

УДК 53+51+54
ББК 22я43+24я43
Ф739

Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом ОмГУ

Ответственные за выпуск:

А. А. Романова, Г. М. Серомян, В. И. Вершинин

Ф739 **ФМХ ОмГУ – 2017** : сборник статей V Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии (Омск, 15 мая – 15 июня 2017 г.) – Электрон. текст. дан. – Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2017. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM) ; 12 см.

ISBN 978-5-7779-2149-9

Представлены 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

Текстовое электронное издание
Самостоятельное электронное издание

Минимальные системные требования:
PC, Pentium и выше с частотой не ниже 500 MHz; ОЗУ 256 Mb;
Microsoft Windows 2000/XP/Vista/7; Internet Explorer 6.0 и выше;
Adobe Acrobat Reader 4.0 и выше; CD-ROM; мышь

© Оформление. ФГБОУ ВО «ОмГУ
им. Ф.М. Достоевского», 2017

Издается в соответствии с оригиналом,
предоставленным организационным комитетом.
Макет подготовлен в Издательстве ОмГУ

Технический редактор *Е.В. Лозовая*
Программно-техническая реализация *Е.А. Малыгиной*

Дата выпуска: 15.09.2017.
1 электрон. опт. диск (CD-ROM); 12 см.
Тираж 9 копий. Объем 5,0 Мб.

Издательство
Омского государственного университета
им. Ф.М. Достоевского
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а
тел.: 8 (3812) 67-32-55, 64-30-61, 64-13-07

Навигация по сборнику: инструкция для читателей

1. Для быстрого перехода к нужной статье используйте интерактивное содержание сборника:

– нажмите кнопку «Закладки» (иконка имеет вид  или ) на боковой (левой) панели;

– в открывшейся панели, прокручивая Содержание, найдите название статьи;

– кликнув по названию статьи, перейдите к ее тексту.

2. Если боковая панель с кнопкой «Закладки» отсутствует, настройте ее следующим образом:

– если вы используете раннюю версию Adobe Reader, зайдите в меню «Просмотр», выберите «Панели навигации», нажмите кнопку «Закладки»;

– если вы используете последние версии Adobe Reader, зайдите в меню «Просмотр», выберите «Показать / Скрыть», далее – «Области навигации», в выпадающем меню нажмите «Закладки».

Далее действуйте в соответствии с указаниями п. 1.

СОДЕРЖАНИЕ

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ	9
--------------------------------------	---

Секция

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

<i>Иванова Н. В.</i> Регрессионный анализ в условиях известных и скрытых зависимостей	10
<i>Маркина А. А.</i> Минимизация потерь компании при недостаточном оборотном капитале	13
<i>Моршинин А. В.</i> Приближенное решение задачи кластеризации графа	17
<i>Рогова Е. О.</i> Проектирование сложных изделий с использованием методов дискретной оптимизации	21
<i>Черных К. А.</i> Планирование инвестиционных проектов с идентичными работами	25

Секция

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

<i>Беломоин К.Ю.</i> Моделирование критической динамики неупорядоченной модели Изинга	29
<i>Болдырев М. И.</i> Моделирование свойств трехплочных структур с изингоподобными магнитными пленками и исследование эффектов старения	33
<i>Борзилов В. О.</i> Компьютерное моделирование многослойных структур на основе модели Гейзенберга с учетом одноосной анизотропии	37
<i>Кожухметов С. З.</i> Изучение влияния температуры на работу выхода электрона с поверхности монослойных пленок переходных металлов, адсорбированных на медной и вольфрамовой подложке	41
<i>Крижановский В. В.</i> Численное исследование неравновесной критической динамики чистой и разбавленной двумерной модели Изинга при эволюции из различных начальных состояний	45
<i>Лаврухин И. В.</i> Ренормгрупповое описание эффектов старения в критической динамике	49
<i>Левицкий А. В.</i> Расчет магнитосопротивления мультислойных структур на основе гейзенберговских ферромагнитных ОЦК-пленок с эффектами одноосной анизотропии	54

<i>Ложников В. Е.</i> Исследования критических свойств трехмерной изотропной модели Гейзенберга методом Ванга – Ландау.....	58
<i>Маляренко П. Н.</i> Численное исследование влияния различных начальных состояний на характеристики неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга	61
<i>Нагибин А. А.</i> Исследование критической эволюции модели Изинга с точечными и линейными дефектами.....	67
<i>Пантелеев В. С.</i> Взрывная перколяция в безмасштабных сетях	72
<i>Папушин А. С.</i> Определение критических показателей трехмерной модели Изинга вблизи порога перколяции.....	76
<i>Поворознюк Е. С.</i> Первопринципные расчеты магнитных свойств мультислойной системы $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}$	80
<i>Пуртов А. Н.</i> Монте-Карло исследование эффектов старения в магнитных сверхструктурах	84
<i>Романовский Д. Е.</i> Вычисление коэффициента магнитосопротивления мультислойных магнитных структур в случае ТВП геометрии	90
<i>Фирстова М. М.</i> Исследование неравновесного поведения мультислойных структур магнитных пленок кобальта.....	94
<i>Фомин П. А.</i> Расчёт работы выхода электрона с поверхности меди при адсорбции монослойных ферромагнитных плёнок.....	98

Секция

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

<i>Бабило М. А.</i> Исследование влияния температуры на лазерную абляцию YBCO керамики	102
<i>Бакланова К. С.</i> Оценка показателей variability ритма сердца в тренировочном процессе.....	106
<i>Баченина А. Ю.</i> Факторная структура параметров variability ритма сердца, полученная методом главных факторов в норме и при физической нагрузке	108
<i>Белоусов К. А.</i> Масс-спектрометрия остаточных газов подкорпусного пространства микросхем	110
<i>Горячкин М. Ю.</i> Применение метода распространения луча для расчета интенсивности световой волны в диэлектрическом волноводе с изгибом	114
<i>Диденко Н. А.</i> Совместное использование модели трехфакторного дисперсионного комплекса и метода главных факторов в статистическом анализе апноэ.....	118

<i>Дубинин Р.А.</i> Анализ входного импеданса мембранного резонатора на ОАВ для биосенсоров	122
<i>Зимбович Е. А.</i> Исследование электронного транспорта в индивидуальных молекулах гемоглобина методом проводящей атомно-силовой микроскопии	126
<i>Калинина Я. А.</i> Определение пористости и плотности незамещенных и модифицированных образцов фосфата кальция	130
<i>Кокош Д. Ю.</i> Влияние органических и неорганических добавок на синтез гидроксиапатита	134
<i>Корнеева М. Ю.</i> Модель кинетики остеотропного радиофармпрепарата в организме больных с костными метастазами	138
<i>Кузнецов В. А.</i> Определение временных задержек и доплеровских сдвигов для многолучевых каналов связи	142
<i>Пушкарев Д. И.</i> Реализация алгоритма машинного обучения для решения задачи классификации степеней дисплазии соединительной ткани	146
<i>Свердлова А. А.</i> Моделирование температурных полей в металлических пленках при воздействии импульсными пучками частиц	150
<i>Тиунова Е. А.</i> Исследование влияния параметров синтеза на фазовый состав оксалатов и фосфатов кальция	154
<i>Шефер К. И.</i> Анализ изменений характеристик диэлектрических волноводов, вызванных механическими напряжениями, методом конечных элементов	158
<i>Шиц А. П.</i> Построение многомерной факторной модели сердечнососудистой патологии на базе ортогонального метода с варимакс вращением	162
<i>Шпунтенок В. С.</i> Фотопревращения основных производных гемоглобина под действием УФ-излучения	166

Секция

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

<i>Бриленок Н. С., Бахарева М. В.</i> Оценка суммарного содержания фенолов по реакции с диазотированной сульфаниловой кислотой	169
<i>Гончаренко М. В.</i> Прогнозирование выхода и качества моторных топлив из газового конденсата	173
<i>Комов А. П.</i> Применение ИК-спектроскопии отражения для классификации различных объектов	177

<i>Мамонтова А. В.</i> Сравнение аналитических возможностей разных способов определения суммарного содержания аренов в водных растворах	181
<i>Мацукевич М. В.</i> Синтез 2,6 -бисоксазоло[5,4- <i>b</i>]пиридинов	185
<i>Паламарчук И. В.</i> Синтез, пространственное строение, химические и биологические свойства 3-(арилметил)аминопиридин-2(1 <i>H</i>)-онов	188
<i>Шацаускас А. Л., Абрамов А. А., Сайбулина Э. Р.</i> Синтез и свойства 3-амино-4-фенил-6-метилпиридин-2(1 <i>H</i>)-она и его производных	191

Организационный комитет

Сервах Владимир Вицентьевич	д-р физ.-мат. наук, профессор, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, профессор кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ
Прудников Владимир Васильевич	д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики ОмГУ
Потуданская Мария Геннадьевна	канд. биол. наук, доцент, декан физического факультета ОмГУ
Вершинин Вячеслав Исаакович	д-р хим. наук, профессор, заведующий кафедрой аналитической химии ОмГУ
Кулаков Иван Вячеславович	д-р хим. наук, профессор кафедры органической химии ОмГУ
Булучевский Евгений Анатольевич	канд. хим. наук, заведующий кафедрой химической технологии ОмГУ
Серопян Геннадий Михайлович	канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры общей физики ОмГУ
Леванова Татьяна Валентиновна	канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, и.о. заведующего кафедрой прикладной и вычислительной математики ОмГУ
Романова Анна Анатольевна	канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры прикладной и вычислительной математики ОмГУ

Секция

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ В УСЛОВИЯХ ИЗВЕСТНЫХ И СКРЫТЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ

Н. В. Иванова

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор Н. В. Перцев

В настоящей работе ставится задача рассмотрения экономических процессов в условиях известных и скрытых зависимостей. С помощью современного аппарата математико-статистической науки проведено исследование характера поведения функции объема производства с течением времени.

Ключевые слова: регрессионный анализ, известные и скрытые зависимости, математико-статистическая наука.

Условимся функционирование изучаемых объектов описывать набором переменных:

x_1, x_2, \dots, x_n – «входные» переменные (предикторы), описывающие условия функционирования;

y_1, y_2, \dots, y_m – «выходные» переменные, характеризующие поведение или результат функционирования исследуемого объекта;

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m$ – латентные, т. е. скрытые, случайные «остаточные» компоненты, отражающие влияние неучтенных изначально факторов, а также случайные ошибки в измерении анализируемых показателей [1].

Пусть вектор $x(t) = (x_i(t))$ – количество произведенной продукции i -го вида в момент времени t , $i = \overline{1, n}$; $A = (a_{ij})_n$ – матрица технологических коэффициентов, где элементы матрицы – доли вклада i -й отрасли для производства единицы продукции j -й отрасли, $i, j = \overline{1, n}$; $x(0) = (x_i(0))$ – вектор начальных значений в момент времени $t = 0$; $i, j = \overline{1, n}$.

$$\begin{cases} x(t+1) = Ax(t) \\ x(0) = x_0 \end{cases}, t = 0, 1, 2, \dots, T$$

Применительно к задаче известно, что имеет место теорема Перрона – Фробениуса [2]:

Теорема. Если матрица $A \geq 0$ – неотрицательна и неприводима, тогда справедливы утверждения

1) Среди собственных чисел матрицы A есть положительные вещественные числа λ ;

2) Наибольшему положительному вещественному собственному числу $\lambda(A)$ соответствует положительный собственный вектор x_A ;

3) Если ω – собственное число матрицы A , то $|\omega| \leq \lambda(A)$.

Определение. Пусть $A \geq 0$, тогда построенное по теореме число $\lambda(A)$ называется числом Фробениуса – Перрона матрицы A , а соответствующий данному числу вектор x_A называется вектором Фробениуса – Перрона матрицы A .

Известно, что $x(t) \sim c\lambda_A^t$, или $x_i(t) \sim c_i\lambda_A^t$, $i = \overline{1, n}$ при $t \rightarrow \infty$, где вектор $c = (c_1, \dots, c_n)^T$ зависит от начальных данных $x(0)$ и вектора $x_A = x(\lambda_A)$.

$x_i(t) = c_i\lambda_A^t e^{\varepsilon_i(t)}$, $i = \overline{1, n}$, где $\varepsilon_i(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$
 $\ln x_i(t) = \ln(c_i\lambda_A^t) + \varepsilon_i(t) = \ln c_i + (\ln \lambda_A)t + \varepsilon_i(t)$, $i = \overline{1, n}$.

Обозначим: $y_i(t) = \ln x_i(t)$, $a_i = \ln c_i$, $b = \ln \lambda_A$, $i = \overline{1, n}$.

Таким образом, задача сводится к модели линейной регрессии

$$y_i(t) = a_i + bt + \varepsilon_i(t), i = \overline{1, n}.$$

Для нахождения a_i и b используем метод наименьших квадратов. Сущность метода заключается в том, чтобы найти такие параметры a_i и b , при которых сумма квадратов отклонений (остатки регрессии) будет минимальной:

$$L(a_1, a_2, \dots, a_n, b) = \sum_{i \in I} \sum_{t \in T} (y_i(t) - a_i - bt)^2 \rightarrow \min.$$

В результате получаем оценки на параметры регрессии, которые позволяют определить асимптотическое поведение $x_i(t) \sim c_i \lambda_A^t$, $i = \overline{1, n}$ при $t \rightarrow \infty$

$$\lambda_A = e^{\frac{|T| \sum_{t \in T} t y_S(t) - \sum_{t \in T} t \sum_{i \in I} y_S(t)}{n(|T| \sum_{t \in T} t^2 - (\sum_{t \in T} t)^2)}}$$

$$c_i = e^{\frac{\sum_{t \in T} y_i(t) - b \sum_{t \in T} t}{|T|}}$$

где $y_S = \sum_{i=1}^n y_i(t), i = \overline{1, n}$, $\hat{b} = \frac{|T| \sum_{t \in T} t y_S(t) - \sum_{t \in T} t \sum_{i \in I} y_S(t)}{n(|T| \sum_{t \in T} t^2 - (\sum_{t \in T} t)^2)}$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Айвазян С.А. Прикладная статистика. Исследование зависимостей / С.А. Айвазян, И.С. Енюков, Л.Д. Мешалкин. М.: Финансы и статистика, 1985. С. 9–10.

[2] Ланкастер П. Теория матриц / П. Ланкастер. М.: Наука, 1973. С. 260.

Наталья Вадимовна Иванова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
tusa274@inbox.ru.

МИНИМИЗАЦИЯ ПОТЕРЬ КОМПАНИИ ПРИ НЕДОСТАТОЧНОМ ОБОРОТНОМ КАПИТАЛЕ

А. А. Маркина

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник В. В. Сервах*

Рассматривается задача оптимизации запасов торговой компании с учетом стоимости доставки и хранения товаров, а также эффективности использования оборотного капитала. Построена модель минимизации потерь в случае, когда текущая заявка в полной мере не обеспечена оборотным капиталом. Предложены два подхода оптимизации: сокращение заявки и использование кредитования. Показано, что минимальные потери достигаются на комбинации этих подходов. Разработаны соответствующие алгоритмы.

Ключевые слова: логистика, управление запасами, динамическое программирование.

Модели управления запасами разрабатываются с 30-х годов прошлого века [1]. Их основы изложены, например, в [2; 3]. Современное развитие этой теории связано с развитием логистики и ее ключевым моментом является эффективное использование капитала [4]. В настоящее время в большинстве компаний, торгующих широким ассортиментом товаров, заказы производятся автоматически программами-роботами. В этих программах оптимизируются сроки и объемы закупки товаров. На практике возникают ситуации, когда рассчитанная программой-роботом текущая заявка не обеспечена финансами. Заявку приходится сокращать или использовать заемные средства. При нескольких сотнях и даже тысячах позиций в номенклатуре товаров вручную это сделать невозможно. Необходимо разработать модель и алгоритм сокращения заявки, с учетом возможности привлечения средств таким образом, чтобы потери были минимальны.

Фирма закупает товары на бирже или у поставщиков и реализует их на розничном рынке. Известны следующие параметры:

N – количество видов товара;

$\alpha_i + \beta_i \cdot v$ – стоимость заказа и доставки партии товара i объемом v ;

λ_i – интенсивность продажи товара i ;

c_i – стоимость продажи единицы товара i ;

c_i^{xp} – стоимость хранения единицы товара i в единицу времени;

r_0 – ставка альтернативного безрискового ликвидного размещения капитала.

Для каждого товара i оптимальный объем очередного завоза v_i^* находится из условия максимизации удельной чистой приведенной прибыли

$$U_i(v_i) = \frac{1}{v_i} \left(\frac{c_i \lambda_i}{\delta} \left(1 - \frac{1}{\delta^{T_i}} \right) - \alpha_i - \beta_i v_i - \frac{c_i^{xp} \lambda_i}{\delta^2} \cdot \left(T_i \delta + \frac{1}{\delta^{T_i}} - 1 \right) \right),$$

где $T_i = \frac{v_i}{\lambda_i}$ и $\delta = \ln(1 + r_0)$.

Отметим, что в силу дискретности моментов завоза T_i^* должно быть целым, а v_i^* – кратным λ_i . Кроме того, новую партию товара завозим только в тот момент, когда товар заканчивается.

Так как периоды не совпадают, то в каждый дискретный момент времени набор закупаемых товаров будет разный. Следовательно, общая стоимость заказа меняется. Меняется и размер оборотного капитала, выделенного для закупки товаров. Это может быть связано с уплатой налогов или внешним отвлечением средств. Таким образом, в некоторые моменты времени общая стоимость заказываемых товаров может оказаться больше имеющихся в наличии свободных денег.

Пусть A – подмножество товаров, которые закончились к текущему моменту времени, K_0 – текущий капитал, r – ставка по кредиту. Если товар $i \in A$ закупается в объеме $x_i < v_i^*$, то потери составят $\Delta U_i(x_i) = U_i(v_i^*) - U_i(x_i)$. При условии $\sum_{i \in A} (\alpha_i + \beta_i v_i^*) > K_0$

модель корректировки заявки выглядит следующим образом:

$$\sum_{i \in A} \Delta U_i(x_i) \rightarrow \min,$$

$$\sum_{i \in A} (\alpha_i + \beta_i x_i) \leq K_0,$$

$$x_i \in \{\lambda_i, 2\lambda_i, 3\lambda_i, \dots, v_i^*\}, \quad i \in A.$$

Обозначим через $\varphi(m, k)$ минимальные потери, для первых m товаров множества A , если имеется k единиц оборотных средств, $m = 1, 2, \dots, |A|$, $k = \sum_{i \in A} (\alpha_i + \beta_i \lambda_i), \dots, K_0$. Имеет место следующее рекуррентное соотношение

$$\varphi(m, k) = \min_{x_m \in \{\lambda_m, \dots, v_m^*\}, \alpha_m + \beta_m x_m \leq k} \{ \Delta U_m(x_m) + \varphi(m-1, k - \alpha_m - \beta_m x_m) \}.$$

Для нахождения $\varphi(|A|, K_0)$ достаточно организовать двойной цикл по m и k при следующих начальных условиях:

$$\varphi(1, k) = \begin{cases} 0, & \text{если } \alpha_1 + \beta_1 v_1^* \leq k, \\ \Delta U_1\left(\frac{k - \alpha_1}{\beta_1}\right), & \text{иначе.} \end{cases}$$

Трудоёмкость алгоритма составит $O\left(K_0 \sum_{i \in A} T_i^*\right)$, где T_i^* – оптимальный период завоза товара $i \in A$.

При наличии возможности использования кредита по ставке r часть прибыли используется на погашение процентов по кредиту, и получаем следующую модель:

$$\sum_{i \in A} \Delta U_i(x_i) - D + \frac{D \cdot (1+r)}{1+r_0} \rightarrow \min,$$

$$\sum_{i \in A} (\alpha_i + \beta_i x_i) \leq K_0 + D,$$

$$\max\{0, K_{\min} - K_0\} \leq D \leq K_{\max} - K_0,$$

$$x_i \in \{\lambda_i, 2\lambda_i, 3\lambda_i, \dots, v_i^*\}, \quad i \in A,$$

где переменная D определяет объем кредита, $K_{\min} = \sum_{i \in A} (\alpha_i + \beta_i \lambda_i)$

– минимально необходимый объем оборотных средств,

$K_{\max} = \sum_{i \in A} (\alpha_i + \beta_i T_i^*)$ – размер средств достаточный для полного обеспечения заявки.

Была написана программа. По результатам эксперимента можно сделать вывод, что оптимальное решение задачи может достигаться в случае, когда недостающий капитал покрывается за счет кредита только частично.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Wilson R.H.* A Scientific Routine for Stock Control / R.H. Wilson // Harvard Business Review. 1934. № 13. P. 116–128.

[2] *Первозванский А.А.* Математические модели в управлении производством / А.А. Первозванский; Главная редакция физико-математической литературы издательства. М.: Наука, 1975. 616 с.

[3] *Рыжиков Ю.И.* Теория очередей и управление запасами / Ю.И. Рыжиков. СПб.: Питер, 2001. 384 с.

[4] *Бродецкий Г.Л.* Многономенклатурное управление запасами: новый подход к оптимизации решений / Г.Л. Бродецкий // Логистика сегодня. 2014. № 1. С. 34–45.

Анна Аркадьевна Маркина,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
anna.m.malaya@gmail.com.

ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ГРАФА

А. В. Моршинин

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор В. П. Ильев

В работе рассматривается задача кластеризации графа. Для задачи кластеризации графа, в которой число кластеров не превосходит трех, предложен приближенный полиномиальный алгоритм с гарантированной оценкой точности.

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

Введение

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 задач кластеризации является задача кластеризации графа. В этой задаче сходство объектов задается с помощью ребер графа, вершины которого взаимно однозначно 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 $\mathbf{M}(V)$ множество всех кластерных графов на множестве вершин V , через $\mathbf{M}_k(V)$ – множество всех кластерных графов на V , имеющих ровно k непустых компонент связности, а через $\mathbf{M}_{1,k}(V)$ – множество всех кластерных графов на V , имеющих не более k компонент связности, $2 \leq k \leq |V|$.

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

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

т. е. $\rho(G_1, G_2)$ – число несовпадающих ребер в графах G_1 и G_2 .

В литературе рассматривались три варианта задачи кластеризации графа, ранее известной под названием задачи аппроксимации графа.

Задача GC. Дан обыкновенный граф $G = (V, E)$. Найти такой граф $M^* \in \mathbf{M}(V)$, что

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

Задача GC_k. Дан обыкновенный граф $G = (V, E)$ и целое число k , $2 \leq k \leq |V|$. Найти такой граф $M^* \in \mathbf{M}_k(V)$, что

$$\rho(G, M^*) = \min_{M \in \mathbf{M}_k(V)} \rho(G, M).$$

Задача GC_{1,k}. Дан обыкновенный граф $G = (V, E)$ и целое число k , $2 \leq k \leq |V|$. Найти такой граф $M^* \in \mathbf{M}_{1,k}(V)$, что

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

В последние годы задачи кластеризации графов неоднократно переоткрывались и независимо изучались под разными названиями (**Correlation Clustering** [2], **Cluster Editing** [3; 4]).

1. Известные результаты

Теорема 1 [1,2,6,7]. Задача **GC** является *NP*-трудной. Задачи **GC_k** и **GC_{1,k}** являются *NP*-трудными при любом фиксированном $k \geq 2$, причем для $k = 2$ они *NP*-трудны на кубических графах.

В 2004 г. Бансал, Блюм, Чаула [2] разработали 3-приближенный алгоритм решения задачи **GC_{1,2}**.

В 2008 г. Коулман, Саундерсон и Вирт [5] предложили 2-приближенный алгоритм решения задачи **GC_{1,2}**, применив процедуру локального поиска к допустимому решению, полученному с помощью 3-приближенного алгоритма из статьи [2].

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 множества $\mathbf{M}_{1,s}(V)$ с компонентами связности, порожденными множествами V_1, V_2, \dots, V_s . Сами множества V_1, V_2, \dots, V_s будем называть *кластерами*. Некоторые из множеств V_i могут быть пустыми.

2. Полиномиальный алгоритм приближенного решения задачи GC_{1,3}

Представленный ниже полиномиальный алгоритм **A** является 6-приближенным алгоритмом решения задачи **GC_{1,3}**.

Через $N_G(v)$ обозначим *окрестность* вершины v , т.е. множество вершин графа $G = (V, E)$, смежных с v .

Алгоритм А

Вход: граф $G = (V, E)$, $|V| = n$.

Выход: кластерный граф $M_I = M(V_1, V_2, V_3)$.

Шаг 1. Для каждой упорядоченной пары вершин $(u, v) \in V \times V$ такой, что $u \neq v$ выполнить:

Шаг 1.1. Положить $V_1 = \{u\} \cup (N_G(u) \setminus \{v\})$.

Шаг 1.2. Обозначить через G_1 подграф графа G , порожденный множеством $V \setminus V_1$. Положить

$$V_2 = \{v\} \cup N_{G_1}(v), \quad V_3 = V \setminus (V_1 \cup V_2).$$

Множество V_3 может быть пустым. Положить

$$M_{u,v} = M(V_1, V_2, V_3).$$

Шаг 2. Среди всех построенных графов $M_{u,v}$ и графа K_n выбрать ближайший к G кластерный граф $M = M(V_1, V_2, V_3)$:

$$\rho(G, M) = \min_{(u,v) \in V \times V, u \neq v} \{\rho(G, M_{u,v}), K_n\}.$$

Конец.

Замечание. Трудоемкость алгоритма А – $O(n^3)$.

Доказана следующая гарантированная оценка точности алгоритма А.

Теорема 2. При $n \geq 3$ для любого n -вершинного графа $G = (V, E)$ имеет место оценка

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

где M – кластерный граф, построенный алгоритмом А, M^* – оптимальное решение задачи $\mathbf{GC}_{1,3}$ на графе G .

ЛИТЕРАТУРА

[1] Вычислительная сложность задачи аппроксимации графов / А.А. Агеев, В.П. Ильев, А.В. Кононов, А.С. Талевнин // Дискрет. анализ и исслед. операций. 2006. Серия 1. Т. 13, № 1. С. 3–11.

[2] Bansal N. Correlation clustering / N. Bansal, A. Blum, S. Chawla // Machine learning. 2004. V. 56. P. 89–113.

[3] *Ben-Dor A.* Clustering gene expression patterns / Ben-Dor A., Shamir R., Yakhimi Z. // *J. Comput. Biol.* 1999. Vol. 6, № 3–4. P. 281–297.

[4] *Charikar M.* Clustering with qualitative information / M. Charikar, V. Guruswami, A. Wirth // *J. Comput. Syst. Sci.* 2005. Vol. 71, № 3. P. 360–383.

[5] *Coleman T.* A local-search 2-approximation for 2-correlation-clustering / T. Coleman, J. Saunderson, A. Wirth // *Algorithms – ESA 2008: Lecture Notes in Computer Science.* 2008. Vol. 5193. P. 308–319.

[6] *Giotis I.* Correlation clustering with a fixed number of clusters / I. Giotis, V. Guruswami // *Theory of Computing.* 2006. Vol. 2, № 1. P. 249–266.

[7] *Shamir R.* Cluster graph modification problems / R. Shamir, R. Sharan, D. Tsur // *Discrete Appl. Math.* 2004. Vol. 144, № 1–2. P. 173–182.

Александр Владимирович Моршинин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
mater_1234@mail.ru.

ПРОЕКТИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ ИЗДЕЛИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ ДИСКРЕТНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Е. О. Рогова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

Д. И. Ягофарова

Рассматриваются вопросы проектирования технических устройств с применением методов дискретной оптимизации с логическими ограничениями. Приводятся постановки задач и модели 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. Ограничения можно разделить на классы по причине их появления. Примером могут служить: условия несовместимости деталей; приоритет, отданный проектировщиком той или иной детали; заданная минимальная величина суммы весов деталей для конечной сборки устройства; порог значения производительности устройства и т.д.

При формализации ограничений строятся формулы, представляющие собой дизъюнкцию литералов содержащих логические переменные x_j . Нами будет рассмотрено 2 варианта задачи проектирования технического устройства.

Каждая деталь может быть выбрана из некоторого перечня возможных вариантов этой детали.

В ходе построения модели возникают ограничения следующих типов:

1. Несовместимость по каким-либо характеристикам.
2. Возможность исключения из набора одного из элементов при выборе некоторого типа другого элемента.

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

Совокупность ограничений сформулированных к задаче обозначим C_k , $k = 1, \dots, p$. Для детали соответствующей переменной $y_j = \{0; 1\}$, определим величину c_j , $j = 1, \dots, n$ – цену соответствующей детали и вес детали – d_j , который может учитываться при построении ограничений. Тогда обозначим $h_i = (y_1, \dots, y_n)$, $i = 1, \dots, m$ – изделие удовлетворяющее системе ограничений C_k , $k = 1, \dots, p$. Каждому вектору $h_i = (y_1, \dots, y_n)$ ставится в соответствие значение функции f отображающую ее «производительность».

Процесс оптимизации проектирования отображается целевой функцией, которая представляет собой конечную стоимость технического устройства, которую следует минимизировать.

Модель для задачи ЦЛП с минимальным допустимым значением функции f , установленным равным α имеет вид:

$$\sum_{y_j \in h_l} c_j y_j \rightarrow \min \quad (1)$$

при условии

$$f(h_l) \geq \alpha, \quad l = 1, \dots, s \quad (2)$$

h_l – удовлетворяет системе ограничений $C_k, k = 1, \dots, p$.

Решение данной задачи отягчается отсутствием возможности вычисления функции f , т.к. на сегодняшний день не выведена зависимость этого параметра от отдельных характеристик комплекующих. Поэтому нам остается только пользоваться известными значениями этого показателя, для конкретных сборок.

Модель для задачи ЦЛП с максимальной приемлемой величиной весов $d_j, j = 1, \dots, m$ деталей в изделии, которая установлена равной β , имеет вид:

$$\sum_{y_j \in h_l} c_j y_j \rightarrow \min \quad (1)$$

при условии

$$\max_{h_l} d_j \leq \beta, \quad l = 1, \dots, s \quad (2)$$

$$\max_{h_l} d_j \rightarrow \min \quad (3)$$

h_l – удовлетворяет системе ограничений $C_k, k = 1, \dots, p$.

Структура задач проектирования технического устройства с условием выполнения ограничений не позволяет применить локальный поиск на всех возможных комбинациях деталей устройства, т.к. велика вероятность выбора вектора, не принадлежащего множеству допустимых решений. Поэтому предварительно решается задача выполнимости логической формулы, которая представляет собой совокупность ограничений. Каждая скобка длины k логической формулы, кодируется множеством чисел k , соответствующих индексам переменных. Основная процедура алгоритма: поиск представителей L-классов и переход от текущего L-класса к следующему. В данном алгоритме регулярно используется процедура упрощения формулы.

Результат работы алгоритма – множество допустимых решений задачи.

Алгоритм решения задачи состоит в последовательном применении алгоритма отыскания множества допустимых решений и алгоритма локального поиска. При этом критерием остановки служит предельное количество перезапусков алгоритма локального поиска, при условии, что $H \neq \emptyset$.

В нашем случае под окрестностью N_k вектора x будем понимать множество векторов x' , которые отличаются от него на k координат.

Таким образом, при проектировании сложных изделий приходится перебирать и сравнивать большое количество вариантов изделия. В связи с наличием ограничений различного типа является актуальным совершенствование процесса автоматизации проектирования. В том числе дальнейшее исследование применения локального поиска для решения такого типа задач.

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,
2-й курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
rogova.evgenya.314159@mail.ru.

ПЛАНИРОВАНИЕ ИНВЕСТИЦИОННЫХ ПРОЕКТОВ С ИДЕНТИЧНЫМИ РАБОТАМИ

К. А. Черных

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник В. В. Сервах*

Рассматривается задача календарного планирования выполнения совокупности идентичных технологически независимых работ, направленных на получение прибыли. Учитывается возможность использования кредита и реинвестирования дохода, получаемого от завершающихся работ. Исследуются свойства задачи, получено аналитическое решение задачи в непрерывном случае, предложен алгоритм решения дискретного варианта задачи.

Ключевые слова: инвестиционный проект, календарное планирование, идентичные работы.

Инвестор владеет участком земли, на котором хочет построить коттеджный поселок из N однотипных домов. Для начала возведения каждого дома требуется финансирование в размере k единиц. Длительность строительства каждого дома берем за единицу времени. По завершению строительства дом продается по цене c . Полученные от продажи деньги могут быть вложены в строительство остальных домов. Имеется начальный капитал K_0 . Возможно использование кредитов по ставке r за единицу времени. Необходимо определить сроки возведения домов, при которых общая дисконтированная прибыль всего проекта будет максимальной.

Сравнение денег в различные моменты времени осуществляется с помощью операции дисконтирования. Ставка альтернативного безрискового ликвидного размещения капитала равна r_0 . Очевидно, что $c \geq k(1 + r_0)$. Иначе строить дома невыгодно, так как альтернативное размещение капитала обеспечит больший доход. Кроме того, для запуска проекта необходимо либо наличие начального капитала, либо чтобы прибыльность строительства была выше ставки по кредиту, то есть $c \geq k(1 + r)$.

Задача календарного планирования с ресурсами складываемого типа, которым относятся финансы, рассматривалась в [1]. В [2] исследована задача максимизации чистой приведенной прибыли, а в [3] задача при возможности использования кредитов. Данная работа посвящена задаче с идентичными независимыми работами.

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.

Обозначим $a = \frac{k}{c}$. Из утверждений 1 и 2 получаем

$$x_0 = \frac{a}{1-ar}, \quad x_1 = \frac{1-a-ar}{1-ar}, \quad x_t = \frac{1-a-ar}{1-ar \cdot \frac{1-a^{t'}}{1-a}}, \quad t = 2, 3, \dots, T-1.$$

При этом целевая функция имеет вид

$$NPV = \frac{c}{(1+r_0)^T} \cdot \frac{(1-a-ar)(1-a)}{1-a-ar \cdot (1-a^{T-1})} \rightarrow \max_T.$$

Наибольшее значение этой функции достигается при

$$T = \log_a \left(\frac{(a(1+r)-1) \cdot \ln(1+r_0)}{r \cdot \ln a(1+r_0)} \right).$$

Приведем небольшой пример. Пусть $k = 1$; $c = 1,4$; $r = 0,2$; $r_0 = 0,1$. Оптимальное значение $T \approx 3,8$. Оптимальное целочисленное значение $T^* = 4$. Оптимальное решение $(x_0, x_1, x_2, x_3) = (0,502; 0,100; 0,189; 0,209)$. Значение прибыли при $T = 1, 2, 3, 4, 5$ равно, соответственно: 0,182; 0,193; 0,199; **0,200**; 0,197.

При ненулевом начальном капитале K_0 в случае $K_0 < \frac{k^2}{c+k}$ выкладки аналогичны. Если $K_0 \geq \frac{k^2}{c+k}$, то работы выполняются без привлечения кредита.

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.

Трудоемкость 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. Этот пример показывает необходимость оптимизации размера используемых кредитов.

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,
2-й курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
ksech@bk.ru.

Секция

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

К. Ю. Беломоин

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. Н. Вакилов

В статье рассматривается задача нахождения критического индекса z , предлагается метод Монте-Карло для неупорядоченной модели Изинга, с помощью которого были получены результаты для концентраций $p = 0,5$; $p = 0,6$; $p = 0,8$; $p = 0,95$.

Ключевые слова: динамический индекс, метод Монте-Карло, модель Изинга.

Исследование критического поведения систем остается одной из главных проблем в физика конденсированного вещества и возбуждает большой интерес, так как все реальные твердые тела содержат структурные дефекты.

Из теоретических подходов можно отметить теорию ренормализационных групп [1], теорию взаимодействующих мод [2], гипотезу динамического скейлинга.

Физический интерес представляет нахождение динамического критического индекса z , определяющего скорость замедления релаксации параметра порядка по мере приближения к точке фазового перехода.

