимости от параметра покрытия  $\theta$  для системы Co/Cu: а) работы выхода  $\varphi$  б) параметра перемешивания  $P$

На рис. 2б) наблюдаем рост параметра перемешивания  $P$  с ростом параметра покрытия  $\theta$ . Видно, что температура не влияет на поведение  $P$ , это связано с тем, что структуры никеля и меди схожи и поверхностные энергии почти равны. Из рис. 2а) можно заметить, что для всех температур, активированная адсорбция увеличивает работу выхода электрона.



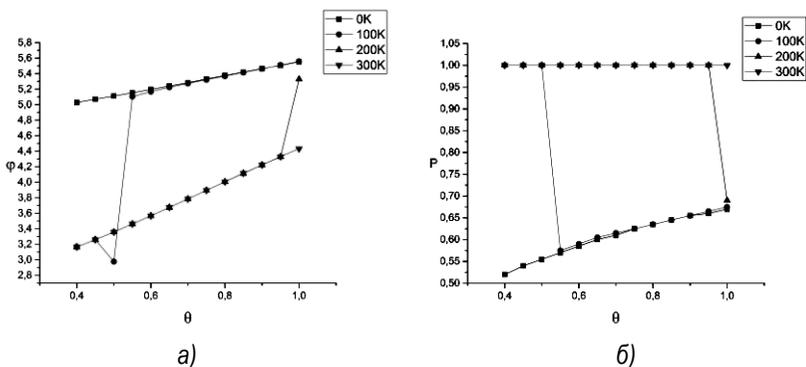
**Рис. 2.** Изображены графики зависимости от параметра покрытия  $\theta$  для системы Ni/Cu а) работы выхода  $\varphi$  б) параметра перемешивания  $r$

На рис. 3б) мы видим ту же зависимость, что и для Ni/Cu. Из рис. 3а) видно, что работа выхода  $\varphi$  для всех температур увеличивается с увеличением параметра покрытия  $\theta$  и для всех температур активированная адсорбция увеличивает работу выхода электрона.



**Рис. 3.** Изображены графики зависимости от параметра покрытия  $\theta$  для системы Co/W а) работы выхода  $\varphi$  б) параметра перемешивания  $r$

На рис. 4б) видно, что для высоких температур  $r = 1$ , что соответствует образованию непрерывной пленки. На рис. 4 а) заметно, что для всех температур работа выхода  $\varphi$  увеличивается с увеличением параметра покрытия  $\theta$ . Такое поведение никеля на вольфраме вызвано тем, что их поверхностные энергии различны и различны их кристаллические структуры.



**Рис. 4.** Изображены графики зависимости от параметра покрытия  $\theta$  для системы Ni/W: а) работы выхода  $\phi$  б) параметра перемешивания  $P$

Таким образом, можно сделать общий вывод, температура существенно повлияла на работу выхода электрона, вызвано это тем, что температура вносит свой вклад в химический потенциал и в намагничённость, из-за чего меняется поверхностная структура исследованных материалов.

#### 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.
- [4] Stampft C., Neugebauer J., Scheffler M., Alkali-metal adsorption on close-packed metal surfaces// Surf. Rev. and Lett. 1995. V. 2. P. 317-340.

---

Саят Зинатович Кожаметов,  
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
 физический факультет, I курс магистратуры.  
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
 sayatanama@mail.ru

# ОСОБЕННОСТИ НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ В ТРЁХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

**В.В. Крижановский**

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

Представлены результаты численного исследования особенностей неравновесного критического поведения в трёхмерной структурно неупорядоченной и чистой модели Изинга при её эволюции из различных начальных температурных состояний в системах с широким спектром изменения спиновой концентрации.

*Ключевые слова:* неравновесное критическое поведение, модель Изинга, скейлинг, начальное состояние.

Поведение статистических систем вблизи температуры  $T_c$  фазового перехода второго рода характеризуется медленной динамикой с аномально большими временами релаксации, которые стремятся к бесконечности как  $t_{rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$  при  $T \rightarrow T_c$ , где  $z, \nu$  – динамический критический индекс и индекс корреляционной длины, соответственно. В результате система, находящаяся в критической точке, не в состоянии прийти к равновесному состоянию в течение всего процесса релаксации [1–4].

В исследовании влияния начальных состояний системы на неравновесное критическое поведение различают высокотемпературное состояние, создаваемое при  $T > T_c$  и характеризующееся начальной намагниченностью  $m_0 = 0$ , и низкотемпературное состояние, которое создается при температурах  $T < T_c$  с  $m_0 = 1$  [4]. В данной статье реализованы различные начальные состояния с намагниченностью в интервале  $0 < m_0 < 1$ .

В данной работе представлены результаты численного моделирования чистой и структурно неупорядоченной трёхмерной модели Изинга при её эволюции из различных начальных состояний. Гамильтониан для модели Изинга имеет следующий вид [5]:

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

где  $J > 0$  характеризует короткодействующее обменное взаимодействие между спинами  $S_i = \pm 1$ . Числа  $p_i$  вводятся как случайные числа, принимающие значения 1, если в  $i$  узле находится спин, или 0 (дефект структуры). Дефекты структуры распределялись в системе случайным образом.

Моделирование проводилось на кубической решётке с периодическими граничными условиями. Число спинов в решётке можно охарактеризовать числом  $N_s = pL^3$ , где  $L$  линейный размер спинов, а  $p$  концентрация спинов. В качестве характеристики неравновесного процесса выступает величина намагниченности системы [4]:

$$M(t) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x,t) \rangle] = \left[ \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) \right\rangle \right], \quad (2)$$

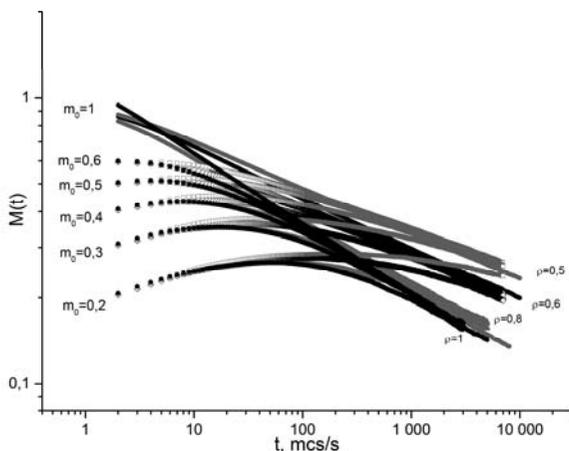
где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния, квадратные – усреднение по различным конфигурациям распределения дефектов в решётке. Вблизи критической точки намагниченность является обобщенно однородной функцией времени наблюдения и нового масштаба времени  $t_m \propto m_0^k$ , связанного с начальной намагниченностью.

В результате скейлинговая зависимость для нее имеет следующий вид [1]:

$$M(t, t_m) = t^{-\beta/(vz)} F_m(t/t_m) = t^{-\beta/(vz)} F_m(tm_0^{1/k}) \quad (3)$$

где  $k = \theta' + \beta / (zv) > 0$ .

Реализовано компьютерное моделирование критической релаксации намагниченности при старте из различных начальных состояний с линейным размером  $L = 64$ , определяемых приведенной намагниченностью  $m_0$ , от низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1$  до высокотемпературного начального состояния с  $m_0 \ll 1$ . Были получены следующие результаты, представленные ниже в виде графиков.



*Графики критической релаксации намагниченности  $M(t)$  систем с различными начальными состояниями с намагниченностями  $m_0$  и различными спиновыми концентрациями  $p$*

На рис. представлены графики критической релаксации намагниченности  $M(t)$  систем с различными начальными намагниченностями  $m_0 = 0.2 \div 1$  и различными спиновыми концентрациями  $p = 1.0, 0.8, 0.6, 0.5$ . Наглядно проявляются эффекты критического замедления с временами релаксации, растущими с увеличением концентрации дефектов (уменьшением  $p$ ). Видно, что кривые релаксации для систем с фиксированной  $p$ , которые стартовали из начальных состояний  $m_0 \neq 1$ , асимптотически стремятся к кривым релаксации систем, стартовавших из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1$ . Для систем с  $m_0 \ll 1$  на этапе неравновесной эволюции наблюдается характерный рост намагниченности, описываемый степенным законом  $M(t) \propto t^{\theta'}$ , где  $\theta'$  – показатель начальной эволюции. При временах  $t > t_{cr} \propto m_0^{-1/(\theta' + \beta/(zv))}$  данный этап эволюции сменяется режимом, характеризующимся степенной зависимостью  $M(t) \propto t^{-\beta/(zv)}$ . При эволюции системы из начального упорядоченного состояния с  $m_0 = 1$  временная зависимость намагниченности в критической точке сразу определя-

ется степенной зависимостью  $M(t) \propto t^{-\beta/(z\nu)}$  со значениями показателей, зависящими от спиновой концентрации  $p$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Calabrese P., Gambassi A.* Aging in ferromagnetic systems at critically near four dimensions // *Phys. Rev. E.* 2002. Vol. 65. P. 066120.

[2] *Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F.* Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state // *J. Stat. Mech.* 2006. P06016.

[3] *Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Pospelov E.A.* Influence of disorder on ageing and memory effects in non-equilibrium critical dynamics of 3D Ising model relaxing from an ordered state // *J. Stat. Mech.: Theory and Exp.* 2016. 043303.

[4] *Прудников В.В., Прудников П.В., Маляренко П.Н., Крижановский В.В.* Влияние дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Изинга при эволюции из начального низкотемпературного состояния // *Вестник ОмГУ.* 2015. № 4. С. 32–38.

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

---

Вячеслав Васильевич Крижановский,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
1 курс магистратуры, физический факультет,  
644077, пр. Мира 55-а, +7-913-979-87-64,  
FehtunKrizh@gmail.com

## РЕНОРМ-ГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ ЭФФЕКТОВ СТАРЕНИЯ В КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКЕ

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 начальных состояний, соответствующих полностью упорядоченному и неупорядоченному состояниям параметра порядка. Уже в теории среднего поля выявлены нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в критическом режиме и двухвременная зависимость для корреляционной функции и функции отклика. Для универсального флуктуационнодиссипативного отношения проведен расчет флуктуационных и примесных поправок при фиксированной размерности пространства  $d = 3$ . Для вычисления предельного значения флуктуационно-диссипативного отношения применен метод суммирования рядов Паде – Бореля.

Спиновые стекла [1], системы вблизи точки фазового перехода второго рода [2], а также мультислойные магнитные сверхструктуры типа  $\text{Co/Cr}$  [3] характеризуются аномально большими временами релаксации, поэтому исследование их динамических свойств становится крайне актуально проблемой. Одним из наиболее интересных явлений, проявляющихся на неравновесном этапе 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 вводятся такие новые понятия, как флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО) [2] и эффективная температура [4]. Наше исследование

дование связано с изучением методами ренормгруппы и теоретико-полевого описания эффектов старения и нарушения ФДТ в системах, испытывающих фазовый переход второго рода, при их неравновесном критическом поведении. Пусть система, описываемая гамильтонианом Гинзбурга – Ландау – Вильсона

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

приведена в критическое состояние из начального состояния ( $t = 0$ ). В (1)  $\phi$  – параметр порядка,  $r_0 \sim T - T_c$  – приведенная температура,  $\psi(x)$  – поле дефектов структуры с гауссовым распределением  $\langle \psi(x) \rangle = 0$ ,  $\langle \psi(x) \psi(y) \rangle = \nu \delta(x - y)$ , где  $\nu$  – положительная константа, пропорциональная концентрации дефектов и квадрату величины их потенциала. Для случая систем без примесей  $\psi(x) \equiv 0$ . Влияние начального состояния с намагниченностью  $m_0$  можно учесть, усредняя характеристики системы с весом  $\exp(-H_0[\phi_0])$ , где

$$H_0[\phi_0] = \int d^3x \frac{\tau_0}{2} [\phi_0(x) - m_0]^2. \quad (2)$$

Функция отклика системы  $R(t, s)$

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

характеризует реакцию параметра порядка в момент времени  $t$  на малое возмущение внешнего поля  $h$ , приложенное в момент времени  $s$ , а *корреляционная функция*  $C(t, s)$

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

отражает взаимосвязь значений параметра порядка в различных точках, в моменты времени  $t$  и  $s$ . Связь этих двух функций определяется флуктуационно – диссипативной теоремой

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

Однако на неравновесном этапе релаксации ФДТ может нарушаться. В этом случае вводится флуктуационно-диссипативное отношение в пространстве координат и импульсов

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

предельные значения которых совпадают

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

В [4; 5] было показано, что  $X^\infty$  является универсальной характеристикой неравновесного поведения в рамках определенной релаксационной модели.

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

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

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

Для описания эволюции из начального *упорядоченного* состояния, необходимо учитывать также ненулевое значение намагниченности системы, которое описывается решением дифференциального уравнения

$$\frac{\partial m}{\partial t} + \frac{m^3}{3} + \frac{m}{t - \tau_0^{-1}} + \frac{g_0}{2} \int (dq) C_q^0(t, t) + O(g_0^2) = 0. \quad (9)$$

Затравочные пропагаторы при этом имеют вид

$$R_q^0(t, s) = \theta(t-s) \frac{S}{t} \exp\{-q^2(t-s) + \int_s^t dt' m^2(t')\}, \quad (10)$$

$$C_q^0(t, s) = 2 \int_0^\infty dt' R_q^0(t, t') R_q^0(t', s), \quad (11)$$

что приводит к значению предельного ФДО в приближении среднего поля  $X_{q=0}^\infty = 6/7$ .

Эффекты влияния взаимодействия флуктуаций параметра порядка и наличия примесей на функцию отклика и корреляционную функцию можно учесть по теории возмущения 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

$$R = R^0 - g_0 R^{1,1} + g_0^2 \sum_i R^{2,i} - v_0 R_d^{1,1} + g_0 v_0 \sum_i R_d^{2,i} + v_0^2 \sum_i R_{dd}^{2,i} \quad (12)$$

$$C = C^0 - g_0 C^{1,1} + g_0^2 \sum_i C^{2,i} - v_0 C_d^{1,1} + g_0 v_0 \sum_i C_d^{2,i} + v_0^2 \sum_i C_{dd}^{2,i} \quad (13)$$

Нами были получены значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения для эволюции систем из различных начальных состояний с учетом влияния примесей (табл.). Для сопоставления представлены значения  $X^\infty$ , полученные в рамках применения метода  $\varepsilon$ -разложения [2; 6; 7] и метода Монте-Карло [8–12].

**Сопоставление значений ФДО, рассчитанных в данной работе ( $d = 3$ ) с результатами, полученными методами  $\varepsilon$ -разложения и Монте-Карло (МК) для высокотемпературного (ВТС) и низкотемпературного (НТС) начальных состояний**

<i>Система / начальное состояние</i>	$d = 3$	$\varepsilon$ -разложение	МК
Чистая модель Изинга, ВТС	<b>0.416(29)</b>	0.429(6) [2]	0.380(13) [8,10]; 0.390(12) [9]
Разбавленная модель Изинга, ВТС	<b>0.446(59)</b>	0.416 [6]	0.413(11) [8,10] 0.415(18) [9]
Чистая ХУ модель, ВТС	<b>0.400(27)</b>	0.416(8) [2]	0.43(4) [12]
Чистая модель Гейзенберга, ВТС	<b>0.386(23)</b>	0.405(10) [2]	–
Чистая модель Изинга, НТС	<b>0.86</b>	0.78 [7]	0.77(6) [10], 0.784(5) [11]
Разбавленная модель Изинга, НТС	...	–	0 [11]

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Cugliandolo L.F., Kurchan J.* // Phys. Rev. Lett., 1993, V. 71, P. 173.
- [2] *Calabrese P., Gambassi A.* // Phys. Rev. E, 2002, V. 66, P. 066101.
- [3] *Mukherjee T., Pleimling M., Binek Ch.* // Phys. Rev. B, 2010, V. 82, 134425.
- [4] *Cugliandolo L.F., Kurchan J.* // Phys. Rev. E, 1997, V. 55, P. 3898.
- [5] *Godrèche C., Luck J.M.* // J. Phys.: Cond. Matter, 2002, V. 14, P. 1589.
- [6] *Calabrese P., Gambassi A.* // Phys. Rev. B, 2002, V. 66, P. 212407.
- [7] *Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F.* // J. Stat. Mech., 2006, 06016.
- [8] *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98. Вып. 10. С. 693–699.
- [9] *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А.* // ЖЭТФ. 2014. Т. 145. Вып. 3. С. 462–471.
- [10] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Pospelov E.A., Malyarenko P.N., Vakilov A.N.* // Prog. Theor. Exp. Phys. 2015. 053A01. P. 1–20.
- [11] *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102. Вып. 3. С. 192–201.
- [12] *Abriet S., Karevski D.* // Eur. Phys. J., 2004. V. 41. P. 79–85.

---

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

# ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА ВАНГА – ЛАНДАУ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

**В.Е. Ложников**

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

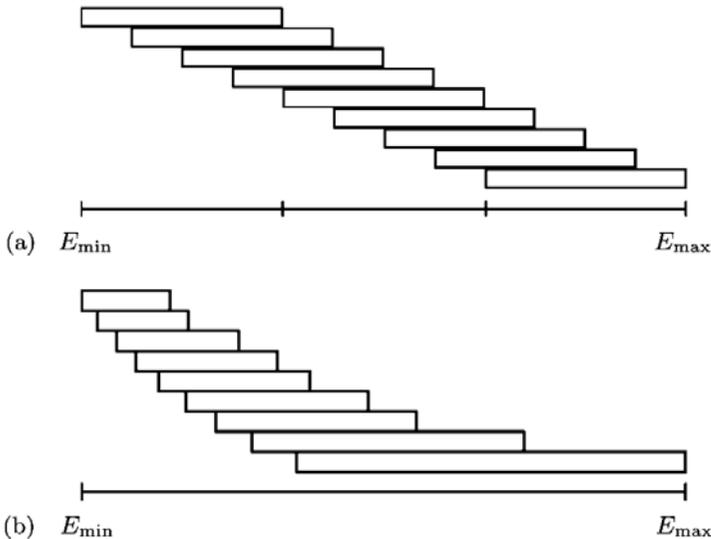
В данной статье рассматривается применимость параллельного алгоритма Ванга-Ландау к исследованию критических свойств спиновых систем. С помощью технологии OpenMP реализована параллельная версия алгоритма, описаны основные особенности реализации. Результаты, полученные с помощью параллельного алгоритма, сравниваются с результатами для однопоточной версии.

*Ключевые слова:* Монте-Карло, алгоритм Ванга – Ландау, параллельное программирование, энтропическое моделирование.

Метод Ванга-Ландау представляет из себя метод компьютерного моделирования, основанный на случайном блуждании в пространстве энергетических состояний [1]. Метод широко применяется для моделирования фазовых переходов в магнитных системах и полимерах [2]. Метод позволяет рассчитать различные термодинамические характеристики, такие как внутренняя энергия, намагниченность, теплоемкость, восприимчивость, а также энтропию и свободную энергию системы, что невозможно сделать, используя классические алгоритмы, такие как кластерные алгоритмы и алгоритм Метрополиса.

В случае, когда энергетический интервал, в котором совершается случайное блуждание, достаточно велик, наблюдается плохая сходимость плотности энергетических состояний  $g(E)$ . Соответственно, увеличивается время вычислений. Стоит отметить, что при превышении некоторого порогового значения размера энергетического интервала (который зависит от размера исследуемой системы), сходимость может не наблюдаться и время вычисления будет стремиться к бесконечности. В следствие чего возникают сложности в моделировании решеток достаточно большого раз-

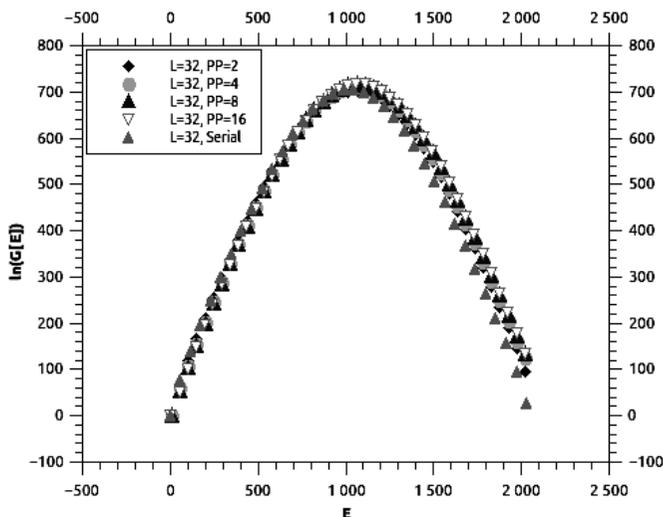
мера, что особенно актуально в случае достаточно больших трехмерных систем с наличием дефектов структуры.