В данной статье была использована трехмерная неупорядоченная модель Изинга. Для определения динамического индекса z , характеризующего критическое замедление времени релаксации систем $t_c \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, был применен метод Монте-Карло для

односпиновой динамики [3; 4] совместно с методом динамической ренорм-группы [5]. Для этого будет осуществляться процедура блочного разбиения системы, когда блок b^d соседних спинов заменялся одним спином с направлением, определяемым ориентацией направлением большинства спинов в блоке.

Использование двух систем после блочного разбиения с размерами блоков b и b' и определение промежутков времени t_b и $t_{b'}$ позволяет получить динамический индекс z из соотношения

$$t' = b^z t. \quad (1)$$

$$\frac{t_b}{t_{b'}} = \left(\frac{b}{b'}\right)^z \text{ или } z = \frac{\ln(t_b/t_{b'})}{\ln(b/b')}. \quad (2)$$

Затем существовала процедура усреднения коэффициентов k_b с выделением среднего r_{av} и последующего определения параметров n_b прямых $l g m_b = k_b l g t + n_b$ путем их приведения через точки пересечения $k_b l g t + n_b$ в середине интервалов Δm_b . В результате формула для определения z переходит в выражение [6]

$$z = \frac{n_{b'} - n_b}{k_{av} l g (b/b')}. \quad (3)$$

Также на основе соотношения (2) можно получить наборы значений индекса z_b , соответствующих различным различным b при $b'=1$. Выделенная тенденция зависимости z от b позволила осуществить процедуру экстраполяции на случай $b \rightarrow \infty$, предполагающую зависимость $z_b = z_{b \rightarrow \infty} + const * b^{-1}$.

Рассмотрим полученные результаты нашего моделирования на рис. 1 уже усредненное значение по 500 прогонкам.

Для рассмотренных примесных систем получены следующие результаты: $(0,95) = 2,14 \pm 0,05$, $z(0,8) = 2,23 \pm 0,06$, $z(0,6) = 2,62 \pm 0,08$, $(0,5) = 2,65 \pm 0,08$.

Полученная зависимость z от b (рис. 2) позволила реализовать типичную экстраполяцию для ренормгруппового преобразования на случай $b \rightarrow \infty$

$$z_b = z_{b \rightarrow \infty} + const * b^{-1}. \quad (4)$$

Рассмотрев изложенный метод и данные, мы получили множества значений показателя z различных значений b с использованием соотношения (3) приведенных в таблице выше. Для примесных систем процедура ренормгруппового преобразования достигает некоторой асимптоты mb в зависимости от параметра b

блочного разбиения при больших значениях b , чем в случае с чистой системы. Это влияние становится менее возможным с увеличением b . С другой стороны, изменения перенормированной намагниченности mb со временем уменьшаются при больших значениях b , следовательно, значения z возрастают.

Таким образом в данной работе осуществлено моделирование критической динамики трехмерной модели Изинга. Реализован алгоритм метода Монте-Карла и динамической ренорм-группы.

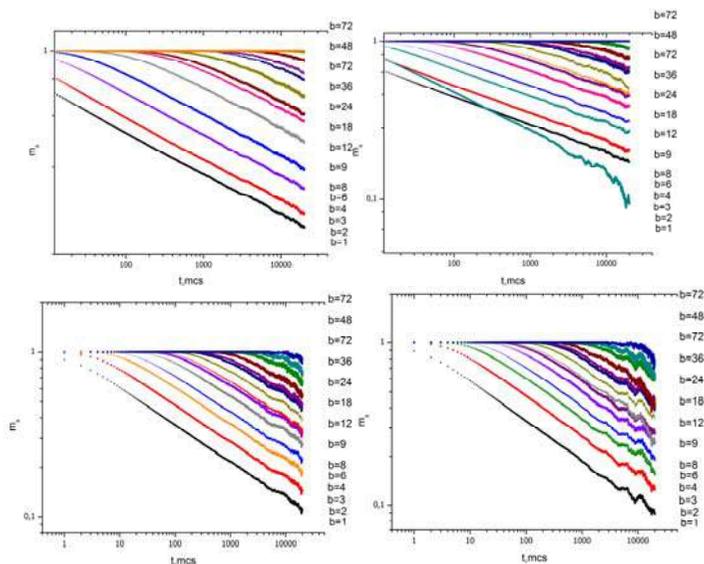


Рис. 1. Изменение m_1 и m_b намагниченности от времени при $p = 0,5; 0,6; 0,8; 0,95$

Значения динамического показателя z для систем с разной концентрацией спинов p

b	$P = 0,5$	$P = 0,6$	$P = 0,8$	$P = 0,95$
8	2,61	2,43	2,26	2,23
9	2,62	2,46	2,26	2,23
12	2,64	2,52	2,26	2,23
16	2,66	2,58	2,26	2,22
18	2,68	2,60	2,27	2,21
24	2,69	2,64	2,27	2,21

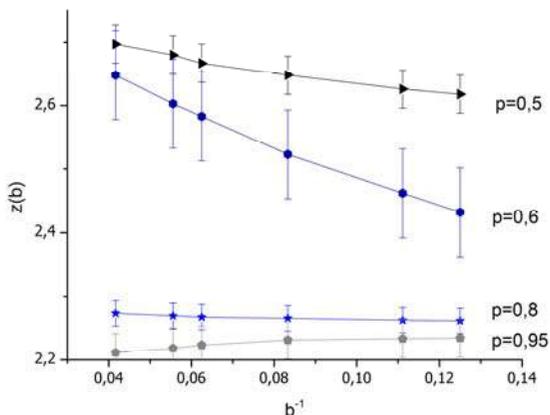


Рис. 2. Зависимость динамического показателя z от b для различных спиновых концентраций p

По результатам моделирования вычислен критический динамический индекс z для неупорядоченной модели Изинга.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мицкека А.И. Фазовые переходы и критические явления / А.И. Мицкека, Т.С. Шубиной; под ред. С.В. Вонсовского. М., 1973. 419 с.
- [2] Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Г. Стенли. М., 1973. 425 с.
- [3] Prudnikov V.V., Vakilov A.N., Zolotarev S.A. Journal of Physics: Conference Series. 2014. Vol. 510. p. 012019.
- [4] Прудников В.В., Вакилов А.Н. // ЖЭТФ. 1993. Т. 103. Вып. 3. С. 962–969.
- [5] Jan N. Dynamic Monte Carlo renormalization group / N. Jan, L.L. Moseley, D. Stauffer // J. Stat. Phys. 1983. Vol. 33. P. 1–11.
- [6] Прудников В.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования: учебное пособие / В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, П.В. Прудников. Омск, 2007. 288 с.

Константин Юрьевич Беломоин,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 2-й курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
 lococbv@gmail.com.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ТРЕХПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР С ИЗИНГОПОДОБНЫМИ МАГНИТНЫМИ ПЛЕНКАМИ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ СТАРЕНИЯ

М. И. Болдырев

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
В. В. Прудников*

Рассмотрены результаты численного исследования методом Монте-Карло особенностей неравновесного поведения в мультислойной магнитной структуре с магнитными пленками, описываемыми моделью Изинга. Анализ полученной зависимости автокорреляционной функции при эволюции системы из начального состояния с $m_0 = 0,02$ позволил выявить эффекты старения, характеризующиеся замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания. Показано, что эффекты старения возникают в магнитных структурах не только вблизи критической температуры T_c , но и во всей низкотемпературной фазе $T < T_c$.

Ключевые слова: Монте-Карло, автокорреляционная функция, эффекты старения, критическая температура, модель Изинга.

Исследование макроскопических статистических систем, характеризующихся медленной динамикой, и изучение свойств структур из ультратонких магнитных пленок вызывают повышенное внимание исследователей как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения [1; 2]. При медленной эволюции данных систем из неравновесного начального состояния в них наблюдаются свойства старения и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы [3; 4].

Известно, что вблизи температуры T_c фазового перехода второго рода время релаксации системы является аномально большой величиной $t_{\text{rel}} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, 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, например, эффекты старения.

Эти эффекты проявляются на неравновесном этапе с временами $t \ll t_{rel}$ и выражаются в осуществлении двухвременных зависимостей корреляционной функции от времени ожидания t_w и времени наблюдения $t - t_w$.

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

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

Важным моментом является то, что обнаруженные к текущему времени особенности неравновесной критической динамики [5] могут служить основой для понимания и адекватной интерпретации экспериментальных данных, полученных для различных мультислойных магнитных структур. Известно, что эффекты старения проявляются в объемных системах вблизи критической точки, в то время как магнитные сверхструктуры с наномасштабной периодичностью дают возможность увеличить время релаксации за счет эффектов, связанных с увеличенной в этих структурах характеристической корреляционной длиной спин-спиновых корреляций, и следовательно наблюдать в них особенности поведения систем с медленной динамикой.

В данной работе методом Монте-Карло было выполнено моделирование неравновесного поведения мультислойных структур (рис. 1) с магнитными пленками с размерами $L \times L \times N$ и наложенными периодическими граничными условиями при критической температуре T_c ферромагнитного упорядочения в пленках, а так же при $T_c/2$. Рассматривалась структура из магнитных пленок с толщинами $N = 3$ (в единицах моноатомных слоев).

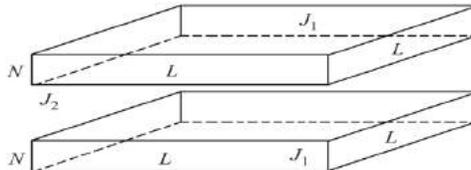


Рис. 1. Мультислойная структура, состоящая из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла:

L и N – линейные размеры пленок; J_1 и J_2 – обменные интегралы

Значение обменного интеграла J_1 , определяющего взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки, бра-лось $J_1/k_B T=1$, а для взаимодействия между пленками $J_2 = -0.5 J_1$. Гамильтониан системы задавался выражением:

$$H = -J \sum_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z \quad (2)$$

Был проведен расчет двухвременной зависимости автокорреляционной функции при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с $m_0 = 0,02$ с температурами теплового резервуара (температурой замораживания) $k_B T_c/J = 3,2819$ и $T_c/2$.

Графики, представленные на рис. 2, демонстрируют наличие в системе эффектов старения, т. е. рост времени корреляции, требуемого для приведения системы в состояние равновесия, при увеличении времени ожидания t_w – “возраста” системы.

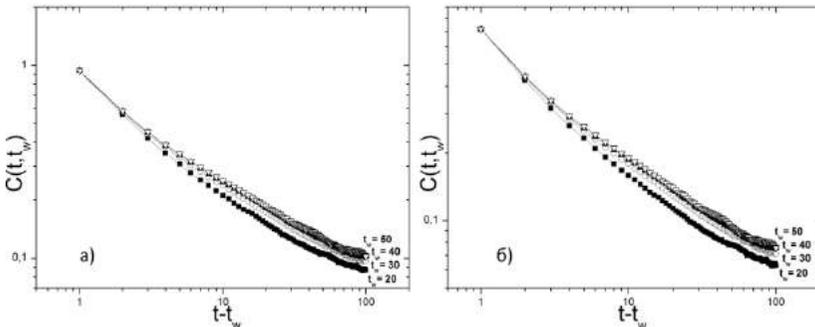


Рис. 2. Временная зависимость автокорреляционной функции для разных времен ожидания t_w , вычисленная при критической температуре T_c (а) и при значении температуры $T_c/2$ (б)

Анализ графиков (рис. 2) показывает, что эффекты старения возникают в мультислойной структуре не только при значениях температуры равной T_c , но и при значениях $T < T_c$, т. е. в низкотемпературной фазе магнитных пленок.

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Vincent E.* Complex behavior of glassy systems / E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo // *Lect. Notes Phys.* 1997. Vol. 492. P. 184.

[2] *Vaz C.A.F.* Magnetism in ultrathin film structures / C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland, G. Lauhoff // *Rep. Prog. Phys.* 2008. Vol. 71. P. 056501–056578.

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

[4] *Прудников В.В., Прудников П.В., Пуртов А.Н.* Письма в ЖЭТФ. Т. 104. Вып. 11. С. 797 – 805.

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

Максим Игоревич Болдырев,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
boldy.maksim@gmail.com.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА С УЧЕТОМ ОДНООСНОЙ АНИЗОТРОПИИ

В. О. Борзилов

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор

П. В. Прудников

В данной статье представлено моделирование методом Монте-Карло критических свойств многослойных магнитных структур на основе анизотропной модели Гейзенберга. Проведен анализ равновесных характеристик системы. Исследованы температурные зависимости намагниченности и кумулянтов Биндера с целью определения значения критической температуры фазового перехода для пленок различной толщины.

Ключевые слова: многослойные магнитные структуры, анизотропная модель Гейзенберга.

Исследование многослойных структур на основе сверхтонких магнитных пленок микроскопического масштаба имеют высокое прикладное значение в области нанотехнологий и создания носителей информации с высокой плотностью записи [1].

В данной работе исследуются критические свойства многослойных структур состоящих из монослоев ферромагнитного материала. При моделировании рассматривались системы с различным количеством монослоев N и линейным размером L . В направлении X и Y используются периодические граничные условия и открытые граничные условия вдоль направления Z . Модель описывается гамильтонианом [2].

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - A \sum_i S_i^2, \quad (1)$$

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

В работе проводился расчет равновесных характеристик таких как намагниченность m и проекции m_z, m_{xy} намагниченности

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

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

Для определения неравновесных свойств рассчитывалась автокорреляционная функция [3]

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_S} \sum_i S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle - \left\langle \frac{1}{N_S} \sum_i S_i(t) \right\rangle \left\langle \frac{1}{N_S} \sum_i S_i(t_w) \right\rangle, \quad (3)$$

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

Определение критической температуры фазового перехода проводилось по температурным зависимостям кумулянтов Биндера

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

Для расчетов использовались системы с различным количеством слоев, константой анизотропии $A = 0, 1$ и линейными размерами решеток $L = 32, 48, 64$. Усреднение проводилось по 880 статистическим конфигурациям при $N = 1$. С увеличением количества слоев время счета значительно возрастало. Для остальных случаев использовались 200 и 100 статистических конфигураций. Пересечение температурных зависимостей кумулянта Биндера для монослоя и различных L , представлено на рис. 1. Результаты для $N = 3$ и $N = 10$ представлены на рис. 2 и рис. 3 соответственно. По нахождению центра тяжести треугольника образованного пересечением аппроксимационных прямых зависимостей кумулянтов Биндера были получены значения критических температур для систем с различным числом слоев для $N = 1$, $T_c = 7175$; $N = 3$, $T_c = 1,789$; $N = 10$, $T_c = 1,429$.

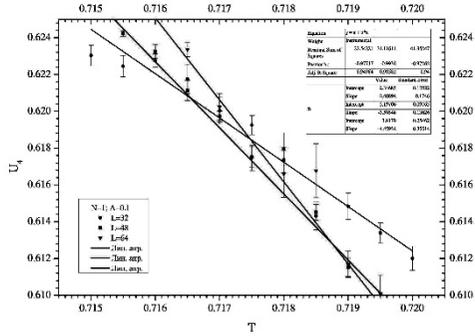


Рис. 1. Линейная аппроксимация температурной зависимости кумулянтов Биндера для $N = 1$

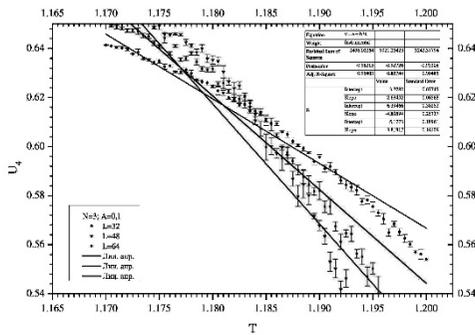


Рис. 2. Линейная аппроксимация температурной зависимости кумулянтов Биндера для $N = 3$

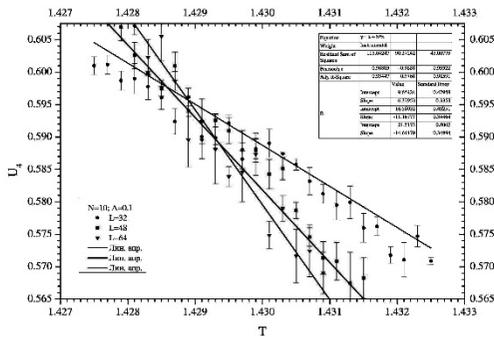


Рис. 3. Линейная аппроксимация температурной зависимости кумулянтов Биндера для $N = 10$

Заклучение

В представленной работе был проведен расчет значений критических температур для пленок различной толщины с учетом влияния одноосной анизотропии $T_c(N = 1) = 7175$; $T_c(N = 3) = 1,789$; $T_c(N = 10) = 1,429$. Полученные результаты находятся в соответствии с проделанной ранее работой [4].

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Scheunert G.* A review of high magnetic moment thin films for microscale and nanotechnology applications / G. Scheunert, O. Heinonen, R. Hardeman, A. Lapicki, M. Gubbins, R.M. Bowman // *Appl. Phys. Rev.* 2016. Vol. 3. P. 011301.

[2] *Mayberry J.* Equilibrium and nonequilibrium properties of synthetic metamagnetic films: A Monte Carlo study / J. Mayberry, K. Tauscher, M. Pleimling // *Phys. Rev. B.* 2014. Vol. 90. P. 014438.

[3] *Medvedeva M.A.* Non-equilibrium critical behavior of thin Ising films / M.A. Medvedeva, P.V. Prudnikov, A.S. Elin // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* 2016. Vol. 12. p. 094 P. 2.

[4] *Soldusova A.P.* Monte-Carlo investigation of competition between uniaxial anisotropy, exchange and dipolar interactions in critical behavior of ultrathin magnetic films / A.P. Soldusova, P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2016. Vol. 681. P. 012017. P. 3.

Вадим Олегович Борзилов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
vadimborzilov@gmail.com.

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

С. З. Кожухметов

*Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент
М. В. Мамонова*

В данной работе, в рамках вариационного метода функционала спиновой плотности, исследовано влияние заместительной адсорбции монослойных пленок кобальта, железа 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.

Исследование изменения поверхностных характеристик различных веществ при адсорбции тонких пленок 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.

Экспериментальные исследования адсорбции выявили такие эффекты, как выталкивание адатомами атомов подложки на поверхность с образованием поверхностных «островов» [1–3]. При этом поверхность испытывает значительную реконструкцию, что существенно влияет на работу выхода электронов [4].

Таким образом, данная работа посвящена исследованию влияния активированной и неактивированной адсорбции монослойной пленки ферромагнитных металлов на работу выхода электрона с поверхности плотноупакованной грани подложки из переходных металлов. В данной работе были произведены расчеты ра-

боты выхода для Co, Ni и Fe на медной Cu(111) и вольфрамовой W(110) подложке.

Работа выхода рассчитывалась по формуле:

$$\varphi(\theta) = \varphi D(\theta) - \mu, \quad (1)$$

где φD – дипольный потенциальный барьер, μ – химический потенциал, θ – степень заполнения адатомами поверхности подложки.

$$\varphi D(\theta) = \varphi_0 + \varphi_{ei}^m + \varphi_{ei}^s + \varphi_{ei}^a, \quad (2)$$

где φ_0 это высота потенциального барьера в модели «желе» можно записать в следующем виде:

$$\varphi_0 = \frac{4\pi n_1}{\beta^2}. \quad (3)$$

Электрон-ионные поправки к потенциальному барьеру считаются по следующим формулам:

$$\varphi_{ei}^m = -\frac{4\pi n_1}{\beta^2} \frac{e^{-\beta(2D+l+h)} e^{-\beta d_1/2}}{2-e^{-\beta(2D+l+h+d_1)}} \{\beta d_1 \operatorname{ch}(\beta r_{c1}) - 2\operatorname{sh}(\beta d_1/2)\} \quad (4)$$

– для металлической подложки;

$$\varphi_{ei}^s = -\frac{4\pi n_2}{\beta^2} \frac{e^{-\beta(2D+h)} e^{\beta l/2}}{2-e^{-\beta(2D+l+h+d_1)}} \{\beta l \operatorname{ch}(\beta r_{c2}) - 2\operatorname{sh}(\beta l/2)\} \quad (5)$$

– для приповерхностного слоя;

$$\varphi_{ei}^a = -\frac{4\pi n_3}{\beta^2} \frac{e^{-\beta h/2}}{2-e^{-\beta(2D+l+h+d_1)}} \{\beta h \operatorname{ch}(\beta r_{c3}) - 2\operatorname{sh}(\beta h/2)\} \quad (6)$$

– для пленки адсорбата.

Химический потенциал μ электронного газа с учетом обменно-корреляционных, псевдопотенциальных и температурных поправок принимает вид

$$\mu(T) = \mu(T=0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu(T=0)} \right)^2 \right], \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mu = 0.5(3\pi^2 n_1)^{2/3} - \left(\frac{3n_1}{\pi} \right)^{1/3} - \frac{0.056 n_1^{2/3} + 0.0059 n_1^{1/3}}{(0.079 + n_1^{1/3})^2} - \\ - 0.4Z_1^{2/3} \left(\frac{4\pi n_1}{3} \right)^{1/3} + 4\pi n_1 r_1^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Результаты расчета работы выхода электрона с поверхности медной и вольфрамовой подложек при неактивированной и активированной адсорбции ферромагнитных пленок Co, Ni, Fe в зависимости от температуры и параметра покрытия приведены на рис. 1–3.

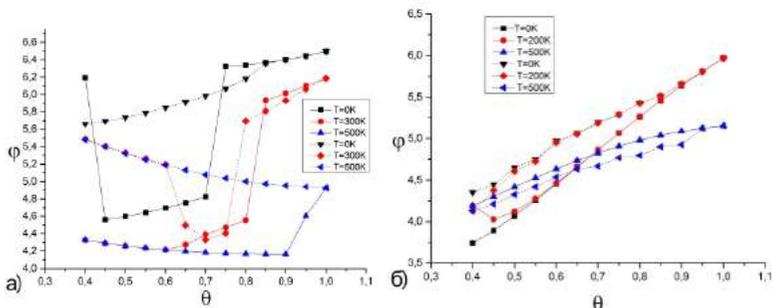


Рис. 1. Зависимость работы выхода фотопараметра покрытия θ для систем а) Co/Cu б) Co/W без учета (сплошная линия) и с учетом перемешивания (пунктирная линия)

Из графика зависимости работы выхода электрона с поверхности меди рис. 1–3а) видно, что при $T < 500\text{K}$ существует критическое значение параметра покрытия θ , при котором скачком меняется в сторону увеличения значение работы выхода электрона. Это вызвано фазовым переходом в пленке от парамагнитного состояния ($T > T_c(\theta)$) к ферромагнитному ($T < T_c(\theta)$). Видно, что при активированной адсорбции до критической температуры значения работы выхода увеличиваются с ростом параметра покрытия θ , а при $T = 500\text{K} > T_c(\theta = 1)$ уменьшаются.

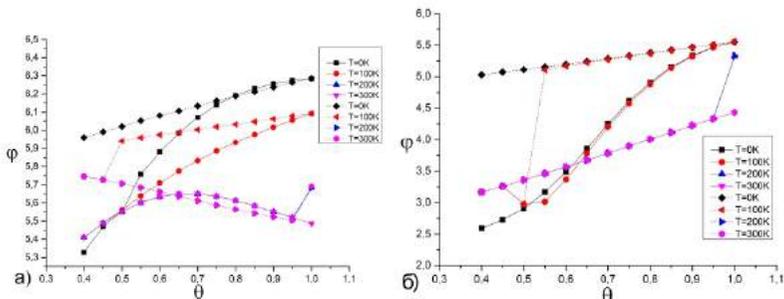


Рис. 2. Зависимость работы выхода ϕ от параметра покрытия θ для системы а) Ni/Cu б) Ni/W

Из графика зависимости работы выхода электрона с поверхности вольфрама рис. 1–3б) видно, что для всех температур и для

активированной и не активированной адсорбции показатель работы выхода увеличивается с увеличением параметра покрытия θ .

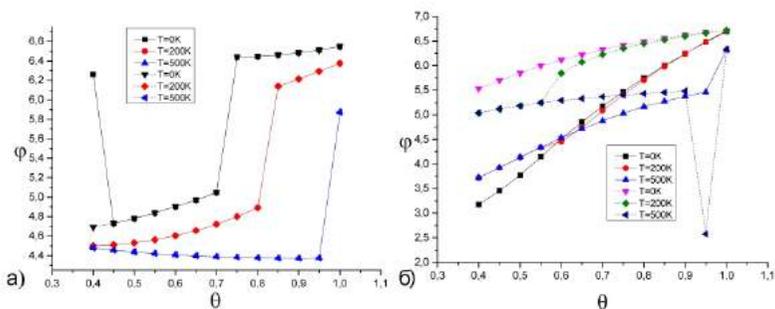


Рис. 3. Зависимость работы выхода ϕ от параметра покрытия θ для системы а) Fe/Cu б) Fe/W

Сравнение графиков работы выхода электрона при адсорбции с учетом и без учета перемешивания позволяет сделать вывод, что наложение графиков при активированной и не активированной адсорбции, указывает на значение θ при котором образуется пленка, а их расхождение на сильное перемешивание.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Мамонова М.В.* Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы / М.В. Мамонова, В.В. Прудников, И.А. Прудникова. 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.* Alkali-metal adsorption on close-packed metal surfaces / C. Stampft, J. Neugebauer, M. Scheffler // Surf. Rev. and Lett. 1995. Vol. 2. P. 317–340.

Саят Зинатович Кожухметов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
sayatanama@mail.ru.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ ЧИСТОЙ И РАЗБАВЛЕННОЙ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА ПРИ ЭВОЛЮЦИИ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

В. В. Крижановский

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
В. В. Прудников*

Представлены результаты численного исследования особенностей неравновесного критического поведения в чистой и разбавленной двумерной модели Изинга при ее эволюции из различных начальных состояний.

Ключевые слова: неравновесное критическое поведение, двумерная модель Изинга, начальные состояния.

Данная работа посвящена исследованию методами Монте-Карло особенностей неравновесного критического поведения чистой и разбавленной двумерной модели Изинга при ее эволюции из различных начальных состояний. Данные особенности являются типичными для систем, испытывающих фазовые переходы второго рода [1–4], с динамикой характеризующейся аномально большими временами релаксации.

Гамильтониан структурно неупорядоченной модели Изинга задается выражением [5]:

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

где $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие между спинами $S_i = \pm 1$ ближайших атомов. Случайные числа p_i принимают значения 1, если в i -узле находится спин, и 0, если в узле немагнитный атом примеси.

Реализовано компьютерное моделирование критической релаксации намагниченности и временной зависимости автокорреляционной функции для квадратных решеток с линейным размером $L = 256$ при старте системы из различных начальных состояний, определяемых приведенной намагниченностью m_0 в преде-

лах от низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ до высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$. Были получены результаты, представленные ниже в виде графиков.

Асимптотическое поведение $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$ для $m_0 = 1$ (рис. 1–2) позволяет определить значения критического показателя $\beta/z\nu = 0.057(4)$ для $p = 1$ и $\beta/z\nu = 0.038(6)$ для $p = 0.8$. Для чистой модели Изинга полученное значение находится в хорошем согласии со статическими критическими индексами $\beta = 0.125$, $\nu = 1$ и динамическим критическим индексом $z = 2.24(7)$ [5], что свидетельствует о правильности компьютерного моделирования. Известно [5], что дефекты структуры не меняют значений статических критических индексов в двумерной модели Изинга, влияя на значения динамического индекса лишь в области сильного разбавления со спиновыми концентрациями $p \leq 0.85$, увеличивая z с приближением к порогу спиновой перколяции $p_c \approx 0.59$. Увеличение z для систем с $p \leq 0.85$ отвечает за эффекты замедления релаксации с ростом концентрации дефектов. Из графиков для автокорреляционных функций (рис. 3–4) видно, что для разбавленной модели начальное состояние $m_0 = 0.4$ оказывается граничным, разделяющим два универсальных типа неравновесного критического поведения и соответствующим высокотемпературному и низкотемпературному начальным состояниям. Анализ скейлингового поведения автокорреляционной функции выявил для разбавленной модели эффекты сверхстарения.

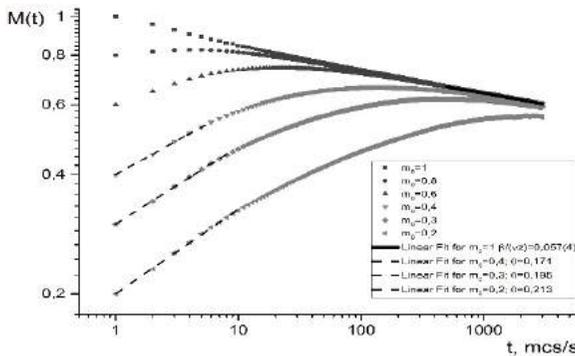


Рис. 1. График критической релаксации намагниченности $M(t)$ для чистой системы $sr = 1$

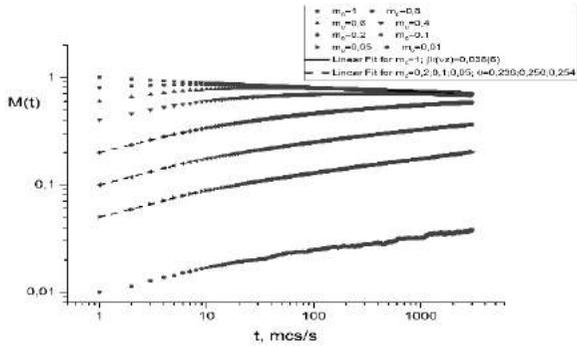


Рис. 2. График критической релаксации намагниченности $M(t)$ для разбавленной системы с $\rho = 0.8$

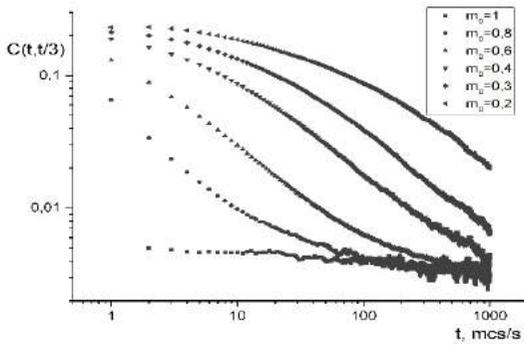


Рис. 3. График автокорреляционной функции $C(t, t_w = t/3)$ для чистой системы с $\rho = 1$

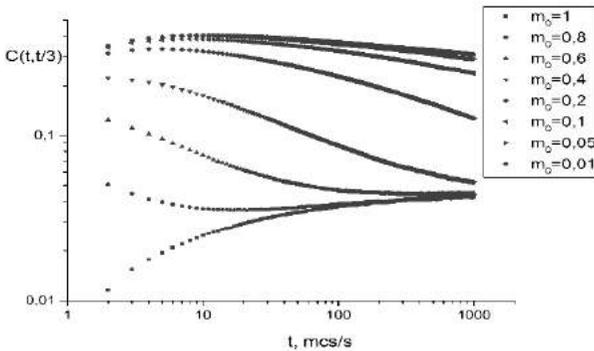


Рис. 4. График автокорреляционной функции $C(t, t_w = t/3)$ для разбавленной системы с $\rho = 0.8$

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Calabrese P.* Ageing properties of critical systems / P. Calabrese, A. Gambassi // *J. Phys. A.* 2005. Vol. 38. P. R133.

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

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

[4] *Krizhanovskiy V.V.* Features of the non-equilibrium critical dynamics in 3D pure and diluted Ising-like ferromagnets / V.V. Krizhanovskiy, P.N. Malyarenko, V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov // *J. SibFU. Mathematics&Physics.* 2016. Vol. 9. № 4. P. 463–468.

[5] *Прудников В.В.* Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем / В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов. М.: Физматлит, 2013. 316 с.

Вячеслав Васильевич Крижановский,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
FehunKrizh@gmail.com.

РЕНОРМГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ ЭФФЕКТОВ СТАРЕНИЯ В КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКЕ

И. В. Лаврухин

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
В. В. Прудников

Приведена методика и результаты ренормгруппового описания неравновесной критической релаксации модели А с эволюцией из упорядоченного начального состояния. Уже в приближении среднего поля выявлены нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в критическом режиме и двухвременная зависимость для корреляционной функции и функции отклика. Для универсального флуктуационно-диссипативного отношения проведен расчет флуктуационных поправок в однопетлевом приближении при фиксированной размерности пространства $d = 3$.

Ключевые слова: ренормгрупповой метод, флуктуационно-диссипативное отношение, эффекты старения.

Спиновые стекла [1], системы вблизи температуры фазового перехода второго рода [2], а также мультислойные магнитные сверхструктуры типа Co/Cr [3] характеризуются аномально большими временами релаксации, поэтому исследование их динамических свойств становится крайне актуальной проблемой. Одним из наиболее интересных явлений, проявляющихся на неравновесном этапе эволюции, является эффект *старения*, когда корреляционная функция и функция отклика системы проявляют нетривиальную двухвременную зависимость от времен s и $t > s$, где s – «возраст» системы (время, прошедшее с момента приготовления системы до начала измерения ее свойств), а t – время измерения. При этом время релаксации системы тем больше, чем она «старше». Для равновесной динамики данные функции зависят только от временного промежутка $t - s$.

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

дятся такие новые понятия, как флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО) [2] и эффективная температура [4]. Наше исследование 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

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

приведена в критическое состояние из начального низкотемпературного состояния с $T < T_c$ ($t = 0$). В (1) ϕ – параметр порядка, $r_0 \sim T - T_c$ – приведенная температура.

Действие системы имеет вид

$$S[\varphi, \tilde{\varphi}] = \int_0^\infty dt \int d^3x \left[\varphi \partial_t \tilde{\varphi} + \Omega \tilde{\varphi} \frac{\delta \hat{H}}{\delta \varphi} - \tilde{\varphi} \Omega \tilde{\varphi} \right]. \quad (2)$$

Влияние начального состояния с намагниченностью m_0 можно учесть, усредняя характеристики системы с весом $\exp(-H_0[\phi_0])$, где

$$H_0[\varphi_0] = \int d^3x \frac{\tau_0}{2} [\varphi_0(x) - m_0]^2. \quad (3)$$

Функция отклика системы $R(t, s)$

$$R_{i,j}(t, s) = \left. \frac{\delta \langle \varphi_i(t) \rangle}{\delta h_j(s)} \right|_{h=0} \quad (4)$$

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

$$C_{i,j}(t, s) = \langle \varphi_i(t) \varphi_j(s) \rangle - \langle \varphi_i(t) \rangle \langle \varphi_j(s) \rangle \quad (5)$$

отражает взаимосвязь значений параметра порядка в различных точках, в моменты времени t и s . Связь этих двух функций на равновесном этапе эволюции системы определяется флуктуационно-диссипативной теоремой

$$R_{i,j}(t,s) = \frac{1}{T} \frac{\partial C_{i,j}(t,s)}{\partial s}. \quad (6)$$

Однако на неравновесном этапе релаксации ФДТ может нарушаться. В этом случае вводится флуктуационно – диссипативные отношения в пространстве координат и импульсов

$$X_x(t,s) = \frac{T R_x(t,s)}{\partial_s C_x(t,s)}, \quad X_q(t,s) = \frac{T R_q(t,s)}{\partial_s C_q(t,s)}, \quad (7)$$

предельные значения которых при $x=0, q=0$ совпадают

$$X^\infty = \lim_{s \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X_{x=0}(t,s) = \lim_{s \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X_{q=0}(t,s). \quad (8)$$

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

Для учета ненулевого среднего значения намагниченности системы $m(t)$, удобно перейти к новым переменным

$$\psi(t) = \varphi(t) - m(t), \quad \tilde{\psi}(t) = \tilde{\varphi}(t). \quad (9)$$

При этом, в действие системы (2) будет входить намагниченность, что приводит к уравнению, описывающему ее временное поведение

$$\partial_t m(t) + \frac{\Omega}{3} m^3(t) + \frac{\Omega g_0}{2} \int (dq) C_q^0(t,t) + O(g_0^2) = 0, \quad (10)$$

а затравочные корреляционная функция и функция отклика будут зависеть от намагниченности как:

$$R_q^0(t,s) = \theta(t-s) \exp[-q^2(t-s) - \int_s^t dt' m^2(t')], \quad (11)$$

$$C_q^0(t,s) = 2 \int_0^s dt' R_q^0(t,t') R_q^0(s,t'). \quad (12)$$

В теории среднего поля Ландау в уравнениях (1), (2), (10) можно положить $g_0 = 0$, что приведёт к значениям затравочных функций

$$R_q^0(t,s) = \left(\frac{s}{t}\right)^{3/2} e^{-q^2(t-s)}, \quad (13)$$

$$C_q^0(t, s) = 2 \frac{e^{-q^2(t+s)}}{(st)^{3/2}} \int_0^s dt' t'^3 e^{2q^2 t'} \quad (14)$$

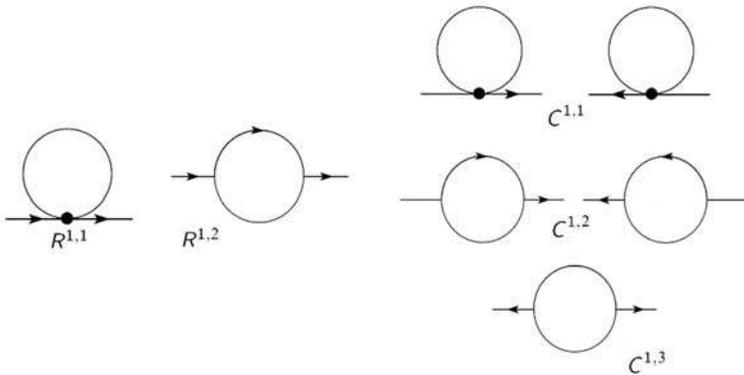
и предельному значению ФДО $X_{q=0}^\infty = 4/5 \neq 1$.

В однопетлевом приближении из (10) сначала вычисляется новое выражение, описывающее поведение намагниченности при использовании (14), а затем новые значения затравочных функций (11), (12).

В корреляционной функции и функции отклика необходимо учитывать флуктуационные поправки, задаваемые в однопетлевом приближении диаграммами Фейнмана.

$$R(t, s) = R_{q=0}^0(t, s) - \frac{g_0}{2} R^{1,1} + g_0 R^{1,2}, \quad (15)$$

$$C(t, s) = C_{q=0}^0(t, s) - \frac{g_0}{2} C^{1,1} + g_0 C^{1,2} + \frac{g_0}{2} C^{1,3} \quad (16)$$



После проведения описанных операций в однопетлевом приближении при $d=3$ было получено предельное значение ФДО $X_{q=0}^\infty = 0.85$. Данный результат можно сравнить с результатами, полученными в рамках методов ϵ -разложения, 0.78 [5], и Монте-Карло, 0.77(6) [6], 0.784(5) [7]. Видно, что $X_{q=0}^\infty = 0.85$, характеризующее увеличенным значением ФДО относительно среднеполевого 0.8, не согласуется с данными работы [5], а также результатами компьютерного моделирования [6; 7].

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Cugliandolo L.F., Kurchan J.* // Phys. Rev. Lett. 1993. Vol. 71. P. 173.
- [2] *Calabrese P., Gambassi A.* // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 66. P. 066101.
- [3] *Mukherjee T., Pleimling M., Binek Ch.* // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. 134425.
- [4] *Cugliandolo L.F., Kurchan J.* // Phys. Rev. E. 1997. Vol. 55. P. 3898.
- [5] *Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F.* // J. Stat. Mech. 2006. 06016.
- [6] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Pospelov E.A., Mal'yarenko P.N., Vakilov A.N.* // Prog. Theor. Exp. Phys. 2015. 053A01.
- [7] *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102. С. 192–201.

Иван Владимирович Лаврухин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
3-й курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
jovanni.omsu@gmail.com.

РАСЧЕТ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОЦК-ПЛЕНОК С ЭФФЕКТАМИ ОДНООСНОЙ АНИЗОТРОПИИ

А. В. Левицкий

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
В. В. Прудников*

Представлены результаты численного исследования температурной зависимости коэффициента магнитосопротивления мультислойных магнитных структур с различными толщинами ферромагнитных гейзенберговских ОЦК-пленок. Исследовано влияние эффектов одноосной анизотропии на коэффициент магнитосопротивления. Показано, что изменение параметра одноосной анизотропии оказывает существенное влияние на изменение коэффициентов магнитного сопротивления.

Ключевые слова: Монте-Карло, мультислойные магнитные структуры, гейзенберговские магнитные пленки, магнитосопротивление.

В настоящее время статистические численные методы Монте-Карло успешно зарекомендовали себя при моделировании и описании физических свойств различных магнитных систем как объемных, так и низкоразмерных с выявлением особенностей, присущих данным системам при фазовых переходах [1]. В работах [2; 3] методами Монте-Карло осуществлено численное исследование размерных эффектов в критических свойствах многослойных гейзенберговских пленок. Для пленок различной толщины учтено влияние анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки. Был проведен расчет критических индексов, чьи значения наглядно продемонстрировали размерный переход от двумерных к трехмерным свойствам пленок с увеличением числа слоев.

В данной работе представлены результаты численного исследования температурной зависимости коэффициента магнитосопротивления мультислойных магнитных структур различными толщинами ферромагнитных гейзенберговских ОЦК-пленок. Исследовано влияние эффектов одноосной анизотропии на характеристики мультислойных структур.

Описание магнитных свойств тонких ОЦК-пленок и структур на их основе проводилось на основе применения изотропной модели Гейзенберга и дополнительного слагаемого, описывающего эффекты влияния одноосной анизотропии.

Гамильтониан модели задается в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \{S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z\} - K(N,T) \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1)$$

где спин атома $S_i = (S_i^x + S_i^y + S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор в узле i , J – обменный интеграл, характеризующий обменное взаимодействие ближайших спинов, $K(N,T)$ – параметр одноосной анизотропии.

Для описания трехпленочных магнитных структур с различной толщиной ферромагнитных ОЦК-пленок применена модель, представленная на рис. 1. Магнитные пленки характеризуются линейными размерами $L \times L \times N$ и наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Величина L^2 задавала число спинов в каждом слое, а N – число слоев в тонкой пленке. Один слой ферромагнитной пленки состоит из элементарных ячеек, соответствующих ОЦК структуре. Значения обменного интеграла, определяющие взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки, задавалось как $J_1 / k_B T = 1.0$, а взаимодействие между пленками как $J_2 = -0.5J_1$. В отсутствии внешнего магнитного поля за счет влияния $J_2 < 0$ в трехпленочной структуре реализуется антиферромагнитная конфигурация с противоположными направлениями намагниченностей пленок \underline{m}_1 и \underline{m}_2 .

На основе, разработанной в работе [4], методики был осуществлен расчет методами Монте-Карло температурной зависимости коэффициента магнитосопротивления для трехпленочных структур с гейзенберговскими магнитными пленками при различных толщинах ферромагнитных пленок.

Коэффициент магнитосопротивления для мультислойных магнитных структур определяется соотношением:

$$\delta_h = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}, \quad (2)$$

где R_{AP} – сопротивление образца при антипараллельной ориентации намагниченностей ближайших ферромагнитных слоев, а R_P – сопротивление образца при параллельной ориентации намагниченностей ферромагнитных слоев.

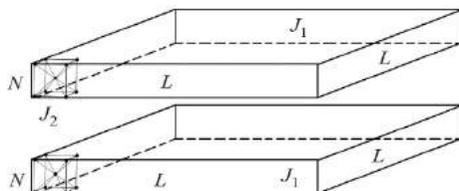


Рис. 1. Мультислоевая структура, состоящая из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла; L и N – линейные размеры пленок. J_1 и J_2 – обменные интегралы

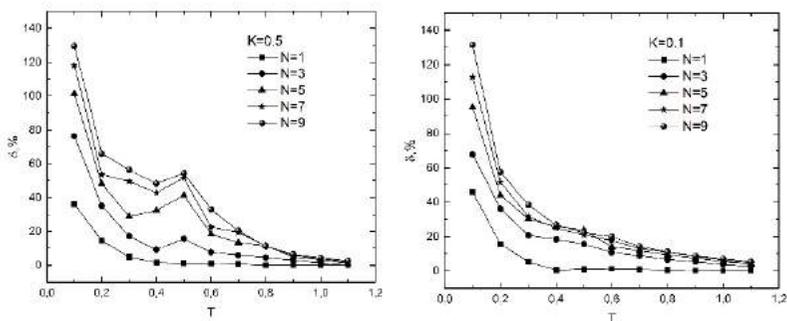


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента магнитосопротивления $\delta_n(T)$ для трехпленочной структуры с толщинами пленок $N = 1 \div 9$, параметр одноосной анизотропии $K_0 = 0.1$ (рисунок слева) и $K_0 = 0.5$ (рисунок справа)

На рис. 2 представлена рассчитанная зависимость коэффициента магнитного сопротивления мультислоевой структуры от температуры и значений константы анизотропии $K = 0.1$ и $K = 0.5$. Расчет проведен для пленок с линейным размером $L = 32$ и толщинами $N = 1 \div 9$.

Из приведенных графиков видно, что при низких температурах, начиная с $T = 0.1$, структуры с $N = 1 \div 9$ характеризуется последовательным увеличением коэффициента магнитного сопротивления.

В области температур $T = 0.3 \div 0.7$ для толщин $N = 5 \div 9$ происходит увеличение коэффициента магнитного сопротивления за счет влияния одноосной анизотропии с последующим его спадом с ростом температуры.

Анализ графиков (рис. 2) показывает, что изменение параметра одноосной анизотропии оказывает существенное влияние на изменение коэффициентов магнитного сопротивления.

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

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

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

[3] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Menshikova M.A., Piskunova N.I.* // ЖММ. 2015. Vol. 387. P. 77-82.

[4] *Прудников В.В.* Моделирование методами Монте-Карло мультислойных магнитных структур и расчет коэффициента магнитосопротивления / В.В. Прудников, П.В. Прудников, Д.Е. Романовский // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102. С. 759.

Александр Владимирович Левицкий,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
sacha080895@mail.ru.

ИССЛЕДОВАНИЯ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТРЕХМЕРНОЙ ИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА МЕТОДОМ ВАНГА – ЛАНДАУ

В. Е. Ложников

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
П. В. Прудников*

Представлен модифицированный алгоритм Ванга – Ландау для расчета намагниченности трехмерной изотропной модели Гейзенберга при нулевом внешнем поле. Характер поведения намагниченности, полученной с использованием данного подхода, коррелирует с полученными другими методами Монте-Карло.

Ключевые слова: алгоритм Ванга – Ландау, трехмерная изотропная модель Гейзенберга.

Алгоритм Ванга – Ландау представляет из себя метод, основанный на представлении статистической суммы в виде разложения по плотности состояний энергии [1]:

$$Z = \sum_E g(E) \exp\left(\frac{-E}{kT}\right). \quad (1)$$

Применимость данного метода к исследованию фазовых переходов второго рода в спиновых системах обусловлена тем, что путем единичного моделирования возможно получить такие термодинамические величины как энергия, теплоемкость, свободная энергия и энтропия для любого температурного интервала. Алгоритм Ванга – Ландау не подвержен эффектам, связанным с существенным увеличением времени релаксации вблизи области фазового перехода, что позволяет получить равновесные характеристики системы за меньшее время относительно других методов Монте-Карло, таких как алгоритм Метрополиса или даже кластерные методы. Существует ограничение которое обусловлено расходимость метода на больших решетках, что может быть решено масштабированием алгоритма путем разделения общего энергетического интервала на пересекающиеся подчасти и реализации межпоточного обмена между репликами [2].

Существенным недостатком канонической реализации алгоритма Ванга – Ландау является невозможность вычисления таких параметров как намагниченность и восприимчивость спиновой системы, что накладывает ограничения на область применимости данного подхода, например на возможность исследования тонких магнитных пленок.

Применительно к данному методу существует два подхода для получения намагниченности и восприимчивости. Первый заключается в вычислении данных величин из плотности энергетических состояний [3]. Второй – в реализации зависимости плотности состояний не только от энергии, но и от намагниченности. В данной работе был применен первый подход. Для того чтобы получить намагниченность через известную плотность энергетических состояний можно воспользоваться следующей формулой:

$$\langle M(T, 0) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_E \bar{M}(E) g(E) \exp \left\{ \frac{-E}{kT} \right\}, \quad (2)$$

где $\bar{M}(E)$ – статистическое среднее от $M\{Si\}$ с энергией E ,

$$\bar{M}(E) = \frac{\sum_{Si} M_{Si} \delta(E - E\{Si\})}{\sum_{Si} \delta(E - E\{Si\})}. \quad (3)$$

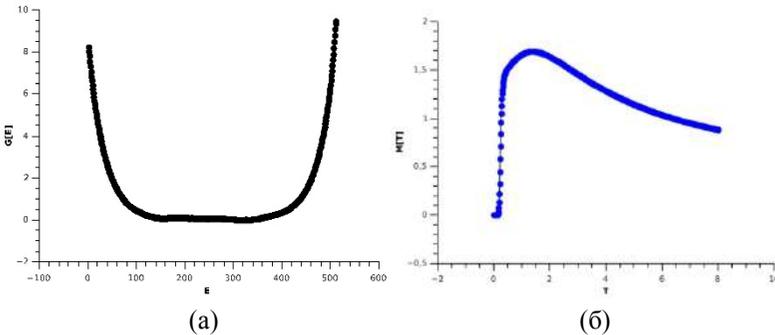


Рис. 1. Зависимость плотности энергетических состояний от энергии (а) и температурная зависимость намагниченности (б) для трехмерной изотропной модели Гейзенберга с решеткой размером $N = 8 \times 8 \times 8$ вычисленная с использованием алгоритма Ванга – Ландау

Восприимчивость вычисляется по следующей формуле:

$$\chi(T, H) = \frac{dM}{dH} = \frac{1}{kT} [\langle M^2(T) \rangle - \langle M(T) \rangle^2] \quad (4)$$

Полученные при использовании данного подхода к вычислению намагниченности для трехмерной изотропной модели Гейзенберга результаты представлены на рис. 1.

Заключение

В данной работе была исследована возможность применения алгоритма Ванга – Ландау для получения намагниченности трехмерной изотропной модели Гейзенберга с нулевым внешним полем реализую случайное блуждание только в пространстве энергии. Сделан вывод о том, что поведение намагниченности полученное для данной системы при помощи алгоритма Ванга – Ландау коррелирует с результатами полученными другими методами Монте-Карло. Разработана модифицированная версия алгоритма, которая в дальнейшем может быть применена для исследования критических свойств тонких магнитных пленок.

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Wang F.* Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States / F. Wang, D.P. Landau // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 86, P. 2050.
- [2] *Vogel T.* Generic, Hierarchical Framework for Massively Parallel Wang-Landau Sampling / T. Vogel, Y.W. Li, T. Wust, D.P. Landau // *Phys. Rev. Letters.* 2013. P. 5.
- [3] *Brown G.* Wang-Landau estimation of magnetic properties for the Heisenberg model / G. Brown, T.C. Schulthess // *J. Appl. Phys.* 2005. V. 97. P. 303.

Вячеслав Евгеньевич Ложников,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
vereskanthem@gmail.com.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

П. Н. Маляренко

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
В. В. Прудников*

Осуществлено исследование методами Монте-Карло влияния различных начальных значений намагниченности на неравновесное критическое поведение трехмерной 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, и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, неравновесное критическое поведение, структурно неупорядоченная модель Изинга, эффекты старения.

В настоящее время большой интерес исследователей вызывает поведение систем, характеризующихся аномально медленной динамикой. Это обусловлено наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения и нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы [1]. Данные особенности неравновесного поведения наблюдаются в системах при фазовых переходах второго рода [2], так как их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации.

Эффекты старения наблюдаются на временах $t \ll \tau_{rel}$, где τ_{rel} – время релаксации системы. Они проявляются в форме двухвременных зависимостей корреляционной функции и функции отклика от времени наблюдения t и времени ожидания t_w . Время ожидания характеризует время, прошедшее с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. При мед-

ленной эволюции из неравновесного начального состояния старение системы проявляется в замедлении релаксационных процессов при увеличении времени ожидания t_w .

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

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

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

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

может быть использовано в качестве универсальной характеристики неравновесного поведения.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

и динамической восприимчивости [1]:

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

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

Моделирование систем проводилось на кубической решетке с линейным размером $L = 128$ со спиновыми концентрациями $p = 1.0, 0.95, 0.8, 0.6, 0.5$ при соответствующих критических температурах T_c . 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 различных времен ожидания t_w .

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

$$C(t, t/3) = t^{\frac{2\beta}{\nu z}} G_C(tm_0^k), \quad \chi(t, t/3) = t^{\frac{2\beta}{\nu z}} G_\chi(tm_0^k) \quad (8)$$

Для проверки этих соотношений были построены зависимости $t^{2\beta/\nu z} C(t, t/3)$ и $t^{2\beta/\nu z} \chi(t, t/3)$ от $x = tm_0^k$, демонстрирующие «коллапс» полученных данных для различных m_0 на универсальной кривой (рис. 1 (а)).

В случае структурно неупорядоченных систем поведение автокорреляционной функции показывает нарушение соотношения (8), 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 $\mu = 2.30(6)$ для систем $cp = 0.95, 0.8$ и $\mu = 2.80(7)$ [3] для систем $cp = 0.6, 0.5$ получить совпадение данных при $0.25 \leq m_0 \leq 1$ и параллельное расположение графиков при $0.02 \leq m_0 \leq 0.1$ (рис. 2 (а)).

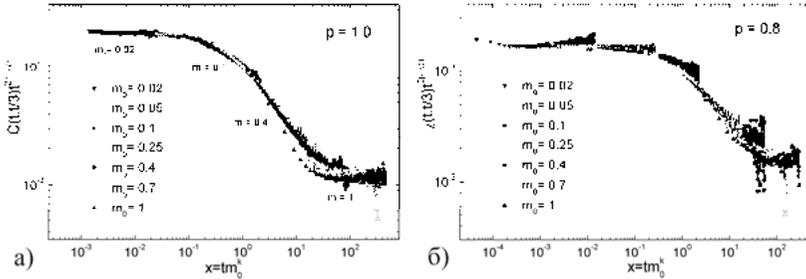


Рис. 1. Скейлинговые зависимости для $t_w^{-2\beta/(vz)} C(t, t_w)$ для $p=1.0$ (а) и $t_w^{-2\beta/(vz)} \chi(t, t_w)$ $p=0.8$ (б), демонстрирующие «коллпас» полученных для различных m_0 данных

Таким образом, в случае структурно неупорядоченных систем реализуется более сложная скейлинговая зависимость вида

$$C(t, t^{1/\mu}) = t^{-\frac{2\beta}{\mu v z}} \tilde{G}_C(t^\mu m_0^k). \quad (9)$$

Случай скейлинговой зависимости, характеризуемой показателем $\mu > 1$, классифицируется в теории неравновесных процессов как явление «сверхстарения» [3].

Динамическая восприимчивость в случае слабо неупорядоченных систем с $p = 0.95, 0.8$ характеризуется скейлинговым соотношением (7) с учетом соответствующих значений критических индексов (рис. 1 (б)). Однако для сильно неупорядоченных систем с $p = 0.6, 0.5$ наблюдается явление «сверхстарения», при котором восприимчивость имеет зависимость вида $\chi(t, t^{1/\mu}) = t^{-\frac{2\beta}{\mu v z}} \tilde{G}_\chi(t^\mu m_0^k)$ (рис. 2 (б)). Данные особенности связаны с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы.

Расчет значений ФДО осуществлялся в соответствии с соотношением $X(t, t_w) = \lim_{C \rightarrow 0} T \frac{\partial \chi(t, t_w)}{\partial C(t, t_w)}$, затем вычислялось предельное значение ФДО (2). В случае начального состояния с намагниченностью $0.02 \leq m_0 < 0.1$ система характеризуется предельными зна-

чениями ФДО, которые в пределах погрешности совпадают со значениями, вычисленными для высокотемпературного начального состояния $X^\infty = 0.391(12)$ ($p = 1.0$), $X^\infty = 0.419(11)$ ($p = 0.8$) и $X^\infty = 0.443(11)$ ($p = 0.5$) [2]. В случае $0.25 \leq m_0 < 1$ предельные значения ФДО для чистой системы ($p = 1.0$) хорошо согласуются с найденным для $m_0 = 1$ значением $X^\infty = 0.784(5)$ [3]. Для структурно неупорядоченных систем при $0.25 \leq m_0 \leq 1$ $X^\infty = 0$, что связано с сильным замедлением корреляционных эффектов на временах $t - t_w \gg t_w \gg 1$ вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры [3]. Случай $m_0 = 0.1$ является переходным между высокотемпературным и низкотемпературным начальными состояниями. С увеличением концентрации дефектов поведение системы с $m_0 = 0.1$ все более соответствует случаю высокотемпературного состояния.

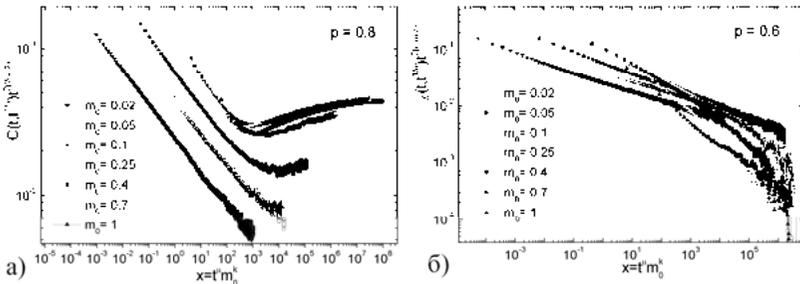


Рис. 2. Эффект «сверхстарения» в скейлинговом поведении автокорреляционной функции для $p = 0.8$ (а) и восприимчивости для $p = 0.6$ (б)

В данной работе выявлено существенное влияние начального состояния на неравновесную критическую динамику трехмерной модели Изинга. Показано, что в структурно неоднородных системах за счет эффектов сильного замедления корреляционных эффектов вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах наблюдается более сложная зависимость от начального состояния. Выявлена реализация двух типов универсального неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга, соответствующих высокотемпературному и низкотемпературному начальным состояниям.

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

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

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

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

Петр Николаевич Маляренко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
petr.malyarenko@yandex.ru.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ МОДЕЛИ ИЗИНГА С ТОЧЕЧНЫМИ И ЛИНЕЙНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

А. А. Нагибин

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор

П. В. Прудников

Осуществлено компьютерное моделирование критического поведения двумерной модели Изинга с точечными и линейными дефектами, а также «чистой» модели. Были получены графики временной зависимости намагниченности $M(t)$ и автокорреляционная функция с различным начальным состоянием M_0 .

Ключевые слова: критическое поведение, двумерная модель Изинга, влияние дефектов.

В последние годы много исследований было посвящено влиянию замороженных дефектов структуры на критическое поведение твердых тел. В работе [1] представлена модель неупорядоченной системы с дальнедействующей корреляцией дефектов для трехмерной модели Изинга, модели Гейзенберга и XY – модели. А в работе [2] было осуществлено теоретико-полевое описание критического поведения непосредственно трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов.

Виды дефектов структуры

Дефекты принято разделять на два вида по тому, как они распределены в решетке вещества. Если способ приготовления образца таков, что дефекты структуры находятся в термодинамическом равновесии с решеткой вещества системы, то их называют расплавленными или равновесными. Но обычно, при приготовлении образца дефекты не успевают прийти в термодинамическое равновесие с решеткой вещества и как бы замораживаются в ней в виде некоторой конфигурации, обусловленной способом приготовления образца. Такие дефекты принято называть замороженными [3].

Критическая эволюция однородной неупорядоченной модели Изинга

В исследованиях влияния начальных состояний на неравновесной критическое поведение, выделим исходное состояние при

высокой температуре, созданный при $T_0 > T_c$ и характеризующейся начальной намагниченности $m_0 = 0$, прежде чем она гасится при T_c и низкотемпературном начальном состоянии при $T_0 = T_c$ и $m_0 \neq 0$. Эволюция начинается, когда система после первоначальной подготовки помещают в термостат с $T = T_c$ [3].

Результаты

В данной работе проводились исследования критической эволюции с точечными и линейными дефектами со спиновой концентрацией $p = 0.8$, а также для «чистой» модели. Ниже приведены графики временных зависимостей намагниченности $M(t)$ и его масштаб функции $F_M(t/t_m) = M(t)t^{\beta/\nu z}$, а также автокорреляционные функции $C_A(t, s)$ для различных начальных состояний намагниченности $M_0 = 0.8, 0.5, 0.2$.

Намагниченность в масштабе [4]:

$$M(t, M_0) = t^{-\beta/\nu z} \hat{F}_M(tM_0^{1/k}), \quad (1)$$

где мы использовали следующие значения критических показателей [5]:

система	z	ν	β	$\beta / \nu z$	θ	k
точечная	2.95(4)	1.01(4)	0.123(8)	0.041(3)	0.137(5)	0.178
линейная	2.274	0.813	0.150	0.082	0.154	0.236
чистая	2.14(3)	0.98(2)	0.123(4)	0.059(2)	0.194(2)	0.253

Проверив начальное увеличение намагниченности, рассмотрим теперь связанную корреляционную функцию. Теперь нас интересует поведение автокорреляционной функции

$C_A(t, s) = \int (dq) C_q(t, s)$, задающееся уравнением [4]:

$$A_C(t, t/3) = t^{-\beta\delta/\nu z} \widehat{G}_C(tM_0^k) \quad (2)$$

где мы использовали соотношение $1 + a - d / z = -2\beta / (\nu z)$.

Соответствующие данные представлены на графиках 1, 2, 3.

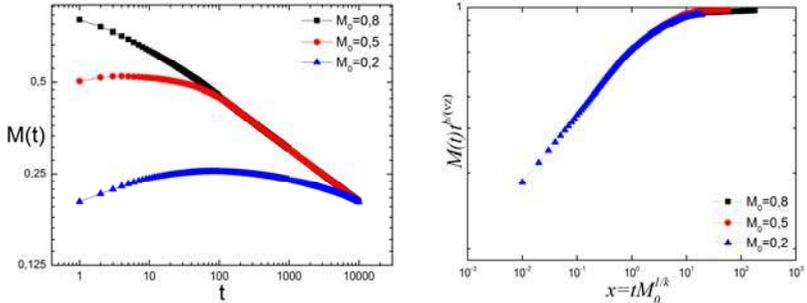


Рис. 1. Временная зависимость намагниченности $M(t)$ (слева) чистой системы и его скейлинговая функция $F_M(t/T_m)$ (справа)

для различных начальных состояний намагниченности $M_0 = 0.8, 0.5, 0.2$

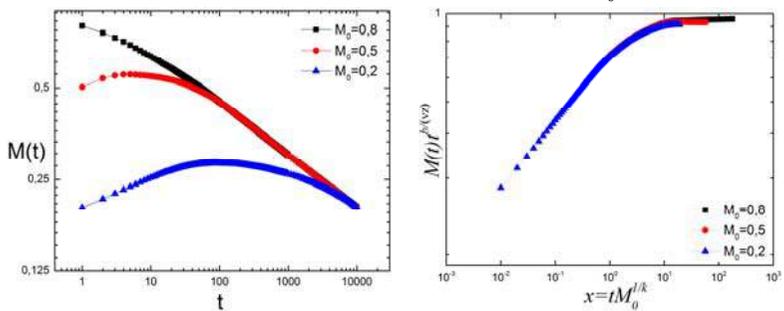


Рис. 2. Временная зависимость намагниченности $M(t)$ (слева) с точечными дефектами и его скейлинговая функция $F_M(t/T_m)$ (справа)

для различных начальных состояний намагниченности $M_0 = 0.8, 0.5, 0.2$

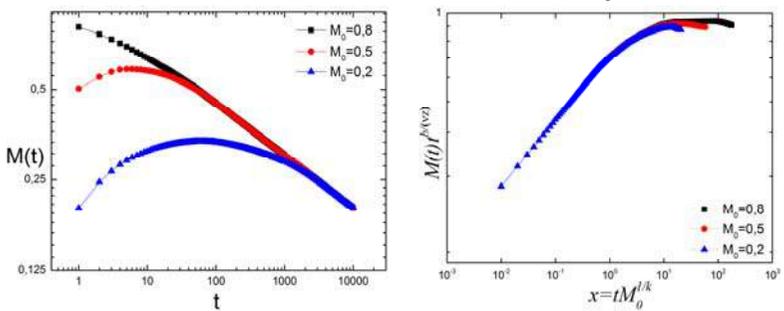


Рис. 3. Временная зависимость намагниченности $M(t)$ (слева) с линейными дефектами и его скейлинговая функция $F_M(t/T_m)$ (справа)

для различных начальных состояний намагниченности $M_0 = 0.8, 0.5, 0.2$

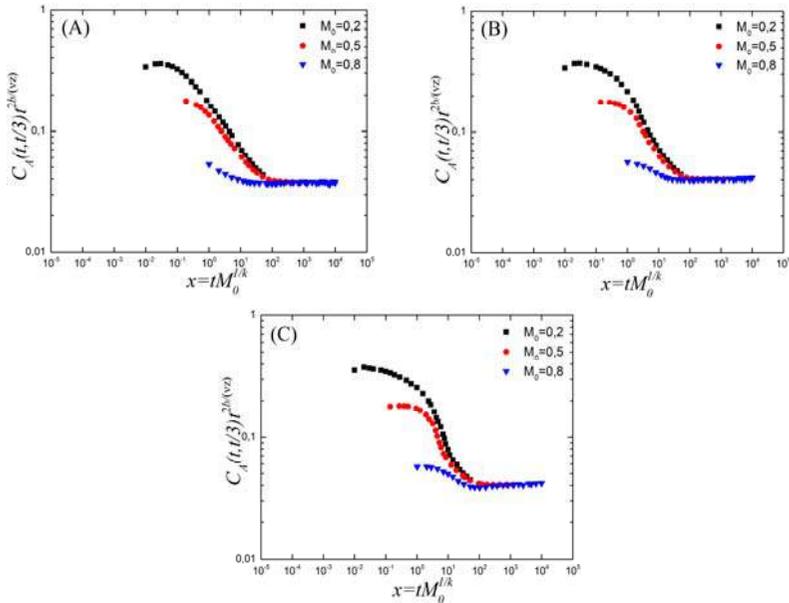


Рис. 4. Корреляционная функция для различных начальных состояний с разными намагниченностями M_0
 ((A) – чистая система, (B) – точечные дефекты, (C) – линейные дефекты)

Заключение

В результате численных исследований выявлено существенное влияние дефектов на неравновесную критическую динамику двумерной модели Изинга. В данном случае, линейные дефекты проявляют более сильное влияние на показания намагниченности, относительно «чистой» модели Изинга. Показано, что критические показатели характеризуются принадлежностью к различным классам универсальности критического поведения, а именно: критического поведения «чистой» системы, точечных и линейных дефектов с $p = 0.8$.

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Prudnikov V.V.* Short-time critical dynamics of the three-dimensional systems with long-range correlated disorder / V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, B. Zheng, S.V. Dorofeev, V.Y. Kolesnikov // *Progress of Theoretical Physics*. 2007. № 6. Vol. 117. P. 973–991.

[2] *Weinrib A.* Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder / A. Weinrib, B.I. Halperin // *Phys. Rev. B*. 1983. Vol. 27. P. 413.

[3] *Прудников В.В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования: учебное пособие / В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, П.В. Прудников. Омск: Изд-во ОмГУ. 2007. 288 с.

[4] *Pasquale Calabrese.* Critical aging of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state / Pasquale Calabrese, Andrea Gambassi, Florent Krzakala // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2006. Vol. 6.06016.

[5] *da Silva L.F.* The two-dimensional site-diluted Ising model: a short-time-dynamics approach / L.F. da Silva, U.L. Fulco, F.D. Nobre // *J. Phys Condens Matter*. 2009. pp. 346005.

Алексей Андреевич Нагибин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
alexnagibin94@gmail.com.

ВЗРЫВНАЯ ПЕРКОЛЯЦИЯ В БЕЗМАСШТАБНЫХ СЕТЯХ

В. С. Пантелеев

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор

П. В. Прудников

Рассмотрен способ создания безмасштабных сетей с помощью конкурирующего Achlioptas процесса с правилом произведения. Представлены результаты численного моделирования данного процесса. Показано, что степенной показатель λ влияет на вид фазового перехода.

Ключевые слова: взрывная перколяция, безмасштабные сети, фазовый переход второго рода.

Перколяционный переход относится к появлению в решетке гигантского связанного кластера (или гигантского связанного компонента) или сети, когда узлы связаны случайно.

При перколяции связывания процесс начинается с N несвязанных узлов. На каждом временном шаге между двумя wybranными узлами добавляется ребро. Число ребер E , добавленных в систему на определенном временном шаге, деленным на общее число ребер системы N , равно контрольному параметру $p = E/N$, описывающему фазовый переход (ФП). Что касается параметра порядка (обычно обозначается как $S(t)$), принимаем долю узлов, принадлежащих к гигантскому кластеру в сети. С течением времени в сети формируется множество ребер, что приводит к увеличению параметра порядка. В термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$), обнаруживается фазовый переход в критической точке p_c . Классическая перколяция – типичный геометрический фазовый переход, который широко изучался с 1940-х годов во многих областях, в том числе и математике, статистической физике и технике [1; 2].

В 2009 году был внедрен конкурентный процесс перколяции, позже получивший название Achlioptas процесс (АП) [3]. По сути дела, АП отличается от традиционных некоррелированных моделей перколяции. Действительно, на каждом временном шаге два ребра сначала выбираются случайным образом, как потенциальные кандидаты. Затем применяется правило произведения (ПП): выбирается то ребро, где произведение связанных кластеров

является наименьшим. В итоге одно ребро остается, а другое отбрасывается. Альтернатива этому, правило сумм (ПС), в котором устанавливается связь там, где сумма кластеров минимальна. В Achlioptas процессе гигантский кластер возникает после нескольких шагов, которые намного меньше размера системы. Как следствие, параметр порядка демонстрирует чрезвычайно резкий «прыжок» в точке перколяции. На первый взгляд такое поведение напоминает разрывной фазовый переход, именно поэтому Achlioptas процесс был назван «взрывной перколяцией» (ВП) [3].

Остановимся кратко на механизме ведущему к «взрывной перколяции». В классической перколяции узлы постепенно выбираются случайно для подключения. Таким образом, вероятность установить конкретное ребро пропорционально произведению размеров кластеров, где находятся конечные точки ребра. В результате гигантский кластер может быстро сформироваться, что в свою очередь, увеличит вероятность для его дальнейшего расширения. Поэтому ожидается, что ФП второго рода всегда происходит по этой схеме. Вместо этого в Achlioptas процессе конкуренция среди потенциальных ребер вводится в основу процесса объединения кластеров. Ключевым фактором взрывной перколяции является то, что механизм конкуренции систематически подавляет формирование больших компонент [4], и такой принцип подавления порождает необходимую «пороховую бочку» (то есть обильные малые кластеры) в определенном диапазоне до начала перехода [5]. Как правило, после нескольких этапов небольшие/средние кластеры сливаются друг с другом, и внезапно возникает гигантское скопление.

Мы рассмотрим безмасштабные сети, построенные с помощью Achlioptas процесса. Связи между узлами, вводятся так, чтобы получить безмасштабную сеть с заданным показателем λ , в нашем случае мы будем рассматривать сеть с показателем $\lambda = 2.5$. Сети, построенные с использованием конкурирующего Achlioptas процесса, характеризуются наличием перколяционного непрерывного фазового перехода.

Проанализировав графики мы можем убедиться, что для $\lambda < 3$ параметр порядка подчиняется экспоненциальному закону, как и должны быть при фазовом переходе второго рода.