**Рис. 1.** Разбиение на пересекающиеся энергетические интервалы

Актуальным вариантом решения данной проблемы – параллелизация алгоритма путем разбиения полного энергетического интервала (рис. 1) на перекрывающиеся подчасти и организацией обмена состояниями между репликами [2]. Это позволяет увеличить сходимость  $g(E)$ , за счет того, что каждая реплика рассчитывает свой интервал, величина которого зависит от количества доступных вычислительных узлов. При реализации многопоточной версии алгоритма Ванга-Ландау для моделирования свойств двумерной модели Изинга полный энергетический интервал разбивался на перекрывающиеся подчасти, каждая из которых имеет собственную, независимо вычисляемую плотность энергетических состояний и гистограмму. Каждый энергетический интервал обрабатывается в отдельной реплике параллельного алгоритма. После того, как все реплики сходятся, гистограммы для всех реплик обнуляются и изменяется уточняющий множитель  $f$ . Для сохранения принципа детального баланса, происходит обмен плотностью со-

стояний между соседними репликами параллельного алгоритма [2]. Получаемая с помощью параллельного алгоритма плотность энергетических состояний хорошо соотносится с последовательной версией (рис. 2). Алгоритм был разработан с применением технологии OpenMP [3], и в дальнейшем планируется его применение к описанию критических свойств трехмерной модели Изинга и модели Гейзенберга, а так же тонких магнитных пленок.



**Рис. 2.** Плотность энергетических состояний для двумерной модели Изинга с размером решетки  $L = 32$  при распределении на разное количество потоков  $PP = 2, 4, 8, 16$  в сравнении с последовательной версией.

Проведенные исследования были поддержаны грантом Президента РФ № МД-6024.2016.2, проектом Министерства образования и науки РФ № 1627, в рамках государственного задания вузам в части проведения научно-исследовательских работ на 2014–2016 гг. Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН Москвы и Санкт-Петербурга.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Wang F., Landau, D.P.* Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States. *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86. P. 2050–2053.
- [2] *Thomas Vogel, Ying Wai Li, Thomas Wust, David P. Landau.* Generic, Hierarchical Framework for Massively Parallel Wang-Landau Sampling. *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110, P. 210603.
- [3] *Антонов А.С.* Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP: учеб. пособие. М.: МГУ, 2009. 77 с.

---

Вячеслав Евгеньевич Ложников,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
II курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,  
vereskanthem@gmail.com

# ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

П.Н. Маляренко

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

Осуществлено исследование методами Монте-Карло влияния начального значения намагниченности на неравновесное критическое поведение модели Изинга. На основе анализа двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости выявлено существенное влияние начальных состояний на эффекты старения, характеризующиеся аномальным замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания.

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  $\tau_{rel}$  – время релаксации системы, во временном поведении системы проявляется влияние начальных состояний системы и эффектов старения, характеризующихся замедлением релаксационных процессов с увеличением  $t_w$ .

Временная автокорреляционная спиновой системы определяется соотношением

$$C(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x, t) S(0, t_w) \rangle - \langle S(x, t) \rangle \langle S(0, t_w) \rangle], \quad (1)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния, квадратные – усреднение по различным конфигурациям распределения дефектов в решётке.

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

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

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

$$\chi(t, t_w) = \int_0^{t_w} dt' R(t, t') \sqrt{2}. \quad (3)$$

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

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} p_i p_j S_i S_j, \quad (4)$$

где суммирование проводится по ближайшим соседям,  $S_i = \pm 1$ . Динамика системы моделировалась с применением алгоритма тепловой бани. Осуществлялось вычисление автокорреляционной функции

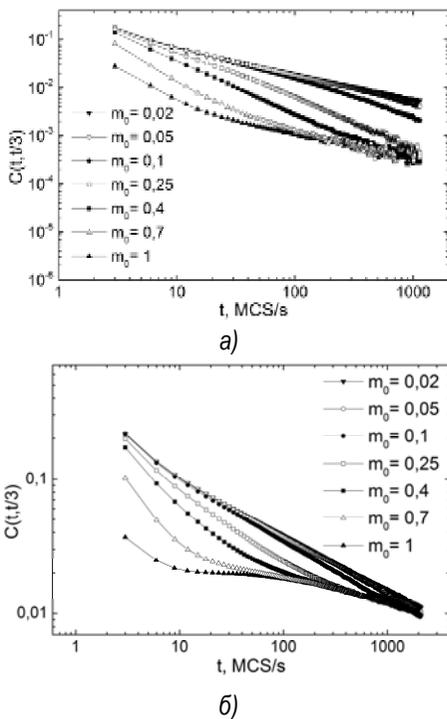
$$C(t, t_w) = \left[ \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle \right] - \left[ \left\langle \sum_{i=1}^N S_i(t) \right\rangle \left\langle \sum_{i=1}^N S_i(t_w) \right\rangle \right] \quad (5)$$

и динамической восприимчивости [1]:

$$\chi(t, t_w) = \frac{1}{TN} \sum_{i=1}^N [\langle p_i S_i(t) \Delta S_i(t_w) \rangle], \quad \Delta S_i(t_w) = \sum_{s=0}^{t_w} [S_i(s) - S_i^W(s)] \quad (6)$$

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  $p = 1,0$  и  $0,8$  при соответствующих критических температурах  $T_c$ . Формировались начальные состояния системы со значениями намагниченности, равными  $m_0 = 0,02; 0,05; 0,1; 0,25; 0,4; 0,7$  и  $1,0$ . Поведение автокорреляционной функции и динамической восприимчивости исследовалось для времен ожидания  $t_w$ , зависящих от времени наблюдения  $t$ . На рис. 1 приведены графики временной зависимости автокорреляционной функции для  $t_w = t/3$ . Эффекты старения наглядно проявляются через отклонение  $C(t, t/3)$  от прямой и характеризуются замедлением корреляции и релаксации системы с увеличением ее «возраста». Из представленных графиков также видно, что с ростом начального значения намагниченности происходит усиление эффектов старения.

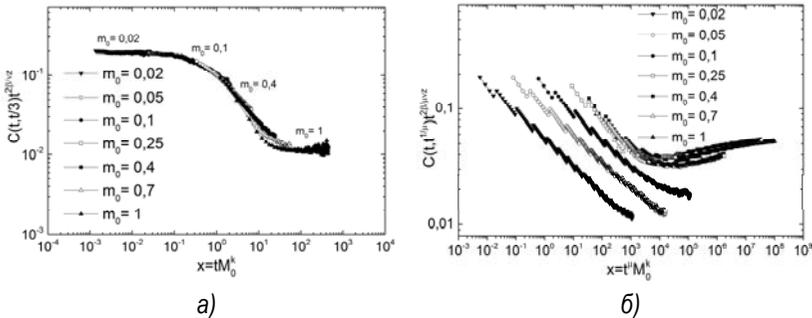


**Рис. 1.** Неравновесные зависимости автокорреляционной функции  $C(t, t/3)$  для систем с концентрацией спинов  $p = 1,0$  (а) и  $p = 0,8$  (б).

Для чистых систем ( $p=1$ ) в случае с  $t_w = t/3$  корреляционная функция и восприимчивость описываются соотношениями [1]:

$$C(t, t/3) = t^{-\frac{2\beta}{\nu z}} G_C(tm_0^k), \quad \chi(t, t/3) = t^{\frac{2\beta}{\nu z}} G_\chi(tm_0^k). \quad (7)$$

Для проверки этих соотношений были построены зависимости  $t_w^{-2\beta/\nu z} C(t, t/3)\sqrt{\phantom{x}}$  и  $t_w^{2\beta/\nu z} \chi(t, t/3)$  от  $x = tm_0^k$ , показанные на рис. 2 (а) и демонстрирующие «коллапс» полученных данных для различных  $m_0$  на универсальной кривой. В случае структурно неупорядоченных систем восприимчивость характеризуется скейлинговым соотношением (7) с учетом соответствующих значений критических индексов. Однако поведение автокорреляционной функции показывает нарушение соотношения (7), определяемого  $G_C(tm_0^k)$ . Представление зависимости  $t_w^{2\beta/\mu\nu z} C(t, t^{1/\mu})$  от  $t^\mu m_0^k$  позволяет при значении показателя  $\mu = 2,30(6)$  [2] для системы с  $p = 0,8$  получить совпадение данных при  $m_0 > 0,25$  (рис. 2 (б)). Таким образом, в случае структурно неупорядоченных систем для автокорреляционной функции реализуется более сложная скейлинговая зависимость вида  $C(t, t^{1/\mu}) = t^{-\frac{2\beta}{\mu\nu z}} \tilde{G}_C(t^\mu m_0^k)$ . Такой случай скейлинговой зависимости, характеризуемой показателем  $\mu > 1$ , классифицируется в теории неравновесных процессов как явление «сверхстарения» [2].



**Рис. 2.** Скейлинговые зависимости для  $t_w^{-2\beta/(\nu z)} C(t, t_w)$  для  $p=1,0$  (а) и  $t_w^{2\beta/\mu\nu z} C(t, t^{1/\mu})$  от  $t^\mu m_0^k$  для  $p=0,8$  (б), демонстрирующие «коллапс» полученных для различных  $t_w$  данных.

Изменения в поведении автокорреляционной функции связаны с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры [2].

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F.* Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state // *J. Stat. Mech.* 2006. P. 066120.

[2] *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н.* Эффекты старения и памяти в неравновесном критическом поведении структурно неупорядоченных магнетиков при эволюции из низкотемпературного начального состояния // *Письма в ЖЭТФ.* 2015. Т. 102. Вып. 3. С. 192–201.

---

Петр Николаевич Маляренко,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
I курс аспирантуры, физический факультет,  
petr.malyarenko@yandex.ru

# ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИКИ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА ВБЛИЗИ ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ

А.С. Папушин

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

В данной статье представлено описание процесса моделирования критического поведения системы вблизи порога примесной перколяции, а так же оценена эффективность перколяционно-кластерного метода.

*Ключевые слова:* модель Изинга, неравновесное критическое поведение, перколяционно-кластерный метод, критическая температура.

Описание фазовых переходов – одна из самых актуальных задач статистической физики. Но при приближении к точке фазового перехода наблюдаются аномально большие флуктуации, что создает значительные трудности при экспериментальном исследовании критического поведения. Одной из таких флуктуаций является критическое замедление процессов релаксации, что сказывается на исследовании системы вплоть до изменения ее критического поведения. В связи с этим стараются разрабатывать и применять методы компьютерного моделирования, слабо зависящие от эффектов критического замедления, к которым относится перколяционно-кластерный метод [1].

Для уменьшения эффектов критического замедления были разработаны различные численные методы. Наиболее известные из них: алгоритм Метрополиса (алгоритм односпиновых переворотов), алгоритмы Вольфа, Свендсена-Ванга, перколяционно-кластерный метод (кластерные алгоритмы). Основным преимуществом кластерных методов являются одновременные перевороты целых групп спинов, что позволяет ускорить процесс приведения системы в состояние равновесия. В процессе моделирования может участвовать более одного кластера, как это происходит в алгоритме Свендсена-Ванга, что так же уменьшает эффекты критического замедления. При приближении к порогу перколяции особенно сильно возрастает влияние структурных дефектов на пове-

дение системы. Поэтому был разработан перколяционно-кластерный метод, позволяющий более эффективно приводить систему в состояние равновесия вблизи порога перколяции.

Рассматривалась трехмерная разбавленная немагнитными атомами примеси модель Изинга (случай замороженных дефектов структуры). Моделирование осуществлялось в рамках статистического метода Монте-Карло. Был реализован динамический процесс многоспиновых переворотов с применением перколяционно-кластерного метода, задающего вероятность перехода спина системы в новое состояние  $S_i \rightarrow S'_i$  посредством формулы:

$$\text{Wsp}(S_i \rightarrow S'_i) = \exp(-\Delta E / kT), \quad (1)$$

где  $\Delta E$  – изменение энергии системы, обусловленное произведенным пробным изменением конфигурации. В качестве единицы времени динамического процесса выбирается шаг Монте-Карло на спин (MCS/s), который обозначает N последовательных переворотов спинов в кластерах. Вычисление критической температуры производилось с помощью кумулянтов Биндера [2]:

$$U_L = \frac{1}{2} \left( 3 - \frac{[\langle M_{sig}^4 \rangle]}{[\langle M_{sig}^2 \rangle]^2} \right), \quad (2)$$

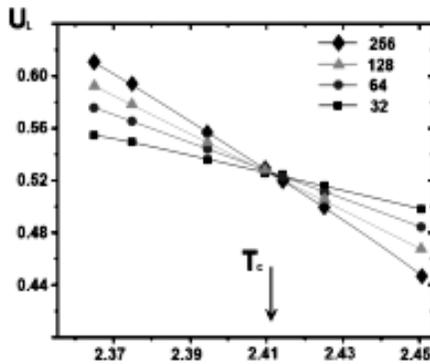
где треугольные скобки означают статистическое усреднение по реализации начального состояния, квадратные – по различным распределениям немагнитных примесей на решётке.

Моделирование системы проводилось на кубической решётке спинов с линейным размером  $L = 32, 64, 128, 256$  при спиновых концентрациях  $p = 0.8, 0.7, 0.69$  и  $0.6$ . Формировалось низкотемпературное (при  $T_0 \ll T_c$ ) начальное состояние системы. Поведение системы исследовалось на 100 000 шагов Монте-Карло на спин (MCS/s). Усреднение проводилось по 1 000 различным примесным конфигурациям. По пересечению кумулянтов было определено значение критической температуры. В табл. 1 представлены полученные значения.

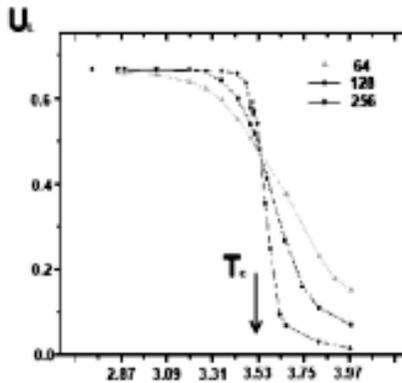
Значения критических температур, полученные для концентраций 0,8 и 0,6, хорошо согласуется с данными, полученными в работах [4; 10]. На рисунках ниже представлен пример полученных значений для концентрации спинов  $p = 0.6$  и  $0.8$ .

**Значения критических температур  
в зависимости от концентрации спинов**

Концентрация спинов, $p$	Значения критической температуры, $T_c$	Значения, полученные ранее, $T_c$ [3]
0.8	3.51(4)	3,4956(6)
0.7	2.90(2)	2,9682(8)
0.69	2.72(3)	—
0.6	2.41(3)	2,4173(9)



**Рис. 1.** Значение кумулянтов Биндера для концентрации  $p = 0.6$



**Рис. 2.** Значение кумулянтов Биндера для концентрации  $p=0.8$

Для определения эффективности того или иного алгоритма, используемого при моделировании критического поведения системы, используется динамический критический индекс  $Z$ , который характеризует величину критического замедления времен релаксации системы при приближении к критической температуре. Полученные значения представлены в табл. 2.

Таблица 2

**Значения критического индекса  $Z$   
в зависимости от концентрации спинов**

<i>Концентрация спинов, <math>p</math></i>	<i>Значения динамического критического индекса <math>Z</math></i>
0.8	0.57(4)
0.7	0.76(3)
0.69	0.79(5)
0.6	0.71(4)

Анализ полученных данных показал, что данный метод хорошо подходит для изучения неоднородных систем, находящихся вблизи порога примесной перколяции.

**ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Machta J., Choi Y.S., Lucke A., Schweizer T.* Invaded cluster algorithm for Equilibrium Critical Points // Department of Mathematics, University of California, Los Angeles. P. 2792–2795. 9 October 1995.

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

[3] *Прудников В.В., Прудников П.В., Вакилов А.Н., Криницин А.С.* Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной упорядоченной модели Изинга // ЖЭТФ. 2007. Т. 132, № 2. С. 417–425.

---

Александр Сергеевич Папушин,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
II курс аспирантуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А,  
as.ollaf@gmail.com

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ СТАРЕНИЯ В МУЛЬТИСЛОЙНОЙ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЕ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

А.Н. Пуртов

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

Рассмотрены результаты численного исследования методом Монте-Карло особенностей неравновесного поведения в мультислойной магнитной структуре с магнитными пленками, описываемыми анизотропной моделью Гейзенберга. Анализ полученной двухвременной зависимости автокорреляционной функции при эволюции системы из различных начальных состояний с  $m_0 = 1$  и  $m_0 = 0,05$  позволил выявить эффекты старения, характеризующиеся замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания. При кратковременных включениях магнитного поля в моменты времени ожидания во временном поведении намагниченности выявлены эффекты памяти о состояниях, предшествующих включениям поля.

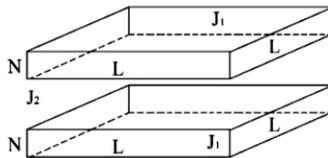
*Ключевые слова:* метод Монте-Карло, анизотропная модель Гейзенберга, мультислойные магнитные структуры, эффекты старения.

Исследование макроскопических статистических систем, характеризующихся медленной динамикой, и изучение свойств ультратонких магнитных пленок, вызывает в настоящее время повышенный интерес. При медленной эволюции данных систем из неравновесного начального состояния в них наблюдаются свойства старения и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы [1]. Известно, что в окрестности температуры  $T_c$  фазового перехода второго рода время релаксации системы является аномально большой величиной  $t_{rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$ , вследствие чего статистическая система в критической точке  $T_c$  не достигает равновесия в течение всего процесса релаксации. В таких условиях система демонстрирует ряд особенностей своего неравновесного поведения, такие как явления старения и памяти о начальных состояниях. Эффекты старения проявляются на этапе  $t \ll t_{rel}$  и выражаются в осуществлении двухвременных зависимостей для корреляционной функции от времени ожидания  $t_w$  и времени наблюдения  $t - t_w$ .

$$C(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x [ \langle S(x, t) S(x, t_w) \rangle - \langle S(x, t) \rangle \langle S(x, t_w) \rangle ], \quad (1)$$

Время ожидания  $t_w$  характеризует время, прошедшее с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. В течение  $t - t_w \ll t_{rel}$  во временном поведении системы проявляется влияние начальных состояний системы.

Моделирование мультислойных структур (рис. 1) выполнялось методом Монте-Карло для магнитных пленок с размерами  $L \times L \times N$  с наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки, для различных начальных состояний: низкотемпературного с  $T_0 < T_c$  и намагниченностью  $m_0 = 1$  и высокотемпературного с  $T_0 > T_c$  и  $m_0 = 0,05$ .



**Рис. 1.** Модель мультислойной структуры, состоящей из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла.  $N, L$  – линейные размеры пленок

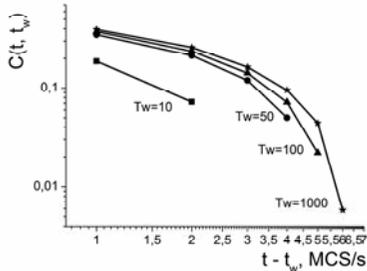
Рассматривалась структура из магнитных пленок с толщинами  $N=3$ . Значение обменного интеграла  $J_1$ , определяющего взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки, бралось  $J_1/k_B T = 1$ , а для взаимодействия между пленками  $J_2 = 0.3J_1$ . Гамильтониан системы задавался выражением:

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \{ (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z \} - h \sum_i S_{ix}, \quad (2)$$

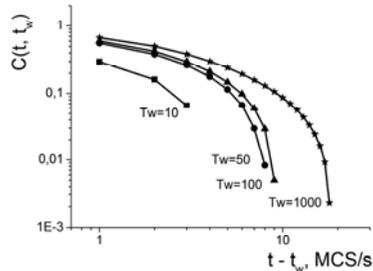
где  $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  – трехмерный единичный вектор в узле  $i$ ;  $\Delta = 0,7$  – параметр анизотропии для  $N=3$ ;  $h = 0,005J_1$  – малое внешнее магнитное поле. Критическая температура ферромагнитного упорядочения  $T_c = 0.72J_1$  в пленках с  $N=3$  была определена по методу пересечения кумулянтов Биндера  $U_4(T, L)$  от  $T$  для различных размеров пленок  $L=16, 24, 32$ .

Был проведен расчет автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  при эволюции системы из начальных состояний с  $m_0 = 1$  и  $m_0 = 0,05$

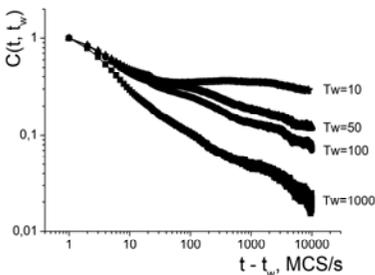
с температурами замораживания  $T_s=T_c$  и  $T_s=0.5J_1<T_c$ . Усреднение характеристик проводилось по 1000 прогонкам. Графики, представленные на рис. 2, демонстрируют наличие в системе эффектов старения, т. е. рост времени установления равновесия в системе при увеличении времени ожидания  $t_w$ .



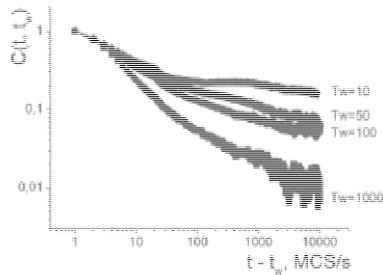
а)  $T_s = 0,5 J_1$



б)  $T_s = T_c = 0,72 J_1$



в)  $T_s = 0,5 J_1$

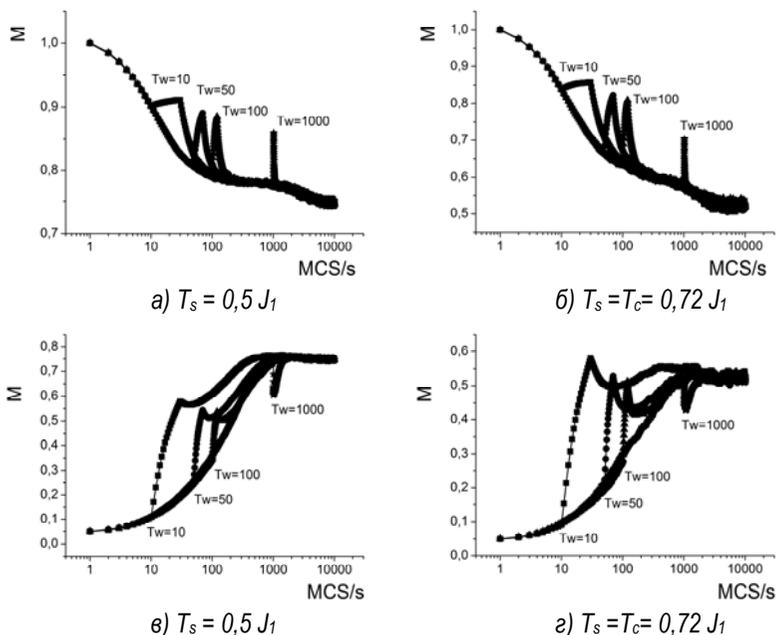


г)  $T_s = T_c = 0,72 J_1$

**Рис. 2.** Автокорреляционная функция с эволюцией из низкотемпературного (а, б) и высокотемпературного (в, г) состояний

Анализ графиков  $C(t, t_w)$  показывает, что эффекты старения возникают в мультислойной структурах не только при  $T_s=T_c$ , как в однородных системах, но и при  $T_s<T_c$ , а понижение температуры  $T_s<T_c$  приводит даже к большему замедлению эффектов корреляции. Исследование «шахматной» намагниченности системы  $M_{stg} = M_1 - M_2$ , где  $M_1, M_2$  – намагниченности пленок, при включении в момент времени  $t_w$  внешнего магнитного поля с  $h=10J_1$  на протяжении 5 MCS/s демонстрирует наличие эффектов памяти системы о состоянии с  $h=0$ , предшествующем включению

поля (рис.~3). Анализ графиков показывает: 1) при  $T_s=T_c$  система возвращается в прежнее состояние гораздо дольше, чем при  $T_s<T_c$ ; 2) с увеличением времени ожидания  $t_w$  растет и время возвращения в состояние при  $h=0$ ; 3) при  $m_0=0,05$  намагниченность заметно медленнее приходит к своему состоянию с  $h=0$  по сравнению с эволюцией из начального состояния с  $m_0=1$ .



**Рис. 3.** «Шахматная» намагниченность при эволюции из низкотемпературного (а, б) и высокотемпературного (в, г) состояний

### ЛИТЕРАТУРА

[1] Bouchaud J.P / Bouchaud J.P., Vincent E., Hammann J., Ocio M., Cugliandolo L.F. Lect. Notes Phys. 1997. V.492, P. 184.

Александр Николаевич Пуртов,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
II курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,  
alprtv@gmail.com

# ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР

Д.Е. Романовский

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

Методами Монте-Карло осуществлено моделирование магнитных свойств структуры из двух ферромагнитных пленок Fe(100), разделенных немагнитной пленкой Cr. Проведены первопринципные расчеты параметров обменного взаимодействия с использованием PAW PBE приближения, которые были применены для Монте-Карло расчета коэффициента магнитосопротивления мультислойной структуры для разных значений толщин ферромагнитных пленок Fe. Рассчитанная температурная зависимость коэффициента магнитосопротивления находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными, полученными для структуры Fe/Cr.

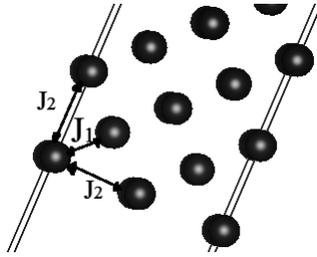
*Ключевые слова:* мультислойные магнитные структуры, метод Монте-Карло, коэффициент магнитосопротивления.

Эффект гигантского магнитосопротивления (ГМС) наблюдается в многослойных структурах, в которых магнитные слои (Fe, Co, Ni) разделены немагнитными металлическими слоями (Cr, Cu) толщиной порядка нескольких нанометров [1]. В настоящей работе рассмотрены мультислойные структуры, состоящие из двух ферромагнитных слоев Fe, разделенных слоем немагнитного Cr.

Магнитные свойства тонких ферромагнитных пленок на основе Fe, Co и Ni можно описать в рамках анизотропной модели Гейзенберга [2]. Гамильтониан модели задается в виде:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[ (1 - \Delta(N)) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right], \quad (1)$$

где  $J_{ij}$  – константы обменного взаимодействия,  $\Delta(N)$  – параметр анизотропии, зависящий от толщины пленки  $N$ ,  $\vec{S}_i$  – спин модели, задаваемый как единичный вектор в  $i$ -м узле решетки. Зависимость параметра анизотропии от толщины пленки выбиралась в соответствии с результатами работы [3].



**Рис. 1.** Обменные интегралы  $J_1$  и  $J_2$ , определяющие взаимодействие спинов внутри ферромагнитного слоя

Значения обменных интегралов  $J_1$  и  $J_2$ , характеризующие взаимодействие ближайших и следующих за ближайшими соседями в ОЦК-решетке Fe вычислялись с использованием программного пакета VASP в соответствии с методикой, изложенной в работе [4]. Проведены первопринципные расчеты полной энергии и магнитного момента для различных антиферромагнитных и ферромагнитной спиновых конфигураций (табл.).

**Полная энергия и магнитный момент, приходящиеся на 1 атом для мультислойной структуры Fe(100)/Cr/Fe(100)**

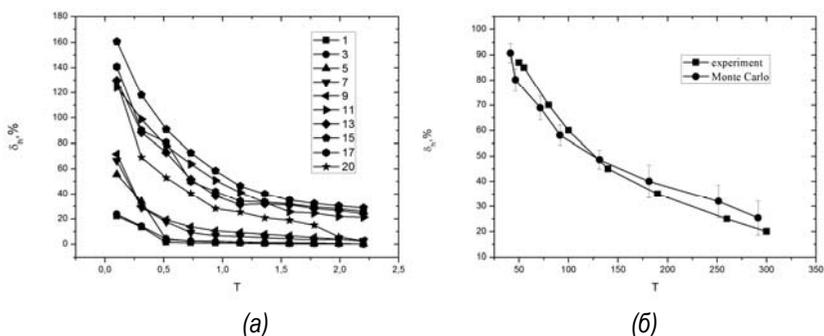
Конфигурация	$E$ (эВ)	$M$ ( $\mu_B$ )
+--+--+	-8,2078	0
--++++--	-8,2117	0
+++++++	-8,1630	2,348

В результате была рассчитана величина интеграла обменного взаимодействия для ближайших соседей  $J_1 = 1.7 \cdot 10^{-14}$  эрг и  $J_2 = 0.4 \cdot 10^{-14}$  эрг – для атомов, следующих за ближайшими (рис. 1). Методами Монте–Карло осуществлен расчет коэффициента магнитосопротивления, вводимый соотношением:

$$\rho = \frac{R(H = 0) - R(H \neq 0)}{R(H)}, \quad (4)$$

где  $R(H = 0)$  и  $R(H \neq 0)$  – сопротивление структуры без поля, и во внешнем магнитном поле, соответственно. Вычисленная нами для коэффициента магнитосопротивления зависимость от толщи-

ны ферромагнитных пленок  $N$  (рис. 2а) соответствует размерным изменениям критической температуры ферромагнитного фазового перехода в гейзенберговских пленках, выявленным в работах [3; 5]. Интервал толщин пленок с  $N=14\div 17$ , в котором коэффициент магнитосопротивления принимает максимальные значения при заметно более медленном его уменьшении с ростом температуры, соответствует гейзенберговским пленкам с критическим поведением, описываемым трехмерной моделью Изинга [3; 5].



**Рис. 2.** Зависимость коэффициента магнитосопротивления трехслойной структуры, состоящей из двух ферромагнитных слоев, разделенных немагнитным слоем, от температуры для различных значений толщины  $N$  ферромагнитных пленок (а), и сопоставление графиков температурной зависимости коэффициента магнитосопротивления для структуры Fe/Cr при толщине пленок железа в 3 нм (б), рассчитанных методами Монте-Карло и измеренных экспериментально [6]

Показано, что рассчитанная температурная зависимость коэффициента магнитосопротивления находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными, полученными для мультислойных магнитных структур Fe(001)/Cr(001) [6] (рис. 2 б).

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Parkin S.S.P.* Giant magnetoresistance in magnetic nanostructures // Annual Review of Materials Science. 1995. V. 25. P. 357–388.
- [2] *Binder K., Landau D.P.* Critical properties of the two-dimensional anisotropic Heisenberg model // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 1140–1155.

[3] Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А. Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 501–505.

[4] Wang J-T., Zhou L., Wang D-S., Kawazoe Y. Exchange interaction and magnetic phase transition in layered Fe/Au(001) superlattices // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 3354–3360.

[5] Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Menshikova M.A., Piskunova N.I. Dimensionality crossover in critical behaviour of ultrathin ferromagnetic films // JMMM. 2015. V. 387. P. 77–82.

[6] Bass J., Pratt W.P. Current-perpendicular (CPP) magnetoresistance in magnetic metallic multilayers // JMMM. 1999. V. 200. P. 274–289.

---

Дмитрий Евгеньевич Романовский,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
I курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,  
romfizz898@gmail.com

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ СТРУКТУР С ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ\*

А.П. Солдусова

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

Проведено исследование температурных зависимостей шахматной намагниченности для двухслойной магнитной структуры с различной толщиной пленок. Получены петли гистерезиса для двухслойной структуры. Рассмотрено влияние расстояния между пленками и величины диполь-дипольного взаимодействия на степень связанности слоев структуры.

Экспериментальные и теоретические исследования структур на основе тонких магнитных пленок имеют широкий практический интерес [2,4]. В структурах, состоящих из чередующихся магнитных и немагнитных слоев, был открыт эффект гигантского магнетосопротивления, который получил применение в устройствах хранения данных [1], в магнитных сенсорах [3].

В данной работе проводилось компьютерное моделирование мультислойных структур на основе метода Монте-Карло. Моделировалась структура, состоящая из двух ферромагнитных пленок с анизотропией в направлении оси  $z$ , перпендикулярной плоскости пленок. Взаимодействие пленок возникает в результате дальнедействующего диполь-дипольного взаимодействия. Гамильтониан системы задается в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \bar{S}_i \bar{S}_j - A \sum_i S_{i,z}^2 - \bar{h} \sum_i \bar{S}_i + D \sum_{ij} \left( \frac{\bar{S}_i \bar{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\bar{S}_i \bar{r}_{ij})(\bar{S}_j \bar{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right),$$

---

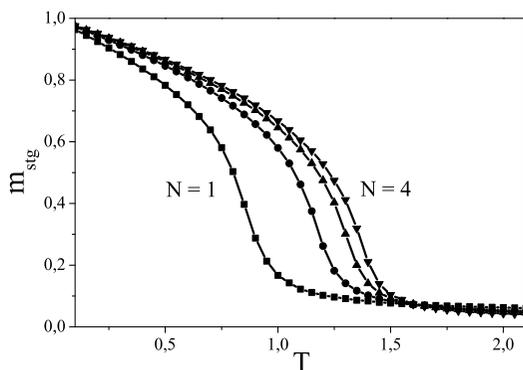
© А.П. Солдусова, 2016

---

\* Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда, № 14-12-00562, гранта Президента РФ № МД-6024.2016.2 и проекта Министерства образования и науки РФ № 1627, в рамках государственного задания вузам в части проведения научно-исследовательских работ на 2014–2016 гг. Численные исследования проведены с привлечением ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН Москвы и Санкт-Петербурга.

где  $J$  – интеграл обменного взаимодействия,  $A$  – константа анизотропии,  $h$  – внешнее магнитное поле,  $D$  – константа диполь-дипольного взаимодействия,  $S_i$  – классический спин, являющийся единичным вектором в трехмерном пространстве. В первом слагаемом предполагается наличие двух сумм, отдельно по каждой пленке, и суммирование проводится по ближайшим соседям в каждой пленке. Суммирование в последнем слагаемом проводится по  $i$ -ым спином, принадлежащим первой пленке, и  $j$ -ым спином, принадлежащим второй пленке. В работе использовались значения параметров гамильтониана  $J=1,00$ ,  $A=0,10$ ,  $D=0,01$ .

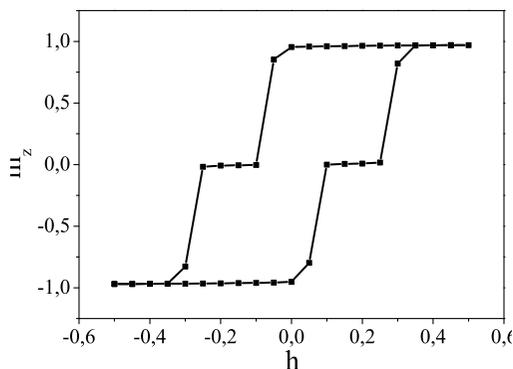
Диполь-дипольное взаимодействие приводит к тому, что при низких температурах реализуется антипараллельное выравнивание магнитных моментов пленок. Это упорядоченное состояние разрушается при повышении температуры, что можно наблюдать по температурной зависимости параметра порядка, которым в данной системе является шахматная намагниченность – разность моментов пленок. Данная зависимость для структур с толщиной пленок  $N = 1, 2, 3, 4$  представлена на рис. 1. С ростом толщины пленок наблюдается рост температуры фазового перехода.



**Рис. 1.** Температурная зависимость шахматной намагниченности для систем с толщиной пленок  $N = 1, 2, 3, 4$  (слева направо)

Включение внешнего магнитного поля перпендикулярно плоскостям пленок может привести к перевороту магнитного момента одной из пленок и появлению намагниченности во всей системе. Моделирование поведения структуры в медленно меняю-

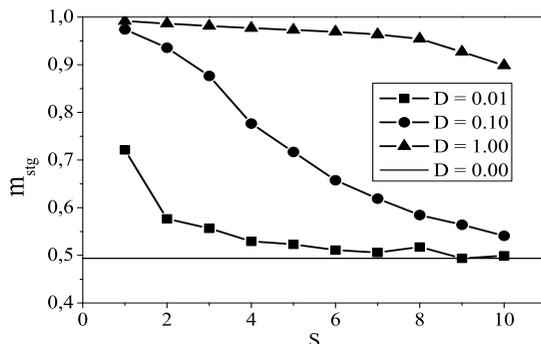
щемся магнитном поле позволяет получать гистерезисные петли. На рис. 2 представлена зависимость проекции намагниченности системы на ось  $z$  от величины внешнего магнитного поля при температуре  $T = 0,1$ . Поле направлено по оси  $z$ , в процессе моделирования направление поля не менялось, изменялась только амплитуда поля. Моделирование начиналось из состояния, в котором все спины направлены в отрицательном направлении оси  $z$  при поле  $h_z = -0,5$ . Далее поле изменялось на величину  $\Delta h = 0,05$  до достижения значения  $h_z = 0,5$ . Видно, что начальное ферромагнитное состояние с  $m_z = -1,0$  сохраняется вплоть до значений поля близких к нулю. С дальнейшим увеличением поля в структуре резко возникает антиферромагнитное упорядочение, которое сохраняется при значениях поля от  $0,1$  до  $0,3$ , а затем резко происходит переход в ферромагнитное состояние с  $m_z = 1,0$ . Аналогичным образом проходит процесс при изменении поля от  $h_z = 0,5$  до  $h_z = -0,5$ . Площадь образующейся петли гистерезиса уменьшается с ростом температуры.



**Рис. 2.** Зависимость проекции намагниченности на ось  $z$  от внешнего поля при  $T = 0.1$

Степень взаимодействия пленок двухслойной структуры уменьшается с ростом расстояния между пленками  $S$  или с уменьшением константы диполь-дипольного взаимодействия  $D$ . При  $D = 0,0$  структура представляет собой две несвязанные пленки. На рис. 3 представлена зависимость шахматной намагниченности двухслойной структуры от расстояния между пленками для трех

значений константы диполь-дипольного взаимодействия  $D$  при низкой температуре  $T = 0,1$ .



**Рис. 3.** Зависимость шахматной намагниченности от расстояния между пленками  $S$  при нескольких значениях  $D$  при  $T = 0,1$

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Heinrich B., Bland J.A.C., Eds. Ultrathin Magnetic Structures. V. 4. Berlin: Springer. 2005.
- [2] Mayberry J., Tauscher K., Pleimling M. Phys. Rev. B. 2014. V. 90. P. 014438.
- [3] Melzer M., Kaltenbrunner M., Makarov D., Karnaushenko D., Karnaushenko D., Sekitani T., Someya T., Schmidt O.G. Nat. Commun. 2015. V. 6. P. 6080.
- [4] Michez L.A., Hickey B.J. Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 012408.

---

Анна Павловна Солдусова,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
2 курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55А

# РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОНОСЛОЙНОЙ ПЛЕНКИ СО С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ОРИЕНТАЦИИ ПОВЕРХНОСТНОЙ ГРАНИ

М.О. Стогова

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

В данной работе, в рамках модели описания адсорбции вариационным методом функционала спиновой плотности, исследовано поведение энергии адсорбции и пространственного распределения намагниченности для монослойной плёнки кобальта на подложках из *Cu* и *Pt* с учетом ориентации поверхностной грани и температуры.

*Ключевые слова:* активированная адсорбция, магнитные ультратонкие пленки.

В данной работе, в рамках модели описания адсорбции вариационным методом функционала спиновой плотности [1], исследовано поведение энергетических и структурных характеристик монослойных плёнок *Co* на подложках из *Cu* и *Pt* с учетом ориентации поверхностной грани и температуры.

Рассмотрим адсорбционную систему состоящую из полубесконечного металла характеризующегося средней плотностью заряда  $n_1$ , пленки адсорбата со средней плотностью заряда  $n_3$  и первым приповерхностным слоем со средней плотностью заряда  $n_2$ . В пленке и приповерхностном слое подложки образуется смесь атомов адсорбата и субстрата, которая по своим свойствам напоминает бинарный сплав двух металлов. Для бинарного сплава, образующегося в пленке, можно ввести обозначение  $A_p S_{1-p}$ , где  $A$  – атомы адсорбата, а  $S$  – атомы субстрата, индекс  $p$  характеризует относительную долю атомов адсорбата в сплаве. Аналогично, для приповерхностного слоя вводится обозначение  $A_{p'} S_{1-p'}$ , где индекс  $p'$  характеризует относительную долю атомов адсорбата в данной области.

Предполагая равномерное распределение адатомов в приповерхностном слое подложки с повторением ее симметрии, параметр заполнения  $\theta$  можно выразить через параметры бинарных растворов  $p$  и  $p'$ :

$$\theta = pq + p'q', \quad (1)$$

где параметры  $q$  и  $q'$ , характеризуют степень заполнения атомами пленки и приповерхностного слоя соответственно.