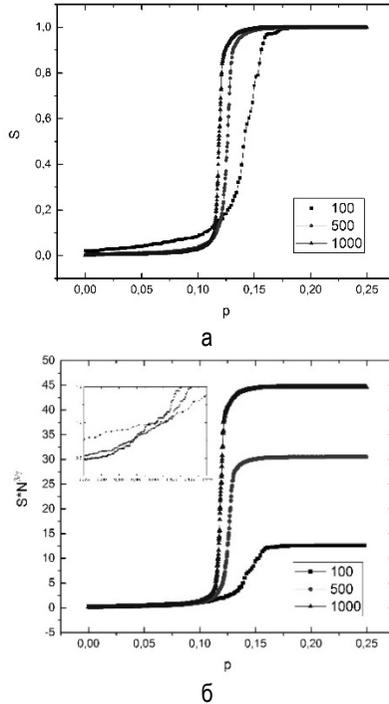


Рис. 1. Взрывной перколяционный переход в безмасштабных сетях со степенным показателем $\lambda = 2.5$. На графиках показан переход соответствующий разным системным размерам (а) и их масштабированию $S \cdot N^{\beta/\nu}$ (б)

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 16-37-00374-мол_а Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Araujo N.* Recent advances and open challenges in percolation / N. Araujo, P. Grassberger, B. Kahng, K. Schrenk, R. Ziff // *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 223 (11). 2014. 2307–2321.
 [2] *Bastas N.* Explosive percolation: Unusual transitions of a simple model / N. Bastas, P. Giazitidis, M. Maragakis, K. Kosmidis // *Physica A* 407. 2014. 54–65.

- [3] *Achlioptas D.* Explosive percolation in random networks / D. Achlioptas, R.M. D'Souza, J. Spencer // *Science* 323 (5920). 2009. 1453–1455.
- [4] *Cho Y.S.* Suppression effect on explosive percolation / Y.S. Cho, B. Kahng // *Phys. Rev. Lett.* 107. 2011. 275703.
- [5] *Friedman E.J.* Construction and analysis of random networks with explosive percolation / E.J. Friedman, A.S. Landsberg // *Phys. Rev. Lett.* 103. 2009. 255701.
- [6] *Barabasi L.A.* Scale-free characteristics of random networks: the topology of the world-wide web / L.A. Barabasi, R. Albert, H. Jeong // *Physica*. 2000. V. A281. 69–77.

Владимир Сергеевич Пантелеев,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
panteleevvova@mail.ru.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА ВБЛИЗИ ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ

А. С. Папушин

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
П. В. Прудников*

Произведено численное описание перколяционно-кластерным методом динамического критического поведения в трехмерной неупорядоченной модели Изинга вблизи порога примесной перколяции. Исследования кумулянтов Биндера четвертого порядка позволили вычислить значения критической температуры для каждого класса универсальности, а также определено значение динамического критического индекса Z , характеризующего эффективность алгоритма приведения системы к состоянию равновесия.

Ключевые слова: критическое поведение, трехмерная модель Изинга, порог примесной перколяции.

Описание фазовых переходов считается одной из наиболее сложных и актуальных задач статистической физики. При приближении к точке фазового перехода наблюдаются аномально большие и долгоживущие флуктуации, что создает значительные трудности при аналитическом и экспериментальном исследовании критического поведения. Особенно ярко это явления проявляется вблизи порога перколяции, разделяющего системы разного класса универсальности. Сложности таких исследований объясняются разными классами универсальности систем из-за присутствия дефектов, которые могут иметь различную природу и оказывать различное влияние на процессы, протекающие в образце. Одним из проявлений долгоживущих флуктуаций является критическое замедление процессов релаксации, что затрудняет моделирование поведения исследуемой системы вплоть до изменения критического поведения. Поэтому, одной из важных задач является разработка методов компьютерного моделирования, слабо зависящих от эффектов критического замедления, одним из которых и явля-

ется гибридно-кластерный метод, призванный унифицировать исследования неоднородных систем при переходе порога примесной перколяции.

Для уменьшения влияния эффектов критического замедления были разработаны различные численные методы. Наиболее яркими из них являются: алгоритмы Метрополиса (алгоритм односпиновых переворотов), Вольфа, Свендсена и Ванга (кластерные алгоритмы). К таким кластерным алгоритмам относится и перколяционно-кластерный метод [1], призванный исследовать поведение систем вблизи порога примесной перколяции.

Для вычисления критической температуры с помощью кумулянтов Биндера моделирование системы проводилось на кубической решётке спинов с линейным размером $L = 128, 160, 192, 224, 256$ при спиновых концентрациях $p = 0.8, 0.7, 0.688, 0.6$. 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, и по 1 000 прогонок для каждой примесной конфигурации.

В работе осуществлялось вычисление кумулянтов Биндера четвертого порядка по формуле:

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

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

По пересечению кумулянтов было определено значение критической температуры.

В исследовании были получены значения критических температур, соответствующие различным концентрациям примесей (см. таблицу 1). Значения критических температур, полученные для концентраций 0.8 и 0.6, хорошо согласуются с данными, полученными в работах [2; 3].

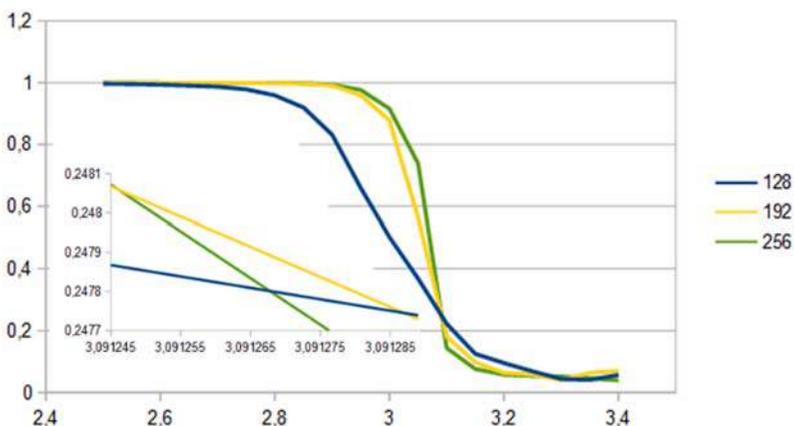


График зависимости кумулянтов Биндера 4 порядка от температуры при пороге перколяции

Таблица 1

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

Концентрация спинов, p	Значения критической температуры, T_c	Значения, полученные ранее, T_c [4]
0.8	3.495 618(31)	3.495 6(6)
0.7	3.101 318(48)	2.968 2(8)
0.688 313 500	3.091 266(20)	-
0.6	2.417 318(19)	2.417 3(9)

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 данные представлены в таблице 2.

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

**Значения критического индекса Z , полученные
для перколяционного метода**

Концентрация	T_c	Индекс Z
0.8	3.495 618	0.674 953(18)
0.7	3.101 318	0.651 644(75)
0.688 313 500	3.091 266	0.614 579(57)
0.6	2.417 318	0.594 178(33)

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

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

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

[3] *Муртазаев А.К.* Исследование критических явлений в спиновых решеточных системах методами Монте-Карло / А.К. Муртазаев // УФН. 2006. Т. 176, № 10. С. 1119–1124.

[4] *В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, А.С. Криницин* // Вестн. Ом.ун-та. 2007. № 2. С. 41–45.

Александр Сергеевич Папушин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
3-й курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
as.ollaf@gmail.com.

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ МУЛЬТИСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}$

Е. С. Поворознюк

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

М. В. Мамонова

В данной работе в рамках первопринципного подхода исследуются магнитные свойства мультислойной системы. С применением программного комплекса VASP получены значения полной энергии системы для различных спиновых конфигураций и магнитного момента атомов для трехслойных структур $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}/\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x$ с ориентацией поверхностной грани (100). Осуществлен расчет интегралов обменного взаимодействия для ближайших и следующих за ближайшими соседями в рамках классической модели Гейзенберга. Полученные значения интегралов обменного взаимодействия могут быть применены при расчете температурной зависимости коэффициента магнитосопротивления.

Ключевые слова: первопринципные расчеты, ультратонкие пленки, обменный интеграл, мультислойные структуры.

Для моделирования использовался программный комплекс VASP [1; 2], основанный на методе функционала плотности, с применением приближения PAW-GGA-PBE. Данный программный комплекс служит для проведения первопринципных расчетов, используя квантово-механические методы и методы молекулярной динамики.

Система (рис. 1) моделировалась с помощью периодической 36-атомной суперячейки (2×2). Постоянная решетки $a_{\text{cell}} = 3,61 \text{ \AA}$ соответствовала постоянной решетки меди. Толщина вакуумного слоя равная 3 \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.

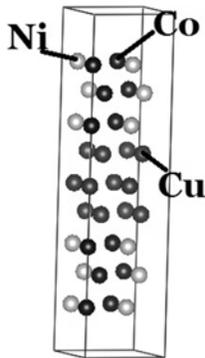


Рис. 1. Структура исследуемой системы $Co_{0,5}Ni_{0,5}/Cu(100)$

Исследовался случай коллинеарного магнетизма, когда спины атомов ориентированы в одном направлении перпендикулярном поверхности. Было рассмотрено три спиновых конфигурации атомов пленок сплава: одно ферромагнитное (все спины направлены вверх) и два антиферромагнитных состояния (рис. 2) для различных концентраций атомов никеля в сплаве $X = 0; 0,5; 1$. Полученные в результате расчетов значения полной энергии системы и среднего магнитного момента приходящегося на один атом, представлены в таблице 1.

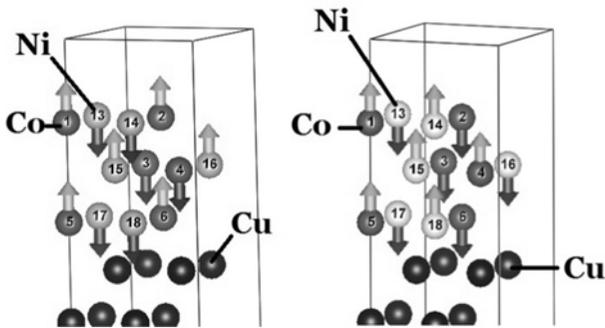


Рис. 2. Ориентация спинов атомов в пленке сплава для двух моделируемых антиферромагнитных состояний системы

Результаты расчетов показывают, что средний магнитный момент атома и полная энергия системы по модулю уменьшаются

с ростом концентрации Ni в сплаве. А E^{FM} меньше E^{AFM} при всех рассмотренных концентрациях.

Таблица 1

Рассчитанные значения полных энергий систем для трех конфигураций и μ_{tot} средний магнитный момент атома

X	E^{FM} , эВ	E_1^{AFM} , эВ	E_2^{AFM} , эВ	μ_{tot} , $\mu_B/ат$
0	-201,463	-197,313	-197,313	1,670
0,5	-185,022	-180,736	-178,959	1,213
1	-167,819	-166,749	-166,691	0,622

Вклад в полную энергию, соответствующий обменному взаимодействию, описывался модельным гамильтонианом Гейзенберга (в расчете на одну ячейку):

$$H = \frac{1}{2n} \sum_{ij} J_{ij} (\vec{S}_i \vec{S}_j), \quad (1)$$

где n – число ячеек в пленке.

Значения интегралов обменного взаимодействия для ближайших J_1 и следующих за ближайшими соседями J_2 могут получены на основе расчета разницы полных энергий системы для ферромагнитной (E^{FM}) и антиферромагнитных (E^{AFM}) спиновых конфигураций:

$$N_{ij} J_j = \Delta E_i = E_i^{AFM} - E^{FM} \quad (2)$$

Полученные значения обменных интегралов и магнитные моменты отдельных атомов Ni и Co приведены в табл. 2.

Таблица 2

Рассчитанные значения обменных интегралов для ближайших J_1 и следующих за ближайшими соседями J_2 , а так же магнитные моменты μ_i атомов Ni и Co в i-м слое

X	J_1 10^{-14} эрг	J_2 10^{-14} эрг	μ_1 , $\mu_B/ат$	μ_2 , $\mu_B/ат$	μ_3 , $\mu_B/ат$
0	2,518	1,679	1,580	1,825	1,825
0,5	2,861	7,769	1,675 0,655	1,659 0,467	1,877 0,695
1	0,649	0,562	0,489	0,678	0,776

Сравнение значений магнитных моментов атомов в разных слоях позволяет сделать вывод, что наибольшим моментом обла-

дают атомы наиболее удаленные от подложки. Магнитный момент атома кобальта в сплаве больше магнитного момента атома в пленке чистого кобальта. Полученные значения интегралов J_1 и J_2 обменного взаимодействия между соседними атомами пленок (ближайшими и следующими за ближайшими соседями) и коэффициента магнитосопротивления могут быть использованы для расчета мультислойных структур с эффектами гигантского магнитосопротивления [3].

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Marsman G.* VASP the GUIDE / G. Marsman, M. Kresse. Wien: Universitat Wien. 2000. P. 208.

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

[3] *Прудников В.В.* Моделирование методами Монте-Карло мультислойных магнитных структур и расчет коэффициента магнитосопротивления / В.В. Прудников, П.В. Прудников, Д.Е. Романовский // *Письма в ЖЭТФ*. Т. 102, 10. С. 759–765.

Евгений Сергеевич Поворозюк,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644081, г. Омск, пр. Мира 55а,
proaspovoroz@icloud.com.

МОНТЕ-КАРЛО ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ СТАРЕНИЯ В МАГНИТНЫХ СВЕРХСТРУКТУРАХ

А. Н. Пуртов

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
В. В. Прудников*

Представлены результаты численного исследования методом Монте-Карло особенностей неравновесного поведения в мультислойной магнитной структуре с магнитными пленками различных толщин, описываемыми анизотропной моделью Гейзенберга. Анализ полученной двухвременной зависимости автокорреляционной функции при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с $m_0 = 0,05$ позволил выявить эффекты старения, характеризующиеся замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания. Показано, что, в отличие от объемных магнитных систем, эффекты старения возникают в магнитных сверхструктурах не только вблизи критической температуры T_c ферромагнитного упорядочения в пленках, но и при температуре $T_s = T_c/2$. Для магнитной мультислойной структуры установлено ослабление эффектов старения с ростом толщины ферромагнитных пленок N .

Ключевые слова: метод Монте-Карло, мультислойные магнитные структуры, анизотропная модель Гейзенберга, 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]. Эффекты старения проявляются на временах $t \ll t_{rel}$ 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 $t - t_w$, $t_w \ll t_{rel}$ во временном поведении системы проявляется влияние начальных состояний системы.

Магнитные свойства ультратонких пленок на основе Fe, Co и Ni при контакте с подложкой из немагнитного металла наиболее правильно описываются анизотропной моделью Гейзенберга [2], задаваемой гамильтонианом:

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

$S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор в узле i ; Δ – параметр анизотропии; $h = 0,005J_1$ – малое внешнее магнитное поле.

Рассматривалась структура из магнитных пленок с толщинами $N = 3,7$ в единицах атомных слоев. Значение обменного интеграла J_1 , определяющего взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки, бралось $J_1/k_B T = 1$, а для взаимодействия между пленками $J_2 = -0.3J_1$. Зависимость параметра анизотропии $\Delta(N)$ от толщины пленок структуры Co/Cu(001) была определена в работе [3] на основе экспериментальных данных по зависимости критической температуры T_c в пленке Co от ее толщины N [4].

На первом этапе было проведено исследование температурной зависимости магнитной восприимчивости и теплоемкости магнитных мультислойных структур. Критическая температура ферромагнитного упорядочения T_c в пленках была определена по пикам магнитной восприимчивости для пленок с различными толщинами N .

На следующем этапе было проведено исследование неравновесного поведения мультислойной магнитной структуры и расчет двухвременной зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 0,05$ с температурами замораживания $T_s = T_c$ и $T_s = 0.5J_1 < T_c$.

При расчете $C(t, t_w)$ применялось выражение

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{NL^2} \sum_{i=1}^{NL^2} S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle - \left\langle \frac{1}{NL^2} \sum_{i=1}^{NL^2} S_i(t) \right\rangle \left\langle \frac{1}{NL^2} \sum_{i=1}^{NL^2} S_i(t_w) \right\rangle, (3)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают статистическое усреднение.

Экспериментальные исследования неравновесного поведения структур Co/Cr [5] и результаты их численного моделирования, проведенные нами в работе [6], показали, что в отличие от объемных систем эффекты старения возникают в мультислойных структурах не только при $T_s = T_c$, но и при температурах замораживания $T_s < T_c$. В данной работе для выявления эффектов старения в низкотемпературной фазе был проведен расчет двухвременной зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ для температур замораживания $T_s = 0.5J_1/k_B = T_c/2$, с результатами, представленными на рис.1б для структур с различными толщинами ферромагнитных пленок N .

На рис.1 представлена рассчитанная зависимость автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ от времени наблюдения $t-t_w$ для различных времен ожиданий $t_w = 10, 30, 50, 100$, вычисленная при различных температурах замораживания системы $T_s = T_c$ и $T_s = T_c/2$. Неравновесное поведение мультислойной магнитной структуры наглядно демонстрирует проявление в системе эффектов старения, т.е. замедление временного спада корреляционных эффектов с ростом времени ожидания t_w .

Результаты, представленные на рис.1, указывают также на ослабление эффектов старения с ростом толщины ферромагнитных пленок N , так как кривые $C(t, t_w)$ для структур с $N = 7$ лежат ниже кривых для $N = 3$ при одинаковых значениях времен ожидания t_w . Это связано с ослаблением корреляции при переходе от низкоразмерных квазидвумерных систем к объемным трехмерным системам.

При сопоставлении поведения автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ при температурах T_c (рис. 1а) и $T_c/2$ (рис. 1б) видно, что происходит усиление эффектов старения с уменьшением температуры замораживания системы T_s .

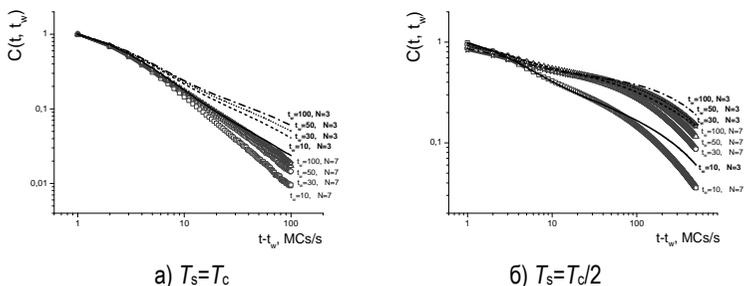


Рис. 1. Зависимость автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ от времени наблюдения $t-t_w$ для различных времен ожиданий $t_w = 10, 30, 50, 100$, вычисленная при критической температуре T_c (а) и при температуре $T_s = T_c/2$ (б), для различных толщин ферромагнитных пленок $N = 3, 7$

Известно [1], что в режиме старения при $t - t_w \sim t_w \gg 1$ двух-временная зависимость автокорреляционной функции характеризуется следующей скейлинговой формой:

$$C(t, t_w) \sim (t_w)^{-2\beta/\nu z} F_C(t/t_w), \quad (4)$$

где $F_C(t/t_w)$, так называемая скейлинговая функция, является однородной функцией своего аргумента t/t_w и характеризуется на долговременном этапе эволюции с $t - t_w \gg t_w \gg 1$ степенным законом затухания

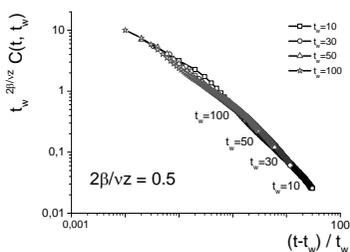
$$F_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_a} \quad (5)$$

с показателем $c_a = d/z - \theta'$, при эволюции из высокотемпературного начального состояния при $T_s = T_c$, где β , ν , z и θ' – известные статические и динамические критические индексы, d – размерность системы.

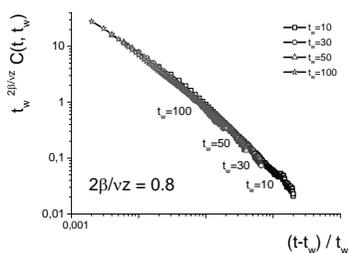
С целью проверки справедливости скейлинговой формы (4) для автокорреляционной функции были построены зависимости $t_w^{2\beta/\nu z} C(t, t_w) = F_C(t/t_w)$ от t/t_w при подборе значений показателя $2\beta/\nu z$ таким образом, чтобы данные для различных t_w ложились по возможности на одну кривую при $t/t_w \geq 1$.

На примере автокорреляционной функции, полученной при эволюции из высокотемпературного начального состояния для структур с $N = 3, 7$ (рис. 2а,б), видно осуществление «коллапса»

данных для $t_w^{2\beta/\nu z} C(t, t_w)$ и различных t_w при фиксированном значении N на универсальной кривой, соответствующей скейлинговой функции $F_C(t/t_w)$. Выявлен рост значений критического показателя $2\beta/\nu z$ в скейлинговой форме (4) при увеличении толщины N ферромагнитных пленок в структурах, что соответствует увеличению эффективной размерности пленок при переходе от квазидвумерных систем с $N = 3$ к квазитрехмерным с $N = 7$.



а) толщина пленки $N = 3$



б) толщина пленки $N = 7$

Рис. 2. Скейлинговые зависимости корреляционной функции $t_w^{2\beta/\nu z} C(t, t_w)$ от $(t-t_w)/t_w$ при эволюции из высокотемпературного состояния, для различных толщин ферромагнитной пленки N

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

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

[2] Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А. // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 501–505.

[3] Romanovskiy D.E., Matonova M.V., Prudnikov V.V., Prudnikov P.V. // J. SibFU. Mathematics & Physics. 2017. Vol. 10. No. 1. P. 65–70

[4] Vaz C.A.F. et al. // Rep. Prog. Phys. 2008. Vol. 71. P. 056501–056578.

[5] Mukherjee T., Pleimling M., Vinek Ch. // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. 134425.

[6] В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Пуртов, М. В. Мамонова // Письма в ЖЭТФ. Т. 104. Вып. 11. С. 797–805.

Александр Николаевич Пуртов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс аспирантуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
alprtv@gmail.com.

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР В СЛУЧАЕ ТВП ГЕОМЕТРИИ

Д. Е. Романовский

*Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор
В. В. Прудников*

Представлено описание эффекта гигантского магнитосопротивления в мультислойных магнитных структурах, состоящих из чередующихся магнитных (Fe, Co) и немагнитных (Cr, Cu) слоев в случае ТВП (ток в плоскости пленки) геометрии с использованием анизотропной модели Гейзенберга для задания магнитных свойств тонких ферромагнитных пленок, образующих данные структуры. Методами Монте-Карло осуществлен расчет коэффициента магнитосопротивления мультислойных структур Fe/Cr и Co/Cu при задании шкалы температур через величину интеграла обменного взаимодействия, полученного в рамках теории молекулярного поля $J_{Fe} = 1.7 \cdot 10^{-14}$ Эрг, $J_{Co} = 4.4 \cdot 10^{-14}$ Эрг. Рассчитанная температурная зависимость коэффициента магнитосопротивления находится в соответствии с экспериментальными данными.

Ключевые слова: гигантское магнитосопротивление, мультислойные структуры, ультратонкие магнитные пленки, ТВП геометрия, анизотропная модель Гейзенберга, метод Монте-Карло.

Значительные успехи в исследовании тонких металлических пленок, достигнутые в последнее время, привели к открытию целого ряда новых явлений, интересных как с точки зрения фундаментальной физики, так и с точки зрения практического применения [1]. Одним из таких примеров является наблюдаемый в сверхструктурах, состоящих из чередующихся магнитных и немагнитных слоев эффект гигантского магнитосопротивления (ГМС) [2].

Эффект ГМС был обнаружен при измерении сопротивления магнитных сверхрешеток в случае тока, текущего в плоскости пленки (ТВП геометрия). Позже изменение сопротивления сверхрешеток при изменении взаимной ориентации магнитных слоев было обнаружено для тока, текущего перпендикулярно плоскости

слоев (ТПП геометрия). Величина сопротивления магнитных сверхрешеток, толщина которых составляет порядка десятков нанометров, при измерении в случае ТПП геометрии очень мала и ее довольно трудно измерить. Поэтому для практического применения эффекта ГМС чаще используется случай ТВП геометрии.

Физические свойства тонких ферромагнитных пленок на основе Fe, Co и Ni можно описать в рамках анизотропной модели Гейзенберга [3]. Гамильтониан модели в случае вектора намагниченности, ориентированного перпендикулярно плоскости пленки (Fe) задается в виде:

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

а в случае вектора намагниченности, ориентированного в плоскости пленки (Co),

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

где $J_{i,j}$ – константа обменного взаимодействия, $\Delta(N)$ – константа анизотропии, зависящая от толщины пленки N , учитывает влияние анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки, \vec{S}_i – спин модели, задаваемый как единичный вектор в i узле решетки. Зависимость константы анизотропии от толщины пленки выбиралась в соответствии с результатами работы [4].

В работе был рассчитан коэффициент магнитосопротивления, вводимый соотношением:

$$\rho = \frac{R(H=0) - R(H \neq 0)}{R(H)}, \quad (3)$$

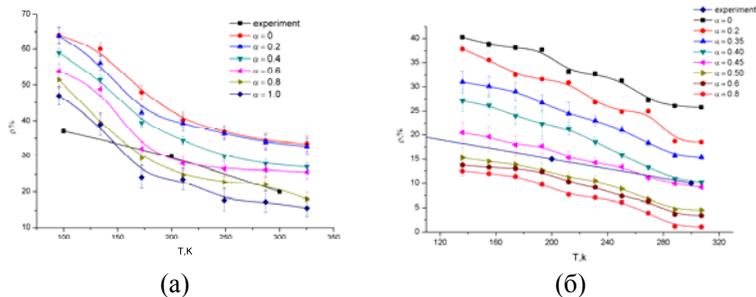
где $R(H = 0)$ и $R(H \neq 0)$ – сопротивление образца без поля, и во внешнем магнитном поле, соответственно.

Энергия взаимодействия электронов проводимости с узлами кристаллической решетки E_i определяется соотношением:

$$E_i = \mp J [\sum_{j \neq i} S_j^z (n_{j,\uparrow} - \alpha n_{j,\downarrow}) + S_i^z (n_{i,\uparrow} - \alpha n_{i,\downarrow})], \quad (4)$$

где i – номер рассматриваемой ячейки, j – ближайший сосед i ячейки вдоль оси X , расположенной в плоскости пленки, $n_{\uparrow,\downarrow}$ – концентрация электронов с проекциями спинов на ось z равными $+1/2$ и $-1/2$, S_j^z – проекция магнитного момента j ячейки на ось z , $0 < \alpha < 1$ – параметр, характеризующий процессы рассеяния с переворотом спина. Моделирование проводилось для различных

значений параметра α , после чего выбиралось значение, дающее лучшее согласие с экспериментом.



Зависимость коэффициента магнитосопротивления трехслойной структуры Co/Cu (а) и Fe/Cr (б) от температуры для различных значений параметра α

Видно (рис.), что рассчитанная температурная зависимость коэффициента магнитосопротивления находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными, полученными для мультислойных магнитных структур Fe/Cr и Co/Cu [5] при $\alpha = 0.45$ и $\alpha = 0.7$, соответственно.

Заключение

В представленной работе разработана методика вычисления коэффициента магнитосопротивления в случае ТВП геометрии методами Монте-Карло и для трехслойных магнитных структур Fe/Cr и Co/Cu осуществлен расчет температурной зависимости коэффициента магнитосопротивления. Показано, что рассчитанная температурная зависимость коэффициента магнитосопротивления находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными, полученными в работе [5].

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Parkin S.S.P.* Giant magnetoresistance in magnetic nanostructures / S.S.P. Parkin // *Annual Review of Materials Science*. 1995. Vol. 25. P. 357–388.
- [2] *Ultrathin Magnetic Structures IV. Applications of Nanomagnetism* / Ed. B. Heinrich and J.A.C. Bland. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. 257 pp.
- [3] *Прудников П.В.* Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках / П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.А. Медведева. // *Письма в ЖЭТФ*. 2014. Т. 100. С. 501–505.
- [4] *Romanovskiy D.E.* Monte Carlo simulation of magnetic multilayered structures with the effects of giant magnetoresistance / D.E. Romanovskiy, M.V. Mamonova, V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov // *J. SibFU. Mathematics & Physics*. 2017. Vol.10. P. 65–70.
- [5] *Gijs M.A. et al.* Perpendicular giant magnetoresistance of microstructures in Fe/Cr and Co/Cu multilayers // *J. Appl. Phys.* 1994. Vol.75. P. 6709-6713.

Дмитрий Евгеньевич Романовский,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
romfizz898@gmail.com.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО ПОВЕДЕНИЯ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ СТРУКТУР МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК КОБАЛЬТА

М. М. Фирстова

Научный руководитель: д-р физ.-мат. наук, профессор

П. В. Прудников

В работе решается задача исследования методами компьютерного моделирования неравновесного поведения магнитных мультислойных структур, состоящих из чередующихся магнитных и не магнитных слоев наномасштабной толщины, в качестве магнитной пленки Со. Вычисляются значения шахматной намагниченности и автокорреляционной функции. Рассматривается возникновение эффектов старения автокорреляционной функции от времен ожидания.

Ключевые слова: ферромагнитная пленка, шахматная намагниченность, автокорреляционная функция, время ожидания.

Изучение мультислойных структур актуально в связи с физическими характеристиками, с точки зрения применения в приборах спинтроники и магнитных сверхструктур на их основе [1; 2].

Выявленные к настоящему времени особенности неравновесного критического поведения могут служить основой для понимания и интерпретации экспериментальных данных, полученных для мультислойных структур на основе Со/Сг [3]. Исследование макроскопических систем, характеризующихся медленной динамикой, а так же изучение свойств мультислойных структур на их основе [2] вызывает в настоящее время значительный интерес [4].

В данной работе рассматривается задача проведения численного исследования особенностей неравновесного поведения мультислойной магнитной структуры из ферромагнитных пленок, разделенных слоем немагнитного металла. Магнитные пленки характеризуются наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки.

Осуществлено численное исследование методами Монте-Карло неравновесного поведения магнитных сверхструктур, состоящих из чередующихся магнитных и немагнитных слоев наномасштабной толщины.

Значение обменного интеграла J_1 , определяющего взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки, брались $J_1=1$, а для взаимодействия между пленками $J_2 = -0.3J_1$. Отрицательность J_2 показывает, что в данных структурах с эффектом гигантского магнитного сопротивления толщина немагнитной прослойки и осциллирующее межслоевое обменное РККИ взаимодействие между спинами ферромагнитных слоев носило эффективный антиферромагнитный характер [5].

Магнитные свойства пленок на основе Со при контакте с подложкой из немагнитного металла описываются анизотропной моделью Гейзенберга, задается в виде гамильтониана:

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} [\vec{S}_i \vec{S}_j - \Delta(N) S_i^z S_j^z] - h \sum_i S_i^x. \quad (1)$$

В формуле (1) $\Delta=0.432$ характеризует количество анизотропии для ферромагнитных пленок Со с толщиной $N = 3$ монослоя; $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор в узле i ; h – внешнее магнитное поле.

Вид и параметры гамильтониана выбраны таким образом, чтобы соответствовать мультислойной структуре Со(0.6nm)/Cr/Со(0.6nm), в которой ультратонкие пленки Со характеризуются при температурах ниже критической появлением спонтанной намагниченности \mathbf{m} , лежащей в XY-плоскости пленки [4].

Значения для $\Delta(N) = 0.432$ пленки Со взяты из экспериментальных данных путем аппроксимации $T_c(N)$ [6].

Проведено изучение неравновесного поведения мультислойной структуры. Был осуществлен расчет временной зависимости намагниченности ферромагнитной пленки в структуре:

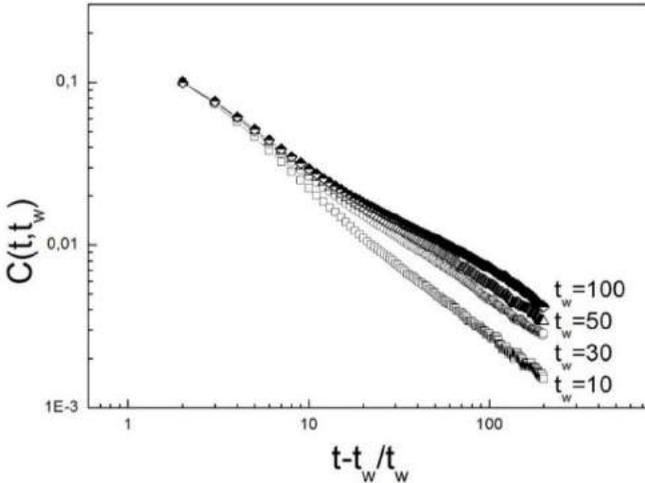
$$m(t) = \left\langle \frac{1}{NL^2} \sum_{i=1}^{NL^2} S_i(t) \right\rangle. \quad (2)$$

Неравновесное поведение реализовывалось переводом системы из данных начальных состояний в состояния при температурах теплового резервуара равных критической температуре

$T_c = 249.6$ К [7]. При расчетах неравновесного поведения автокорреляционной функции рассматривались структуры с линейными размерами пленки $L = 128$, что дает возможность анализировать системные неравновесные характеристики на временах до 10^4 шагов Монте-Карло на спин.

Двухвременная зависимость автокорреляционной функции [7]:

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{NL^2} \sum_{i=1}^{NL^2} S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle - M(t)M(t_w). \quad (3)$$



Зависимость автокорреляционной функции при $T_c = 249.6$ К от времени наблюдения при временах ожидания $t_w = 10; 30; 50; 10$

Показанная на рис. зависимость автокорреляционной функции от времени наблюдения $t - t_w$, демонстрирует наличие в системе эффектов старения, т. е. зависимости временного спада корреляционных эффектов от времени ожидания.

Расчеты двухвременных зависимостей автокорреляционной функции методами Монте-Карло позволили выявить возникновение эффектов старения в мультислойных магнитных структурах. Поэтому существование данных неравновесных эффектов необходимо учитывать при практическом использовании мультислойных

магнитных структур в качестве элементов приборов спинтроники с эффектами гигантского магнитного сопротивления [7].

Работа выполнена при частичной поддержке грантом 17-02-00279 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом МД-6024.2016 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Прудников П.В.* Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках / П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.А. Медведева // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. Вып. 5. С. 481–528.

[2] *Vaz. C. A. F., Bland J. A. C., and Lauhoff. G.*, Rep. Prog. Phys. 2008. Vol. 71. P. 056501.

[3] *Mukherjee T., Pleimling M., and Binek Ch.*, Phys.Rev. 2010. Vol. 82. P. 134425.

[4] *Mukherjee T.* Magnetocaloric properties of Co/Cr superlattices / T. Mukherjee, S. Sahoo, R. Skomski, D.J. Sellmyer, Ch. Binek // Phys. Rev. 2009. Vol. 79. P. 144406.

[5] *Prudnikov P. V., Prudnikov P. V., Menshikova M. A., and Piskunova N. I.* JMMM. 2015. Vol. 387. P. 77–82.

[6] *Baberschke K.* A New Design of an UHV-High-Tc-SQUID Magnetometer: Absolute Determination of Magnetic Moments of 3d-Transition Metal Films / K. Baberschke, P. Fumagalli. Berlin. 2001. 126 p.

[7] *Прудников В.В.* Эффекты старения в неравновесном поведении мультислойных магнитных структур / В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Пуртов, М.В. Мамонова // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104. Вып. 11. С. 797–805.

Марина Максимовна Фирстова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
ffi-95@mail.ru.

РАСЧЁТ РАБОТЫ ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА С ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ ПРИ АДСОРБЦИИ МОНОСЛОЙНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЁНОК

П. А. Фомин

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

М. В. Мамонова

В данной работе, в рамках первопринципных расчётов с использованием программного комплекса VASP, исследовано влияние магнитных свойств монослойных плёнок железа, кобальта и никеля на работу выхода электрона с плотноупакованной грани поверхности Cu с учетом релаксации.

Ключевые слова: программный комплекс VASP, работа выхода электрона, магнитные ультратонкие пленки.

Исследование изменения поверхностных характеристик различных веществ при адсорбции тонких пленок 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.

В развитии современной вычислительной техники и методах решения больших систем уравнений достигнута высота, позволяющие в настоящее время получить при расчете свойств веществ из первых принципов (abinitio) точность, сопоставимую с получаемой в эксперименте. Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) – программа для моделирования материалов атомного масштаба из первых принципов [1].

Данная работа посвящена вычислению работы выхода электрона с поверхности переходных металлов при адсорбции монослойной ферромагнитной плёнки с применением приближения PAWPBE [2; 3]. В качестве подложки в данной работе была выбрана плотноупакованная грань меди Cu(111). Исследовано влияние магнитных свойств монослойных плёнок и учёт релаксации на работу выхода и энергию Ферми.

Работа выхода электрона [4] определяется выражением:

$$\varphi = \varphi_D - \varepsilon_F \quad (1),$$

где φ_D – высота дипольного потенциального барьера, ε_F – энергия Ферми.

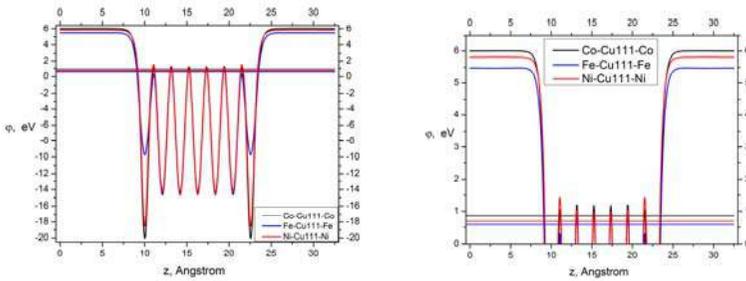


Рис. 1. Пространственное распределение кулоновского потенциала для системы Co-Cu111-Co

На рис. 1,а изображено сравнение распределения кулоновского потенциала в системе Co-Cu111-Co с различными условиями: немагнитный/магнитный Собез/с учёта/учётом релаксации, а на рис. 1,б – аналогичное распределение, но в другом масштабе (при $\varphi > 0$).

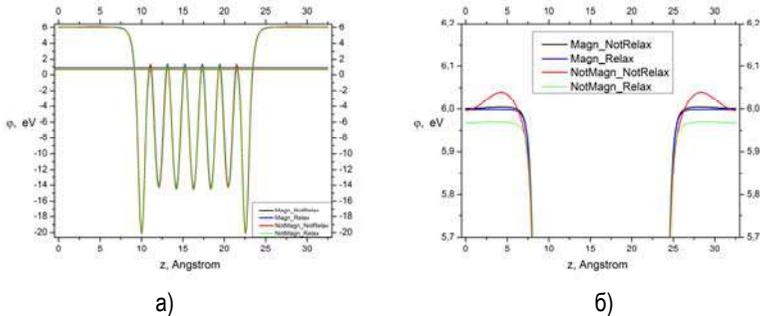


Рис. 2. Пространственное распределение кулоновского потенциала для систем: Co-Cu111-Co, Fe-Cu111-Fe, Ni-Cu111-Ni

На рис. 2,а изображено распределение в различных системах (Co-Cu111-Co, Fe-Cu111-Fe, Ni-Cu111-Ni) при условии: магнитная

монослойная плёнка (Co, Fe, Ni) без учёта релаксации. Рисунок 2,б – есть рис. 2,а, но в увеличенном масштабе (при $\varphi > 0$).

На обоих рисунках видна разница между высотой дипольного момента и энергией Ферми – это работа выхода электрона с плотноупакованной грани поверхности меди.

Таблица 1

Результаты расчета работы выхода электрона φ , эВ

Система	NotMagn NotRelax	NotMagn Relax	Magn NotRelax	Magn Relax
7Cu	4,917	4,855		
5Cu	4,933; 4,94[5]	4,899		
1Fe-5Cu-1Fe	5,394	5,305	4,898	4,911
1CO-5Cu-1Co	5,374	5,242	5,133	5,126
1Ni-5Cu-1Ni	5,297	5,149	5,133	5,117

Таблица 2

Значения энергий Ферми ε_F , эВ

Система	NotMagn NotRelax	NotMagn Relax	Magn NotRelax	Magn Relax
7Cu	0,743	0,768		
1Fe-5Cu-1Fe	0,211	0,269	0,579	0,570
1Co-5Cu-1Co	0,645	0,727	0,869	0,872
1Ni-5Cu-1Ni	0,572	0,662	0,684	0,686

По результатам вычислений, представленных в таблицах 1–2, можно сделать следующие выводы:

В немагнитной системе учёт релаксации приводит к уменьшению работы выхода. В случае магнитной плёнки работа выхода меньше, чем в случае немагнитной. Учёт релаксации, когда плёнка магнитная, меньше влияет на работу выхода по сравнению с немагнитной плёнкой. В случае магнитной плёнки энергия Ферми больше, чем в случае немагнитной.

Используя данные в таблице 1, можно посчитать величину $\Delta\varphi$ по формуле:

$$\Delta\varphi = \varphi_{\text{плёнка+Cu}} - \varphi_{\text{Cu}}, \quad (2)$$

где $\varphi_{\text{плёнка+Cu}}$ – работа выхода электрона в системе с адсорбированной пленкой, φ_{Cu} – работа выхода электрона с чистой поверхности меди.

Значения $\Delta\phi$, эВ

Система	NotMagn Relax	Magn Relax
1Fe-5Cu-1Fe	0,407	0,013
1CO-5Cu-1Co	0,343	0,228
1Ni-5Cu-1Ni	0,250	0,218

Данная величина показывает, что если монослойная плёнка – магнитная, то разница между работой выхода электрона в системе с плёнкой и работой выхода с чистой поверхности меньше, чем в случае, когда плёнка немагнитна.

Проведенные исследования позволяют сделать общий вывод, что работа выхода электрона с поверхности подложки существенно зависит от вида поверхностных структур образующихся при адсорбции пленок, а также учётом эффектов релаксации и магнитного упорядочения.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Marsman G. VASP the GUIDE / G. Marsman, M. Kresse. Wien: Universitat Wien. 2000. P. 208.

[2] *Мамонова М.В.* Описание активированной адсорбции магнитных ионов на поверхности твердых тел с образованием ультратонких ферромагнитных пленок / М.В. Мамонова, В.В. Прудников, С.П. Климов // Вестник Омского университета. 2010. № 4. С. 52–56.

[3] *Мамонова М.В.* Разработка методики расчета работы выхода электронов с поверхности металлов / М.В. Мамонова, В.В. Прудников // Физика металлов и металловедение. 1998. Т. 86. № 2. С. 33–39.

[4] *Пааш Г.* Поверхности твёрдых тел Достижения электронной теории металлов / Г. Пааш, М. Хитшольд; под ред. П. Цише, Г. Лемана. М.: Мир, 1987. Т. 2. С. 466–540.

[5] *Chiarotti G.* Physics of Solid Surfaces / G. Chiarotti. Berlin, 1993.

Пётр Александрович Фомин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
petya_fomin@mail.ru.

Секция

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ЛАЗЕРНУЮ АБЛЯЦИЮ YBCO КЕРАМИКИ

М. А. Бабило

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Г. М. Серопян

В работе исследовалась зависимость эффективности лазерной абляции YBCO керамики от температуры для длин волн 532 и 1064 нм. Эксперименты показали, что лазерная абляция эффективнее при меньшей длине волны и большей температуре керамики.

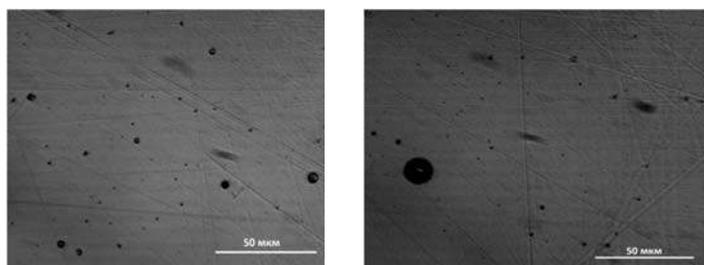
Ключевые слова: лазер, лазерная абляция, сверхпроводящая керамика.

Одним из методов выращивания тонких YBCO пленок является метод лазерной абляции. Механизмы отрыва частиц от мишени, формирования и роста пленок определяют качество получаемых пленок и структур на их основе [1]. Ввиду сложности явления лазерной абляции, включающего в себя процессы поглощения излучения твердым телом, его плавление и испарение, формирование плазменного факела и другие процессы, до сих пор это явление изучено недостаточно [2]. До сих пор нет полной ясности в механизме фотоабляции сложных металлооксидных керамических мишеней, в частности, YBCO мишеней [3].

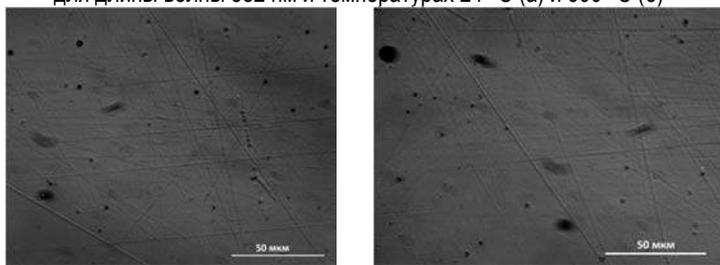
Целью работы является исследование влияния температуры и длинны волны лазерного излучения на эффективность лазерной абляции YBCO керамики. В работе применялся твердотельный наносекундный лазер с Nd:YAG стержнем. Длина волны излуче-

ния составляла 532 и 1064 нм, длительность импульса 16 нс, частота следования импульсов 10 Гц, импульсная энергии 80 мДж, плотность мощности излучения $6,4 \cdot 10^{10}$ Вт/см².

Было проведено распыление YBCO керамики на подложку и исследовано распределение частиц перенесенного материала по размерам. Температура мишени составляла 24 и 600 °С, давление в напылительной камере 100 Па. Время напыления составляло 5 секунд, что не позволяло частицам слиться в сплошную пленку. Частицы в дальнейшем исследовались на оптическом микроскопе, микрофотографии поверхности подложки представлены на рис. 1 и 2.



а б
Рис. 1. Микрофотография поверхности подложки для длины волны 532 нм и температурах 24 °С (а) и 600 °С (б)



а б
Рис. 2. Микрофотография поверхности подложки для длины волны 1064 нм и температурах 24 °С (а) и 600 °С (б)

В зоне облучения керамики образуется кратер, на котором отчетливо видно присутствие расплава вещества. Размер кратера, а соответственно и удаляемый лазерной абляцией объем материала, растет с повышением температуры. На рис. 3 и 4 показаны микрофотографии кратеров полученных при длине волны лазерного излучения 532 нм при температурах 24 и 600 °С.

На рис. 5 и 6 представлены гистограммы распределения капель по диаметру для длин волн излучения 532 и 1064 нм.

Анализ гистограмм на рис. 5 и 6 выявил, что для $\lambda = 532$ нм при температуре 24 °С максимум распределения капель по диаметру приходится на 3000 нм, а при температуре 600 °С – на 2000 нм. Для $\lambda = 1064$ нм при температуре 24°С максимум распределения приходится на 2500 нм, а при температуре 600 °С – на 2000 нм. Кроме того, для $\lambda = 532$ нм с ростом температуры появляются капли, чей диаметр значительно выше среднего, а максимум распределения смещается влево примерно на 1000 нм. Для $\lambda = 1064$ нм с ростом температуры диаметр капель возрастает, а максимум распределения смещается влево примерно на 500 нм.

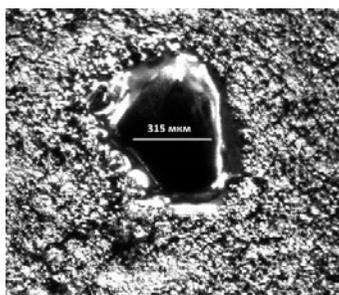


Рис. 3. Микрофотография кратера, полученного при температуре 24 °С

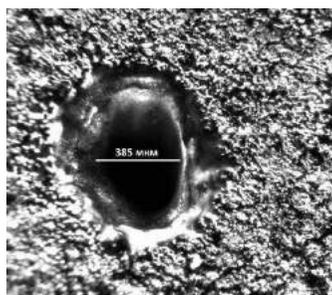


Рис. 4. Микрофотография кратера, полученного при температуре 600 °С

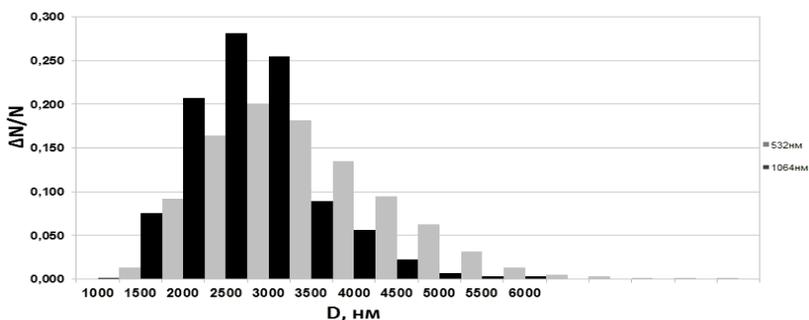


Рис. 5. Гистограммы распределения капель по диаметру, полученные при температуре 24 °С

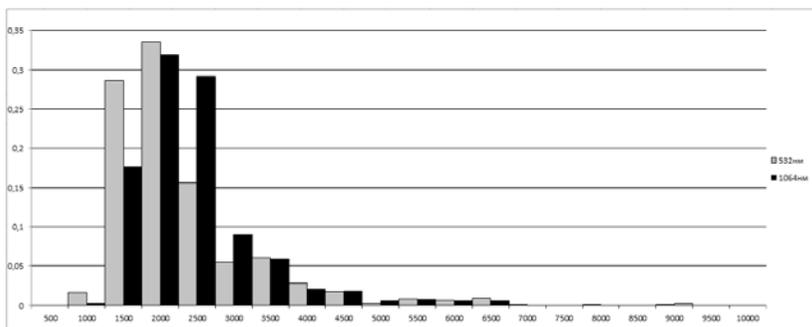


Рис. 6. Гистограммы распределения капель по диаметру, полученные при температуре 600 °С

Средний размер капель снижается с ростом температуры, что особенно заметно для длины волны 532 нм. С уменьшением длины волны излучения, распределение капель YBCO смещается в сторону больших значений. Мы считаем, что это может быть связано с тем, что при повышении температуры мишени растет доля жидкой фазы в кратере, а соответственно – диаметр крупных капель, и масса переносимая ими.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Воробьев В.С.* Плазма, возникающая при взаимодействии лазерного излучения с твердыми мишенями / В.С. Воробьев // УФН. 1993. Т. 163, № 12. С. 51–83.
- [2] *Булгаков А.В.* Динамика и механизмы образования кластеров при импульсной абляции: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / А.В. Булгаков. Новосибирск, 2004.
- [3] *Югай К.Н.* Макроструктура ВТСП YBCO пленок, выращенных методом лазерной абляции / К.Н. Югай, Г.М. Серопян, А.Б. Муравьев // ЖТФ. 1998. Т. 98. № 2. С. 48–51.

Максим Александрович Бабило,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 1-й курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
 babilo_ma@mail.ru.

ОЦЕНКА ПОКАЗАТЕЛЕЙ ВАРИАБЕЛЬНОСТИ РИТМА СЕРДЦА В ТРЕНИРОВОЧНОМ ПРОЦЕССЕ

К. С. Бакланова

*Научный руководитель: канд. биол. наук, доцент
М. Г. Потуданская*

Применение математических методов для оценки параметров работы сердца с целью корректировки эффективности тренировочного процесса спортсменов различного уровня подготовки находит все более широкое применение. Комплексное изучение ВРС позволяет формировать и корректировать группы с примерно одинаковыми тренировочными возможностями.

Ключевые слова: вариабельность ритма сердца, спектральные параметры, тренировочные группы.

Оценка функциональных показателей вариабельности ритма сердца у здоровых тренированных людей во время физической нагрузки является важной задачей, так как она позволяет корректировать тренировочный процесс и избежать срыва адаптационных процессов [2]. В исследовании принимали участие три группы студентов 1 группа – это спортсмены высокой квалификации, мастера спорта 22 человека; 2 группа – это спортсмены, имеющие более низкую квалификацию 35 человек; 3 группа – начинающие спортсмены 36 человек. Запись ЭКГ осуществлялась с использованием электрокардиографа Cardio Care 2000. Запись осуществлялась до и после проведения фоновой пробы. При спектральном анализе оценивались следующие показатели: TP (общая мощность спектра), HF (мощность волн высокой частоты в диапазоне от 0,4 до 0,15 Гц), LF (мощность волн низкой частоты в диапазоне от 0,15 до 0,04 Гц) [1], VLF (мощность волн очень низкой частоты в диапазоне от 0,04 до 0,0033 Гц), LF/HF (коэффициент вагосимпатического баланса), HF% (относительное значение мощности волн высокой частоты), LF% (относительное значение мощности волн низкой частоты), VLF% (относительное значение мощности волн очень низкой частоты), HF в п. и. (относительное значение мощности волн высокой частоты, выраженное в нормализованных еди-

ницах) [1]. В таблице приведены изменения спектральных параметров и параметров ВРС после физической нагрузки в %.

Спектральные параметры и параметры ВРС

Показатели	Процент изменения, %	Показатели	Процент изменения, %
LF, мс ²	90,24	RR min,мс	4,68
VLF, мс ²	84,38	RR max,мс	0,25
HF, мс ²	16,73	RRNN,мс	7,43
LF/HF	88,27	BP,с	26,94
%VLF	70,94	ИВР,отн.е.	56,25
%LF	81,82	ПАПР,отн.е.	20,40
%HF	55,00	ВПР, отн.е.	22,95
TP, мс ²	46,27	ИН, отн.е.	36,00

Исследуя индивидуальные изменения спектральных параметров и параметров ВРС можно задать границы параметров групп, основываясь на экспертной оценке. На основе клинических данных и спортивно-тренировочных достижений определены изменения параметров ВРС, характерные для различных тренировочных групп (мужчины и женщины). Разработана методика распределения спортсмена в тренировочную группу на основе анализа его индивидуальных изменений ВРС. Проведен анализ ВРС для выбранных студентов ОмГУ и определена их групповая принадлежность для спортивного тренировочного процесса.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Антонов А.А.* Диагностика функционального состояния спортсменов / А.А. Антонов // Медицина для спорта: матер. 1-го Всероссийского конгресса (19–20.09.2011). М. С. 11–14.

[2] *Бабунц И.В.* Азбука анализа variability сердечного ритма / И.В. Бабунц, Э.М. Мириджанян, Ю.А. Машаех. Ставрополь: Принтмастер, 2002. 112 с.

Ксения Сергеевна Бакланова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
ksyusha.m@mail.ru.

ФАКТОРНАЯ СТРУКТУРА ПАРАМЕТРОВ ВАРИАБЕЛЬНОСТИ РИТМА СЕРДЦА, ПОЛУЧЕННАЯ МЕТОДОМ ГЛАВНЫХ ФАКТОРОВ В НОРМЕ И ПРИ ФИЗИЧЕСКОЙ НАГРУЗКЕ

А. Ю. Баченина

*Научный руководитель: канд. биол. наук, доцент
М. Г. Потуданская*

Вариабельность сердечного ритма (ВРС) – средство измерения изменений в сердечном ритме. Причина изменчивости ритма сердца в том, что организм способен реагировать на различные раздражения внешней и внутренней среды. Эти изменения в биофизике сердца могут быть описаны с применением многомерных статистических методов.

Ключевые слова: вариабельность ритма сердца, факторный анализ, генеральный фактор.

У здоровых людей интервал времени от начала цикла одного сердечного сокращения до начала другого не является одинаковым, это явление – вариабельность сердечного ритма (ВРС). Исследование ВРС очень информативно и его активно применяют в оценке физиологического состояния кардиореспираторной системы и в спортивной медицине [1].

ВРС характеризуется следующими параметрами: индекс вегетативного равновесия (ИВР), вегетативный показатель ритма (ВПР), показатель адекватности процессов регуляции (ПАПР), индекс напряжения регуляторных систем (ИН). ИВР указывает на соотношение между активностью симпатического и парасимпатическим отделом вегетативной нервной системы. ВПР позволяет оценить вегетативный баланс активности автономного контура регуляции. ПАПР демонстрирует соответствие между активностью симпатического отдела вегетативной нервной системы и ведущим уровнем функционирования синусового узла. ИН регуляторных систем свидетельствует о степени централизации управления сердечным ритмом.

В работе произведен факторный анализ совокупности параметров ЭКГ (длительности и амплитуды зубцов, длительность сегментов) и перечисленных выше параметров ВРС. Выявление фак-

торов, комплексно описывающих распространение возбуждения по проводящей системе сердца, позволяет быстро отслеживать изменения, происходящие в тренировочном процессе и изменять длительность и интенсивность нагрузки.

Для проведения анализа параметров ЭКГ и ВРС использовался метод главных компонент [2]. Метод показывает, когда значения случайной величины изменяются под воздействием ограниченного числа причин и эти причины могут быть выражены через исследуемые случайные величины [3].

Анализ факторной структуры показал, что можно выделить фактор, вклад в который осуществляют все анализируемые параметры ЭКГ и ВРС. Весовые нагрузки параметров минимальны для амплитуд зубцов. Эти параметры образуют отдельный фактор, значение которого также существенно изменяется в тренировочном процессе. Очевидно, что наиболее высокий коэффициент корреляции наблюдается между длительностью R-R интервала и параметрами ВРС, однако значимой является связь между сегментами ЭКГ и длительностью зубца Р с одной стороны и параметрами ВРС с другой.

Вычисленная индивидуальная структура факторов, уникальная для каждого вовлеченного в тренировочный процесс может быть использована как индикатор состояния функциональной активности миокарда и, одновременно, изменение значения фактора может быть использовано как индикатор тренировочного процесса.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Кудря О.Н.* Влияние физических нагрузок различной направленности на вариабельность ритма сердца у спортсменов / О.Н. Кудря // Бюллетень сибирской медицины. 2009. № 1. С. 36–42.

[2] Иберла К. Факторный анализ / К. Иберла. М., 1980. 394 с.

[3] *Глотов А.В.* Основы электрокардиографии: учеб. пособие / А.В. Глотов, М.Г. Потуданская. Омск, 2011. 41 с.

Анастасия Юрьевна Баченина,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
nysaa29@mail.ru.

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ ОСТАТОЧНЫХ ГАЗОВ ПОДКОРПУСНОГО ПРОСТРАНСТВА МИКРОСХЕМ

К. А. Белоусов

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

Г. Ж. Худайбергенов

Разработан измерительный стенд с вакуумом $10^{-8} \div 10^{-7}$ Торр для определения остаточных газов на корпусе и внутри корпусов изделий. Получены спектры остаточных газов до и после разгерметизации кварцевых резонаторов-термостатов (КРТ) в корпусе DIL-14. Проведен качественный анализ состава газа при температурах $20 \div 160$ °С.

Ключевые слова: масс-спектрометрия, подкорпусное пространство, кварцевый резонатор термостатированный.

Целью работы является исследование остаточных газов подкорпусного пространства кварцевых резонаторов термостатированных (КРТ) с установленными дефектами масс-спектрометрическим методом.

Одним из контролируемых параметров опорных генераторов на основе КРТ является стабильность частоты, которая задается с точностью до $10(-9)$ на протяжении всего срока эксплуатации изделия, поэтому необходимо определить причины отклонения частоты от рабочего значения. Возможными причинами отклонений могут быть адсорбированные на поверхности кристалла КРТ газовые продукты выделения из материалов, используемых при монтаже резонатора и корпусировании [1]. Для определения состава адсорбатов и возможных химически активных частиц проводятся исследования спектра остаточных газов подкорпусного пространства микросхем [2]. Для проведения экспериментов были получены образцы № 315, 343, 435 имеющие различные неисправности. Так же был получен рабочий образец № 215.

Процесс проведения измерений: испытываемая микросхема помещается в вакуумную систему, после откачки до высокого вакуума происходит нагрев до 80 °С (рабочий режим), затем до 160 °С (режим отжига). В камере вскрытия находится ионный ис-

точник масс-спектрометра (ХТ-100). По достижении необходимого уровня фона прокалывающее устройство создаёт микротечь в корпусе микросхемы. Парогазовая смесь через отверстие попадает в область ионизации масс-спектрометра. После этого происходит контрольный нагрев образца и снятие спектра масс.

На рис. 1. представлен участок спектра (10–40 а.е.м.) остаточных газов образцов при $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$. После прокола давления паров воды (18 массы) у всех образцов в пределах одного порядка, давление азота для №343 выше, чем у №435 в $\approx 1,5$ раза, что говорит о более высоком давлении внутри корпуса образца – № 343. Парциальное давление для 55 и 69 (см. таблицу) масс выше всех у № 343 образца (рис. 2) и ниже всех у № 215. На рис. 3 представлен масс-спектр интересующего нас диапазона (34–80 а.е.м.) при $160\text{ }^{\circ}\text{C}$. Из графика видно при нагреве появляется 41 масса, пик которой выше у 315, у остальных в пределах порядка. В итоге можно заметить, что у № 215 образца лучшие показатели, чем у остальных, особенно в области 55 массы, № 435 образец уступает исправному, только в области данной массы. Что может говорить о существенном влиянии данного соединения, отвечающего 55 массе, на работу генератора.

Поиск по базе NIST2008 (National Institute Standard and Technology) [3] позволил выявить несколько соединений, которые могли попасть внутрь корпуса в процессе изготовления КРТ и повлиять на его работу (см. таблицу).

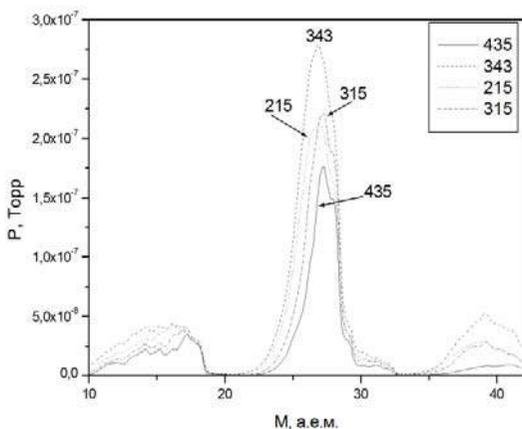


Рис. 1. Участок спектра (10-40 а.е.м.) остаточных газов образцов при $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$

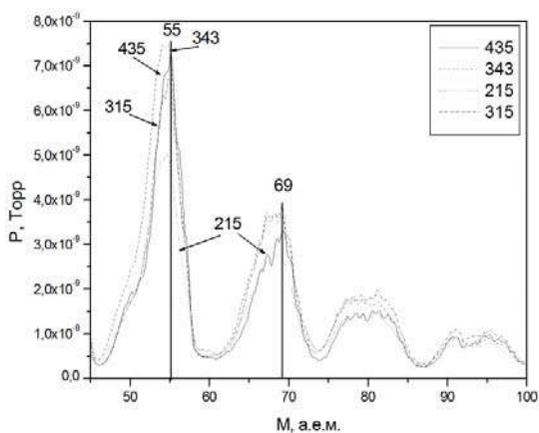


Рис. 2. Участок спектра (45–100 а.е.м.) остаточных газов образцов при $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$

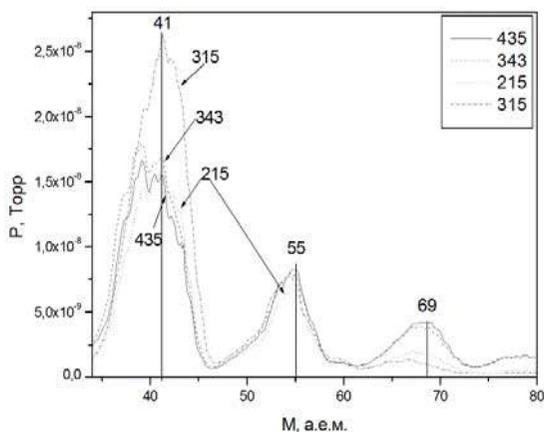


Рис. 3. Участок спектра остаточных газов образцов при $T = 160\text{ }^{\circ}\text{C}$

В результате проведенного анализа спектров установлено, что основными загрязняющими веществами являются азотсодержащие соединения и пары воды, а так же соединения представленные в таблице. Показано, что спектры для различных неисправностей по частоте, тоже различаются. Конкретный ответ может дать эксперимент целью, которого является выявления подобной закономерности.

М, а.е.м.	Формула	Название	Применение
41	C_2H_3N	ацетонитрил	используется в органической химии в качестве растворителя
55	C_3H_5N	изоцианид	содержится в отвердителях акриловых, эпоксидных и полиуретановых смол
59	CH_5N_3	гуанидин	в производстве пластмасс, ингибитор коррозии
69	C_4H_7N	азиридин	используется при получении полиэтиленамина, аминоэтилировании полимеров

ЛИТЕРАТУРА

[1] Орлов В.И. Качество электронной компонентной базы – залог длительной работоспособности космических аппаратов / В.И. Орлов, В.В. Федосов // Решетневские чтения. СибГУ им. М.Ф. Решетнева (Красноярск). 2013. С. 238–241.

[2] *Lowry R. K.* Harsh environments and volatiles in sealed enclosures / R. K. Lowry, R. C. Kullberg, D. J. Rossiter // Surface Mount Technology Association International Technical Conference, October 24–28, 2010, Orlando, FL. P. 380–386.

[3] <http://www.nist.gov/srd/chemistry.cfm>.

Константин Анатольевич Белоусов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
konstanti.belousov@yandex.ru.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЛУЧА ДЛЯ РАСЧЕТА ИНТЕНСИВНОСТИ СВЕТОВОЙ ВОЛНЫ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВОЛНОВОДЕ С ИЗГИБОМ

М. Ю. Горячкин

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Т. К. Болецкая

В работе методом распространения луча рассчитано распределение интенсивности световой волны в диэлектрическом волноводе с изгибом.

Ключевые слова: метод распространения луча, оптический волновод, распределение интенсивности света.

С помощью метода распространения луча ищется приближенное решение скалярного волнового уравнения (или уравнения $n(x, y, z)$ Гельмгольца) [1]:

$$\Delta E + k^2 n^2(x, y, z)E = 0, \quad (1)$$

$n(x, y, z)$ – показатель преломления среды, k – волновое число для вакуума, E – напряженность электрического поля.

Пусть волна распространяется в оптическом волокне. Вдоль преимущественного направления распространения волны проводим ось z . Представляем напряженность электрического поля в виде произведения быстро меняющейся функции z и огибающей, медленно меняющейся при изменении z [1]:

$$E(x, y, z) = \phi(x, y, z) \exp(-j\beta z), \quad (2)$$

β – проекция волнового вектора на ось z , называется постоянной распространения. Если показатель преломления волноводного канала мало отличается от показателя преломления окружающей среды, β можно считать равным волновому числу в окружающей среде: $\beta \approx kn_0$, n_0 – показатель преломления окружающей среды, считаем его независимым от координат.

Подставляя (1) в (2), получаем уравнение на функцию ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = -j \frac{1}{2kn_0} \nabla^2 \phi - jk[n - n_0]\phi. \quad (3)$$

При записи (3) пренебрегаем второй производной от ϕ по z и записываем приближенно разность квадратов показателей преломления [2]:

$$n^2 - n_0^2 \cong 2n_0(n - n_0). \quad (4)$$

Для того чтобы учесть поглощение электромагнитной волны, считаем показатель преломления волноводного канала комплексным:

$$n \rightarrow N = n - j\kappa. \quad (5)$$

С помощью метода эффективного показателя преломления задачу можно свести к двумерной [2].

Уравнение (3) для двумерного волновода переписывается в виде:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = -j \frac{1}{2kn_0} \nabla^2 \phi - \alpha \phi - jk[n(x, z) - n_0] \phi, \quad (6)$$

где $\alpha = k\kappa$.

Вводя операторы \mathbf{A} и \mathbf{B} , (6) переписываем в виде:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = (\mathbf{A} + \mathbf{B}) \phi, \quad (7)$$

$$\mathbf{A} = -j \frac{1}{2kn_0} \nabla^2, \quad (8)$$

$$\mathbf{B} = -\alpha(x, z) - jk[n(x, z) - n_0]. \quad (9)$$

Проинтегрируем (7) по отрезку от z до $z + h$. Если h малая величина, то интегрирование дает:

$$\phi(x, z + h) = \exp \left[h\mathbf{A} + \frac{h}{2}(\mathbf{B}(z) + \mathbf{B}(z + h)) \right] \phi(x, z). \quad (10)$$

При малом h можно написать

$$\exp(h\mathbf{A} + h\mathbf{B}) \cong \exp(h\mathbf{A}) \exp(h\mathbf{B}). \quad (11)$$

Подставляя (11) в (10), получим

$$\begin{aligned} \phi(x, z + h) = & \exp(h\mathbf{A} / 2) \exp \left[\frac{h}{2}(\mathbf{B}(z) + \mathbf{B}(z + h)) \right] \times \\ & \times \exp(h\mathbf{A} / 2) \phi(x, z). \end{aligned} \quad (12)$$

Можно показать, что огибающая решения волнового уравнения для однородной среды удовлетворяет соотношению

$$\phi\left(x, z + \frac{h}{2}\right) = \exp\left(\frac{h\mathbf{A}}{2}\right)\phi(x, z) = F^{-1}\left[\exp\left(-\frac{j\delta\gamma h}{2}\right)F\{\phi(x, z)\}\right]. \quad (13)$$

где F – преобразование Фурье по координате x , F^{-1} – обратное преобразование Фурье,

$$\delta\gamma = \left[k^2 n_0^2 - (2\pi\rho)^2\right]^{1/2} - kn_0, \quad (14)$$

ρ – пространственная частота.

Из (13) следует, что \mathbf{A} описывает распространение волны в однородной среде без затухания с показателем преломления n_0 [2]. Оператор \mathbf{B} описывает потери (или усиление) и задержку фазы.

Из изложенного следует, что для того чтобы вычислить $\phi(x, z + h)$ по известной $\phi(x, z)$ нужно выполнить 3 операции [2].

1. Выполнить вычисления по формуле (13).

2. Умножить полученный результат на экспоненту, содержащую операторы \mathbf{B} :

$$\bar{\phi}\left(x, z + \frac{h}{2}\right) = \exp\left\{\frac{h}{2}[\mathbf{B}(z) + \mathbf{B}(z + h)]\right\}\phi\left(x, z + \frac{h}{2}\right). \quad (15)$$

3. Выполнить вычисления по формуле (13), в которой z заменяется на $z + h/2$, а $z + h/2$ заменяется на $z + h$:

$$\phi(x, z + h) = \exp\left(\frac{h\mathbf{A}}{2}\right)\bar{\phi}\left(x, z + \frac{h}{2}\right) = F^{-1}\left[\exp\left(-\frac{j\delta\gamma h}{2}\right)F\left\{\bar{\phi}\left(x, z + \frac{h}{2}\right)\right\}\right]. \quad (16)$$

На рис. 2 приведен график интенсивности света, распространяющегося в оптическом волноводе с изгибом, изображенном на рис. 1. Размер волновода в плоскости чертежа $a = 8$ мкм; размер волновода в плоскости, перпендикулярной плоскости чертежа $d = 8$ мкм; координата x меняется в пределах $-51.2 \text{ мкм} \leq x \leq 51.2 \text{ мкм}$; координата z меняется в пределах $0 \leq z \leq 1100 \text{ мкм}$; радиус кривизны $R = 10000 \text{ мкм}$; $S_b = 25 \text{ мкм}$; показатель преломления среды, окружающей волноводный канал: $n_0 = 2.214$; показатель преломления волновода $1.003n_0$, эффективный показатель преломления волновода: $n = 2.2206$; шаг по оси z : $h = 0.2 \text{ мкм}$; шаг по оси x : $\Delta x = 0.2 \text{ мкм}$.

Рассчитаны интеграл от интенсивности по всей области изменения координат x и z : $V = 858800$ в условных единицах. Интеграл от интенсивности по всей области изменения координаты z и по x , лежащим внутри волноводного канала, равен

$V_B = 522380$ в условных единицах. Отношение: $V / V_B = 1.644$, отношение в децибелах $V / V_B = 2.2$ дБ. Таким образом, вычислены потери энергии волны при распространении ее в волноводе вследствие выхода волны за пределы волноводного канала.