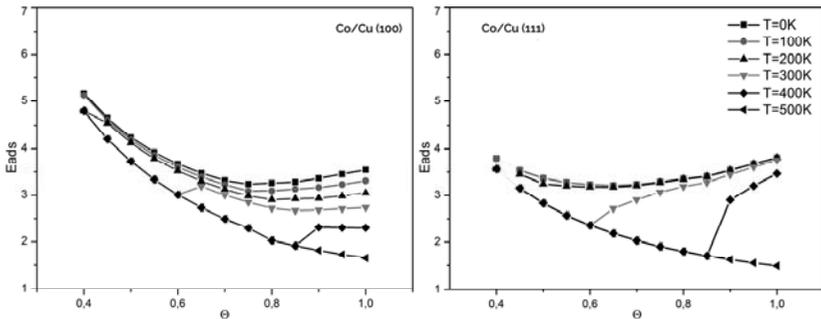
Поверхностные концентрации  $n_{s1}$  и  $n_{s2}$  являются функциями параметра  $c_2$ , задающего минимальное расстояние между атомами в приповерхностном слое, и зависят от симметрии грани подложки

$$n_{si}^{100} = 1/c_i^2; n_{si}^{110} = 1/c_i^2\sqrt{2}; n_{si}^{111} = 2/c_i^2\sqrt{3}. \quad (2)$$

Энергия адсорбции находится из условия минимума по параметрам  $q$  и  $p$  удельной энергии адгезии, приходящейся на один адсорбированный атом:

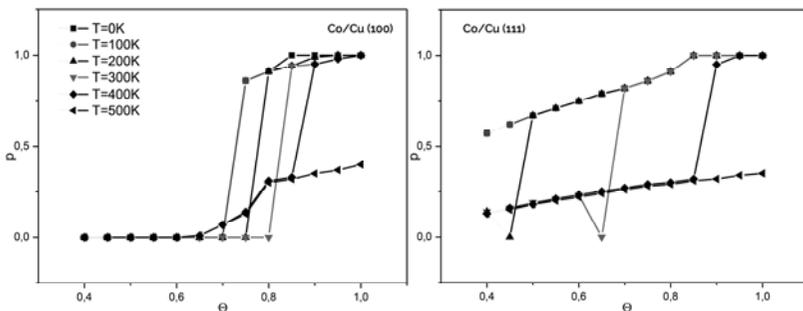
$$E_{ads} = E_a / n_s^a = \min_{p,q} [(\sigma(\infty) - \sigma(0)) / n_s^a]. \quad (3)$$

Экспериментальные исследования показали [2], что температурная зависимость намагниченности пленки кобальта на подложке из Pt и Cu(111) может быть описана двумерной моделью Изинга. В то время как пленки на подложке из Cu для грани 100 будут отражать поведение двумерной XY модели.



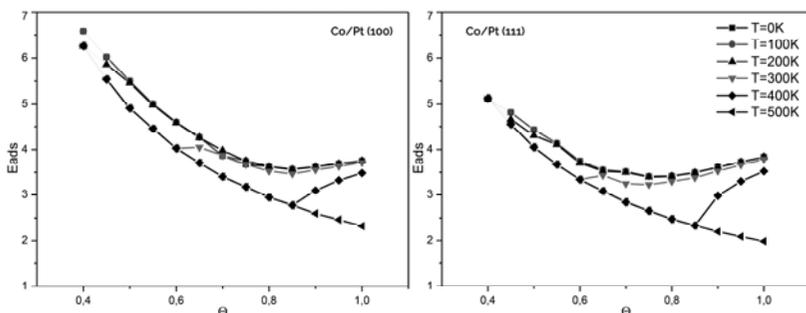
**Рис. 1.** Зависимость энергии адсорбции  $E_{ads}$  эВ/ат от параметра покрытия  $\theta$  на грани (100) и (111) для системы Co/Cu при различных температурах

По данным, представленным на рис. 1, видно, что расстояние между парамагнитной и ферромагнитной фазой энергии адсорбций для плотноупакованной грани (111) больше чем для рыхлой (100). Так же стоит отметить, что для грани (100) значения энергий максимальны и лежат в диапазоне  $5.5 > E_{ads} > 0.5$  эВ/ат, для грани (111) энергия адсорбции принимает значения  $4 > E_{ads} > 0.5$  эВ/ат.



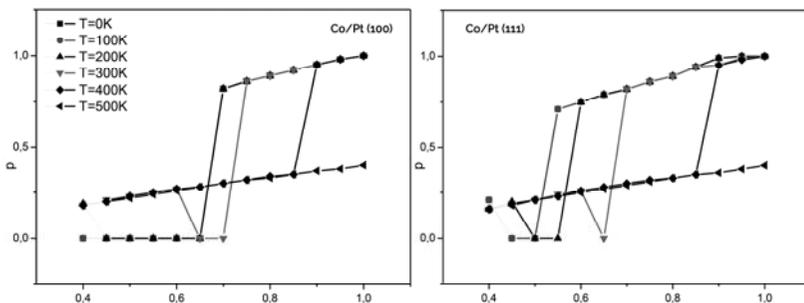
**Рис. 2.** Зависимость степени перемешивания  $p_{min}$  от параметра покрытия  $\Theta$  на грани (100) для системы Co/Cu при различных температурах

Из рис. 2 для Co/Cu(100) видно, что при  $T < T_c$  начиная со значения параметра покрытия  $\Theta > 0.85$  формируется монослойная пленка, при значениях  $\Theta < 0.7$  происходит сильное перемешивание атомов адсорбата и субстрата, данное поведение системы совпадает с полученным экспериментально [3]. Для плотноупакованной грани монослойная пленка формируется при температурах, не превышающих критическую, начиная с параметра покрытия  $\Theta > 0.9$ .



**Рис. 3.** Зависимость энергии адсорбции  $E_{ads}$  эВ/ат от параметра покрытия  $\Theta$  на грани (100) и (111) для системы Co/Pt при различных температурах

Для системы Co/Pt как и для Co/Cu разность между парамагнитной и ферромагнитной фазой (рис. 3) для рыхлой грани меньше чем для плотноупакованной. Энергия системы Co/Pt для соответствующих граней больше чем у системы Co/Cu.



**Рис. 4.** Зависимость степени перемешивания  $p_{min}$  от параметра покрытия  $\Theta$  на грани (100) для системы Co/Pt при различных температурах.

На графиках рис. 4 наглядно видно, что поведение систем для разных граней аналогично, так для грани (100) при температурах меньших критической формируется монослойная пленка начиная со значения параметра покрытия  $\Theta > 0.85$ . Для грани (111) формирование монослойной пленки происходит начиная со значения параметра покрытия  $\Theta > 0.8$  для температур  $T < 500\text{K}$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А.* Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011. 400 с.
- [2] *Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G.* Magnetism in ultrathin film structures // Reports on Progress in Physics. 2008. V. 71.
- [3] *Ney A.* A New Design of an UHV-High- $T_c$ -SQUID Magnetometer: Absolute Determination of Magnetic Moments of 3d-Transition Metal Films. Homburg: dissertation.de, 2001. 128 p.

---

Мария Олеговна Стогова,  
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
 физический факультет, II курс магистратуры,  
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
 masha.stogova@gmail.com

Секция  
**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА**

---

**ИССЛЕДОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО  
СОСТОЯНИЯ ЧЕРНЫХ МЕТАЛЛОВ,  
ОБЛУЧЕННЫХ МОЩНЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ**

**Я.Н. Голубева**

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

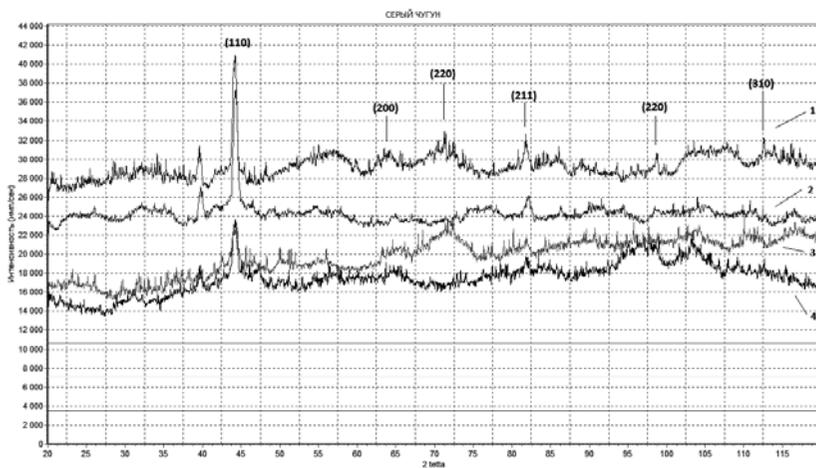
Наряду с традиционными методами упрочняющего объемного воздействия на металлические материалы, такими как термомеханическая обработка, закалка и ударно-волновое нагружение, появилась возможность проводить поверхностную обработку мощными ионными пучками (МИП). В результате передачи энергии от быстрых частиц пучка вещество переходит в неравновесное состояние: резко растёт температура, повышается давление [1]. Это приводит к целому ряду явлений, которые могут вызывать фазовые превращения и изменения физико-технических свойств материала. Целью данной работы являлось исследование методом рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии модифицированных поверхностных слоев серого чугуна мощным ионным пучком наносекундной длительности при варьировании числа импульсов.

*Ключевые слова:* мощный ионный пучок (МИП), рентгеноструктурный анализ (РСА), остаточные напряжения I-рода, серый чугун, фазовый анализ.

Для исследования были выбраны образцы серого чугуна (Fe 93 % C 2.9-3.7 %, Si 1.2-2.6 %, Mn 0.5-1 %, P 0.2-0.3 %, S 0.12-0.15 %, Cr 0.01-0.02 %, Ni 0.05-0.1 %) [2]. Образцы предварительно шлифовались и полировались, а затем облучались на ускорителе ТЕМП со следующими параметрами пучка: состав – 70 % C<sup>+</sup>

и 30 %  $H^+$ , энергия ионов до  $\sim 300$  кэВ, длительность импульса 60 нс, плотность тока пучка  $j = 150$  А/см<sup>2</sup>, число импульсов от 1 до 6. Фазовый состав исследовали с использованием методик рентгенофазового анализа, снятых на дифрактометре ДРОН-3М на  $CuK_{\alpha}$ -излучении. Элементный анализ исследовали с применением энергодисперсионного анализа.

На рис. 1 представлены дифрактограммы исследуемого материала до и после воздействия МИП. Рентгенофазовый анализ показал, что в сером чугуна фазовая перестройка происходит, в основном, за счет перераспределения углерода в поверхностном слое. Так, при 1 импульсе облучения, в результате диффузии углерода из феррита, уменьшается интенсивность пиков  $\alpha$ -фазы. При воздействии МИП 3 импульсами наблюдается незначительное увеличение карбидной фазы и образование обезуглероженной ферритной фазы.

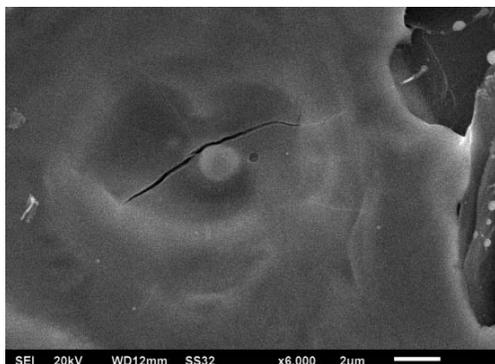


**Рис. 1.** Серый чугун: 1 – исходный; 2 – облученный МИП с  $j = 150$  А/см<sup>2</sup> и  $n = 1$ ; 3 – облученный МИП с  $j = 150$  А/см<sup>2</sup> и  $n = 3$ ; 4 – облученный МИП с  $j = 150$  А/см<sup>2</sup> и  $n = 6$

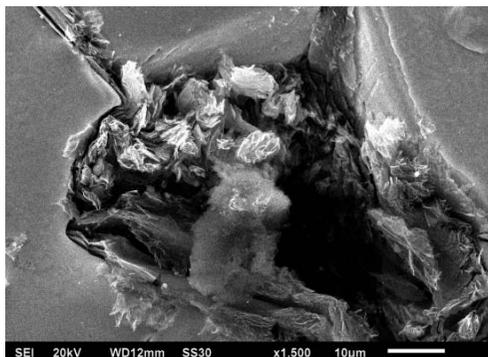
При воздействии МИП с 6-ю импульсами происходит распад цементита на ферритно-графитную смесь, о чем свидетельствует уширение пика (220), соответствующий ферритной фазе.

Возникновение положительных значений нормальных напряжений (1 имп.:  $\sigma = 1,61$  ГПа; 3 имп.:  $\sigma = 0,77$  ГПа; 6 имп.:  $\sigma = 0,26$  ГПа) указывают на существование сжимающих напряжений. Увеличение числа импульсов приводит к уменьшению таких напряжений. Такая обратная зависимость связана, по-видимому, с их частичной релаксацией, выражающейся в образовании микротрещин, расщеплении графитных включений, приводящих к возникновению полостей в области пластинчатого графита (рис. 2).

Микроструктура поверхности серого чугуна до и после воздействия МИП представлена на рис. 3.



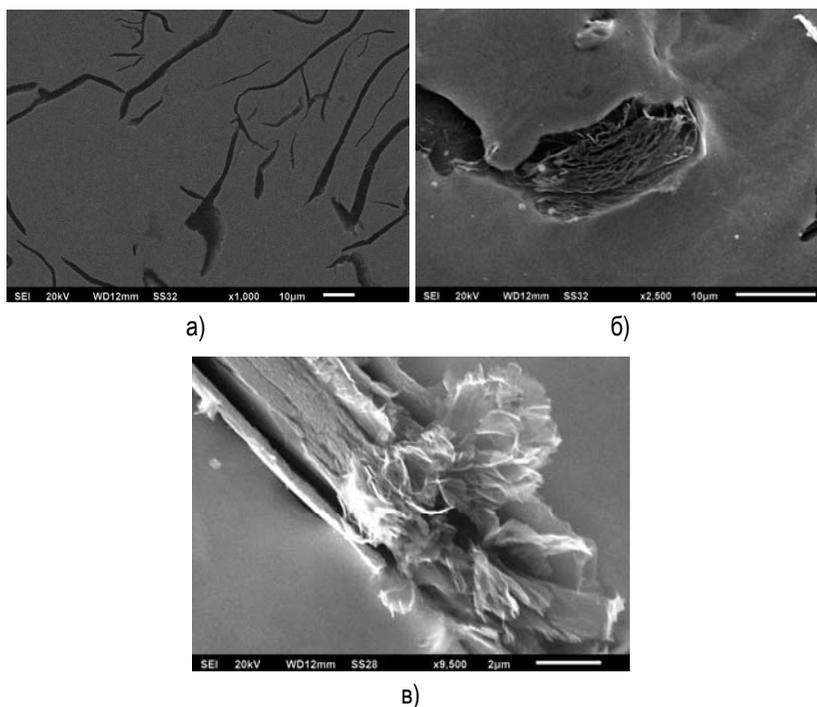
a)



б)

**Рис. 2.** Поверхность серого чугуна после воздействия МИП с плотностью тока  $j = 150$  А/см<sup>2</sup> числом импульсов: а – 3, б – 6

Поверхность необлученного образца (рис. 3а) представляет собой металлическую поверхность с включениями пластинчатого графита. После воздействия 3 импульсами (рис. 3б) видны изменения графитных включений, а именно их расслоение и изменение формы. Металлическая поверхность неоднородна, имеет развитый рельеф, на котором отчетливо просматриваются следы от теплового воздействия МИП. В результате воздействия 6 импульсами на поверхности графитовых включений обнаруживаются углеродные нанотрубки, катализатором роста которых является железо.



**Рис. 3.** Поверхность серого чугуна до и после воздействия МИП:  
 а – исходный, б – после воздействия МИП с  $n = 3$  импульсами,  
 в – после воздействия МИП с  $n = 6$  с импульсами

Из элементного анализа следует, что поверхность после воздействия 3 импульсами химически неоднородна (рис. 3б). Преобладающими химическими элементами являются углерод и желе-

зо, а также выявлены основные примесные элементы – кремний и марганец. После воздействия 6 импульсами анализ показал, что в результате теплового воздействия и выхода примесных элементов на поверхность образца происходит окисление графита (содержание О 4,89 %). Выход неосновных примесных элементов (F, Al, Ca, Cl и Mg) обусловлен значительным увеличением интенсивности диффузионного процесса, образующегося вследствие большой концентрации точечных дефектов (примесей) в поверхностном слое. Изменение процентного содержания углерода при варьировании режимов облучения МИП свидетельствует об увеличении скорости диффузии этого основного химического элемента в поверхностном слое.

Таким образом, диффузия углерода, возникающая вследствие облучения МИП различным числом импульсов, приводит к изменению фазового состава, которое выражается в уменьшении феррита и появлении цементитной фазы. Разрыв Ван-дер-ваальсовых связей между пластинами графита приводит при облучении МИП к формированию углеродистых нанотрубок, катализатором которых является железо. Формирующиеся сжимающие напряжения I-рода уменьшаются с увеличением числа импульсов, что, по-видимому, связано с их релаксацией при образовании микротрещин и расщеплением графитных включений.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Чистяков С.А., Халиков С.В., Яловец А.П.* Исследование формирования упругопластических волн в металлической мишени при воздействии потоков заряженных частиц // ЖТФ. 1993. Т. 63, № 1. С. 31–40.

[2] *Гуляев А.П.* Металловедение: учебник для вузов. 6-изд., перераб. и доп. М.: Металлургия, 1986. 544 с.

---

Яна Николаевна Голубева,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
I курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, 89620320580,  
yana\_gn@mail.ru

# ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ГИДРОКСИЛАПАТИТА, СИНТЕЗИРОВАННОГО В ПРИСУТСТВИИ ЖЕЛАТИНА

Я.А. Калинина

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

Методом осаждения из модельного раствора внеклеточной жидкости синтезированы образцы гидроксилapatита в присутствии 3 % желатина. Проведен изотермический термогравиметрический анализ. Изучены характеристики ГЖА при разных температурах с помощью физических методов анализа.

*Ключевые слова:* гидроксилapatит, желатин, ИК-Фурье спектроскопия, термогравиметрический анализ, рентгенофазовый анализ.

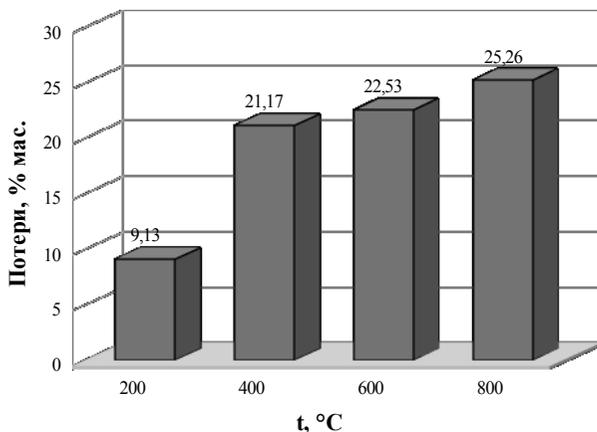
Материалы на основе гидроксилapatита  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  являются аналогом минеральной составляющей костной ткани, проявляют высокую биоактивность и рассматриваются как наиболее перспективные для создания биокомпозитов в медицине. Человеческая кость на 80 % состоит из ГА и на 20 % из коллагена. Поскольку желатин является одним из продуктов гидролиза коллагена, использование его в синтезе приводит к большому родству с минеральной костью. Синтез ГА в присутствии желатина в условиях, приближенных к физиологическим, представляет собой перспективную и актуальную физико-химическую задачу.

Целью работы является изучение термической устойчивости фосфатов кальция, полученных осаждением из модельного раствора внеклеточной жидкости типа SBF.

Синтез 3 % ГЖА осуществляется из раствора, модельная среда которого приближена по электролитному составу к внеклеточной жидкости человека [1].

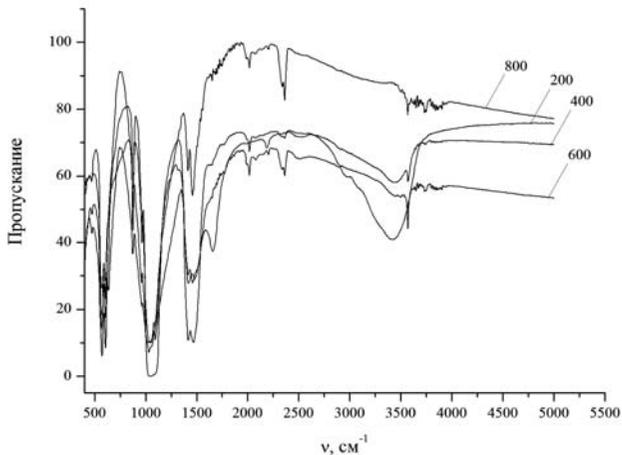
Изучение термических эффектов проводили путем изотермического термогравиметрического анализа (ТГА) [2]. Исследование полученных образцов ГЖА показали непрерывную потерю массы (рис. 1). Как видно из диаграммы ТГА, наибольшая убыль массы наблюдается при 200 °С и 400 °С, что объясняется удале-

нием адсорбционной и химически связанной воды из образцов. При 600 °С наблюдается незначительная убыль массы, тогда как при 800 °С массовые потери увеличились в 2 раза (по сравнению с убылью массы при 600 °С), что говорит об удалении из структуры ГА карбонатных групп.



**Рис. 1.** Диаграмма ТГА образцов ГЖА 3% мас.

Эти данные согласуются с результатами ИК-Фурье спектроскопии (рис. 2).



**Рис. 2.** Результаты ИК-Фурье спектроскопии для образцов 3 % ГЖА обожженных при 200, 400, 600, 800 °С

Структуру ГА определяют следующие полосы: 1040–1080 ( $\nu_3$ ), 960, 840 ( $\nu_2$ ), 602, 574 ( $\nu_4$ ) и 473 ( $\nu_2$ )  $\text{см}^{-1}$ , соответствующие колебаниям фосфатных групп, широкая полоса при 3440–3570  $\text{см}^{-1}$  соответствует деформационным колебаниям ОН<sup>-</sup>-групп и валентным колебаниям адсорбированной воды [3].

При температуре 200 °С наблюдается соответствующая полоса деформационных колебаний С=С связи в области 1658  $\text{см}^{-1}$ . При увеличении температуры до 400 °С наблюдается уменьшение интенсивности пика, а при достижении температуры 600 °С полное его удаление.

По результатам рентгенофазового анализа установлено, что при 200 °С имеем фазу карбонат-гидроксилапатита. При 400 °С наблюдается частичное расщепление пика в области 32 брэгговских углов. При 600 °С расщепление пика в данной области увеличивается. Это температура начала разложения карбонат-группы в ГА. При 800 °С имеем двухфазную систему трикальцийфосфат и карбонат-гидроксилапатит.

## **ВЫВОДЫ**

При проведении термогравиметрического анализа обнаружена постоянная убыль массы с увеличением температуры. Наибольшая убыль массы наблюдается при 200 °С и 400 °С, что связано с удалением адсорбционной и кристаллизационной воды.

В ходе физико-химических анализов (РФА, ИК-Фурье спектроскопия) было установлено, что в результате ТГА наибольшая потеря массы наблюдается в области 200 °С и 400 °С, что объясняется удалением адсорбционной воды и химически связанной воды из структуры ГА, соответственно. Это подтверждается результатами ИК-спектроскопии.

При 200 °С в области 3422  $\text{см}^{-1}$  наблюдается широкая полоса (вода), а при 400 °С интенсивность данной полосы уменьшается, что говорит об удалении воды из ГА. При 600 °С наблюдается образование второй фазы совместно с ГА разложение карбонатной группы карбонатной группы из структуры ГА. При термической обработке 800 °С формируется двухфазная система ГА и  $\beta$ -ТКФ.

Методами ИК-спектрометрии установлено, что при 200 °С в структуре ГА наблюдается присутствие желатиновой фазы (пик

в области  $1758\text{ см}^{-1}$ , что говорит о валентных колебаниях  $\text{C}=\text{C}$ ). При  $400\text{ }^\circ\text{C}$  данная полоса ослабевает, а при  $600\text{ }^\circ\text{C}$  полностью исчезает, что позволяет сделать вывод об удалении желатина из структуры ГА. При  $800\text{ }^\circ\text{C}$  имеем двухфазную систему ГА и  $\beta$ -ТКФ.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Измайлов Р.Р.* Синтез гидроксилапатита при вариации параметров синовиальной жидкости человека / О.А Голованова, С.А. Герк, Т.В. Панова // Всероссийская рабочая химическая конференция «Бутлеровское наследие – 2011»: тезисы доклада г. Казань. С. 133–177.

[2] *Соин А.В., Евдокимов П.В., Вересов А.Г., Путляев В.И.* Синтез и исследование анионмодифицированных апатитов // Международный научный журнал «Альтернативная энергетика и экология». 2007. Т. 1, № 45. С. 130–132.

[3] *Solonenko A.P., Golovanova O.A.* Hydroxyapatite-Brushite mixtures: Synthesis and Physicochemical Characterization // J. Inorganic Chemistry. 2014. Vol. 59, No. 1. P. 12–20.

---

Яна Андреевна Калинина,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
I курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)647787,  
yanika\_k@inbox.ru

# ПЛАНИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА “FLUKA” АДРОННОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ

**А.А. Кангер**

*Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, проф. Г.А. Вершинин*

В программной среде “FLUKA” создана модель облучения злокачественной опухоли большеберцовой кости человека с реальными физическими параметрами. Рассмотрен процесс формирования терапевтического пучка с необходимыми характеристиками. Построена модифицированная кривая Брэгга, получены выходные данные, необходимые для планирования лучевой терапии.

*Ключевые слова:* модифицированная кривая Брэгга, адронная лучевая терапия, “FLUKA”, планирование эксперимента.

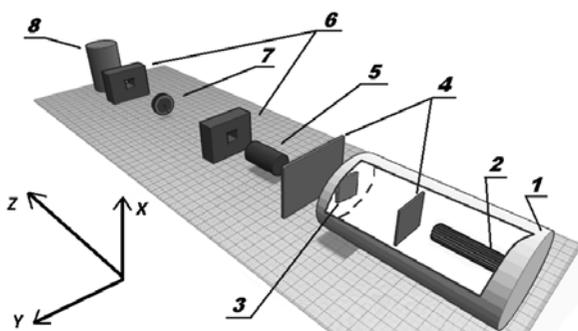
Как правило, в существующих методах лучевой терапии нет необходимой избирательности воздействия излучения на соответствующие мишени – злокачественные образования. В большинстве работ моделируются и анализируются эксперименты по облучению заряженными частицами элементарных объектов без учета химического состава, геометрии и т. д. Существует несколько крупных программных комплексов, способных моделировать процесс прохождения заряженных частиц через вещество. Наиболее совершенные из них позволяют учитывать огромное количество параметров эксперимента, в том числе геометрию мишени и ее состав. В работе используется программный комплекс “FLUKA” [2] совместно с графическим интерфейсом “FLAIR”.

Целью работы является создание достоверной модели для планирования сеансов лучевой терапии. Особое внимание при этом уделялось выбору заряженных частиц и процессу их доставки до области, в которой локализована мишень.

Из-за малой величины отношения входной дозы к дозе в пике перспективным представляется использование тяжелых ионов. На примере моделирования взаимодействия основных используемых в терапии ионов гелия, углерода, неона и аргона с водным

фантомом показано, что все они имеют характерный «хвост», располагающийся в дистальной части кривой Брэгга. Соотношение амплитуд в пике и дистальной части растет с ростом атомного веса ионов пучка и достигает порядка 30 % для неона [1]. Эта особенность перечеркивает ряд несомненных преимуществ данного вида частиц. Ниже приводится схема эксперимента по проведению лучевой терапии объекта.

Пучок, вышедший из ускорителя, до попадания в опухоль должен быть сформирован соответствующим образом. Была смоделирована система, позволяющая формировать нужное изодозное распределение в области мишени. Общий вид установки представлен на рис. 1. Параметры системы транспортировки пучка указаны в таблице.



**Рис. 1.** Схема виртуальной экспериментальной установки:  
 1 – выход ускорителя, 2 – протонный пучок, 3 – выходное окно,  
 4 – рассеивающая система, 5 – деградер, 6 – система коллимации,  
 7 – модулятор, 8 – биологическая ткань

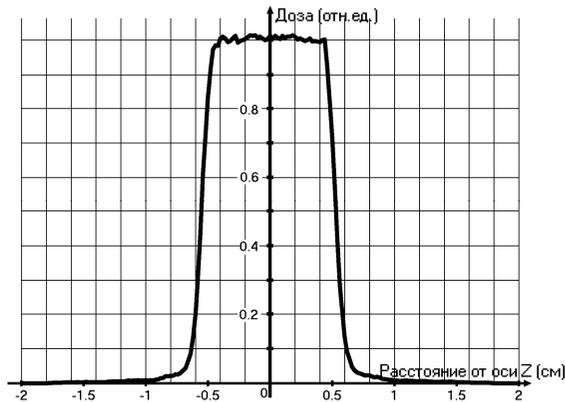
Название элемента	Материал	Расстояние до фантома, мм	Размеры, мм*
Выход ускорителя	Вакуум	2000 (край: 1500)	0x100x500
1-я рассеивающая фольга	Тантал	1800	80x80x0.02
Выходное окно	Каптон	1500	40x40x0.04
2-я рассеивающая фольга	Тантал	1200	100x100x0.01 5

Окончание табл.

Название элемента	Материал	Расстояние до фантома, мм	Размеры, мм*
Деградер	Вода	1000	0x40x20
Коллиматор 1	Сплав Вуда	900	80x80x20
Отверстие коллиматора 1	Воздух	900	10x10x20
Модулятор	ПММА	725÷734	Конструкция из 4х крыльев (толщина крыла: 16÷25)
Коллиматор 2	Сплав Вуда	50	80x80x30
Отверстие коллиматора 2	Воздух	50	10x10x20

\* Для цилиндрических форм выхода ускорителя и деградера размеры представлены в виде  $г \times R \times h$ , где  $г$  – внутренний радиус,  $R$  – внешний радиус,  $h$  – высота цилиндра. Для параллелепипеда размеры представлены в виде  $a \times b \times c$ , где  $a, b$  – размеры в плоскости перпендикулярной пучку,  $c$  – размер в плоскости движения пучка.

Представленная схема эксперимента позволяет сформировать поперечное сечение пучка, необходимое для равномерного облучения опухоли (рис. 2).



**Рис. 2.** Сформированный терапевтический пучок для облучения мишени с шириной 1 см

Применяемый нами ранее метод расчета модифицированной кривой Брэгга [3] работает только для грубых оценок дозного распределения в случае использования метода активного рассеяния. В методе пассивного рассеяния, который мы использовали в процессе создания терапевтического пучка, для достижения протонами соответствующей энергии они должны пройти через поглотитель (слой модулятора определенной толщины), в котором одновременно со снижением энергии происходит и рассеяние пучка. Система коллимации и деградер также будет выбивать часть протонов из пучка, что приведет к снижению дозы в фантоме. Поэтому для получения модифицированной кривой использовался матричный метод, позволяющий учитывать индивидуальные особенности пучка.

Таким образом, в процессе выполнения работы получены выходные данные, необходимые для планирования ЛТ большеберцовой кости, пораженной саркомой Юинга, и создания системы формирования пучка.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Лебедева Ж.С.* Формирование дозных распределений в протонной онкоофтальмологии: дис. ... канд. физ.-мат. наук. ПИЯФ. СПб., 2015.

[2] Пакет “FLUKA”: офиц. сайт. URL: <http://www.fluka.org> (дата обращения: 10.05.2016).

[3] *Jette D., Chen W.* Creating a spread-out Bragg peak in proton beams // *Phys. Med. Biol.* 2011. Vol. 56. P. N131–N138.

---

Александр Александрович Кангер,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
2 курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)647787,  
tashijkeee@gmail.com

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОЛУЧЕВЫХ КАНАЛОВ СВЯЗИ С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМА ESPRIT

В.А. Кузнецов

*Науч. рук. канд. физ.-мат. наук Т.К. Болецкая*

Определение временных задержек и коэффициентов ослабления входного сигнала, является одной из проблем в беспроводной связи и радиолокационном обнаружении. Знание характеристик многолучевых каналов уменьшает частоту появления ошибочных битов и улучшает точность детектирования. Статья посвящена определению характеристик каналов методом, использующим низкоскоростные выборки принимаемых сигналов, основанным на алгоритме ESPRIT.

*Ключевые слова:* каналы с малым уширением, временные задержки, доплеровские сдвиги, множители ослабления, низкоскоростные выборки, алгоритм ESPRIT.

Цель работы – определение временных задержек многолучевого канала связи с помощью метода, основанного на алгоритме ESPRIT.

Пусть передаваемый сигнал  $x(t)$  является последовательностью прямоугольных импульсов  $g(t)$ , следующих друг за другом через промежуток времени  $T$  :

$$x(t) = \sum_{m=1}^{N_{sym}} b[m]g(t - (m-1)T), \quad (1)$$

где

$$g(t) = \begin{cases} 1, & -\gamma T \leq t \leq \gamma T, \\ 0, & t < -\gamma T \quad t > \gamma T, \end{cases} \quad (2)$$

$b[m]$  –  $m$ -й информационный бит,  $N_{sym}$  – число передаваемых битов,  $0 < \gamma < 1$  – число. Тогда отклик  $y(t)$  многолучевого канала с малым уширением на этот сигнал имеет вид:

$$y(t) = \sum_{k=1}^{K_\tau} \sum_{m=1}^{N_{sym}} b[m] a_k[m] g(t - \tau_k - (m-1)T) + n(t) \quad (3)$$

где  $K_\tau$  – число каналов,  $\tau_k$  – задержка в  $k$ -м канале,  $a_k[m]$  – коэффициент ослабления в  $k$ -м канале в промежуток времени от  $(m-1)T$  до  $mT$ ,  $n(t)$  – шум.

Рассмотрим схему определения характеристик многолучевого канала, приведенную на рисунке [1]. Принимаемый сигнал (3) подается на фильтры, число которых равно  $K$ .  $K > K_\tau$ .

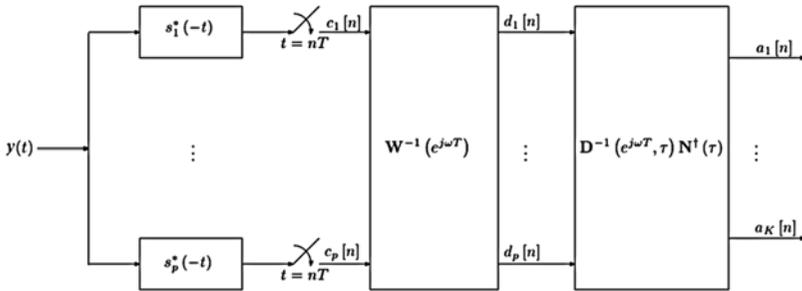


Схема определения характеристик многолучевого канала

После фильтрации выбираются отсчеты сигналов  $c_l(t)$  ( $l=1, \dots, K$ ) в моменты времени, кратные  $T$ . Скорость выборки этой схемы равна  $K/T$  и может быть гораздо меньше частоты Найквиста. Выбираем фильтры так, чтобы их полосы пропускания были ограничены и содержались в области частот:  $\Omega = [0, 2\pi K/T]$ . Тогда для выходов фильтров в частотной области можно написать:

$$\bar{\mathbf{c}}(e^{j\omega T}) = \mathbf{W}(e^{j\omega T}) \mathbf{N}(\tau) \bar{\mathbf{b}}(e^{j\omega T}), \quad (4)$$

где  $\bar{\mathbf{c}}$  – вектор-столбец, элементы которого равны  $C_l(e^{j\omega T})$  – Фурье-образам сигналов  $c_l(t)$ ,  $\mathbf{W}(e^{j\omega T})$  – диагональная матрица, элементы которой определяются по формуле:

$$W_{mm}(e^{j\omega T}) = \frac{1}{T} G\left(\omega + \frac{2\pi}{T}(m-1)\right), \quad (5)$$

$G(\omega)$  – Фурье-образ функции  $g(t)$ ,  $\mathbf{N}(\tau)$  – матрица Вандермонда, элементы которой определяются так:

$$N_{mk}(\tau) = e^{-j\frac{2\pi}{T}(m-1)\tau_k}, \quad (6)$$

$\vec{b}$  – вектор-столбец, элементы которого  $B_k$  выражаются через  $A_k(e^{j\omega T}) = \sum_{m=1}^{N_{sym}} a_k[m] e^{-j\omega m T}$  и задержки:

$$B_k(e^{j\omega T}) = e^{j\omega\tau_k} A_k(e^{j\omega T}). \quad (7)$$

Будем считать, что Фурье-образ  $g(t)$  одинаков при всех частотах:  $G(\omega) = T$ . Тогда  $\mathbf{W}(e^{j\omega T})$  – единичная матрица.

$\mathbf{N}(\tau)$  не зависит от  $\omega$ , поэтому из линейности преобразования Фурье следует выражение, связывающее последовательности  $\vec{c}[n]$  и  $\vec{b}[n]$ :

$$\vec{c}[n] = \mathbf{N}(\tau) \vec{b}[n], \quad (8)$$

где  $\vec{c}$  – вектор-столбец, элементы которого равны выборкам сигналов на выходах фильтров  $c_i(nT)$ .

Для определения задержек  $\tau_k$  воспользуемся алгоритмом ESPRIT [2], одним из алгоритмов, так называемых методов подпространств. Введем корреляционную матрицу  $\mathbf{R}_{cc}$ :

$$\mathbf{R}_{cc} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \vec{c}[n] \vec{c}^H[n]. \quad (9)$$

Выполняем ее сингулярное разложение. Введем  $\mathbf{E}$  – матрицу, столбцы которой равны левым сингулярным векторам, соответствующим ненулевым сингулярным значениям матрицы  $\mathbf{R}_{cc}$ . Обозначим  $\mathbf{E}_\downarrow$  матрицу, полученную из матрицы  $\mathbf{E}$ , вычеркиванием из нее последней строки. Обозначим  $\mathbf{E}_\uparrow$  матрицу, полученную из матрицы  $\mathbf{E}$ , вычеркиванием из нее первой строки.

Определим матрицу  $\Phi$  следующим образом:

$$\Phi = \mathbf{E}_\downarrow^H \mathbf{E}_\uparrow. \quad (10)$$

Вычислив собственные значения  $\lambda_k$  матрицы  $\Phi$ , можно определить задержки:

$$\hat{\tau}_k = -\frac{T}{2\pi} \arg(\lambda_k). \quad (11)$$

Расчеты выполнены при следующих параметрах:  $N_{sym} = 100$ ,  $T = 1$ ,  $\gamma = 0.025$ . Коэффициенты  $a_k[m]$  моделировались с помощью модели Джейкса [1]. Отношение сигнал/шум принималось равным 15 дБ. Число каналов равно 4. Число используемых фильтров – 5. Полученные для задержек результаты равны средним по 1000 экспериментов. Максимальная относительная погрешность при определении задержек составила 24,07 %.

В дальнейшем использованный в данной работе метод предполагается использовать для определения характеристик каналов, не являющихся каналами с малым уширением.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Gedalyahu K.* Time delay estimation from low rate samples: a union of subspaces approach / K. Gedalyahu, Yonina C. Eldar, IEEE Transaction on signal processing. 2010. Vol. 58, No. 6.

[2] *Kailath T.* ESPRIT – estimation of signal parameters via rotational invariance techniques / T. Kailath, R. Richard, IEEE Transactions on acoustics, speech and signal processing. 1989. Vol. 37, No. 7.

---

Владимир Александрович Кузнецов,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
I курс магистратуры, физический факультет,  
644077, г. Омск, пр. Мира, 55-А,  
volodya\_KZ55@mail.ru

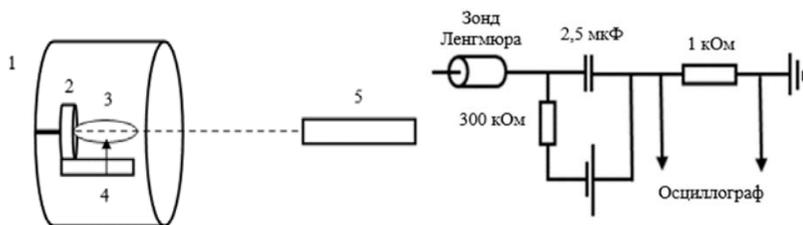
# ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ ЗОНДОВЫМ МЕТОДОМ ПРИ НАПЫЛЕНИИ ТОНКИХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ПЛЕНОК УВСО

А.С. Малышев

Науч. рук. канд. физ.-мат. наук, доц. С.А. Сычев

Метод лазерной абляции стал широко используемым методом для напыления тонкопленочных ВТСП материалов с заданной стехиометрией. Конкретные параметры плазмы сильно влияют на качество получаемых пленок. В работе использовался зондовый метод для исследования лазерной плазмы, используемой для напыления ВТСП пленок. В разных частях плазменного факела были получены распределения электронной, ионной концентраций, а также электронной температуры.