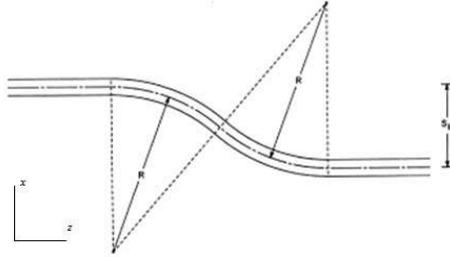


Рис. 1. Оптический волновод с изгибом

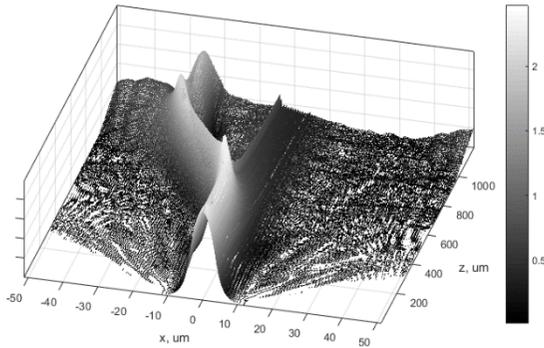


Рис. 2. Распределение интенсивности света

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Унгер Х.-Г. Планарные и волоконные оптические волноводы / Х.-Г. Унгер. Oxford University Press, 1977. 656 с.
 [2] Katsunari Okamoto. Fundamentals of Optical Waveguides / Katsunari Okamoto. 2006. 561 с.

Максим Юрьевич Горячкин,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 2-й курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
 maxgoryachkin@mail.ru.

**СОВМЕСТНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИ
ТРЕХФАКТОРНОГО ДИСПЕРСИОННОГО КОМПЛЕКСА
И МЕТОДА ГЛАВНЫХ ФАКТОРОВ
В СТАТИСТИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ АПНОЭ**

Н. А. Диденко

*Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент
В. В. Гольтяпин*

Статья посвящена проблеме выявления факторов, прямо или косвенно оказывающих влияние на наличие у пациентов синдрома обструктивного апноэ сна (СОАС). Актуальность связана с большой распространенностью заболевания, которая составляет 5–10 % во взрослой популяции и с возрастом увеличивается. В результате определено, что всю совокупность параметров можно разделить на пять факторов, хорошо описывающих дисперсию.

Ключевые слова: синдром обструктивного апноэ сна, факторный анализ, дисперсионный анализ.

Целью работы является выявление, с помощью факторного анализа, латентных факторов, оказывающих влияние на наличие у пациентов СОАС. Это нужно для того, чтобы определить какие факторы коррелируют между собой и, следовательно, в дальнейшем их нельзя будет совместно использовать при дисперсионном анализе.

Исследование проводилось на базе сомнологического отделения многопрофильного центра современной медицины «Евромед» (г. Омск) в рамках совместного научного сотрудничества. В нем приняли участие 254 пациента, у которых определялись 9 параметров: сатурация, индекс десатураций, индекс массы тела (ИМТ), хронический тонзиллит, хронический вазомоторный ринит, ретромикрогнатия, искривление носовой перегородки, возраст и пол.

Использование дисперсионного анализа позволяет получить информацию о том, существуют ли между факторами взаимосвязи и насколько сильно они влияют на наличие конкретного заболевания. Главными характеристиками в дисперсионном анализе являются вариация, сила влияния и значение критерия Фишера F.

Варианса – дисперсия C_i , деленная на число степеней свободы v_i :

$$\sigma^2 = \frac{C_i}{v_i} \quad (1)$$

Сила влияния – отношение частной дисперсии к общей:

$$\eta^2 = \frac{C_i}{C_y} \quad (2)$$

В качестве критерия достоверности различия факториального и случайного разнообразия используется критерий Фишера:

$$F = \frac{\sigma_i}{\sigma_z} \quad (3)$$

Полученное значение сравнивается с табличным значением критерия Фишера. Если вычисленное значение критерия F больше критического для определенного уровня значимости ($\alpha = 0,05$) при соответствующих числах степеней свободы, то дисперсии считаются различными, т. е. данный фактор влияет на результативный признак [4].

Факторный анализ позволяет получить информацию о том, есть ли в массиве данных латентные факторы, которые оказывают влияние на наличие заболевания. При проведении факторного анализа все расчеты носят последовательный характер (рис. 1).

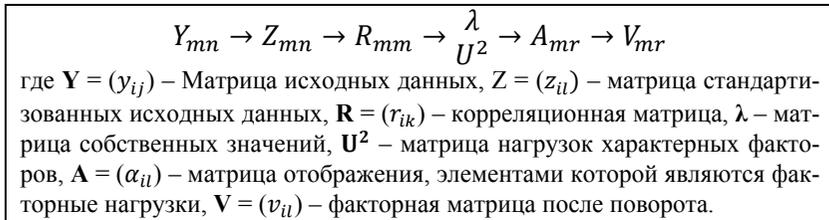


Рис. 1. Схема факторного анализа

Факторный анализ начинается с \mathbf{Y} – матрицы, исходных данных, которая в обязательном порядке преобразуется в матрицу стандартизованных значений \mathbf{Z} . По ней вычисляется корреляционная матрица \mathbf{R} . Затем вычисляется матрица собственных векторов, собственные значения матрицы λ (5) и матрицы нагрузок характерных факторов \mathbf{U}^2 (4) [2].

$$R - U^2 = ACA' \quad (4)$$

$$R\alpha_l = \lambda_l \alpha_l \quad (5)$$

Процесс выбора числа факторов, достаточных для описания системы, состоит в анализе собственных значений системы. Согласно критерию Кайзера, можно отбросить компоненты, собственные значения которых меньше единицы. Также используем критерий каменистой осыпи, который заключается в том, что находится место на графике, где убывание собственных значений слева направо максимально замедляется. Предполагается, что слева от этой точки находится то число факторов, которое в большей степени способно описать дисперсию параметров. Причем суммарная дисперсия оставленных факторов должна составлять не менее 75 %. В данной работе целесообразно рассматривать 5 латентных факторов, которые описывают 77,67 % общей дисперсии.

Для получения наиболее оптимального решения (матрица **V**) используется метод варимакс-вращения, целью которого является выбор наиболее простого факторного решения путем максимизации дисперсии факторных нагрузок переменных по каждому фактору. В результате становится более очевидным, какие переменные с какими факторами взаимосвязаны. При варимакс-вращении доли дисперсий, объясняемые факторами, перераспределяются в сторону выравнивания [3].

Матрица весовых нагрузок

	Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3	Фактор 4	Фактор 5
Сатурация	0,905	0,0114	-0,0147	-0,0303	-0,0427
Индекс деса- тураций	-0,908	-0,0524	-0,00216	0,063	-0,0299
ИМТ	-0,662	0,193	0,118	0,0869	0,0882
Хр. Гонзил- лит	-0,079	-0,0679	-0,106	0,968	-0,0811
Хр. вазо-мо- тор. ринит	-0,107	-0,839	0,00253	-0,0437	-0,0143
Искривление нос.перег.	0,135	-0,763	-0,0827	0,237	0,00709
Ретро-мик- рогнатия	0,0234	-0,00423	-0,0219	0,0749	-0,991
Возраст	-0,245	-0,0517	0,842	-0,097	-0,0216
Пол м-1, ж-0	-0,387	-0,196	-0,705	0,133	-0,107

В таблице приведены значения факторных нагрузок после варимакс-вращения. На основе этих данных, видно, что вклад в каждый фактор параметров имеет разное значение. Таким образом, можно выделить несколько групп характеристик, которые взаимосвязаны между собой. В первую группу входит индекс десатураций и сатурация. Это фактор, непосредственно связанный с характеристиками, снятыми во время сна у каждого пациента. К следующей группе можно отнести хронический вазомоторный ринит и искривление носовой перегородки – это параметры, связанные с нарушением нормального функционирования верхних дыхательных путей. В третьей группе оказались параметры возраст и пол. В отдельные группы выделились параметры ретромикрогнатия и хронический тонзиллит. Так как дисперсионный анализ в данном исследовании проводится на базе качественных показателей, то из всей совокупности данных можно использовать следующие параметры: хронический тонзиллит, искривление носовой перегородки, пол, хронический вазомоторный ринит, ретромикрогнатия и ИМТ (при разбиении пациентов на 3 группы по степени ожирения). Причем нельзя совместно использовать параметры хронический вазомоторный ринит и искривление носовой перегородки, так как они коррелируют между собой.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бузунов Р.В. Храп и синдром обструктивного апноэ сна у взрослых и детей: Практическое руководство для врачей / Р.В. Бузунов, И.В. Легейда, Е.В. Царева. М., 2013. 125 с.
- [2] Иберла К. Факторный анализ / К. Иберла; пер. с нем. В.М. Иванова. М.: Статистика, 1980. 397 с
- [3] Ким Д. О. Факторный, дискриминантный и кластерный анализ / Д.О. Ким. Рипол Классик, 1989. 215 с.
- [4] Плохинский Н.А. Биометрия / Н.А. Плохинский. М.: Изд-во Московского университета, 1970. 367 с.

Наталья Андреевна Диденко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
tusik-didenko@mail.ru.

АНАЛИЗ ВХОДНОГО ИМПЕДАНСА МЕМБРАННОГО РЕЗОНАТОРА НА ОАВ ДЛЯ БИОСЕНСОРОВ

Р. А. Дубинин

Научный руководитель: д-р техн. наук, доцент А. Г. Козлов

В работе проведено моделирование электрического входного импеданса микроэлектронного резонатора на объемных акустических волнах, используемого для биосенсоров. Рассмотрен микроэлектронный резонатор мембранного типа, на поверхность верхнего электрода которого нанесен биочувствительный слой. Используя модель Мэзона, мы определили частотные зависимости модуля импеданса биосенсора от толщины мембраны и от свойств материала диэлектрической пленки. Установлено, что данные параметры в основном влияют на частоту последовательного резонанса и на значение модуля импеданса биосенсора на этой частоте.

Ключевые слова: микроэлектронный резонатор, биосенсор, входной акустический импеданс, объемная акустическая волна.

Основным элементом резонаторов на ОАВ мембранного типа является тонкопленочная резонансная структура металл-пьезоэлектрик-металл. По периметру мембрана поддерживается подложкой и располагается над вытравленной полостью подложки. Наряду с простой мембраной используют и сложные мембраны. В мембране сложной конструкции дополнительно применяют диэлектрические (SiO_2 , Si_3N_4) пленки. Эти пленки повышают температурную стабильность частоты и увеличивают механическую прочность мембраны [2].

Целью данной работы является исследование влияния толщины мембраны, а так же влияние материала диэлектрической пленки на вид частотных зависимостей входного электрического импеданса биосенсора на основе резонатора на объемных акустических волнах.

Изучения зависимостей для резонаторов на ОАВ производится с использованием математического моделирования на основе ряда базовых моделей резонаторов [1]. Одной из таких моделей является модель Мэзона.

Входной электрический импеданс биосенсора может быть определен с использованием следующего выражения [3]:

$$Z_{\text{вх}} = \frac{1}{i\omega C_0} \left\{ 1 + \frac{k_t^2}{\gamma} \frac{i(Z_{\text{эл}}^{\text{в}} + Z_{\text{эл}}^{\text{н}})Z_{\text{п}} \sin \gamma - 2Z_{\text{п}}^2(1 - \cos \gamma)}{(Z_{\text{п}}^2 + Z_{\text{эл}}^{\text{в}} Z_{\text{эл}}^{\text{н}}) \sin \gamma - i(Z_{\text{эл}}^{\text{в}} + Z_{\text{эл}}^{\text{н}})Z_{\text{п}} \cos \gamma} \right\}.$$

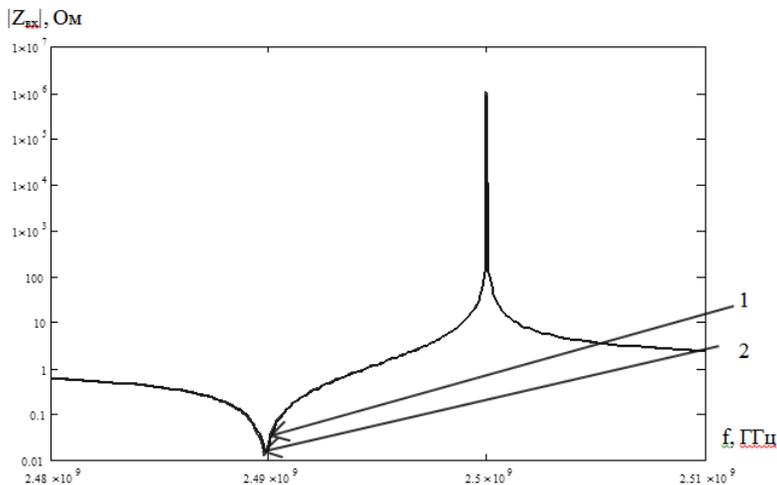
Величина импеданса верхнего и нижнего электрода определяется импедансами двух слоев: металлического слоя и нанесенного на него биочувствительного слоя и металлического слоя и диэлектрической плёнки соответственно.

Исследование частотной зависимости входного электрического импеданса биосенсора от свойств диэлектрической плёнки проводилось на конструкции, имеющей следующие характеристики слоев: в качестве материала пьезоэлектрического слоя был выбран оксид цинка (ZnO); в качестве материала пленочных электродов – алюминий (Al); в качестве диэлектрической плёнки – оксид кремния (SiO₂) и нитрид кремния (Si₃N₄). Толщина пьезоэлектрического слоя была выбрана равной 1.27 мкм, что соответствует резонансной частоте, равной 2.5 ГГц. В качестве биочувствительного слоя рассматривался слой фермента с физическими характеристиками, близкими к характеристикам воды. Толщина биочувствительного слоя равна 0.1 мкм. Частотные зависимости модуля входного электрического импеданса биосенсора с акустическим импедансом для разных диэлектрических плёнок изображены на рис. Измеренные параметры приведены в табл. 1.

Таблица 1

**Параметры частотных зависимостей импеданса биосенсора
для диэлектрических плёнок**

Материал	fs, ГГц	fp, ГГц	log Zs , Ом	log Zp , Ом
оксид кремния, SiO ₂	2.4899	2.50	-1.828	5.933
нитрид кремния, Si ₃ N ₄	2.4898	2.50	-1.888	6.02



Частотные зависимости модуля входного электрического импеданса биосенсора на основе микроэлектронного резонатора на ОАВ с акустическим импедансом для диэлектрических плёнок:
1 – SiO₂, 2 – Si₃N₄

Параметры частотных зависимостей модуля входного электрического импеданса биосенсора с различными толщинами мембраны представлены в таблице 2. В качестве диэлектрической плёнки был выбран оксид кремния (SiO₂).

Таблица 2

Параметры частотных зависимостей импеданса биосенсора для разных значений толщины мембраны

№ образца	Толщина электрода мембраны, мкм	C0, пФ	f _s , ГГц	f _p , ГГц	log Z _s , Ом	log Z _p , Ом
1	0.5	53.1	2.4899	2.50	-1.828	5.933
2	0.75		2.4898	2.50	-1.813	5.953
3	1		2.4898	2.50	-1.964	6.105

Анализ частотных зависимостей модуля входного электрического импеданса биосенсора на основе резонатора на ОАВ при двух значениях акустического импеданса диэлектрического слоя показал, что с увеличением акустического импеданса диэлектрической плёнки частота последовательного резонанса уменьшается, а частота параллельного резонанса остается практически неизменной. Модуль импеданса при последовательном резонансе уменьшается, а при параллельном – увеличивается с увеличением акустического импеданса диэлектрической плёнки.

Толщины мембраны оказывают различное влияние на особые точки частотной зависимости модуля входного электрического импеданса биосенсора на основе резонатора на ОАВ. С увеличением толщины этого слоя частота последовательного резонанса уменьшается, а частота параллельного резонанса практически не изменяется. Модуль импеданса при последовательном резонансе с увеличением толщины уменьшается, в то время как при параллельном резонансе он увеличивается.

Результаты работы могут быть использованы при проектировании биосенсоров на основе резонаторов на объемных акустических волнах. В частности, используя методику моделирования, предложенную в работе, можно определить наиболее оптимальные значения мембраны.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Kim H.-Y.* Analysis of resonance characteristics of Bragg reflector type film bulk acoustic resonator / H.-Y. Kim, K.-B. Kim, S.H. Cho, Y.-I Kim // *Surface and Coatings Technology*. 2012. Vol. 211. P. 143–147.

[2] *Зима В.Е.* Пьезоэлектрические тонкоплёночные резонаторы СВЧ диапазона / В.Е. Зима, И.А. Корж // *Техника радиосвязи*. 2008. Вып. 13. С. 152–160.

[3] *Кайно Г.* Акустические волны: Устройства, визуализация и аналоговая обработка сигналов / Г. Кайно. М.: Мир, 1990. 656 с.

Роман Александрович Дубинин,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, ИМИТ,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
ramonus_skullus@mail.ru.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА В ИНДИВИДУАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛАХ ГЕМОГЛОБИНА МЕТОДОМ ПРОВОДЯЩЕЙ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Е. А. Зимбович

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

Н. А. Давлеткильдеев

Методом проводящей атомно-силовой микроскопии изучен процесс переноса заряда в системе «зонд – молекула гемоглобина – проводящая подложка». Показано, что перенос заряда через молекулу гемоглобина осуществляется путем туннелирования и происходит при ширине барьера меньше 4,5 нм и высоте барьера меньше 3 эВ.

Ключевые слова: молекула гемоглобина, проводящая атомно-силовая микроскопия, вольт-амперная характеристика, нерезонансное туннелирование, перенос заряда.

Гемоглобин (Hb), являясь одним из важнейших редокс-протеинов, рассматривается как перспективный компонент биоэлектронных устройств, в частности, как чувствительный элемент электрохимических биосенсоров. В связи с этим актуальным является изучение процесса переноса заряда между белком и электродом на уровне индивидуальной молекулы. Уникальным методом изучения таких процессов является проводящая атомно-силовая микроскопия (ПАСМ), позволяющая получить непосредственный контакт наноразмерного зонда с индивидуальной молекулой белка.

Образец индивидуальных молекул Hb на атомарно гладкой проводящей поверхности готовился следующим образом. На расщепленную поверхность высоко ориентированного пиролитического графита (HOPG) наносились 10 мкл водного раствора Hb с концентрацией 70 мкг/мл. После инкубации в течении 20 минут подложки отмывались в деионизованной воде для удаления неадсорбированного белка и высушивались на воздухе. Сканирование поверхности HOPG производилось на атомно-силовом микроскопе MFP-3DSA (AsylumResearch) в полуконтактном режиме на воздухе. Использовались кантилеверы марки HA_C/Pt с зондом,

покрытым платиной и имеющим радиус закругления 30 нм. Электрические измерения в контактах зонд/НОРГ и зонд/Нб/НОРГ производились методом ПАСМ в контактном режиме путем регистрации силовых и токовых кривых подвода зонда к подложке и к индивидуальным молекулам Нб, а также регистрации вольт-амперных характеристик (ВАХ) контактов при силе прижатия зонда 50 нН.

На рис. 1 представлены типичные АСМ изображения поверхности чистого НОРГ до (рис. 1а) и после (рис. 1б) иммобилизации молекул Нб.

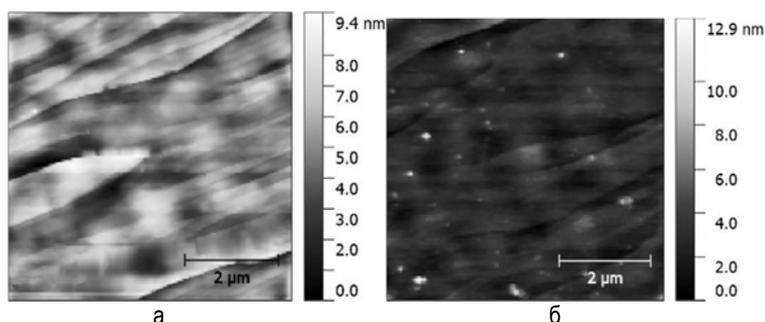


Рис. 1. АСМ изображения поверхности чистого НОРГ (а) и НОРГ с иммобилизованными молекулами Нб (б)

На основе анализа силовых и токовых кривых подвода зонда к подложке и молекуле Нб были получены зависимости силы тока, протекающего в контактах зонд/НОРГ (рис. 2а) и зонд/Нб/НОРГ (рис. 2б), от силы прижатия зонда.

Представленные зависимости показывают, что при контакте зонда с НОРГ сила тока возрастает вследствие увеличения площади контакта и величины деформации поверхности НОРГ с ростом силы прижатия. В тоже время при контакте зонда с молекулой Нб рост тока начинается с силы равной 45 нН, что указывает на возможность протекания тока начиная с определенной высоты молекулы Нб.

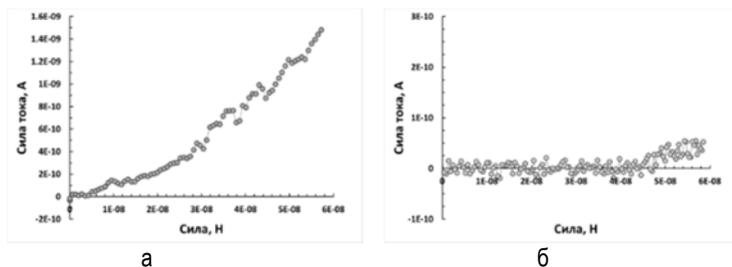


Рис. 2. Зависимость силы тока, протекающего в контактах зонд/НОРГ (а) и зонд/Нб/НОРГ (б), от силы прижатия зонда

На основе классического решения задачи Герца была определена зависимость высоты молекулы Нб от силы прижатия зонда (рис. 3).

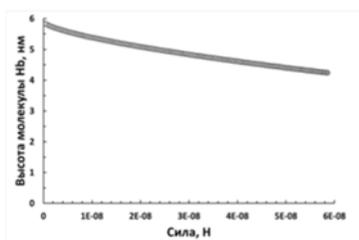


Рис. 3. Зависимость высоты молекулы Нб от силы прижатия зонда

Согласно полученной зависимости, при силе 45нН величина деформации молекулы составляет 1,4 нм, а высота молекулы – 4,5 нм.

На рис. 4 представлены типичные ВАХ контактов зонд/НОРГ (рис. 4а) и зонд/Нб/НОРГ (рис. 4б).

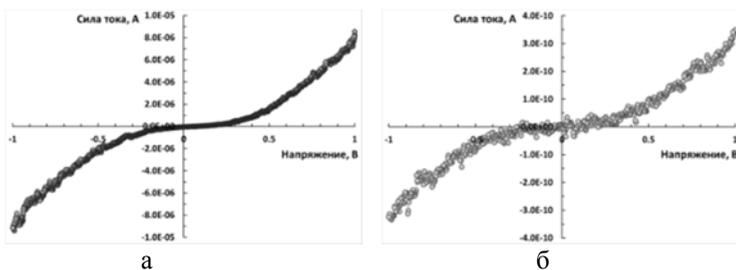


Рис. 4. ВАХ контактов зонд/НОРГ(а) и зонд/Нб/НОРГ (б) при силе прижатия зонда 50 нН

ВАХ имеют нелинейный характер, являются симметричными относительно полярности приложенного напряжения. Величина тока в контакте зонд/Нб/НОРГ на четыре порядка меньше, чем в контакте зонд/НОРГ. Полученные ВАХ контакта зонд/Нб/НОРГ анализировались с использованием транспортной модели, описывающей нерезонансное туннелирование электронов из электрода в электрод через молекулу [1]. Согласно модели туннельный ток задается выражением $I = GV$, где G – линейная проводимость, описываемая формулой Ландауэра

$$G = (2e^2/h)T_{tot},$$

где T_{tot} – полная эффективность передачи электронов из подложки в зонд. T_{tot} задается произведением эффективностей передачи через верхний контакт (зонд), нижний контакт (НОРГ) и молекулу белка. Эффективность передачи через молекулу рассматривается как нерезонансное туннелирование через прямоугольный барьер с высотой H и шириной L

$$T_{mol} = e^{\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m^* \alpha \left(H - \frac{eV}{2} \right) L}},$$

где α – параметр асимметрии контактов, m^* – эффективная масса электрона.

Путем подгонки модельных ВАХ к экспериментальным определялись параметры потенциального барьера H и L . Полученная ширина потенциального барьера (3 нм) близка к высоте молекулы Нб (4,2 нм) при используемой силе прижатия зонда. Высота барьера при туннелировании электронов через молекулу Нб составила величину 2,8 эВ.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Salomon A.* Comparison of Electronic Transport Measurements on Organic Molecule / A. Salomon, D. Cahen, S. Lindsay, J. Tomfohr, V.B. Engelkes, C.D. Frisbie // *Adv. Mater.* 2003. Vol. 15. № 22. P. 1881–1890.

Екатерина Андреевна Зимбович,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
valentin.zimbovich@mail.ru.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРИСТОСТИ И ПЛОТНОСТИ НЕЗАМЕЩЕННЫХ И МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОБРАЗЦОВ ФОСФАТА КАЛЬЦИЯ

Я. А. Калинина

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

Т. В. Панова

Методом осаждения из модельного раствора внеклеточной жидкости синтезированы образцы гидроксилapatита при варьировании концентрации силикат-ионов. Проведена оценка пористости и плотности полученных порошков методом вытеснения жидкости. Рассчитана пористость порошков ГА, ГА–Ж и Si–ГА.

Ключевые слова: гидроксилapatит, желатин, силикат-ион, пористость, плотность.

В настоящее время в изготовлении пористых имплантатов используются различные металлы, керамики и материалы биологического происхождения (коллаген, хитозан). Использование природных материалов возможно в сочетании с гидроксилapatитом и фосфатами кальция – естественными составляющими костной ткани, что повышает биосовместимость и остеоиндуктивные свойства материалов.

Пористость является одной из важнейших микроструктурных характеристик биоматериалов, существенно влияющих на их свойства: модуль упругости, предел текучести. Твердые соединительные ткани являются пористыми (диаметр пор составляет около 1 мм). Установлено, что пористость чистых желатиновых скаффолдов уменьшается при добавлении ГА [1].

Целью работы является изучение свойств модифицированных силикат-ионамифосфатов кальция, полученных осаждением из модельного раствора внеклеточной жидкости типа SBF, и определение пористости и плотности незамещенных и модифицированных образцов фосфата кальция.

Синтез гидроксилapatита, ГЖА 3 % и Si–ГА проводился в среде модельного раствора внеклеточной жидкости при варьировании концентрации силикат-ионов. Размеры кристаллитов полу-

ченного немодифицированного ГА составили 6,3 нм, для Si–ГА – 6,0 ÷ 7,1 нм, что указывает на образование соединений в нанокристаллическом состоянии.

Параметры кристаллической решетки образованных твердых фаз увеличены (табл. 1), по сравнению с немодифицированным гидроксилapatитом, что подтверждает возможное замещение различных по размеру ортофосфат-иона силикат-ионом.

Таблица 1

Параметры кристаллической решетки

Образец	С исх. Si, %	Постоянные решетки, Å	
		<i>a</i>	<i>c</i>
ГА	-	9,414	6,865
Na ₂ SiO ₃	0,5	9,466±0,007	6,885±0,007
Na ₂ SiO ₃	2,5	9,413±0,005	6,877±0,005
ТЭС	0,5	9,490±0,001	7,320±0,001
ТЭС	2,5	9,546±0,007	6,975±0,008

Увеличение параметра *c* свидетельствует о том, что силикат-ион занимает преимущественно позицию фосфат-иона в структуре ГА, а не гидроксил-иона. Из данных табл. 2 следует, что большая степень замещения соответствует образцам, полученным в присутствии ТЭС, для которых значения параметров кристаллической решетки искажаются сильнее, что, по нашему мнению, может быть связано с влиянием геометрических параметров разветвленной формулы тетраэтоксисилана.

Таблица 2

Результаты измерений плотности и пористости

Образец	Пористость, P, (%)	Плотность, d, г/см ³
ГА	64	0,78
ГА–Ж (3%)	79	0,49
Si–ГА (0,5%)	71	0,73

В ИК-спектрах образцов, полученных в присутствии силикат-ионов, присутствуют полосы поглощения, характерные для ГА. В виду того, что ГА синтезирован в воздушной среде, в процессе его образования из атмосферы воздуха сорбируется углекислый газ, и в решетке локализуются ионы карбоната в положении

фосфатного иона [2]. По этой причине в системе присутствует карбонат-гидроксилапатит В-типа (так как происходит замещение фосфатной группы на карбонатную).

Пористость оценивали, используя метод вытеснения жидкости [3]. Этанол был выбран как вытесняющая жидкость, поскольку он легко проникает в открытые поры, не вызывая набухания или деформации. Образец с известной сухой массой W погружали в градуированный цилиндр, содержащий известный объем (V_1) этанола, прижимали образец для проникновения в его поры этанола и выдерживали 24 часа. Общий объем оставшегося этанола и пропитанного скаффолда обозначали как (V_2), определяя уровень жидкости в цилиндре. Разница объемов ($V_2 - V_1$) составляет объем скаффолда. Пропитанный этанолом скаффолд удаляли из градуированного цилиндра, оставшийся объем этанола отмечали как V_3 . Пористость вычисляли по уравнению (1):

$$P(\%) = \frac{(V_1 - V_2)}{(V_2 - V_3)} \times 100. \quad (1)$$

Для расчета плотности полученных порошков использовали формулу (2):

$$d = \frac{w}{(V_2 - V_3)}. \quad (2)$$

Результаты измерений плотности и пористости полученных ГА, ГА–Ж и Si–ГА представлены в табл. 2 со среднеквадратичным отклонением, рассчитанным для пяти образцов каждого порошка.

Рассчитанная пористость композитов ГА, ГА–Ж и Si–ГА находится в диапазоне 60–80 %, что практически соответствует пористости губчатой кости (65–80 %).

ВЫВОДЫ

1. Изучены методы синтеза кремний-замещенного гидроксилапатита и метод исследования пористости и плотности биокомпозитов.

2. Синтезированы порошки Si–ГА из раствора SBF с содержанием кремния 0,50 и 2,50 масс. %. Установлено, что все образцы, синтезируемые в среде модельного раствора внеклеточной жидкости при варьировании концентрации силикат-ионов, однофазны и представляют собой гидроксилапатит.

3. С помощью анализа порошков Si–ГА методом инфракрасной спектроскопии выявлено, что природа реагента, содержащего SiO_4^{4-} -ионы, не влияет на структуру гидроксилапатита.

4. Проведена оценка пористости и плотности полученных порошков методом вытеснения жидкости. Рассчитанная пористость порошков ГА, ГА–Ж и Si–ГА со среднеквадратичным отклонением, рассчитанным для пяти образцов каждого порошка, практически соответствует пористости губчатой кости.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Kailasanathan C.* Structure and properties of titania reinforced nano-hydroxyapatite/gelatin bio-composites for bone graft materials / C. Kailasanathan, N. Selvakumar, N. Vasant // *Ceram. Int.* 2012. Vol. 38. P. 571–579.

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

[3] *Guan J.* Preparation and characterization of highly porous, biodegradable polyurethane scaffolds for soft tissue applications / J. Guan, K.L. Fujimoto, M.S. Sacks, W.R. Wagner // *Biomaterials.* 2005. Vol. 26. P. 3961–3971.

Яна Андреевна Калинина,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
yanika_k@inbox.ru.

ВЛИЯНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ ДОБАВОК НА СИНТЕЗ ГИДРОКСИАПАТИТА

Д. Ю. Кокош

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Т. В. Панова

Представлены результаты исследования влияния органических и неорганических добавок с варьированием времени кристаллизации на фазовый состав гидроксилapatита. Исследованы параметры элементарной ячейки и размеры кристаллитов.

Ключевые слова: гидроксилapatит, биополимер, композитный материал, рентгенофазовый анализ.

Гидроксилapatит кальция ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ – ГА, являющийся основной неорганической компонентой костной ткани, благодаря высокой биосовместимости и биоактивности, широко используется в медицине в качестве материала имплантатов и в костном инжиниринге [1]. Однако применение чистого ГА в имплантологии сильно ограничено из-за его низких прочностных характеристик. Актуальной является задача создания органоминеральных композитов (ОМК) с хорошей биосовместимостью, высокой биоактивностью, высокими связующими и прочностными характеристиками [2].

Целью данной работы является изучение влияния органических и неорганических добавок при варьировании концентрации и времени кристаллизации на структурно-фазовый состав гидроксилapatита.

Были получены образцы гидроксилapatита с добавками метасиликата натрия (Na_2SiO_3), пектина, хитозана. Для данных добавок варьировалась концентрация, а так же время кристаллизации. Исследование характеристик полученных образцов гидроксилapatита проводили при помощи методов рентгенофазового анализа.

По данным РФА, в ходе синтеза во всех образцах происходит образование стехиометрического ГА гексагональной сингонии в присутствии как органической, так и неорганической фракции в растворе.

Рентгеноструктурный анализ образцов метасиликата натрия и гидроксиапатита показал, что с увеличением времени кристаллизации интенсивность пиков растет (рис. 1).

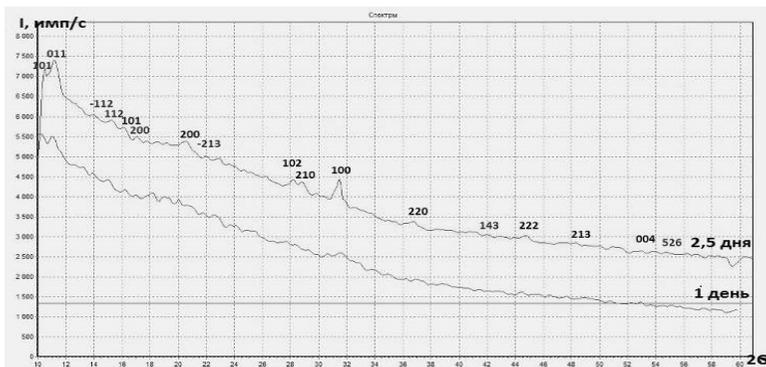


Рис. 1. Дифрактограмма образцов гидроксиапатита и метасиликата натрия

Для образцов гидроксиапатита и пектина помимо времени кристаллизации варьировалась концентрация органического вещества.

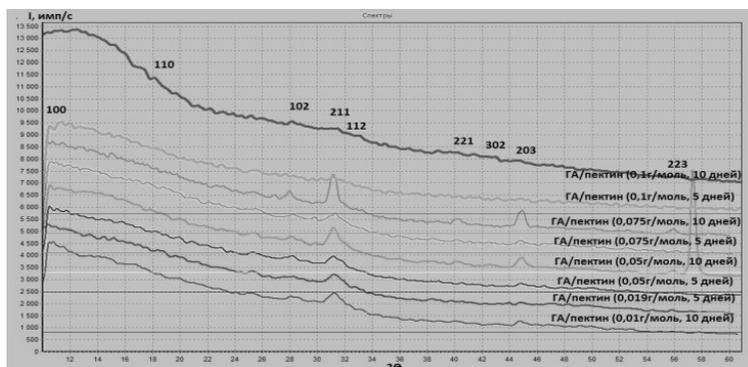


Рис. 2. Дифрактограмма образцов гидроксиапатита и пектина

Анализ показал наличие апатитовой фазы для всех образцов. При концентрации пектина от 0,01 г/моль до 0,1 г/моль происхо-

дит возрастание интенсивности пиков. Для образца с концентрацией пектина 0,05 г/моль после 10 дней кристаллизации наблюдается резкое возрастание пика (223). При концентрации пектина 0,1 г/моль ширина пиков увеличивается, интенсивность уменьшается. Пики слабо выражены, что свидетельствует о формировании аморфного состояния.

На дифрактограмме композитов на основе гидроксиапатита и хитозана присутствует характерное нано структурному гидроксиапатиту галло в области $2\theta = 31-34^\circ$.