Для диагностики лазерной плазмы была разработана и реализована вакуумная установка с использованием твердотельного импульсного YAG:Nd лазера (рис. 1). Вакуумная камера откачивалась форвакуумным насосом, где создавалось давление ниже 1 торр. Для получения плазмы использовалось лазерное излучение 1064 нм с заданной энергией в импульсе 120 мДж. Длительность импульса 12 нс. Плотность мощности на поверхности мишени была  $6 \cdot 10^9$  Вт/см<sup>2</sup>.



**Рис. 1.** Вакуумная установка для изучения лазерной плазмы и электрическая эквивалентная схема: 1 – вакуумная камера, 2 – мишень, 3 – плазменный факел, 4 – платиновый зонд, 5 – лазер YAG:Nd

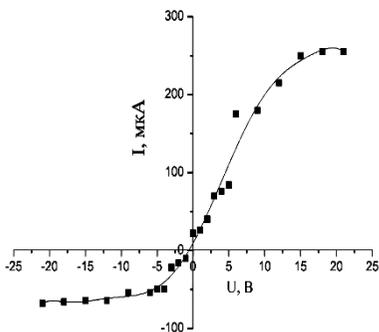
Для измерения концентрации заряженных частиц и электронной температуры использовался однозондовый метод Ленгмюра.

гмюра. Условия применимости зонда Ленгмюра для диагностики лазерной плазмы можно записать в виде:

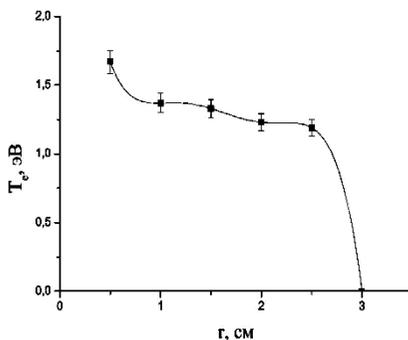
$$\begin{aligned} L > x_p >> r_D, \\ T_e >> T_i, \\ |U| > |U_{\text{sat}}|, \\ \varepsilon_i >> k_B T_e, \end{aligned}$$

где  $L$  – расстояние от зонда до источника плазмы,  $x_p$  – размер зонда,  $T_e$  и  $T_i$  – электронная и ионная температуры,  $U$  – напряжение на зонде,  $U_{\text{sat}}$  – напряжение насыщения,  $\varepsilon_i$  – кинетическая энергия ионов [1].

Изменение расстояния зонд-мишень производилась в пределах 0,5–3 см, что соответствует размеру лазерного факела при напылении тонких сверхпроводящих пленок. Потенциал зонда менялся в пределах от +20 до -20 В. Ток регистрировался осциллографом С8-13. Полученные данные обрабатывались с помощью персонального компьютера.



**Рис. 2.** ВАХ зонда Ленгмюра в факеле лазерной плазмы мишени YBCO



**Рис. 3.** Зависимость электронной температуры от расстояния зонд-мишень

Для вычисления электронной температуры бралась электронная часть ВАХ, где вклад ионов невелик и почти весь ток электронный. По наклону графика можно определить температуру электронов.

$$T_e = \frac{e}{k_e} \cdot \frac{1}{\text{tg}\psi},$$

где  $\psi$  – угол наклона прямолинейного участка графика к оси напряжения [2].

Измерив, ионный ток насыщения, можно определить концентрацию ионов:

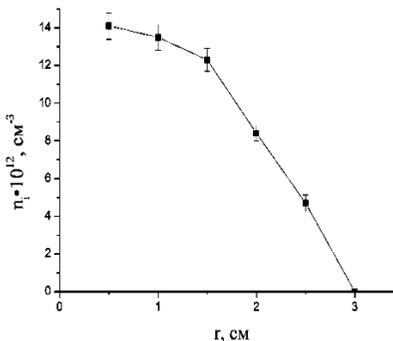
$$n_i = \frac{I_i}{cSe} \sqrt{\frac{M_i}{2k_B T_e}},$$

где  $n_i$  – концентрация ионов,  $M_i$  – масса иона,  $S$  – собирающая поверхность зонда. Для цилиндрического зонда  $c = 0.4$ , а собирающая поверхность рассчитывается по формуле:

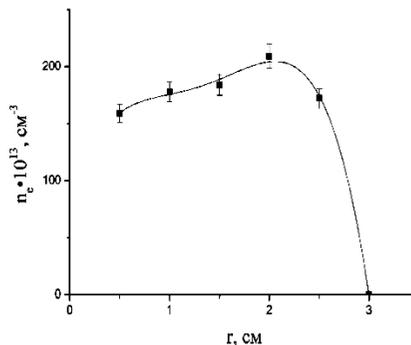
$$S = 2\pi r_i l,$$

где  $r_i$  – радиус собирающей поверхности,  $l$  – длина зонда [3].

Результаты определения электронной температуры представлены на рис. 3. Видно, что температура электронов уменьшается при увеличении расстояния от зонда до мишени и резко падает на краю факела.



**Рис. 4.** Зависимость концентрации ионов от расстояния зонд-мишень



**Рис. 5.** Зависимость концентрации электронов от расстояния зонд-мишень

На рис. 4 показано, как уменьшается ионная концентрация.

Из рис. 5 видно, что зависимость концентрации электронов по мере удаления от мишени, медленно возрастает, достигает максимума, а к краю лазерного факела резко уменьшается.

Из анализа полученных данных, можно сделать выводы, что осаждение сверхпроводящих пленок, с сохранением стехиометрии, происходит в области достаточно низкой электронной температуры и низкой концентрации ионов и электронов. Сразу после вылета из высокоэнергетической зоны, начинается интенсив-

ное образование молекулярных ионов. И только на краю плазменного факела (2,5–3 см) ионы начинают интенсивно рекомбинировать с электронами, образуя нейтральные кластеры, которые, осаждаясь, обеспечивают рост сверхпроводящей пленки. Видимо, именно в этой области кластеры наиболее интенсивно присоединяют кислород, что и позволяет получать сверхпроводящие тонкие пленки YBCO с необходимыми свойствами.

### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Хайдуков К.В., Хайдуков Е.В., Лотин А.А., Рочева В.В., Зувев Д.А., Храмова О.Д., Новодворский О.А.* Зондовые исследования лазерного эрозионного факела. Волгоград. 2010. 1–2 с.

[2] *Козлов О.В.* Электрический зонд в плазме. М.: Атомиздат, 1969. 180 с.

[3] *Гнап А.К., Колесник В.П., Онищенко В.В., Колесник В.В., Гнап Б.А., Коваленко Н.И., Дубровин Ю.В.* Особенности применения зондовых методик в скрещенных электрическом и магнитном полях. Харьков. 2006. 191 с.

---

Александр Сергеевич Малышев,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
II курс магистратуры, физический факультет,  
644077, Омск, пр. Мира 55-А, +79087925957,  
malysh1993@yandex.ru

**Секция**  
**ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ**

---

**ИНТЕРВАЛЬНАЯ ОЦЕНКА СУММАРНОГО СОДЕРЖАНИЯ  
АНТИОКСИДАНТОВ ПОЛИФЕНОЛЬНОГО ТИПА ПО МЕТОДУ FRAP**

**Н.С. Бриленок, М.В. Бахарева**

*Науч. рук. д-р хим. наук, проф. В.И. Вершинин*

Оценки суммарного содержания полифенолов ( $c_{\Sigma}$ ) по методу FRAP часто не точны из-за разной чувствительности определения аналитов, неизвестного соотношения их концентраций, неверного выбора стандарта и влияния посторонних веществ (особенно комплексантов). Предложены способы снижения соответствующих систематических погрешностей. Новый алгоритм интервальной оценки  $c_{\Sigma}$  позволяет исключить влияние природы стандарта и соотношения аналитов. Применение интервальных оценок позволяет объективно сопоставлять антиоксидантную ценность разных продуктов (вина, чай и др.).

*Ключевые слова:* антиоксиданты, полифенолы, комплексанты, метод FRAP, суммарное содержание антиоксидантов, интервальные оценки, анализ пищевых продуктов.

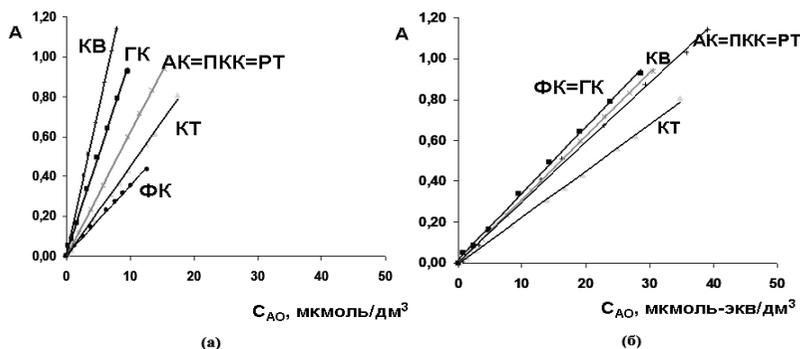
В анализе пищевых продуктов и биообъектов суммарное содержание антиоксидантов (преимущественно полифенолов) оценивают в виде интегрального показателя АОА (антиоксидантная активность) по методу FRAP [2]. В ходе анализа измеряют обобщенный аналитический сигнал полифенолов и пересчитывают его на концентрацию стандартного вещества  $X_{\text{ст}}$ . Величина АОА может в несколько раз отличаться от действительной величины  $c_{\Sigma}$  из-за разной чувствительности определения индивидуальных по-

лифенолов, неверного выбора  $X_{ст}$ , а также из-за влияния посторонних веществ.

Цель данной работы – повышение точности оценки  $c_{\Sigma}$  по методу FRAP.

Определяли значения АОА модельных смесей и некоторых пищевых продуктов по известным методикам, в пересчете на разные стандарты, по градуировочному графику или по способу добавок. В состав модельных смесей входили семь полифенолов, часто встречающихся в пищевых продуктах, а также мешающие вещества (комплексанты, белки, углеводы).

Коэффициенты чувствительности при определении молярных концентраций разных полифенолов различаются примерно в три раза (рис. 1а), поэтому систематическая погрешность оценки  $c_{\Sigma}$  (далее  $\Delta c, \%$ ) может достигать до 100 %. Хорошим способом нивелирования чувствительности может быть переход к оценке содержания антиоксидантов не в моль/л, а в моль-экв/л (рис. 1б). Переход исключает влияние разной стехиометрии взаимодействия полифенолов с Fe(III), что существенно снижает погрешность оценки  $c_{\Sigma}$ .



**Рис. 1.** Вееры градуировок при определении молярных (а) и нормальных (б) концентраций разных антиоксидантов (здесь и далее: кверцетин (КВ), галловая кислота (ГК), аскорбиновая кислота (АК), рутин (РК), катехин (КТ), протокатеховая кислота (ПКК), феруловая кислота (ФК))

Теоретические расчеты показывают, что при прочих равных условиях минимальный уровень  $\Delta c$  будет достигаться при использовании в качестве стандарта аскорбиновой или галловой кислоты, что и было подтверждено в эксперименте. Кроме того, для ни-

велирования чувствительности определении разных полифенолов оптимизировали концентрации реагентов и время экспозиции. Совместное применение разных приемов в анализе модельных смесей позволило снизить  $\Delta c$  до 10–20 %. Исключить  $\Delta c$  не удастся из-за непредсказуемого состава смесей полифенолов в единичных пробах. Недавно в ОмГУ разработан алгоритм [2], позволяющий по величине любого интегрального показателя ( $c^*$ ) рассчитать интервал возможных значений  $c_{\Sigma}$ . Если погрешность оценки  $c_{\Sigma}$  связана с разной чувствительностью определения однотипных аналитов, то, независимо от соотношения аналитов в данной пробе, значения  $c_{\Sigma}$  должны принадлежать интервалу

$$\frac{c^* K_{CT}}{K_m} \leq c_{\Sigma} \leq \frac{c^* K_{CT}}{K_1} \quad (2)$$

где  $K_m$  и  $K_1$  – максимальный и минимальный коэффициенты чувствительности при определении аналитов данного типа по данной методике,  $K_{CT}$  – коэффициент чувствительности для  $X_{CT}$ . Ширина интервала тем больше, чем шире веер градуировок для данной методики измерения сигнала.

Мы применили общий алгоритм [1] для оценки суммарного содержания полифенолов в модельных смесях и пищевых продуктах. Полученные данные подтвердили независимость интервальной оценки от соотношения компонентов пробы и выбора того или иного стандартного вещества (табл.).

**Оценки суммарного содержания антиоксидантов  
в смеси АК+КТ+ПКК ( $c_{\Sigma} = 8,0$  мкмоль-экв/л),  
полученные с применением разных стандартных веществ**

$X_{cm}$	$AOA$	$\Delta c, \%$	<i>Интервальная оценка, <math>c_{\Sigma}</math></i>
ФК	5,2	-35	5,2–10,8
ГК	6,4	-20	5,2–10,8
АК	7,5	-6	5,3–10,9
КТ	8,6	+8	5,2–10,8
КВ	8,9	+11	5,2–10,8
ПКК	9,0	+12	5,3–10,9
РТ	10,9	+36	5,3–10,8

Правильная интервальная оценка  $c_{\Sigma}$  возможна только в том случае, когда другие компоненты пробы заранее отделены, либо не

вливают на чувствительность определения аналитов данного типа по данной методике. Мы установили, что на чувствительность определения полифенолов по методу FRAP не влияют соли (кроме сильных окислителей или восстановителей), углеводы, а также небольшие количества монофенольных соединений. Сильное влияние оказывают белки, реагирующие с полифенолами. Чувствительность определения полифенолов резко падает в присутствии избытка фторидов, фосфатов, тартратов и других комплексантов, содержащихся в пищевых продуктах и связывающих Fe(III) в прочные комплексные соединения. В присутствии вина или чая чувствительность определения полифенолов также снижается. Мешающее влияние комплексантов может быть значительно снижено при переходе от расчета АОА по градуировочному графику к расчету того же показателя по способу добавок. При этом величина АОА приближается к действительному значению  $c_x$ . Разработанные на этой основе методики использованы для экспрессной оценки суммарного содержания антиоксидантов в чае, винах, кофе, соках и других пищевых продуктах. Как и в случае модельных смесей, интервальная оценка состава пробы не зависит от выбора стандартного вещества и соотношения разных полифенолов, что позволяет объективно сопоставлять антиоксидантную ценность разных пищевых продуктов.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Вершинин В.И., Исаченко Н.А., Бриленок Н.С.* Методология анализа неразделенных смесей. Интервальные оценки суммарного содержания однотипных аналитов // ЖАХ. 2016. № 4. С. 369–376.

[2] *Цюпко Т.Г.* Определение суммарного содержания антиоксидантов методом FRAP // Аналитика и контроль. 2011. № 3. С. 287–289.

---

Наталья Сергеевна Бриленок,  
II курс аспирантуры, химический факультет,  
Маргарита Вячеславовна Бахарева,  
студент 4 курса, химический факультет,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)642485,  
brilenok@list.ru

# ОЦЕНКА СУММАРНОГО СОДЕРЖАНИЯ АРЕНОВ В ВОДЕ МЕТОДОМ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ В СОЧЕТАНИИ С АЛГОРИТМОМ ПРОЕКЦИИ НА ЛАТЕНТНЫЕ СТРУКТУРЫ (PLS)

П.А. Бурюкина

*Науч. рук. д-р хим. наук, проф. И.В. Власова*

Суммарное содержание моноаренов в воде может быть определено по УФ-поглощению гексановых экстрактов вод с обработкой данных методом проекции на латентные структуры (PLS). В работе были использованы модели PLS-1 и PLS-2. Показано, что обе модели позволяют определять суммарную концентрацию аренов в тестовых смесях с погрешностями не более 4% отн. ( $S_r$  не более 0,01). Проведен анализ экстрактов водных растворов аренов. Неполнота извлечения аренов требует введения поправочного коэффициента, после чего суммарное содержание аренов удается определить по модели PLS -1 с погрешностью порядка 10 % ( $S_r$  не более 0,03).

*Ключевые слова:* ароматические углеводороды, УФ-спектрометрия, метод проекции на латентные структуры.

Нефть и продукты ее переработки являются типичными загрязнителями окружающей среды и в системах контроля качества вод разного типа их относят к обязательно нормируемым компонентам [2–4]. Арены являются неотъемлемой частью нефтепродуктов. Учитывая особенную токсичность некоторых ароматических углеводородов, важно оценивать их содержание отдельно от остальных нефтепродуктов. УФ-спектрометрия является наиболее дешевым и экспрессным методом для решения этой задачи, так как все арены хорошо поглощают в УФ-области. В последние годы УФ-спектрометрию в сочетании с хемометрической обработкой данных, например, методом проекции на латентные структуры (PLS), успешно применяют для определения индивидуальных органических веществ [1].

Целью настоящей работы является оценка возможности суммарного УФ-спектрофотометрического определения аренов в водах с применением моделей PLS-1 и PLS-2.

**Экспериментальная часть.** В качестве объектов исследования были взяты растворы ароматических углеводов в н-гексане разного качественного и количественного состава, содержащие от 3 до 6 компонентов, а также модельные растворы аренов в воде. Все индивидуальные вещества: бензол (Б), толуол (Т), этилбензол (Э), о- и п-ксилолы (О, П), кумол (К), а также гексан были марки «х.ч.». Исходные растворы с концентрациями порядка  $1,7 \text{ мг/см}^3$  готовили путем разбавления гексаном точной навески индивидуального вещества объемом  $0,1 \text{ см}^3$  в колбе на  $50 \text{ см}^3$ . Рабочие растворы смесей готовили из исходных путем разбавления аликвот гексаном в мерных колбах на  $25 \text{ см}^3$ . Суммарное содержание аренов варьировали от  $0,23$  до  $0,42 \text{ мг/см}^3$ . Экстракцию аренов из водного раствора объемом  $500 \text{ см}^3$  проводили гексаном объемом  $10 \text{ см}^3$  однократно в течение 10 минут. Полученный экстракт доводили растворителем до  $10 \text{ см}^3$ . Все спектры растворов регистрировали на спектрофотометре СФ-2000 в кварцевых кюветках толщиной 1 см в диапазоне  $240\text{--}280 \text{ нм}$  с шагом 1 нм, против чистого гексана. Для обработки полученных данных использовали программу UNSCRAMBLER CLIENT 9.8. В программу вводили концентрации компонентов в смесях, а также их суммарное содержание ( $C_{\Sigma}$ ) и оптические плотности смесей во всем спектральном диапазоне. Затем выбирали смеси для градуировочного набора и варьировали число главных компонент (ГК). Поскольку качественный состав реальных объектов зачастую неизвестен, в градуировочный набор включали смеси с наибольшим числом аренов, т. е. 6-компонентные. Оптимальным оказался объем из 14 смесей. При построении модели PLS-1 использовали суммарную концентрацию аренов. Модель PLS-2 строили с учетом содержания каждого компонента. Далее с помощью функции Predict по моделям PLS-1 и PLS-2 находили концентрации аренов в одних и тех же тестовых смесях. Правильность определения суммы аренов в единичной тестовой смеси оценивали по величине *относительной погрешности*

$$\delta = \frac{C^* - C_{\Sigma}}{C_{\Sigma}} \cdot 100\%, \quad (1)$$

где  $C_{\Sigma}$  и  $C^*$  – заданные и найденные суммарные концентрации, соответственно.

Для всех тестовых смесей вычисляли также усредненную относительную погрешность:

$$\delta_{cp} = \sqrt{q^{-1} \cdot \sum_{i=1}^q \delta_i^2}, \quad (2)$$

где  $\delta_i^2$  – квадрат относительной погрешности  $i$ -ой тестовой смеси,  $q$  – число тестовых смесей

**Результаты и обсуждение.** Построенные модели PLS-1 и PLS-2 применили для определения суммарной концентрации компонентов в тестовых растворах, содержащих от трех до шести аренов (табл. 1).

Таблица 1

**Результаты анализа некоторых смесей  
по моделям PLS-1 и PLS-2 (ГК = 7, Р = 0,95)**

Состав	$C_{\Sigma}$ , мг/дм <sup>3</sup>	PLS-1			PLS-2		
		$C^*$ , мг/дм <sup>3</sup>	$\delta$ , %	$Sr$	$C^*$ , мг/дм <sup>3</sup>	$\delta$ , %	$Sr$
Б,Т,Э	27,1	27,2	0,6	0,005	27,9	3,2	0,004
Т,Э,К	42,0	41,7	-0,7	0,004	41,6	-1,1	0,004
Б,Т,О,П	22,9	22,6	-1,4	0,013	23,3	1,6	0,013
Б,Т,П,К	35,3	34,7	-1,7	0,003	34,8	-1,3	0,003
Б,Т,Э,О,П,К	24,8	25,0	0,8	0,005	25,3	2,1	0,008
$\delta_{cp}$ , % ( $q = 65$ )		1,2			2,0		

Результаты, полученные по обеим моделям, хорошо согласуются между собой, однако PLS-1 позволил оценить суммарное содержание аренов в модельных смесях с меньшими погрешностями.

Далее проанализировали экстракты аренов из водных растворов методом PLS-1. Оказалось, что оценка суммарного содержания аналитов проходит точнее при ГК = 4 вместо 7, что, вероятно, связано с наличием шума в более старших компонентах. Также выяснилось, что результаты имеют одну и ту же по знаку и близкую по величине систематическую погрешность, связанную с неполнотой извлечения аренов, что дает право ввести поправочный коэффициент (табл. 2).

Таблица 2

**Результаты анализа экстрактов без учета ( $K = 1$ )  
и с учетом ( $K = 2,7$ ) поправочного коэффициента**

Состав	$C_{\Sigma}$ , мг/дм <sup>3</sup>	$K=1$			$K=2,7$		
		$C^*$ , мг/дм <sup>3</sup>	$\delta, \%$	$Sr$	$C^*$ , мг/дм <sup>3</sup>	$\delta, \%$	$Sr$
Т, Э, П, К	39,0	14,0	<b>-64,1</b>	0,027	41,5	<b>6,4</b>	0,027
Б, Т, Э, К	38,0	14,3	<b>-62,4</b>	0,005	40,0	<b>5,3</b>	0,005
Б, Т, Э, П, К	50,0	16,3	<b>-67,5</b>	0,009	45,5	<b>-8,9</b>	0,009

Таким образом, построенная модель PLS-1 при  $GK = 4$  позволяет определять суммарную концентрацию аренов с относительными погрешностями, не превышающими 12 %, и может быть использована для анализа гексановых экстрактов из природных вод.

### ЛИТЕРАТУРА

[1] Власова И.В., Бурюкина П.А. Спектрофотометрический анализ смесей, содержащих макро- и микрокомпоненты, с применением метода PLS // Вестн. Ом. ун-та. 2012. № 2. С. 116–120.

[2] ИК-спектрометрическое определение нефтепродуктов в водных средах с их экстракционно-хроматографическим концентрированием в процессе пробоотбора / Булатов А.В. [и др.] // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2011. Т. 77. № 2. С. 15–17.

[3] Илларионова Е.А., Сыроватский И.П. Анализ сточных вод: учеб. пособие / ГБОУ ВПО ИГМУ Минздрава РФ. Иркутск, 2013. 53 с.

[4] ПНД Ф 14.1:2:4.128-98. Методика измерений массовой концентрации нефтепродуктов в пробах природных, питьевых, сточных вод на анализаторе жидкости «Флюорат-02» / ФЦАО. М., 2012. 19 с.

---

Полина Анатольевна Бурюкина,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского  
Соискатель, 644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812) 642410  
appolinariya2006@mail.ru

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ СИЛИКАТСОДЕРЖАЩИХ ГИДРОКСИЛАПАТИТОВ

А.В. Зайц

*Науч. рук. д-р геол.-минерал. наук, проф. О.А. Голованова*

Методами химического, рентгенофазового анализом, а также ИК-Фурье-спектроскопии и оптической микроскопии установлено образование кремний-структурированного гидроксилапатита с различной степенью замещения фосфатных групп на силикатные группы. Термическая стойкость образцов возрастает с увеличением количества кремния в Si-ГА. Наибольшая потеря массы наблюдается при температурах 25–400 °С, что связано с удалением адсорбционной и кристаллизационной воды и легколетучих примесей. Показано, что полученные модифицированные апатиты обладают дефектной структурой и кристаллизуются в нанокристаллическом состоянии.

*Ключевые слова:* гидроксилапатит, силикат-ионы, кремнийсодержащий гидроксилапатит, внеклеточная жидкость, структура, фазовый состав, биорезорбируемость, термические эффекты.

Известно, что кремний играет связующую роль в физиологических процессах роста и перестройки костной и хрящевой ткани, поэтому разработка различных методов синтеза кремний-замещенного гидроксилапатита (Si-ГА) представляет собой актуальную физико-химическую задачу [2–5]. Для достижения более полного физиологического отклика организма при восстановлении поврежденной костной ткани химическое модифицирование гидроксилапатита следует проводить в растворах, приближенных к физиологическим условиям в организме человека.

Важной характеристикой синтетически полученных Si-ГА является их термическая устойчивость [6]. Установлено, что при термической обработке биологической кости при 1000 °С формируется кремний-магний-замещенный оксиапатит, который при охлаждении трансформируется в гидроксилапатит, сохраняет сбалансированный состав естественных микропримесей, поддерживающих стабильность структуры, фазового и химического состава.

ва, что обеспечивает лучшие характеристики биопокровов на титановых имплантатах при любых способах нанесения (электрохимический, плазменный, шликерный). Также немаловажным фактором является то, что независимо от степени текстурированности и стехиометрии образца Si-ГА достигается нанотвердость в пределах от 11 до 12 ГПа, термическая стабильность, равномерность химического состава, но самым главным является сохранение биоактивности, что позволяет всесторонне использовать данные образцы [7].

Как известно, кремний-замещенный гидроксилapatит термически устойчивее, чем незамещенный гидроксилapatит (ГА) [6]. Данный факт позволяет утверждать, что образцы кремний-замещенного гидроксилapatита являются перспективным материалом для их использования в медицине.

Цель работы – исследование процесса термического превращения образцов на основе Si-ГА, полученных осаждением из модельного раствора внеклеточной жидкости типа SBF, SBF +  $\text{SiO}_4^{4-}$  при варьировании концентрации и природы поставщика силикат-ионов.

В качестве прототипа внеклеточной жидкости был использован модельный раствор SBF (Simulated Body Fluid). Твердые фазы получали методом осаждения из водных растворов, где исходными компонентами системы были использованы растворы  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{MgCl}_2$ ,  $\text{K}_2\text{HPO}_4$ ,  $\text{NaHCO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{NaCl}$  [1].

В качестве основных соединений – поставщиков силикатных групп были выбраны  $\text{Na}_2\text{SiO}_3$  и тетраэтоксисилан (ТЭС). Добавку силикат-ионов вводили в виде  $\text{Na}_2\text{SiO}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  и спиртового раствора ТЭС, при этом массовое содержание кремния варьировали в интервале 0.5÷5.0 %. Синтез проводили при комнатной температуре ( $t = 25^\circ\text{C}$ ). По истечении 48 часов осадки отфильтровывали под вакуумом, сушили при  $80^\circ\text{C}$ , взвешивали и исследовали с применением группы физико-химических методов.

Твердые осадки анализировали методами ИК-Фурье-спектроскопии и рентгенофазового анализа (РФА) – выполняли качественный и количественный фазовый анализ, а также расчет размеров кристаллитов (областей когерентного рассеяния – ОКР). Морфологию осадков изучали с помощью микроскопа МБР-1. В надосадочных жидкостях после полного отделения твердой фазы

потенциометрическим методом измеряли рН и концентрацию ионов  $\text{Ca}^{2+}$ . Фотометрическим методом определяли остаточные концентрации в растворе фосфат-ионов в виде молибденовой сини, силикат-ионов по методике определения в виде желтой формы молибденкремневой кислоты на приборе КФК-2. Далее был проведен термогравиметрический анализ, температура прокаливания составляла от 2000 °С до 1000 °С с шагом в 200 °С.

Результаты рентгенофазового анализа полученных твердых фаз свидетельствуют об образовании гидроксилapatита [1; 6], при этом другие фосфаты кальция не обнаружены. При повышении концентрации силикат-ионов в системе наблюдается уширение пиков в области  $2\theta = 25^\circ - 35^\circ$ , что обусловлено слабой степенью кристалличности образцов.

Размеры кристаллитов полученных модифицированных гидроксилapatитов составляют  $6.1 \div 7.1$  нм, что указывает на образование соединения в нанокристаллическом состоянии.

Методами химического анализа надосадочной жидкости по окончании минерализации твердой фазы установлено присутствие ионов кремния в полученных порошках. Содержание ионов кремния значительно возрастает при увеличении исходной концентрации силикат-ионов в системе, что приводит к снижению соотношения  $\text{Ca}/\text{P}+\text{Si}$ . Соотношение  $\text{Ca}/\text{P}$  в синтезируемых соединениях превышает заданное значение 1.67, характерное для стехиометрического гидроксилapatита, и соответствует фазе кальций-избыточного ГА. Это свидетельствует об уменьшении количества фосфат-ионов в полученных твердых фазах, что, по нашему мнению, связано с возможным замещением фосфатных групп на силикатные.

Исследование полученных образцов модифицированного гидроксилapatита методом термогравиметрического анализа показало непрерывную потерю массы. Кремнийсодержащие ГА, образованные в среде силиката натрия, характеризуются наибольшей термической стабильностью. Установлено, что при росте содержания кремния в твердой фазе суммарная потеря массы в процессе нагревания до 1000°С снижается. Увеличение содержание силикат-ионов в ГА благоприятно сказывается на термической активности образцов. Таким образом, наличие в структуре гидро-

ксилапатита  $\text{SiO}_4^{4-}$ -группировок повышает термическую стабильность материала на его основе.

### **Выводы:**

1. Методами химического анализа, РФА, ИК-Фурье спектроскопии установлено образование кремний-замещенного гидроксилапатита из модельного раствора внеклеточной жидкости человека.

2. Термическая стойкость образцов возрастает с увеличением количества кремния в Si-ГА.

3. Показано, что полученные модифицированные апатиты обладают дефектной структурой и кристаллизуются в нанокристаллическом состоянии.

### **ЛИТЕРАТУРА**

[1] Голованова О.А., Бердинская М.В., Зайц А.В., Дроздов В.И., Леонтьева Н.Н., Антоничева Н.В. Ж. Структурной химии. 2014. № 5. Т. 55, 992.

[2] Kokubo T., Kushitani H., Sakka S., Kitsugi T., Yamamuro T. J. Biomed. Mater. Res. 1990, 24, P. 721.

[3] Carlisle E.M. 1970, J. Science. V. 167, P. 279.

[4] Соин А.В., Евдокимов П.В., Вересов А.Г., Путьяев В.И. Международный научный журнал «Альтернативная энергетика и экология». 2007. Т. 1, № 45. С. 130.

[5] Сафронова Т.В., Путьяев В.И., Сергеева А.И., Куненков Э.В., Третьяков Ю.Д. Ж. Доклады академии наук. 2009. № 4. С. 491.

[6] Solonenko A.P., Golovanova O.A. J. Inorganic Chemistry. 2013. V. 58, No. 12. P. 1420.

[7] Yongsheng Wang, Sam Zhang, Xianting Zeng, Kui Cheng, Min Qian, Wenjian Weng. J. Materials Science and Engineering. 2007. V. 27. P. 244.

---

Альберт Викторович Зайц,  
II курс магистратуры,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
ХФ, 644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812) 642410,  
4er4el1@mail.ru

## СИНТЕЗ 2-АРИЛ(ГЕТАРИЛ)ЗАМЕЩЕННЫХ АНТРА[1,9,8-*CDEF*][1,7]НАФТИРИДИН-6,11(10Н)-ДИОНОВ

**М.В. Мацукевич**

*Науч. рук. д-р хим. наук, проф. И.В. Кулаков*

Взаимодействие 1-аминоантрахинона с хлорацетилхлоридом был получен соответствующий *N*-(9,10-диоксо-9,10-дигидроантрацен-1-ил)-хлорацетамид, нагревание которого с избытком пиридина в *n*-бутаноле привело к 1-пиридинийзамещенному нафто[1,2,3-*de*]хинолин-2,7-диону. При расщеплении пиридиниевой соли гидразингидратом был получен новый 1-амино-3Н-нафто-[1,2,3-*de*]хинолин-2,7-дион. Последующая внутримолекулярная циклизация в полифосфорной кислоте с 1,5 кратным избытком альдегида привела к 2-арил(гетарил)-замещенным антра[1,9,8-*cdef*][1,7]нафтиридин-6,11(10Н)-дионам.

*Ключевые слова:* 1-аминоантрахинон, *N*-(9,10-диоксо-9,10-дигидроантрацен-1-ил)-хлорацетамид, антра[1,9,8-*cdef*][1,7]нафтиридин-6,11(10Н)-дион, внутримолекулярная циклизация.

Антрахинон применяют в медицине, в производстве антрахиноновых красителей, полициклических кубовых красителей, бензантрона и др. Производные антрахинона так же используют как красители (например, ализарин) [2].

Большой интерес имеют такие производные антрахинона, как 1-аминоантрахинон **1** и 2-аминоантрахинон **2**.

1-Аминоантрахинон используют также для получения антримидов, фталоилкарбазолов и кубовых красителей.

2-Аминоантрахинон – исходный продукт для получения кубового красителя индантрона, антримидов [1].

Амины антрахинонового ряда играют важную роль в химии красителей. Все они окрашены, причем их цвет в значительной мере предопределяет оттенки получаемых из них красителей, так же используются как полициклические красители синевато-красного и фиолетового цвета, дисперсные красители для крашения в массе волокон и пластмасс, кубовые и кислотные красители, люминофоры.

Таким образом, производные в положении 1- и их модификации мало описаны в литературе и практически не изучены, в связи с чем нами были предприняты следующие модификации.

Исходя из готового товарного 1-аминоантрахинона (Sigma-Aldrich) ацилированием хлорацетилхлоридом был получен соответствующий хлорацетамид **3**. Далее из хлорацетамида **3** по известной методике [3] при кипячении в бутаноле с избытком пиридина была получена соответствующая пиридиниевая соль **4**, нерастворимая в органических растворителях и легко растворимая в воде. Разложение пиридиниевой соли **4** проводили 80%-ым гидразингидратом при кипячении около 2-х часов. Полученный 1-амино-3*H*-нафто-[1,2,3-*de*]хинолин-2,7-дион **5** является кристаллическим веществом красно-коричневого цвета, труднорастворимым в обычных органических растворителях (схема 1).

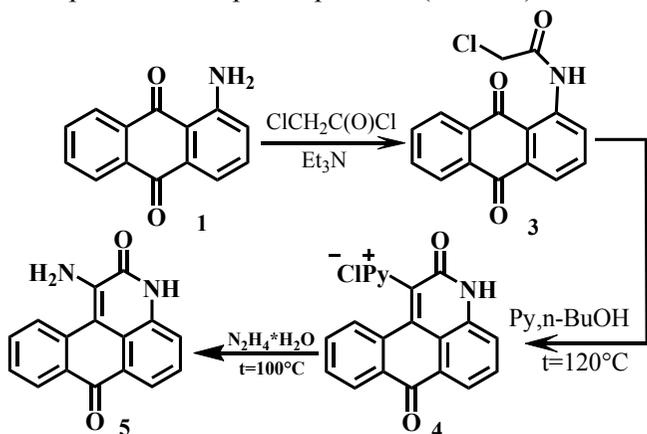


Схема 1

Строение соединения **5** доказано ИК- и ЯМР-спектроскопией. Впервые был получен и охарактеризован новый 1-амино-3*H*-нафто[1,2,3-*de*]хинолин-2,7-дион **5** на основе 1-аминоантрахинона.

На основе соединения **5** реакцией с различными альдегидами (бензальдегид, тиофен-2-карбальдегид) были получены соответствующие 1,7-нафтиридины (схема 2). Реакция проводилась при нагревании в течение 10 ч в растворе полифосфорной кислоты.



## СИНТЕЗ 4-(МОРФОЛИНИЛ)ФЕНИЛЗАМЕЩЕННОГО БЕНЗО[С][1,7]-НАФТИРИДИН-4(3Н)-ОНА

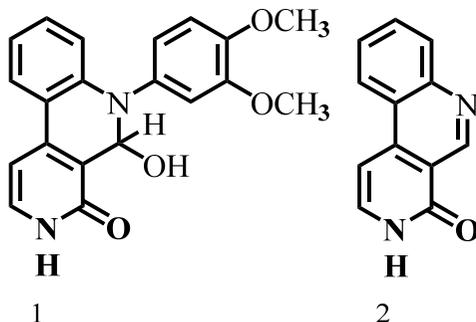
И.В. Паламарчук

Науч. рук. д-р хим. наук, проф. И.В. Кулаков

На основе 3-амино-4-фенилпиридин-2(1H)-она и 4-морфолинил-бензальдегида синтезировано производное бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-она с фармакофорным морфолиновым заместителем. При проведении реакции в более мягких условиях выделен также промежуточный не окисленный продукт – 5,6-дигидробензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-он. Строение соединений подтверждено ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  спектроскопией.

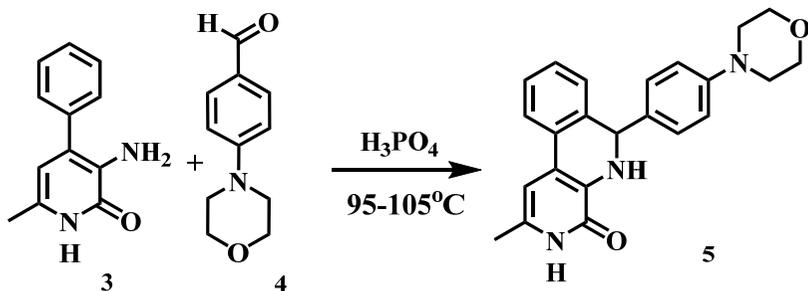
*Ключевые слова:* 3-амино-4-фенилпиридин-2(1H)-он, 4-морфолинилбензальдегид, бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-он.

Нафтиридины представляют собой очень интересный и еще малоизученный класс гетероциклических соединений, содержащие два конденсированных пиридиновых кольца [1]. Среди конденсированных бензонафтиридинов заслуживает особое внимание биологически активные алкалоиды, включающие данный фрагмент. К ним относится алкалоид перлолин **1** и алкалоид перлолидин **2**.



В работе [2] показано, что нагревание 3-аминопиридин-2(1H)-онов с альдегидами в растворе полифосфорной кислоты приводит к образованию неописанных ранее в литературе производных бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-онов.

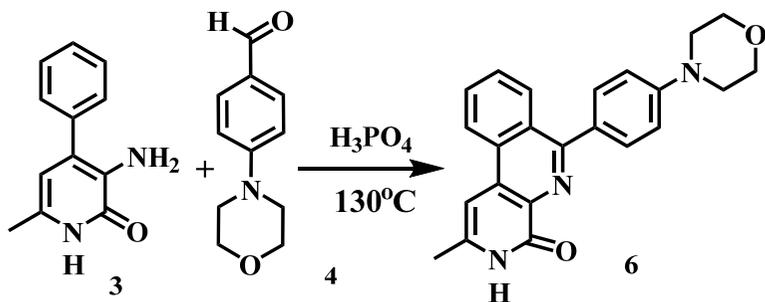
С целью получения производных нафтиридина, содержащего в своей структуре биогенный морфолин, нами были осуществлены следующие превращения. По аналогии описанной методики [3] был осуществлен синтез 4-морфолинилбенальдегида, который мы использовали далее в циклизации с 3-аминопиридоном **3**.