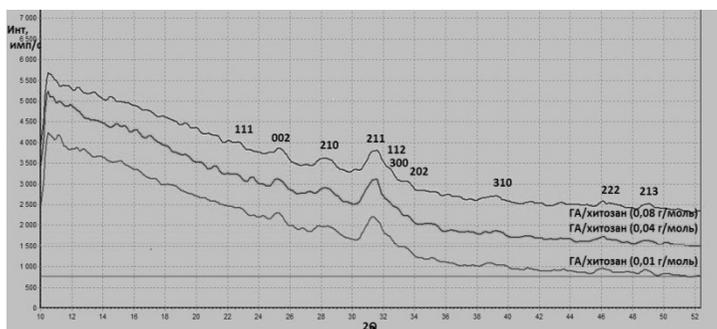


Рис. 3. Дифрактограмма образца гидроксиапатита и хитозана

С увеличением концентрации хитозана от 0,01 г/моль до 0,08 г/моль в композите уменьшается средний размер кристаллитов апатита, что проявляется в уширении линий рентгеновской дифракции, обратно пропорциональном размерам кристаллитов.

Рассчитанные параметры элементарных ячеек для всех композитов (табл.) близки к значениям для эталонного стехиометрического ГА (по данным JCPDS № 9-432: $a = 9,418 \text{ \AA}$; $c = 6,884 \text{ \AA}$) [3].

Поскольку на дифрактограммах воспроизводятся все линии спектра индивидуального стехиометрического ГА, можно сделать вывод о том, что макромолекулы добавок не вносят значительных искажений в структуру образующегося ГА.

В то же время, изменение параметров элементарных ячеек и размеров частиц синтезированных образцов позволяет предположить участие молекул добавок в формировании кристаллической решетки гидроксиапатита.

Параметры элементарной ячейки и значения размеров кристаллитов для образцов гидроксипапата с органическими и неорганическими добавками

	a, Å	c, Å	D, Å
Пектин (0,01г/моль) – 10 дней	9,203	6,781	10,86
Пектин (0,019г/моль) – 5 дней	9,314	6,759	16,36
Пектин (0,05 г/моль) – 5 дней	9,413	6,801	21,43
Пектин (0,05 г/моль) – 10 дней	9,426	6,839	36,32
Пектин (0,075 г/моль) – 5 дней	9,531	6,887	43,28
Пектин (0,075 г/моль) – 10 дней	9,684	6,933	50,64
Пектин (0,1 г/моль) – 5 дней	9,108	6,636	18,48
Пектин (0,1 г/моль) – 10 дней	9,201	6,781	33,31
Метасиликат натрия (1 г/моль)	9,218	6,751	37,18
Метасиликат натрия (2,5 г/моль)	9,531	6,983	53,21
Хитозан (0,01 г/моль)	9,423	6,785	58,11
Хитозан (0,04 г/моль)	9,436	6,836	36,23
Хитозан (0,08 г/моль)	9,448	6,884	23,28
ср. значение	9,387	6,828	33,73

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Захаров Н.А.* Ультрадисперсные порошкибиосовместимого $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$: синтез, термообработка, свойства / Н.А. Захаров, Т.В. Беляевская, А.Е. Чалых // Конденсированные среды и межфазные границы. 2006. Т. 8. № 1. С. 18–24.

[2] *Захаров Н.А.* Образование наноразмерных биоконпозитов $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ /полисахарид (карбоксиметилцеллюлоза, хитозан) в условиях соосаждения из водных растворов / Н.А. Захаров, Ж.А. Ежова, Е.М. Коваль // Сорбционные и хроматографические процессы. 2007. Т. 7. Вып. 4. С. 653–664.

[3] Powder Diffraction File (inorganic phases). Swarthmore: Joint Committee on Powder Diffraction Standards (JCPDS) File # 9-432.

Дарья Юрьевна Кokoш,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
alleine_mond@mail.ru.

МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ОСТЕОТРОПНОГО РАДИОФАРМПРЕПАРАТА В ОРГАНИЗМЕ БОЛЬНЫХ С КОСТНЫМИ МЕТАСТАЗАМИ

М. Ю. Корнеева

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

А. В. Матвеев

Построена четырехкамерная модель кинетики остеотропного РФП в организме пациента с костными метастазами. Разработана программа для расчета модельных параметров камерной модели на основе количественных данных радиометрии. Приведены и проанализированы результаты кинетического моделирования. Произведен расчет поглощенных доз на критические органы.

Ключевые слова: фармакокинетическое моделирование, радиофармпрепарат, дозиметрическое планирование.

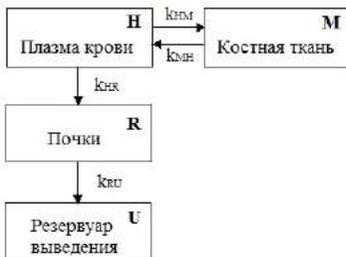
Целью данной работы являлось построение фармакокинетической модели распределения остеотропного радиофармпрепарата (РФП) в организме больных с костными метастазами, проходящих паллиативную терапию ^{153}Sm -оксабифором.

Для описания кинетики остеотропного РФП в организме была использована четырехкамерная модель (рис.) [1], в которой выделены следующие компартменты: плазма крови, костная ткань с метастазами, почки и резервуар выведения (мочевой пузырь). В данной математической модели зоны накопления РФП в здоровой и пораженной костной ткани (метастатические очаги и, возможно, другие патологические изменения) объединены в одну камеру. Разделить их в рамках рассматриваемой модели кинетики не представляется возможным, поскольку отсутствует необходимая измерительная информация, дифференцированная применительно к динамике активности в здоровых и пораженных структурах.

Согласно этой модели была составлена следующая система дифференциальных уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dH(t)}{dt} = k_{MH}M(t) - (k_{HM} + k_{HR} + \lambda)H(t) \\ \frac{dM(t)}{dt} = k_{HM}H(t) - (k_{MH} + \lambda)M(t) \\ \frac{dR(t)}{dt} = k_{HR}H(t) - (k_{RU} + \lambda)R(t) \\ \frac{dU(t)}{dt} = k_{RU}R(t) - \lambda U(t) \end{array} \right. \quad (1)$$

где $\lambda = \ln 2/T_{1/2} = 0,015\text{ч}^{-1}$ – постоянная распада ^{153}Sm ; k_{HM} , k_{MH} , k_{HR} , k_{RU} – параметры межкамерных коммуникаций (транспортные константы); $H(t)$, $M(t)$, $R(t)$, $U(t)$ – функции удержания активностей в каждой камере (см. рис.) отнесены к введенной активности так, что $H(t)$, $M(t)$, $R(t)$, $U(t) \leq 1$. Начальные условия: $H(0) = 1$, $M(0) = R(0) = U(0) = 0$. (2)



Геометрическая иллюстрация 4х-камерной модели кинетики остеотропного РФП в организме

Для решения системы (1) с начальными условиями (2) и нахождения транспортных констант была разработана программа (используя алгоритм из [1]).

Зная временные зависимости функций накопления-выведения ^{153}Sm -оксабифора в камерах, можно рассчитать поглощенные радиационные дозы в критических органах, моделируемых соответствующими кинетическими камерами. При расчете поглощенных доз для костных структур, плазмы крови и почек была использована методика из [2]. Расчет поглощенной дозы на мочевой пузырь с учетом его периодического опорожнения осуществлялся согласно методике, описанной в [3]. Все поглощенные дозы были рассчитаны в нашем программном комплексе.

В качестве клинических данных паллиативной терапии были использованы доступные из литературы [1] количественные

данные радиометрии отобранных проб мочи для трех пациентов с различными метастатическими поражениями скелета от рака различного происхождения. В табл. 1 приведены расчетные значения параметров фармакокинетической модели – транспортные константы, в табл. 2 – дозиметрические характеристики.

Таблица 1

Расчетные значения параметров кинетической модели, ч⁻¹

Пациент, №	k_{HM}	k_{MH}	k_{HR}	k_{RU}
1	0,683	0,001	0,303	0,735
2	0,499	0,012	1,104	0,449
3	0,417	0,001	0,341	0,568

Таблица 2

**Поглощенные дозы на единицу введенной активности
в критических органах, мГр/мКи**

Пациент, №	D_H/A_0	D_{endost}/A_0	$D_{T.m.}/A_0$	D_R/A_0	D_U/A_0
1	1,016	133,9	47,60	8,051	19,25
2	0,693	40,23	14,31	32,34	41,98
3	1,299	105,1	37,36	14,90	28,12

Заключение.

1. Разработана методика для идентификации параметров модели кинетики транспорта РФП ¹⁵³Sm-оксабифора в организме пациентов с метастазами в кости. С использованием результатов радиометрических измерений экскреции РФП у трех пациентов, проходящих радионуклидную терапию, рассчитаны кинетические параметры динамики активности в их организме, позволившие определить дозиметрические характеристики облучения ряда критических органов.

2. Анализ результатов дозиметрических расчетов показывает, что полученные в ходе радионуклидной терапии лучевые нагрузки на критические структуры пациентов (кровь, красный костный мозг, эндостальный слой кости, почки, мочевой пузырь) являются клинически допустимыми.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Доля О.П.* Математическое моделирование кинетики транспорта остеотропного радиофармпрепарата в организме пациентов с метастазами в кости / О.П. Доля, Е.С. Матусевич, А.Н. Клепов // Ядерная медицина. 2007. № 2. С. 40–50.

[2] *Матвеев А.В.* Фармакокинетическое моделирование и дозиметрическое планирование радиодтерапии тиреотоксикоза / А.В. Матвеев, Д.Ю. Носковец // Вестн. Ом. ун-та. 2014. № 4. С. 57–64.

[3] *Матвеев А.В.* Особенности дозиметрического планирования радиодтерапии на основе фармакокинетического моделирования / А.В. Матвеев, Д.Ю. Носковец // Вестн. Ом. ун-та. 2016. № 3. С. 74–83.

Мария Юрьевна Корнеева,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
korneevamaria11@gmail.com.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВРЕМЕННЫХ ЗАДЕРЖЕК И ДОПЛЕРОВСКИХ СДВИГОВ ДЛЯ МНОГОЛУЧЕВЫХ КАНАЛОВ СВЯЗИ

В. А. Кузнецов

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Т. К. Болецкая

Определение временных задержек, коэффициентов ослабления и доплеровских сдвигов сигнала в многолучевых каналах является одной из проблем в беспроводной связи и радиолокационном обнаружении. Знание этих величин уменьшает частоту появления ошибочных битов и улучшает точность детектирования. Статья посвящена определению характеристик многолучевых каналов методом подпространств.

Ключевые слова: временные задержки, доплеровские сдвиги, множители ослабления, метод подпространств.

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

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

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 на этот сигнал имеет вид:

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

где K_{τ} – число каналов, τ_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. Коэффициенты $a_k[m]$ вычисляются

так $a_k[m] = \sum_{i=1}^{Q_k} \alpha_{ki} e^{j2\pi v_{ki} m T}$, где α_{ki} – множитель ослабления в k -м канале для i -ого доплеровского сдвига, v_{ki} – i -й доплеровский сдвиг в k -м канале, $-\nu_{\max}/2 \leq v_{ki} \leq \nu_{\max}/2$, $\nu_{\max} \ll 1/T$, Q_k – количество доплеровских сдвигов в k -м канале.

В [1] описан алгоритм вычисления временных задержек и коэффициентов $a_k[m]$. Вычислив их, можно определить доплеровские сдвиги с помощью алгоритма, основанного на методе матричного карандаша.

Составим вектор-столбцы \vec{y}_i , которые определяются как $\vec{y}_i = [a_k[i], a_k[i+1], \dots, a_k[i + N_{sym} - L - 1]]^T$, где $i = 1, \dots, L+1$, $Q_k \leq L \leq N_{sym} - Q_k$. Определим матрицы \mathbf{Y}_1 и \mathbf{Y}_2 следующим образом:

$$\mathbf{Y}_1 = [\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_L], \quad \mathbf{Y}_2 = [\vec{y}_2, \vec{y}_3, \dots, \vec{y}_{L+1}] \quad (4)$$

Выполним сингулярное разложение матрицы \mathbf{Y}_1 :

$$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^H, \quad (5)$$

где \mathbf{U} – матрица размера $(N_{sym} - L) \times (N_{sym} - L)$, столбцы которой являются левыми сингулярными векторами матрицы \mathbf{Y}_1 , \mathbf{V} – матрица размера $L \times L$, столбцы которой являются правыми сингулярными векторами матрицы \mathbf{Y}_1 , \mathbf{D} – матрица размера $(N_{sym} - L) \times L$, содержащая сингулярные значения матрицы \mathbf{Y}_1 , « H » означает эрмитово сопряжение. Определим матрицу \mathbf{Z}_k размера $Q_k \times Q_k$:

$$\mathbf{Z}_k = \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{U}_1^H \mathbf{Y}_2 \mathbf{V}_1, \quad (6)$$

\mathbf{U}_1 и \mathbf{V}_1 – матрицы, состоящие из Q_k столбцов матрицы \mathbf{U} и \mathbf{V} , соответствующих ненулевым сингулярным значениям матрицы \mathbf{Y}_1 , \mathbf{D}_1 – матрица размера $Q_k \times Q_k$, на главной диагонали которой

стоят ненулевые сингулярные значения матрицы \mathbf{Y}_1 ; «-1» означает обратную матрицу.

Вычислив собственные значения $z_{k,i}$ матрицы \mathbf{Z}_k , можно определить доплеровские сдвиги по формуле [2]

$$\hat{v}_{k,i} = \frac{1}{2\pi} \arg \{z_{k,i}\}. \quad (7)$$

Результаты расчета доплеровских сдвигов для двух каналов, в каждом из которых три доплеровских сдвига, приведены в таблице 1. Максимальная относительная погрешность составила 4,6 %.

Таблица 1

Определение доплеровских сдвигов

Заданные доплеровские сдвиги, сек ⁻¹	-0,0031	0,0086	0,0278
	-0,0483	-0,0300	0,0264
Измеренные доплеровские сдвиги, сек ⁻¹	-0,0031	0,0086	0,0278
	-0,0482	-0,0296	0,0252

Среднеквадратичные ошибки (MSE) определения временных задержек (MSE_τ) и доплеровских сдвигов (MSE_v) вычислялись в децибелах по формулам:

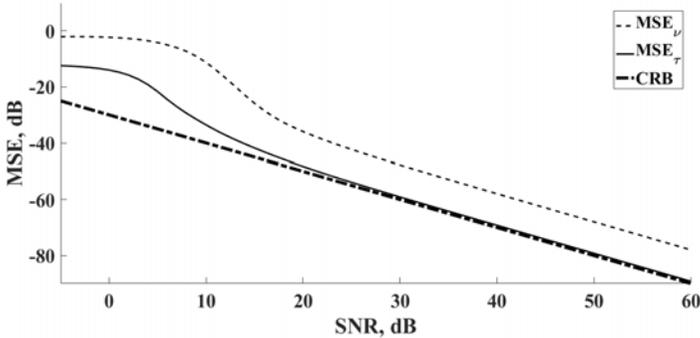
$$MSE_\tau = 10 \log \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{K_\tau} \left(\frac{\hat{\tau}_{ik} - \tau_k}{\tau_{\max}} \right)^2 \right], \quad (8)$$

$$MSE_v = 10 \log \left[\frac{4\pi^2}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{K_\tau} \sum_{j=1}^{Q_k} \left(\frac{\hat{v}_{ikj} - v_{kj}}{v_{\max}} \right)^2 \right], \quad (9)$$

где N – число экспериментов, $\hat{\tau}_{ik}$ – k -я измеренная временная задержка в i -м эксперименте, в сек, τ_k – k -я заданная временная задержка, в сек, $\tau_{\max} = T$, \hat{v}_{ikj} – j -й измеренный доплеровский сдвиг в i -м эксперименте в k -м канале, в сек⁻¹, v_{kj} – j -й заданный доплеровский сдвиг в k -м канале, в сек⁻¹. Полагалось $v_{\max} = 0,1/T$.

Результаты вычисления среднеквадратичных ошибок в зависимости от отношения сигнал-шум приведены на рисунке. Прямая

CRB – граница Крамера-Рао для среднеквадратичных ошибок временных задержек. При $\text{SNR} > 15$ dB среднеквадратичные ошибки для временных задержек совпадают с границей Крамера-Рао, что свидетельствует об эффективности используемого метода.



Графики зависимостей среднеквадратичных ошибок определения временных задержек и доплеровских сдвигов от ОСШ

В ходе работы был изучен метод подпространств в применении к расчету характеристик многолучевых каналов связи. Были рассчитаны временные задержки и доплеровские сдвиги многолучевого канала связи и среднеквадратичные ошибки их определения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Кузнецов В. А. Определение характеристик многолучевых каналов связи с помощью метода подпространств / В. А. Кузнецов // Современные проблемы радиофизики и радиотехники. 2017. Вып. 5. С. 67–72.
- [2] Hua Y. Generalized pencil-of-function method for extracting poles of an EM system from its transient response / Y. Hua, T. K. Sarkar // IEEE Trans. Antennas Propagat. February 1989. Vol. 37, № 2.

Владимир Александрович Кузнецов,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 2-й курс магистратуры, физический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира, 55а,
 volodya_KZ55@mail.ru.

РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КЛАССИФИКАЦИИ СТЕПЕНЕЙ ДИСПЛАЗИИ СОЕДИНИТЕЛЬНОЙ ТКАНИ

Д. И. Пушкарев

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

В. В. Гольяпин

Метод машинного обучения «Random forest» адаптирован для работы в области классификации степени дисплазии соединительной ткани. Результат оформлен в виде программного обеспечения.

Ключевые слова: дисплазия соединительной ткани, машинное обучение, решающее дерево, классификация.

Дисплазия соединительной ткани (ДСТ) – системное заболевание соединительной ткани, обусловленное нарушением развития соединительной ткани в эмбриональном и постнатальном периодах. Характеризуется дефектами волокнистых структур и основного вещества соединительной ткани, приводящее к расстройству гомеостаза на тканевом, органном и организменном уровнях в виде различных нарушений органов с прогрессивным течением. Классификация ДСТ традиционно является дискуссионным вопросом, отсутствуют общепринятые критерии постановки диагноза, используемые на практике методики тестирования не комплексны.

Целью работы является разработка программного обеспечения способного с высокой вероятностью классифицировать степень расстройства. Систему распознавания решено реализовать с использованием методов машинного обучения.

Первоначально была предпринята попытка построить систему классифицирующую степень ДСТ для отдельно взятого большого по трем группам (здоров, состояние не осложнено, состояние осложнено) с использованием нейронной сети. Была реализована нейронная сеть с архитектурой Perceptron [3]. Эта архитектура позволяет создавать многослойные сети, также известные как нейронные сети с обратной связью.

В большинстве испытаний нейронная сеть не показала приемлемых результатов. Вероятнее всего это связано с тем, что для обучения нейронных сетей требуются большие обучающие выборки. В нашем случае объем исходных данных доступных для анализа не велик – имеется статистика около 1000 человек.

Далее был осуществлен поиск алгоритмов способных работать с малыми данными. В следующей итерации был реализован алгоритм Random Forest [1; 2] (англ. «Случайный лес»).

Этот алгоритм сочетает в себе две идеи: использование комитета деревьев решений (создание «леса»), получающего результат путем голосования отдельных деревьев, и идею внесения элемента случайности в процесс обучения модели.

Программная реализация данного алгоритма показала лучшие результаты, чем алгоритм с использованием нейронных сетей, однако точность все еще оставалась недостаточной для того, чтобы можно было говорить об успешном решении поставленной задачи. При отработке модели на данных трех групп точность определения принадлежности индивидуума к конкретной группе составляла порядка 40 % (рис. 1, строилось до 50 деревьев). Дальнейшее увеличение числа деревьев, возможно повлияло бы на точность, но и значительно увеличило бы время получения ответа.

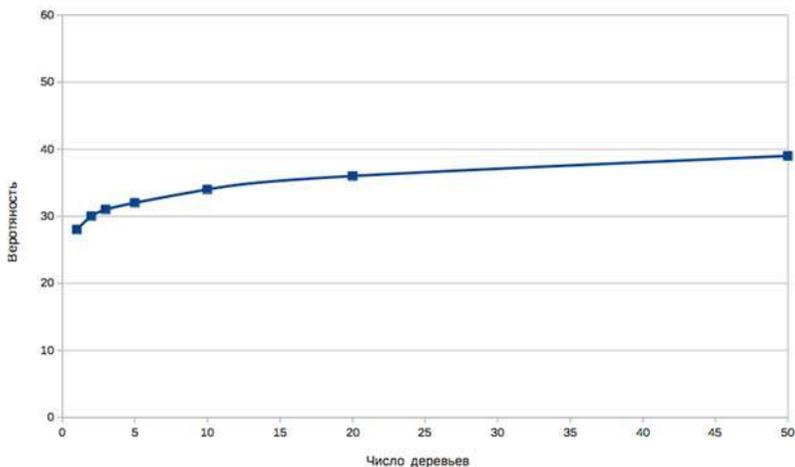


Рис. 1. Зависимость вероятности успешной классификации от числа решающих деревьев

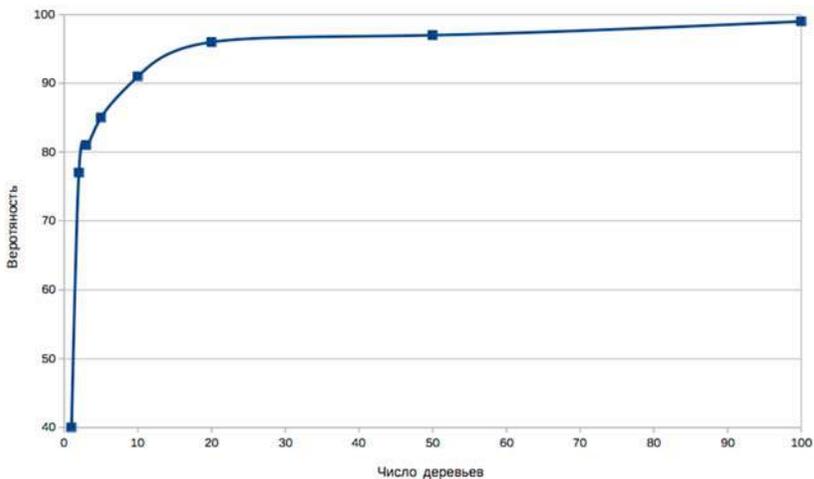


Рис. 2. Зависимость вероятности успешной классификации от числа решающих деревьев

Тогда было решено разбить задачу на 2 стадии: на первом этапе алгоритм делает выбор между двумя группами: человек без синдрома и человек с синдромом (данные групп с осложнениями и без). На следующем этапе, если он требуется, делается выбор между группами осложнено/не осложнено и выносится конечный вердикт.

ВЫВОДЫ

1. Изучены методы машинного обучения применительно к анализу статистических данных по синдрому дисплазии соединительной ткани.

2. Реализован алгоритм, использующий нейронную сеть решения задачи классификации степени ДСТ, на основе имеющихся статистических данных. Сделан вывод о непригодности нейронных сетей для решения данной задачи.

3. Реализована программа, использующая алгоритм «Random forest» для решения задачи классификации степени ДСТ. Получены результаты, позволяющие говорить об успешном решении поставленной задачи выбранным алгоритмом.

4. Реализовано программное обеспечение, позволяющее использовать реализованный алгоритм.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Hastie T.* The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction / T. Hastie, R. Tibshirani, J. Friedman. 2nd ed. Springer-Verlag, 2009. 746 p.

[2] *Левитин А.В.* Алгоритмы. Введение в разработку и анализ / А.В. Левитин. М.: Вильямс, 2006. С. 409–417. 576 с.

[3] *Барский А.Б.* Нейронные сет: распознавание, управление, принятие решений / А.Б. Барский. М.: Финансы и статистика, 2004.

Денис Игоревич Пушкарев,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
igoo10on@gmail.com.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНЫМИ ПУЧКАМИ ЧАСТИЦ

А. А. Свердлова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

Г. А. Вершинин

Оценивается роль пространственно-временной нелокальности и начальной скорости теплового потока на формирование температурных полей в металлических пленках при импульсных воздействиях мощными пучками частиц.

Ключевые слова: локально-неравновесный теплоперенос, моделирование.

При быстропротекающих процессах и в малых пространственных объемах явления переноса (тепла, массы, импульса) протекают, по-видимому, в локально-неравновесных условиях [2]. В данной работе оценивается роль пространственно-временной нелокальности и начальной скорости потока тепла на формирование температурных полей в металлических пленках при импульсных воздействиях мощными пучками частиц.

Математическая модель. С учетом пространственно-временной нелокальности в рамках расширенной необратимой термодинамики [2] одномерное уравнение переноса для потока тепла $J(x, t)$ при быстро протекающих процессах при определенных условиях имеет вид [1]

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \tau_1 \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} = a \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + \tau_2 \frac{\partial^3 J}{\partial t \partial x^2}. \quad (1)$$

Здесь a – коэффициент температуропроводности, который принимается постоянным; τ_1 и τ_2 – времена релаксации потока и градиента температуры, соответственно. Пространственная нелокальность означает, что удельный поток и градиент температуры связаны между собой не в одной пространственной точке с координатой x , как в классическом законе Фурье, а в некоторой окрест-

ности этой точки с характерным размером h . Уравнение переноса (1) в частных производных третьего порядка, являющееся универсальным, сочетает свойства волнового уравнения (при $\tau_2 = 0$), описывающего распространение в системе температурных волн с конечной скоростью, а также диффузионного уравнения (при $\tau_1 = \tau_2 = 0$), соответствующего диссипативному переносу тепла. Построим решение уравнения (1) на конечном отрезке $0 \leq x \leq l$ для потока со следующими начальными и граничными условиями

$$J(x, 0) = 0, \quad \partial J(x, 0) / \partial t = \dot{J}_0; \quad J(0, t) = J_0, \quad \partial J(l, t) / \partial x = 0$$

при $t > 0$. (2)

Введем безразмерный поток $\chi(\xi, \tau) = J(\xi, \tau) / J_0$ и безразмерные переменные $\tau = t / (l^2 / a)$ и $\xi = x / l$. Тогда уравнение (1) примет вид

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + \alpha_c \frac{\partial^3 \chi}{\partial \xi^2 \partial \tau} = \frac{\partial \chi}{\partial \tau} + \alpha_j \frac{\partial^2 \chi}{\partial \tau^2}, \quad (3)$$

а начальные и граничные условия переписутся следующим образом

$$\chi(\xi, 0) = 0, \quad \partial \chi(\xi, 0) / \partial \tau = \dot{\chi}_0, \quad \chi(0, \tau) = 1, \quad \partial \chi(1, \tau) / \partial \xi = 0. \quad (4)$$

Здесь введены обозначения: $\alpha_c = \tau_2 / (l^2 / a)$, $\alpha_j = \tau_1 / (l^2 / a)$ – безразмерные времена релаксации; $\dot{\chi}_0 = \dot{J}_0 (l^2 / a) / J_0$ – безразмерный начальный поток тепла.

Для решения краевой задачи (3)–(4) применим метод преобразования Лапласа. В результате для безразмерного потока и образа $\bar{\chi}(\xi, p)$ получаем

$$\chi(\xi, \tau) = \frac{\exp(\gamma\beta)}{\beta} \left[\frac{\bar{\chi}(\xi, \gamma)}{2} + \operatorname{Re} \sum_{n=1}^N (-1)^n \bar{\chi}(\xi, \gamma + in\pi / \tau) \right], \quad (5)$$

$$\bar{\chi}(\xi, p) = \frac{1}{p} \left(z_1 + (1 - z_1) \frac{ch((1 - \xi)z_2)}{ch(z_2)} \right), \quad (6)$$

где $z_1 = \alpha_j \dot{\chi}_0 / (1 + \alpha_j p)$, $z_2 = \sqrt{p(1 + \alpha_j p) / (1 + \alpha_c p)}$.

Здесь γ – вещественная константа прямолинейного участка контура интегрирования. При фиксированном γ необходимо вы-

брать N таким, чтобы погрешность усечения ряда была меньше наперед заданной точности.

Результаты моделирования. Для исследования влияния пространственной нелокальности на процесс массопереноса рассмотрим сначала случай, когда скорость изменения начального потока на левой границе равна нулю ($\dot{J}_0 = 0$).

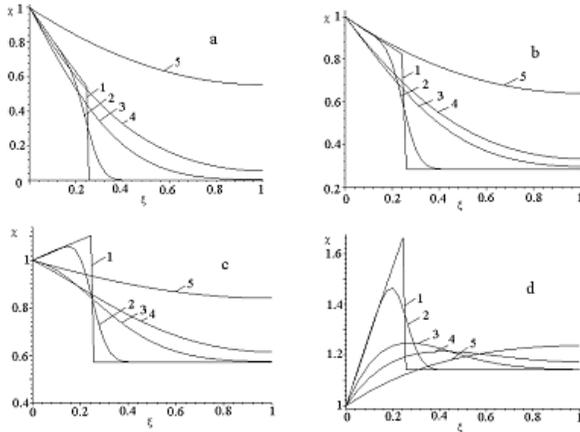


Рис. 1. Зависимость потока тепла в тонкой пленке от значений параметра пространственной нелокальности и начальной скорости изменения потока α_c :

1 – 0; 2 – 0.002; 3 – 0.04; 4 – 0.1; 5 – 0.5;

$\dot{\chi}_0$: a – 0; b – 10; c – 20; d – 40. $\alpha = 0.04$; $\tau = 0.05$

На рис. 1а и других представлены результаты моделирования с погрешностью 10^{-5} (для достижения которой достаточно было взять $N = 2000$ и $\gamma\tau = 5.0$ для всех случаев). Значения α_j фиксированы, варьируется α_c . Малое значение времени $\tau = 0.05$ выбрано во избежание эффекта отражения волны на границе $\xi = 1$. Кривая со значением $\alpha_c = 0$ соответствует волновому механизму массопереноса со скоростью $(D/\tau_j)^{1/2}$. Резкий волновой фронт наблюдается при $\xi = \tau / (\alpha_j)^{1/2}$. При незначительном отклонении α_c от нуля, т.е. когда начинает действовать пространственная нелокальность, резкий волновой фронт расплывается, а область проникновения потока тепла расширяется в глубь образца. При

$\alpha_c = \alpha_j$ имеем классический закон Фурье. Если $\alpha_c > \alpha_j$, то значения потока превышают величины, предсказываемые волновой и диффузионной моделями, резко растет глубина проникновения тепла. Влияние ненулевой начальной скорости изменения потока тепла при тех же значениях τ и α_j , что и для $\dot{\chi}_0 = 0$, показано на рис. 1b–1d для $\dot{\chi}_0 = 10, 20$, и 40 , соответственно. Когда $\dot{\chi}_0$ достигает 20 (рис. 1c), распределение потока внутри пленки в приповерхностном слое начинает уменьшаться с увеличением значения α_c . В этом случае эффект, вызванный начальной скоростью изменения потока, преобладает над эффектами, вызванными пространственной и временной нелокальностями. При дальнейшем увеличении $\dot{\chi}_0$ до 40 величина самого потока может превысить его значение на поверхности. Независимо от величины начальной скорости пространственная нелокальность нарушает волновой характер теплопереноса. Даже небольшое отклонение α_c от нуля приводит к разрушению резкого волнового фронта и уменьшению максимального значения потока.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Афонькина Е.А.* Влияние пространственно-временной нелокальности на формирование концентрационных профилей в металлах при воздействии мощными ионными пучками / Е.А. Афонькина, Г.А. Вершинин, Г.И. Геринг // ФизХОМ. 2004. № 2. С. 5–11.
- [2] *Жоу Д.* Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас-Баскес, Д. Лебон. М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. 528 с.
- [3] *Соболев С.Л.* Локально-неравновесные модели переноса / С.Л. Соболев // УФН. 1997. Т. 167, № 10. С. 1095–1106.

Александра Алексеевна Свердлова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
sverdlova_sasha@mail.ru.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ОКСАЛАТОВ И ФОСФАТОВ КАЛЬЦИЯ

Е. А. Тиунова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Т. В. Панова

В работе рассматривается кристаллизация одноводного оксалата кальция в присутствии различных добавок. В качестве добавок были использованы аминокислоты – аргинин, глицин, изолейцин, лизин, пролин, серин, цистин, валин. С помощью рентгенофазового анализа установлено, что в присутствии добавок фазовый состав уэвеллита не изменяется, но изменяется степень кристалличности. Исследование ИК-спектров показало, что аминокислоты оказывают как ингибирующее, так и катализирующее воздействие.

Ключевые слова: моногидрат оксалата кальция, аминокислоты, кристаллизация, рентгенофазовый анализ, ИК-спектроскопия.

Мочекаменная болезнь – одно из самых распространенных урологических заболеваний, встречается у 3–4 % взрослого населения земного шара [1]. Рост заболеваемости мочекаменной болезнью лиц трудоспособного возраста, пожилых людей и детей, отсутствие эффективных методов лечения делают эту проблему актуальной для современной медицины [2].

Изучение процессов образования минералов в живых организмах весьма актуальное направление исследований. Результаты рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии почечных камней показывают, что в их составе присутствуют оксалаты (уэвеллит, уэдделлит), фосфаты (апатит, струвит, витлокит), а также мочевая кислота, которая в геологических условиях не образуется [3].

Установлено, что образование оксалатных камней, во многом зависит от органических компонентов физиологических жидкостей. Особенно важную роль играют аминокислоты, содержание которых составляет большую часть от органического состава почечных камней. В настоящей работе представлены результаты кристаллизации моногидрата оксалата кальция в присутствии аминокислот.

Для кристаллизации использовали двуводный хлорид кальция и выбранные аминокислоты и дигидрат оксалата аммония с добавками. pH раствора доводили до необходимого значения при помощи 30 % раствора NaOH и раствора HCl. Для работы было подобрано пересыщение = 100.

Используя рентгеновский дифрактометр ДРОН-3М, были получены дифрактограммы оксалата кальция без добавок и оксалата кальция с аминокислотами. Путем сравнения дифрактограмм оксалата кальция без добавок и с добавками (рис. 1) установлено, что синтез оксалата кальция в присутствии органических и неорганических добавок не изменяет фазового состава, но приводит к изменению степени кристалличности.

При добавке магния и цистина происходит возрастание интенсивности от плоскостей (200), (113). Из этого следует, что эти добавки вызывают рост кристаллов моногидрата оксалата кальция. При добавке глицина наоборот наблюдается уменьшение интенсивностей от плоскостей (101), (110), (113). Из этого следует, что глицин замедляет рост кристаллов моногидрата оксалата кальция.

С целью получения дополнительной информации о составе полученных образцов использован метод инфракрасной спектроскопии (ИК-спектроскопии). ИК-спектры (рис. 2) получали на спектрофотометре «ФСМ-2201». Образцы готовились методом прессования таблеток. Запись спектра исследуемых образцов проводили в области от 4000 до 420 см⁻¹. Чувствительность метода ИК-спектроскопии для данных измерений составляет < 5 %.

Используя литературные данные, были идентифицированы полосы поглощения исследуемых спектров. Исходя из этих данных, можно сделать вывод, что полученные спектры имеют сходства и различия для используемых добавок.

Анализ спектров (рис. 2) показывает, что в ИК-спектрах образцов, обнаружены все основные полосы, характерные для моногидрата оксалата кальция, а также дополнительные полосы поглощения, характерные для карбоната и гидрофосфата-ионов.