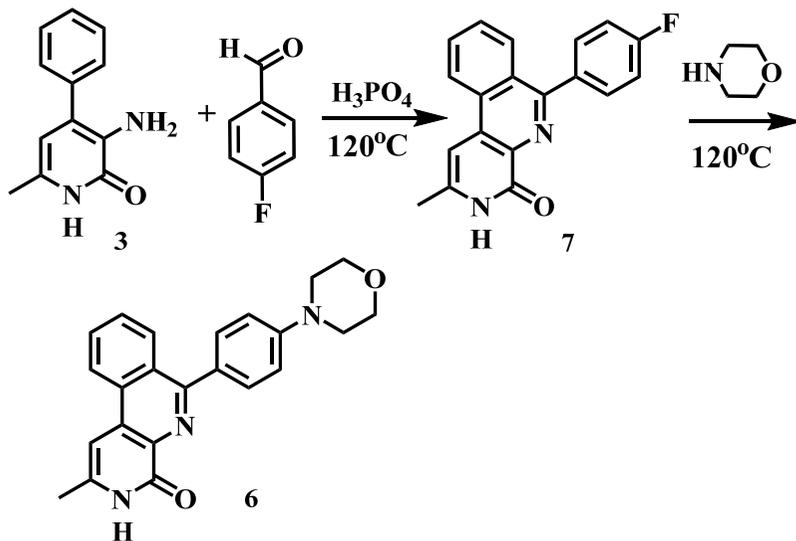
При проведении реакции в течение 15 часов и температуре  $95-105^\circ\text{C}$  был выделен кристаллический продукт светло-желтого цвета. Структура соединения была установлена на основании данных  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ -ЯМР спектров. Так, в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР отчетливо регистрируются девять ароматических протонов. При этом в результате дополнительного сопряжения происходит значительное смещение протонов как исходного 4-фенильного заместителя в область 7.91–8.65 м.д., так и протона Н-5 пиридонового кольца с 6.00 м.д. у исходного соединения **3** до 7.18 м.д. Протоны морфолинового кольца выписываются в сильном поле в области 3.23–3.78 м.д. N-H протон регистрируется уширенным синглетом при 11.78 м.д. Наличие синглета метинового протона в области 3,55 м.д. свидетельствует об образовании дигидронафтиридина **5**, являющегося промежуточным, не ароматизованным продуктом указанной реакции.

Выход продукта **5** после перекристаллизации – 36 %.

С целью получения ароматизованного бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3Н)-она **6** мы провели эту же реакцию в более жестких условиях при температуре  $130^\circ\text{C}$ . В этом случае с выходом 64 % был выделен соответствующий бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3Н)-он **6**, структура которого также подтверждена данными  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ -ЯМР спектров. В отличие от дигидронафтиридина **5**, в спектре ЯМР  $^1\text{H}$  соединения **6** исчезает синглет метинового протона при 3,55 м.д.



С целью попытки получения нафтиридина 6 встречным методом, мы провели вначале конденсацию 3-аминопиридона 3 с фторбензальдегидом по аналогии [2]. Выделенный нафтиридин 7 с 4-фторфенильным заместителем содержит атом фтора обладающий высокой нуклеофильной подвижностью. В связи с этим нами была проведена попытка его замещения на молекулу морфолина. Кипячение нафтиридина 7 с двукратным избытком морфолина привело к образованию соответствующего бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-она 6.



## ЛИТЕРАТУРА

[1] *D.J. Brown*, Chem. Heterocycl. Compd. John Wiley & Sons. Inc., 2008, V. 63, 423 p.

[2] *Мацукевич М.В., Кулаков И.В., Шацаускас А.Л., Гончаров Д.С., Фисюк А.С.* Новый подход к синтезу 6-арилзамещенных бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-онов // Химия под знаком сигма: исследования, инновации, технологии. сб. тез. V Всерос. науч. молод. школы-конф. (Омск, 15–20 мая 2016 г.). С. 325.

[3] *Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Arinova A.E., Turdybekov K.M., Turdybekov D.M., Talipov S.A., and Ibragimov B.T.* Synthesis, Structure and Chemical Transformations of 4-Aminobenzaldehyde // Russian Journal of General Chemistry, 2013, Vol. 83, No. 10, pp. 1864–1868.

---

Ирина Валерьевна Паламарчук,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
4 курс, химический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)642410,  
kulakov@chemomsu.ru

## ИЗВЛЕЧЕНИЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ ИЗ ОТРАБОТАННОГО КАТАЛИЗАТОРА КРЕКИНГА НЕФТИ\*

Д.С. Платонова, О.Ю. Цыганова

*Науч. рук. д-р техн. наук, проф. Л.Н. Адеева*

Установлено уравнение регрессии, показывающее влияние концентрации серной кислоты, температуры и продолжительности процесса на эффективность выделения редкоземельных металлов из отработанного катализатора. Показано, что ионы лантана могут быть сорбированы из модельных растворов хлорида лантана гуминовыми кислотами, выделенными из сапропеля Омской области. Величина статической емкости гуминовыми кислотами по лантану при pH 4 составляет  $152.6 \pm 1.7$  мг/г. Показано, что процесс сорбции описывается уравнением изотермы Фрейндлиха. Данные ИК-спектра указывают на участие -COOH и -OH групп в связывании ионов  $\text{La}^{3+}$ .

*Ключевые слова:* редкоземельные элементы, сорбция, ионы лантана, гуминовая кислота.

Редкоземельные металлы (РЗМ) получили применение в самых различных высокотехнологичных производствах. В настоящее время в России существует дефицит этих стратегически важных металлов. Поэтому актуальным является поиск сырьевых источников РЗМ, в качестве которых могут рассматриваться промышленные отходы. Отходом, из которого могут быть извлечены РЗМ, является отработанный катализатор крекинга углеводородов нефти, содержащий 1.8–2.1 % оксидов редкоземельных металлов, который в настоящее время не перерабатывается и складывается в отвалах производственных отходов в значительном количестве [2].

В нашей работе рассматривается возможность извлечения РЗМ из отработанного катализатора крекинга нефти марки Люкс, в состав которого входят цеолит, аморфный диспергированный алюмосиликат и алюминий содержащий компонент [4].

---

© Д.С. Платонова, О.Ю. Цыганова, 2016

\* Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ договор № 16-45-550511/16 от 11 апреля 2016 г.

Целью работы являлось исследование возможности кислотного выщелачивания РЗМ из отработанного катализатора и подбор условий сорбции РЗМ из растворов выщелачивания на примере ионов лантана. В качестве сорбента использовались гуминовые кислоты, выделенные из сапропеля (озерного ила) Омской области. Вследствие того, что гуминовые кислоты (ГК) содержат большое количество функциональных групп (карбоксильных, гидроксильных, аминных, карбонильных), можно ожидать высокую сорбционную способность по ионам РЗМ [5].

**Экспериментальная часть.** Для установления условий наиболее полного извлечения РЗМ из катализатора был проведен факторный эксперимент 2<sup>3</sup>. Выбраны следующие факторы: X<sub>1</sub> – концентрация серной кислоты, X<sub>2</sub> – температура реакционной среды, X<sub>3</sub> – продолжительность контакта. Концентрация кислоты варьировалась от 1:1 до 1:3, температура от 25 до 75 °С, продолжительность контакта от 1 до 3 часов.

Емкость ГК по ионам лантана определяли в статических условиях. Для этого ГК массой 0.1000 г. помещали в колбы с притертыми пробками и приливали 20.0 мл раствора компонента, встряхивали с малой интенсивностью, через определенный промежуток времени ГК отделяли от раствора декантацией и затем измеряли остаточное содержание ионов лантана фотометрическим методом.

Метод фотометрического определения ионов лантана основан на взаимодействии ионов лантана с арсеназо I [1].

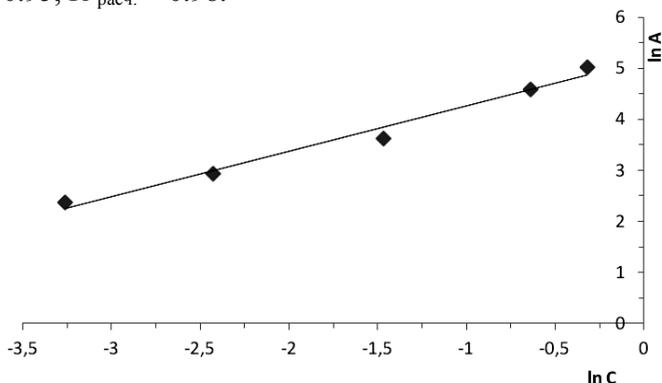
**Результаты и их обсуждение.** На основе результатов факторного эксперимента рассчитано уравнение регрессии, описывающее влияние концентрации кислоты (X<sub>1</sub>), температуры (X<sub>2</sub>) и продолжительности извлечения (X<sub>3</sub>) на степень извлечения лантана из катализатора:

$$Y = 10.6 - 0.4X_1 + 2.5X_2 + 1.3X_3 + 0.5X_1X_2 + 0.6X_1X_3 + 0.4X_2X_3 + 0.2X_1X_2X_3.$$

Полученные коэффициенты уравнения регрессии для извлечения лантана свидетельствуют о том, что наибольшее влияние на извлечение лантана в выбранных интервалах варьирования оказывает температура, меньшее – концентрация кислоты и время. Так, при концентрации кислоты 1:3 и температуре 75 °С в тече-

ние 3 часов наблюдается наиболее полное извлечение ионов лантана – 29.8 %.

Изучение зависимости величины сорбции ионов лантана на ГК проводили в статических условиях. Экспериментально было установлено влияние pH, концентрации ионов лантана и продолжительности сорбции на величину сорбции ионов лантана на гуминовых кислотах. Наибольшая величина сорбции достигается при pH 4. Полученные данные описываются изотермой Фрейндлиха, приведенной на рисунке. Уравнение изотермы:  $a = 174.2 \cdot C^{0.89}$ ,  $R^2_{\text{табл.}} = 0.95$ ,  $R^2_{\text{расч.}} = 0.98$ .



*Изотерма адсорбции ионов лантана на гуминовых кислотах*

Величина емкости ГК по ионам лантана –  $152.6 \pm 1.7$  мг/г. Было установлено, что набор емкости достигается за 1 час.

С целью выяснения механизма поглощения ионов  $\text{La}^{3+}$  ГК был записан ИК-спектр продуктов сорбции  $\text{GK} + \text{La}^{3+}$ . В ИК-спектре ГК карбоксильным группам соответствуют валентные колебания  $\text{C}=\text{O}$  при  $1651 \text{ см}^{-1}$  [6]. При ионизации остается группа  $\text{COO}^-$ , соответственно, в ИК-спектре образца  $\text{GK} + \text{La}^{3+}$  происходит смещение полосы в  $1647 \text{ см}^{-1}$ , отнесенной к ассиметричным валентным колебаниям групп  $\text{COO}^-$ . Вместе с тем ослабевает полоса поглощения  $1280 \text{ см}^{-1}$ , соответствующая деформационным колебаниям спиртовых гидроксидов [3]. По данным, полученным при анализе ИК-спектров, можно заключить, что поглощение ионов  $\text{La}^{3+}$  ГК при  $\text{pH} \leq 5.0$  происходит в основном с участием групп  $-\text{COOH}$  и  $-\text{OH}$ .

**Выводы.** Показано, что на полноту извлечения РЗМ из катализатора оказывают влияние концентрация серной кислоты, температура и продолжительность извлечения. Сорбция ионов  $\text{La}^{3+}$  гуминовыми кислотами описывается уравнением изотермы Фрейндлиха. Максимальная статическая емкость ГК по ионам лантана составляет  $152.6 \pm 1.7$  мг/г. Судя по ИК-спектрам, можно предположить, что сорбция ионов  $\text{La}^{3+}$  при  $\text{pH} \leq 5.0$  происходит с участием  $-\text{COOH}$  и  $-\text{OH}$  групп.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Бусев А.И., Тупцова В.Г., Иванов В.М.* Практическое руководство по аналитической химии редких элементов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Химия, 1978. 423 с.

[2] *Козловская И.Ю., Марцунь В.Н.* Кислотное выщелачивание редкоземельных элементов из отработанного катализатора крекинга углеводородов нефти // Труды БГТУ. 2011. № 3. С. 75–78.

[3] *Комиссаров И.Д., Логинов Л.Ф., Стрельцова И.Н.* Спектры поглощения гуминовых кислот // Науч. труды ТюмСХИ. 1971. Т. 14. С. 75–90.

[4] Новые катализаторы каталитического крекинга серии «Люкс»: опыт разработки, производства и эксплуатации на ОАО «Сибнефть-Омский НПЗ» / А.И. Глазов [и др.] // Российский химический журнал. – 2007. Т. 51, № 4. С. 57–59.

[5] *Орлов Д.С.* Гумусовые кислоты почв и общая теория гумификации. М.: Изд-во МГУ, 1990. 325 с.

[6] *Shin H.S., Monsalier J.M., Choppin G.R.* Spectroscopic and chemical characterizations of molecular size fractionated humic acid // Talanta. 1999. Vol. 50. P. 641–647.

---

Дарья Сергеевна Платонова,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
II курс аспирантуры, химический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, 8 (3812) 26-81-99,  
daria\_platonova@list.ru

# СИНТЕЗ БИСДИГИДРОПИРАЗОЛА НА ОСНОВЕ 3,5-ДИАЦЕТИЛ-2,6-ДИМЕТИЛПИРИДИНА

А.А. Шрайнер

*Науч. рук. д-р хим. наук, проф. И.В. Кулаков*

На основе 3,5-диацетилпиридина и фурфурола получен соответствующий бисхалкон, который оказался хорошим синтоном в синтезе производных бисдигидропиразола. Строение продуктов доказано ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ -спектроскопией и хромато-масс-спектрометрией.

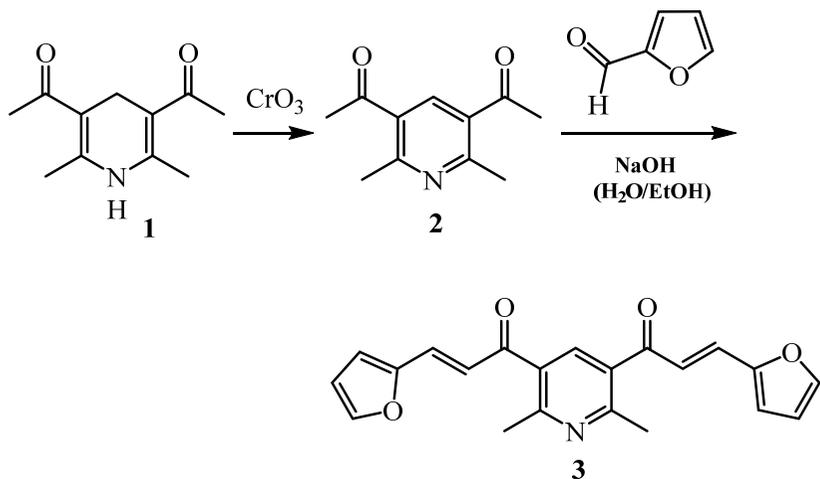
*Ключевые слова:* 3,5-диацетилпиридин, фурфурол, халконы, дигидропиразол.

Халконы являются предшественниками флавоноидов. Халконы и флавоноидные соединения довольно широко распространены в природе. Они встречаются в 9 семействах растений, в различных органах, как в виде агликонов, так и в виде гликозидов. Нередко входят в состав хромофорных комплексов, обуславливающих окраску цветков, к примеру, бетеин характерен для семейства сложноцветных [3]. Халконы являются одной из важнейших групп вторичных метаболитов [5], обладающих широким спектром фармакологической активности. Анализ литературы [1] по халконам выявил, что 1,3-диарил-2-пропен-1-оны или халконы представляют собой класс противоопухолевых агентов, которые показали многообещающую терапевтическую эффективность в лечении злокачественных опухолей человека. К тому же, недавние исследования показали, что халконы также вызывают апоптоз в различных типах клеток, включая рак молочной железы.

Кроме того, в работе [2] описан синтез бисхалкона, являющийся исходным объектом в синтезе терпиридинов, которые обладают хорошими люминесцентными свойствами.

С целью получения аналогичных по структуре производных халконов, нами были осуществлены следующие превращения. Вначале был проведён стандартный синтез 1,4-дигидропиридина **1** по реакции Ганча, далее окислительной ароматизацией хромовым ангидридом получили 3,5-диацетил-2,6-диметилпиридин **2**, кото-

рый затем взаимодействием с фурфуролом в спиртово-щелочном растворе превращали в бисхалкон **3**:

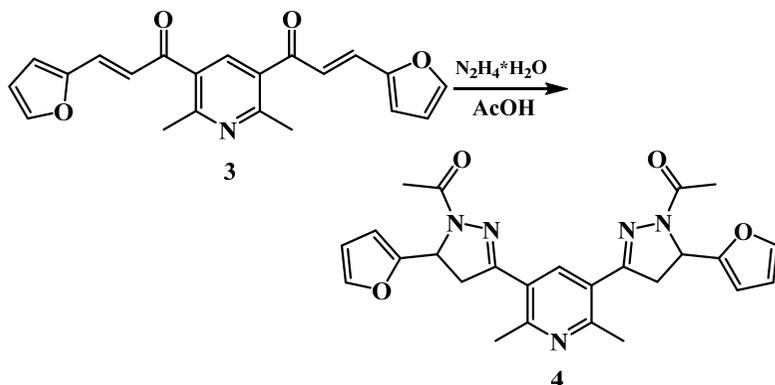


Выход продукта составил 84 % и представляет собой кристаллическое вещество жёлто-оранжевого цвета.

Структура этого соединения подтверждена спектрами  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрией. Так, в  $^1\text{H}$  ЯМР спектре соединения **3** присутствует один ароматический пиридиновый протон Н-4, проявляющийся в виде синглета в области 7,92 м.д. Шесть метильных протонов зарегистрированы в области 2,70 м.д. в виде синглета. Также присутствуют 4 протона при двойной связи в области 7,0 м.д. и 7,3 м.д., которые выходят парно в виде дуплетов. Присутствуют в спектре 6 ароматических протонов фуранового кольца в области 6,5 м.д., 6,7 м.д. и 7,6 м.д. Проведённый хромато-масс анализ выявил пик молекулярного иона  $[\text{M}^+] = 347,1$ .

Известно, что некоторые замещенные пиразолины, синтезированные на основе халкона, проявляют противоопухолевую активность, а также способность ингибировать Р-гликопротеин [4].

Поскольку синтезированный нами бисхалкон содержит несколько реакционных центров, нами была осуществлена попытка синтеза на его основе производное пиразола. Реакцию осуществляли кипячением исходного бисхалкона **3** с избытком гидразин-гидрата в уксусной кислоте:



Выход продукта составил 45 % и представляет собой порошкообразное вещество светло-серого цвета.

Структура соединения **4** подтверждена спектрами  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ -ЯМР и хромато-масс-спектром. Так, в  $^1\text{H}$  ЯМР спектре соединения **4** присутствует ароматический пиридиновый протон, проявляющийся в виде синглета в области 7,66 м.д., шесть метильных протонов зарегистрированы в области 2,87 м.д. в виде синглета, а шесть протонов ацильной группы также выходят синглетом в области 2,37 м.д. Аналогично соединению **3** в спектре присутствуют 6 ароматических протонов фуранового кольца в области 6,5 м.д., 6,7 м.д. и 7,6 м.д. Кроме того, протоны (метиновый и диастереотопные метиленовые) образующихся дигидропиразоловых колец проявляются дублетом дублетов и двумя дублет дублетов в области 5,67 м.д., 3,47 и 3,63 м.д. Проведённый хромато-масс анализ показал, что соединение **4** устойчиво под действием электронного удара, о чём говорит 100 % пик молекулярного иона  $[\text{M}^+] = 459,2$ . Интенсивные осколки с  $m/z$  417 и 375 принадлежат соответственно фрагментам молекулы после  $\alpha$ -разрыва одной и двух ацильных групп.

### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Dimmock J.R., Elias D.W., Beazely M.A., Kandepu N.M.* Curr. Med. Chem. 1999, 6, 1125.

[2] *Lhotak P., Kurfurst A.* Preparation of new organic luminophores based on 3,5-diacetylpyridines // Collect. Czech. Chem. Commun. Vol. 57, 1992, 1937-1946.

[3] *Литвиненко В.И.* Природные флавоноиды. Харьков: ГНЦЛС, 1995. 56 с.

[4] *Manna F., Chimenti F., Fioravanti R., Bolasco A., Secci D., Chimenti P., Ferlinib C. and Scambia G.* Synthesis of some pyrazole derivatives and preliminary investigation of their affinity binding to P-glycoprotein // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 15 (2005), 4632–4635.

[5] *Verma A.K., Partap R.* *Nat. Prod. Rep.* 2010, 27, 1571–1593.

---

Анастасия Андреевна Шрайнер,  
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
4 курс, химический факультет,  
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)642410,  
a.shrayner@list.ru

*Научное издание*

## **ФМХ ОмГУ – 2016**

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

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

Технический редактор *Н.В. Москвичёва*  
Дизайн обложки *З.Н. Образова*

---

Подписано в печать 03.10.2016. Формат бумаги 60x84 1/16.  
Печ. л. 9,25. Усл. печ. л. 8,6. Уч.-изд. л. 7,9. Тираж 70 экз. Заказ 133.

---

*Издательство Омского государственного университета*  
644077, Омск, пр. Мира, 55а

*Отпечатано на полиграфической базе ОмГУ*  
644077, Омск, пр. Мира, 55а