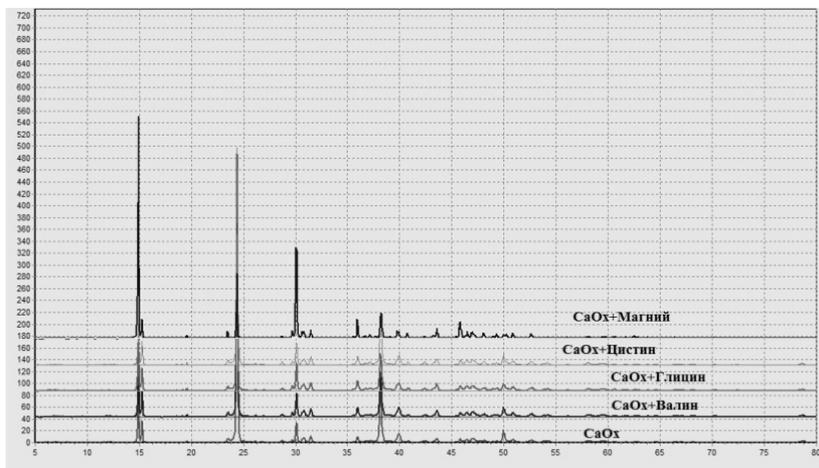


Рис. 1. Дифрактограмма оксалата кальция без добавок и с добавлением валина, глицина, цистина, магния

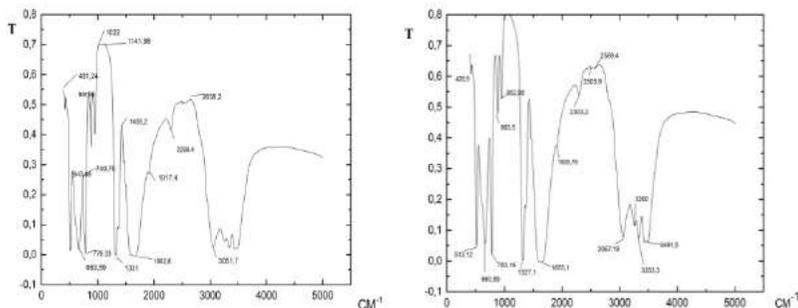


Рис. 2. ИК-спектры оксалата кальция без добавок (рисунок слева) и с добавлением аргинина (рисунок справа)

Спектры оксалата кальция без добавок совпадают с спектрами лизина, пролина и серина в линиях: 513 см^{-1} , которые соответствуют деформационным колебаниям СО-группы и важны для отличия моногидрата от дигидрата; $783,19 \text{ см}^{-1}$; $883,5 \text{ см}^{-1}$ – характерные для узеллита. Также в спектрах присутствуют полосы, характерные для PO_4^{3-} , входящей в брушит, это полосы на 1140 см^{-1} 1022 см^{-1} и 952 см^{-1} , а полосы на 663 см^{-1} , 547 см^{-1} характерны для валентных колебаний этой группы.

ИК-спектры со всеми добавками содержат пики характерные для одноводного оксалата кальция. Однако видно, что добавление аргинина приводит к исчезновению в спектре пиков характерных для уэвеллита и появлению пиков, характерных для аргинина, таких как: асимметричное валентное колебание $\nu(\text{C}=\text{O})$ полипептидной цепи, деформационные колебания метильных $\nu(\text{CH})$ и метиленовых групп, колебания пирольных колец (CH_2). Добавление лизина также приводит к исчезновению в спектре пиков характерных для уэвеллита, но в значительно меньшей степени. При добавлении валина, серина, цистина, изолейцина, пролина, глицина существенных изменений не наблюдалось.

Таким образом, в результате проделанной работы установлено, что аминокислоты различным образом влияют на кристаллизацию: аргинин, глицин, лизин замедляют процесс; цистин и магний являются катализаторами, пролин, серин, валин и изолейцин не оказывают значительного действия на кинетику роста.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Тиктинсий О.Л.* Мочекаменная болезнь / О.Л. Тиктинсий, В.П. Александров. СПб.: Питер, 2000.
- [2] *Дзеранов Н.К.* Качество жизни пожилых больных нефролитиазом / Н.К. Дзеранов, К.А. Байбара, А.В. Казаченко // Урология. 2006. № 1. С. 7–11.
- [3] *Голованова О.А.* Минералы почечных камней жителей Омского региона и некоторые химические условия их образования / О.А. Голованова // Зап. ВМО. 2004. № 5. С. 94–104.

Екатерина Анатольевна Тиунова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
katrin_great.94@mail.ru.

АНАЛИЗ ИЗМЕНЕНИЙ ХАРАКТЕРИСТИК ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ, ВЫЗВАННЫХ МЕХАНИЧЕСКИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ, МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

К. И. Шефер

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

Т. К. Болецкая

В статье рассчитаны механические напряжения, возникающие в гребенчатом волноводе вследствие изменения его температуры и изменения показателей преломления, вызванных механическими напряжениями. Расчеты выполнены методом конечных элементов.

Ключевые слова: гребенчатый волновод, механические напряжения, изменения показателей преломления, метод конечных элементов.

Рассмотрим гребенчатый волновод, изображенный на рис. 1. В процессе эксплуатации волновод нагревается и, так как упругие характеристики полоски, волноводной пленки и подложки отличаются друг от друга, это приводит к возникновению механических напряжений. Так как размеры волновода вдоль оси z велики по сравнению с размерами в направлениях, перпендикулярных этой оси, можно использовать приближение плоской деформации [1], которое заключается в том, что деформация тела вдоль оси z считается равной нулю.

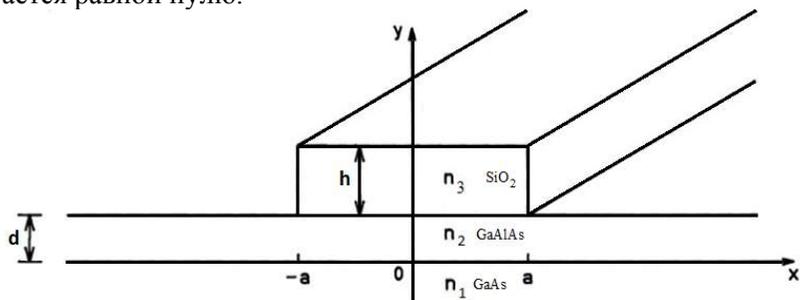


Рис. 1. Гребенчатый волновод

Чтобы найти компоненты тензора напряжений, нужно найти смещения точек, лежащих в поперечном сечении волновода. В методе конечных элементов [2] поперечное сечение волновода делится на малые элементы – треугольники. Смещения вершин треугольников (узлов) вдоль осей x и y аппроксимируются линейными функциями координат. Из принципа минимальности потенциальной энергии следует уравнение

$$A\{d\} = \{H\}, \quad (1)$$

в котором матрица A составлена из матриц, соответствующих каждому из треугольников. Она содержит характеристики материала в месте расположения треугольников и координаты их вершин. Столбец $\{H\}$ составлен из столбцов, соответствующих каждому из треугольников, и содержит компоненты тензора деформации, вызванной нагреванием. Столбец $\{d\}$ содержит смещения узлов вдоль осей x и y .

Компоненты тензора напряжений $\sigma_{xx}^e, \sigma_{yy}^e, \sigma_{xy}^e$ в треугольнике с номером e вычисляются так:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx}^e \\ \sigma_{yy}^e \\ \sigma_{xy}^e \end{Bmatrix} = D_e \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx}^e \\ \varepsilon_{yy}^e \\ \varepsilon_{xy}^e \end{Bmatrix} - (1 + \nu^e) \alpha^e \Delta T \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{xx}^e, \varepsilon_{yy}^e, \varepsilon_{xy}^e$ – компоненты тензора деформации,

$$D_e = \frac{E^e}{(1 + \nu^e)(1 - 2\nu^e)} \begin{pmatrix} 1 - \nu^e & \nu^e & 0 \\ \nu^e & 1 - \nu^e & 0 \\ 0 & 0 & (1 - 2\nu^e)/2 \end{pmatrix}, \quad E^e, \nu^e, \alpha^e \text{ – мо-}$$

дуль Юнга, коэффициент Пуассона и коэффициент теплового расширения соответственно, ΔT – разность температур волновода и окружающей среды.

Напряжения приводят к изменениям показателей преломления, причем показатели преломления для волн, поляризованных вдоль осей x и y , отличаются друг от друга:

$$n_x(x, y) = n_{x0}(x, y) - C_1 \sigma_x(x, y) - C_2 [\sigma_y(x, y) + \sigma_z(x, y)], \quad (3)$$

$$n_y(x, y) = n_{y0}(x, y) - C_1 \sigma_y(x, y) - C_2 [\sigma_z(x, y) + \sigma_x(x, y)], \quad (4)$$

где n_{x0} и n_{y0} – показатели преломления при отсутствии напряжений, C_1 и C_2 – фотоупругие константы.

Расчеты выполнены для волновода, имеющего размеры: $d = 0.2$ мкм, $h = 0.4$ мкм, $2a = 3$ мкм. Толщина подложки 15 мкм, ширина пленки и подложки 16.5 мкм.

Распределения компоненты σ_{yy} тензора напряжений и разности $n_y - n_{y0}$ показаны на рис. 2 и 3.

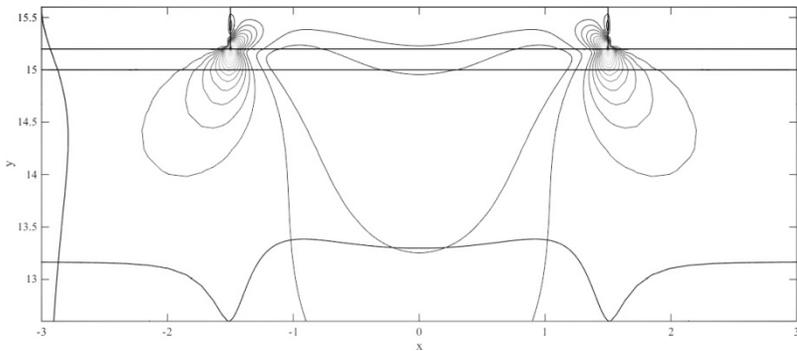


Рис. 2. Распределение компоненты σ_{yy} тензора напряжений

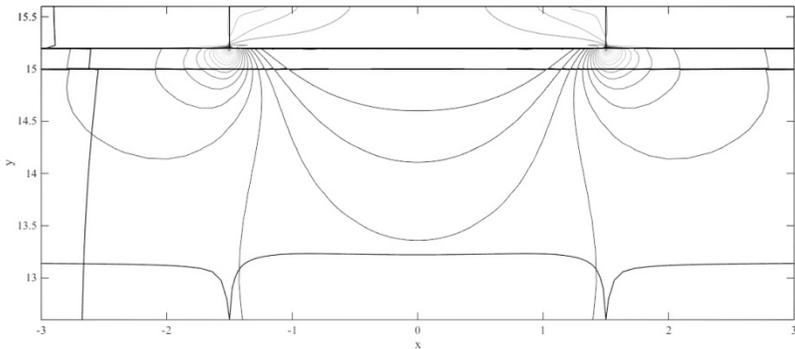


Рис. 3. Изменение $n_y - n_{y0}$ показателя преломления при наличии напряжений

Кривые, расположенные в нижних частях рис. 2 и 3, – зависимости σ_{yy} и $n_y - n_{y0}$ от x вдоль прямых, параллельных оси x , проходящих через точки, в которых величины принимают максимальные значения. Кривые в левых частях рис. 2 и 3, – зависимости σ_{yy} и $n_y - n_{y0}$ от y вдоль прямых, параллельных оси y , проходящих через точки, в которых величины принимают максимальные значения.

Показатель преломления n_y полосы уменьшается, это же справедливо для показателя преломления n_x . Уменьшение показателей преломления должно привести к более компактному распределению электрического поля в области полосы, расположенной под пленкой.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ландау Л.Д.* Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Главная редакция физико-математической литературы, 1987. 246 с.
- [2] *Okamoto K.* Fundamentals of Optical Waveguides / К. Okamoto; Second edition. J.: Elsevier, 2006. 578 с.

Константин Иванович Шефер,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
Konstantin.shef@mail.ru.

ПОСТРОЕНИЕ МНОГОМЕРНОЙ ФАКТОРНОЙ МОДЕЛИ СЕРДЕЧНОСОСУДИСТОЙ ПАТОЛОГИИ НА БАЗЕ ОРТОГОНАЛЬНОГО МЕТОДА С ВАРИМАКС ВРАЩЕНИЕМ

А. П. Шиц

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент

В. В. Гольтяпин

Статья посвящена проблеме выделения факторов, оказывающих влияние на сердечно-сосудистые заболевания (ССЗ). Актуальность обусловлена тем, что ССЗ являются основной причиной смертности во всем мире (31 % за 2012 год по данным ВОЗ) и России в частности. По результатам исследования было выделено 13 значимых факторов.

Ключевые слова: сердечно-сосудистые заболевания, факторный анализ, дисперсионный анализ.

ССЗ – общее название заболеваний системы кровообращения, среди которых выделяют: инфаркты, заболевания сердца, заболевания артерий, заболевания вен. Иногда к ним относят так же заболевания сосудов коронарного кровообращения [1].

Целью работы является выделение латентных факторов с помощью факторного анализа, оказывающих влияние на наличие у пациентов ССЗ. Это позволяет сократить число переменных, определить структуру взаимосвязи между ними и упростить дальнейшую обработку экспериментальных данных.

Данные для исследования были предоставлены бюджетным учреждением здравоохранения Омской области медико-санитарной частью № 7. В нем приняли участие 255 пациентов, у которых определялись 46 параметров: жесткость крупных артерий, растяжимость аорты по ширине, КСР, КДО, КСО и др. Для анализа были отобраны три группы лиц: с незначительными осложнениями в сердечно-сосудистой системе, со смертельно опасными осложнениями в сердечно-сосудистой системе и контрольная группа.

При проведении факторного анализа все расчеты носят последовательный характер. Общий ход анализа отражён на схеме ниже.

$$Y \rightarrow Z \rightarrow R \rightarrow \lambda \rightarrow A \rightarrow V$$

где Y – матрица исходных данных, Z – матрица стандартизованных исходных данных, R – корреляционная матрица, λ – матрица собственных значений, A – матрица отображения, элементами которой являются факторные нагрузки, V – факторная матрица после поворота.

Схема факторного анализа

В ходе факторного анализа для выделения значимых факторов матрица исходных данных Y преобразуется в матрицу стандартизованных значений Z . Исходя из неё вычисляется корреляционная матрица R . Далее вычисляется матрица собственных векторов, собственные значения матрицы $\lambda(1)$ [2].

$$R - U^2 = ACA^T \quad (1)$$

Для получения оптимального решения (матрица V) используется метод варимакс-вращения, целью которого является выбор наиболее простого факторного решения путем максимизации дисперсии факторных нагрузок переменных по каждому фактору. В результате становится более очевидным, какие переменные с какими факторами взаимосвязаны. При варимакс-вращении доли дисперсий, объясняемые факторами, перераспределяются в сторону выравнивания [3].

В рамках данной работы фактор принимался значимым, если корреляция между ним и по крайней мере одним из параметров превышала 0,7. Ниже в качестве примера приведены весовые нагрузки некоторых значимых факторов (табл.).

В каждой из групп были выделены следующие факторы. Жёсткость крупных артерий, УО, МОК, СИ и ОПСС коррелируют с фактором, отвечающим за общую скорость кровотока и насосную функцию сердца. Диаметр аорты в систолу, диаметр её основания, а так же Z -критерий – с другим фактором, отвечающим за функциональность аорты и указывающим её возможную патологию. Также с этим фактором коррелирует и растяжимость аорты, однако лишь для пациентов с незначительными осложнениями и контрольной группы. Для лиц, страдающих ССЗ, параметры, отвечающие за растяжимость, коррелируют с другим независимым фактором. (и)КСР, (и)КСО, ФВ – с третьим фактором, отвечающим за систолическую функцию левого желудочка. Мсдиас,

МЖПд, индекс ОТСЛЖ – с фактором, позволяющим оценить тип гипертрофии левого желудочка. E/A, IVRT, DT – с фактором, характеризующим диастолическую функцию левого желудочка. Диаметры различных артерий также коррелируют между собой и описываются ещё двумя факторами. Аналогичными факторами описываются их патологии (патологическая извитость). Время нормализации кровотока и номер цикла – с фактором, отвечающим за нормализацию кардиоцикла. Коэффициент овершута, сила ауторегуляции, коэффициент ауторегуляции – с фактором, отвечающим за способность организма к поддержанию постоянного мозгового кровотока. Прирост ЛСК за компрессию, скорость коллатеральной компенсации – с фактором, отвечающим за компенсацию недостаточного кровообращения. Ивмр, КР+ – с фактором, характеризующим линейную скорость кровотока.

Параметр	Фактор		
	№ 1	№2	№3
Жесткость крупных артерий	0,703	0,115	-0,201
аорта основание	-0,245	-0,154	0,753
аорта в систолу	-0,213	-0,129	0,9
растяжимость по квадрату диаметра	-0,0906	-0,0522	0,958
растяжимость аорты по ширине	0,0113	0,0119	0,809
КСР	-0,263	-0,752	0,087
иКСР	-0,106	-0,75	-0,0206
КСО	-0,218	-0,91	0,142
иКСО	-0,157	-0,936	0,0872
УО	-0,902	-0,111	0,139
МОК	-0,948	-0,0447	0,0961
СИ	-0,859	-0,0973	0,0407
ОПСС	0,919	0,0601	-0,0413
ФВ	-0,293	0,776	-0,00984

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Коваленко В.Н.* Руководство по кардиологии // В.Н. Коваленко, М.И. Лутай, В.В. Братусь и др. Киев: МОРИОН, 2008. 1424 с.
- [2] *Иберла К.* Факторный анализ / К. Иберла; пер. с нем. В.М. Иванова. М.: Статистика, 1980. 397 с.
- [3] *Ким Д.О.* Факторный, дискриминантный и кластерный анализ / Д.О. Ким. Рипол Классик, 1989.

Александр Павлович Шиц,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
sppklon@gmail.com.

ФОТОПРЕВРАЩЕНИЯ ОСНОВНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГЕМОГЛОБИНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ

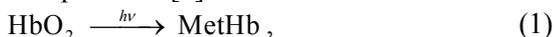
В. С. Шпунтенко

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Е. Ю. Мосур

Определена зависимость содержания основных производных гемоглобина от экспозиционной дозы УФ-излучения. Показано, что выявленная зависимость соответствует известной последовательности фотопревращений производных гемоглобина.

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

Исследование механизмов действия света на кровь и ее компоненты является актуальным вследствие распространения в клинической практике различных методов УФ-облучения. Одним из объектов воздействия УФ света являются эритроциты, которые содержат гемоглобин. Выделяют четыре основных производных гемоглобина: оксигемоглобин (HbO_2), дезоксигемоглобин (Hb), карбоксигемоглобин (HbCO) и метгемоглобин (MetHb). Фотопревращения основных производных гемоглобина описываются следующей последовательностью реакций [1]:



Цель данной работы – определение зависимости содержания основных производных гемоглобина от экспозиционной дозы УФ-излучения.

В настоящей работе использовалась цельная венозная кровь. Оптические спектры поглощения исследуемых образцов получены с помощью спектрофотометра СФ-56 в диапазоне длин волн 510÷650 нм в кварцевых кюветах с оптической длиной пути 0,01 см. В качестве источника излучения применялась ртутная

лампа ДРГС-30 (для выделения УФ-излучения использовался светофильтр УФС-1). Количественный анализ производных гемоглобина проводился посредством компьютерной программы “НемоСпектр” [2].

Определена зависимость содержания основных производных гемоглобина от экспозиционной дозы УФ-излучения (рис. 1). Заметно, что с ростом дозы излучения уменьшается содержание оксигемоглобина (с 78,2 % до 32,3 %) с одновременным увеличением уровня метгемоглобина до 65,6 %, что согласуется с реакцией (1).

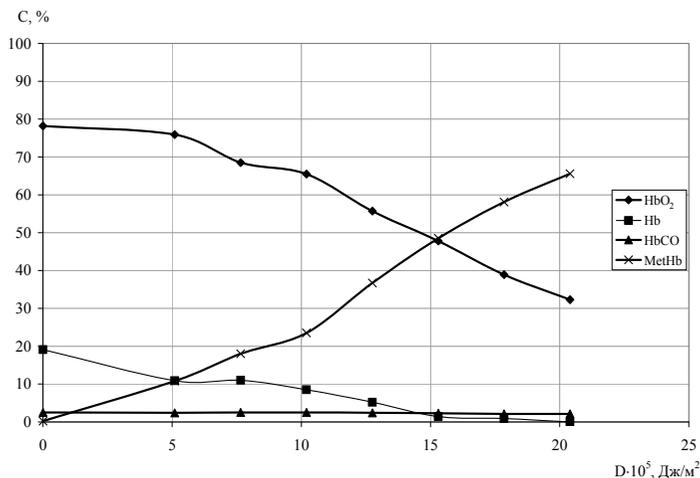


Рис. 1. Зависимость содержания основных производных гемоглобина от экспозиционной дозы УФ излучения

Использование образца крови с повышенным содержанием MetHb (83,6 %) позволяет подробно исследовать реакции (2–4). Результаты количественного анализа спектров данного образца приведены на рис. 2. При росте дозы облучения наблюдается уменьшение содержания MetHb до 12,8 %, сопровождающееся ростом уровня Hb при дозах $\leq 1,3 \cdot 10^6$ Дж/м² (реакция (2)); начиная с дозы $0,5 \cdot 10^6$ Дж/м² заметен резкий рост содержания HbCO (до 47,9 %) на фоне замедления, а впоследствии и снижения, уровня Hb, что подтверждает протекание реакции (3); в ходе процесса воздей-

ствия УФ-излучения на анализируемый образец общая концентрация гемоглобина уменьшилась со 127 г/л до 92 г/л (реакция (4)).

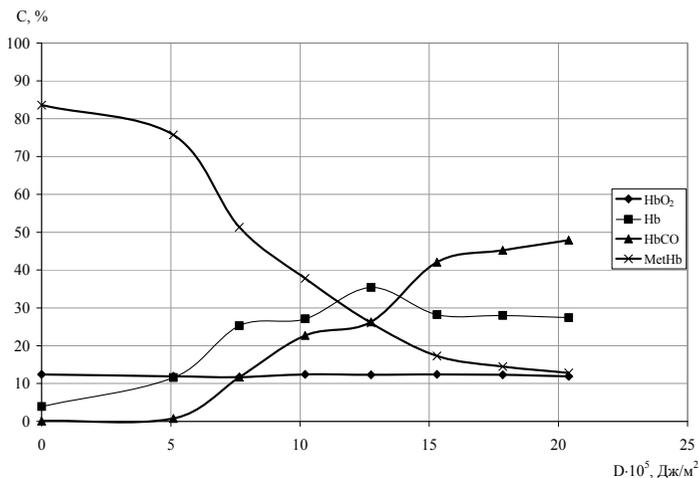


Рис. 2. Зависимость содержания основных производных гемоглобина в образце крови с повышенным содержанием MetHb от экспозиционной дозы УФ излучения

Таким образом, описанная динамика содержания основных производных гемоглобина соответствует известной последовательности фотохимических превращений.

ЛИТЕРАТУРА

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

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

Вячеслав Сергеевич Шпунтенко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
9shpoont@mail.ru.

Секция

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

ОЦЕНКА СУММАРНОГО СОДЕРЖАНИЯ ФЕНОЛОВ ПО РЕАКЦИИ С ДИАЗОТИРОВАННОЙ СУЛЬФАНИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ

Н. С. Бриленок, М. В. Бахарева

Научный руководитель: д-р хим. наук, профессор В. И. Вершинин

Предложен способ снижения систематической погрешности при определении суммарного содержания фенолов по реакции с диазотированной сульфаниловой кислотой. Способ проверен на модельных смесях фенолов.

Ключевые слова: фенолы, фенольный индекс, интегральный показатель, суммарное содержание фенолов.

Фенолы являются опасными токсикантами. Они содержатся в сточных водах нефтеперерабатывающих, лесохимических, коксохимических и других предприятий. Сброс плохо очищенных фенолсодержащих вод в водоемы резко ухудшает их санитарное состояние [1]. Состав природных и сточных вод контролируют, измеряя интегральный показатель «фенольный индекс» (приблизительная оценка суммарного содержания фенолов, найденная спектрофотометрическим методом по реакции с 4-аминоантипирином). Аналитический сигнал A_{Σ} пересчитывают на концентрацию стандартного вещества $X_{\text{СТ}}$, обычно им служит простейший фенол

$$c^* = A_{\Sigma} / K_{\text{СТ}} \quad (1)$$

Здесь $K_{\text{СТ}}$ – коэффициент чувствительности при определении $X_{\text{СТ}}$, c^* – интегральный показатель, который считают равным

действительному значению суммарного содержания фенолов (далее c_{Σ}). В этом случае величина c^* может отличаться от c_{Σ} в несколько раз, из-за разной чувствительности определения аналитов и $X_{ст}$, а также по другим причинам. Для повышения точности оценки c_{Σ} предложено применять менее селективную реакцию азосочетания фенолов с диазотированной сульфаниловой кислотой (ДСК) [2]. При этом образуется смесь азокрасителей. Аналитические возможности новой методики изучены недостаточно. Цель данной работы – оптимизация и проверка точности новой методики в ходе анализа модельных водных растворов, содержащих 2–3 разных фенола на уровне 10^{-6} – 10^{-5} мкМ. Эти растворы готовили, имитируя реальный состав природных или сточных вод.

В качестве модельных соединений использовали: простейший фенол (Ф), резорцин (Р), гваякол (ГВ), хлор- (ХФ) и нитро- (НФ) фенолы, нафтол (Н1), о- и м-крезол (ОК и МК). Анализ проводили при комнатной температуре, время экспозиции – 10 минут, рН около $7,4 \pm 0,2$. Оказалось, что в реакцию с ДСК вступают все фенолы, кроме пара-нитрофенола и парара-крезол. Спектры образующихся азокрасителей довольно похожи. Вееры градуировок, полученных в одних и тех же условиях для разных фенолов, регистрировали при разных аналитических длинах волн (пример – рис. 1).

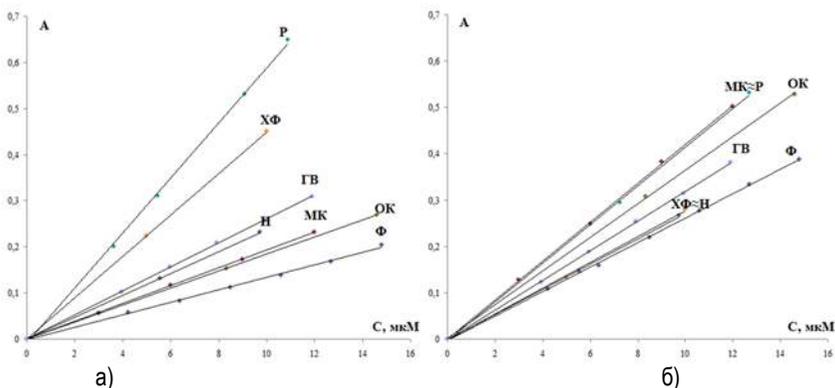


Рис. 1. Веер градуировок при определении фенолов по реакции с ДСК при аналитической длине волны 410 нм (а) и 380 нм (б)

При измерении сигналов в видимой области спектра молярные коэффициенты поглощения разных азокрасителей различаются в два-три раза (рис. 1а), поэтому анализ модельных смесей приводит к значениям c^* , отличающимся от c_{Σ} на 60–80 % отн. Наилучшие результаты анализа модельных смесей (а, следовательно, и реальных гидрохимических объектов) достигались при использовании в качестве стандарта простейшего фенола. Результаты оценки c_{Σ} одних и тех же смесей оказались более правильными, чем при использовании 4-амино-антипирина, при той же сходимости результатов и приблизительно такой же чувствительности анализа. Для дальнейшего уменьшения систематических погрешностей можно оптимизировать выбор аналитической длины волны. Переход к измерению сигнала при 360–380 нм ведет к сужению веера градуировок (рис. 1б). Отношение максимального и минимального коэффициентов чувствительности при измерении сигналов разных фенолов по реакции с ДСК в этих условиях составляет 1,5–1,8 единицы. Нивелирование ведет к достоверному снижению систематической погрешности (таблица).

Погрешность определения фенолов (δc , %) при разном значении T

Состав смеси, мкМ	Длина волны, нм	
	410	380
H1+P = 7,0 + 3,8	-22	-18
Ф+P = 10,7 + 5,6	17	6
H1 + P = 9,8 + 11,2	23	-3

Нивелировать коэффициенты чувствительности при определении однотипных фенолов можно и другими способами (оптимизация концентрационных условий и времени экспозиции) [3]. В результате проведенных исследований погрешности оценки c_{Σ} удалось снизить до 15–20 %. Однако полностью исключить систематические погрешности не удалось. Этому мешает наличие других источников систематической погрешности. В частности, выявлены небольшие отрицательные отклонения от аддитивности аналитических сигналов разных фенолов. В анализе реальных объектов результат анализа будет занижен и вследствие влияния посто-

ронных веществ. Как показали опыты на модельных смесях, результаты определения фенолов в присутствии активных восстановителей (например, сульфита натрия) будут сильно занижены, а в присутствии некоторых аминов – завышены. Это следует учитывать при разработке методик.

В дальнейшем новый способ определения суммы фенолов планируется проверить на реальных объектах, а именно на пробах сточных и природных вод разного типа.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Руководство по анализу воды. Питьевая и природная вода, почвенные вытяжки / под ред. А.Г. Муравьева. СПб.: Крисмас+, 2011. 264 с.

[2] Патент на изобретение № 2533322 «Способ определения суммарного содержания фенола в водах».

[3] *Вершинин В.И.* Определение суммарного содержания однотипных веществ с помощью интегральных показателей / В.И. Вершинин. Омск: ОмГУ, 2016. 288 с.

Наталья Сергеевна Бриленок,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
3-й курс аспирантуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
brilenok@list.ru.

Маргарита Вячеславовна Бахарева,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
pearl_5@mail.ru.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ВЫХОДА И КАЧЕСТВА МОТОРНЫХ ТОПЛИВ ИЗ ГАЗОВОГО КОНДЕНСАТА

М. В. Гончаренко

Научный руководитель: канд. техн. наук, доцент В. Н. Носенко

Целью проектирования новых установок является получение ассортимента продукции требуемого качества. Создание компьютерной модели установки фракционирования стабильного газового конденсата (СГК) в ПП Aspen HYSYS позволяет оценивать выход и качество получаемых фракций.

Ключевые слова: газовый конденсат, моторные топлива, Aspen HYSYS, качество, выход.

Газовые конденсаты (ГК) так же, как и нефть, являются сырьем для получения моторных топлив: бензинов, реактивных и дизельных топлив. По фракционному составу газовые конденсаты отличаются от нефти более высоким содержанием светлых фракций (выкипающих до 350 °С): содержание светлых фракций порядка 70 % характерно для самых легких нефтей и самых тяжелых ГК. Большинство ГК имеет температуру конца кипения менее 350 °С. Кроме того, газовые конденсаты содержат значительно меньше смолистых веществ, асфальтенов и, как правило, серы и других нежелательных соединений [1; 3]. Поэтому для получения газоконденсатных моторных топлив требуется меньшее количество дополнительных процессов, что упрощает производство топлив.

На установке фракционирования СГК происходит разделение на прямогонные фракции. Компьютерная модель установки фракционирования СГК представлена на рис.1. Основные характеристики рассматриваемого сырья приведены в таблице 1.

С помощью компьютерной модели были определены следующие характеристики прямогонных фракций: плотность, вязкость, фракционный состав, давление насыщенных паров, температура вспышки, температуры помутнения и застывания, октано-

вое число, цетановый индекс [2]. Высота некоптящего пламени для керосиновой фракции рассчитывалась по формуле:

$$ВНП = 21,5 - 165 \cdot (\rho_4^{20} - 0,81) + 1260 \cdot (\rho_4^{20} - 0,81)^2,$$

где $ВНП$ – высота некоптящего пламени, мм; ρ_4^{20} – относительная плотность.

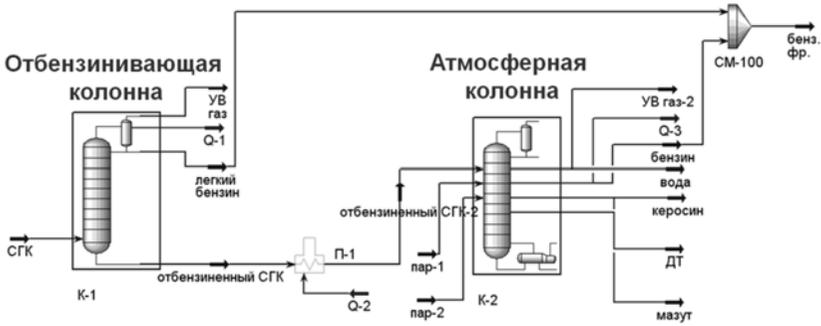


Рис. 1. Имитационная модель установки фракционирования СГК

Основные характеристики СГК

Показатель	Значение
Плотность, при 15 °С, кг/см ³	0,735
Вязкость кинематическая при 20 °С, мм ² /с	0,73
Вязкость кинематическая при 40 °С, мм ² /с	0,60
Содержание серы, % масс	0,0064
Температура н.к., °С	<35
Температура к.к., °С	392

Показано, что прямогонные фракции (кроме бензиновой) соответствуют требованиям действующих ГОСТ на моторные топлива по перечисленным выше характеристикам. При изменении режима работы установки температура застывания и высота некоптящего пламени перестают соответствовать стандартам – такие характеристики называют ограничивающими параметрами процесса. Расчет компьютерной модели с использованием ограничивающих параметров позволяет установить пределы нормальной работы установки.

В электронной таблице ПП Aspen HYSYS можно контролировать изменение выхода суммы светлых фракций при изменении режима работы установки. Для этого достаточно связать ячейки таблицы с расходами потоков (бензиновой, керосиновой и дизельной фракций) и ввести необходимые формулы (рис. 2).

The screenshot shows a spreadsheet window titled "Spreadsheet: SPRDSHT-1". At the top, there is a "Тек. ячейка" (Text cell) section with "A1" selected, a "Перем:" (Parameter) field, and a "Углы в:" (Angles in) field. There is also a checkbox for "Экспортируемые" (Exportable). Below this is a table with 8 rows and 4 columns (A, B, C, D). The table contains the following data:

	A	B	C	D
1	Параметр	Значение	Формула	
2	Расход бензина	1.054e+005 kg/h		
3	Расход керосина	2.198e+004 kg/h		
4	Расход ДТ	6464 kg/h		
5	Сумма светлых фракций	1.338e+005 kg/h	B2+B3+B4	
6	Расход сырья	1.370e+005 kg/h		
7	Выход светлых фракций	97.69	B5/B6*100	
8				

At the bottom of the window, there are tabs for "Параметры" (Parameters), "Формулы" (Formulas), "Электронная таблица" (Spreadsheet), and "Порядок вычислений" (Calculation Order). Below the tabs are buttons for "Удалить" (Delete), "Справка по функции..." (Help on function...), "Только электр. табл." (Spreadsheet only), and a checkbox for "Игнор." (Ignore).

Рис. 2. Расчет выхода суммы светлых фракций в электронной таблице

Рассмотрим несколько примеров. Для расчета атмосферной колонны в ПП Aspen HYSYS были использованы следующие спецификации: расход углеводородных газов, параметры ребойлера 1-ой отпарной колонны, параметры циркуляционных орошений, точки отделения 10 % и 98 % керосиновой и 95 % дизельной фракции. При этом выход светлых фракций составил 98,34 %.

Изменим значение точки отделения 95 % дизельной фракции с 350 °С на 360 °С. Расширение пределов выкипания дизельной фракции закономерно приводит к увеличению выхода светлых – 98,58 %.

Теперь заменим одну из спецификаций: вместо точки отделения 95 % дизельной фракции используем точку отделения 3,5 % мазута. В этом случае выход светлых составляет 97,69 %, так как часть светлых фракций остается в мазуте.

Таким образом, на примере компьютерной модели установки фракционирования СГК показано, что использование компьютерного моделирования при проектировании позволяет определять выход продуктов и оценивать их качество.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Дриацкая З.В.* Нефти СССР: справочник в 4 т. / З.В. Дриацкая, М.А. Мхчиян, Н.М. Жмыхова. М., 1971–1974.

[2] *Кузнецов О.А.* Основы работы в программе Aspen HYSYS / О.А. Кузнецов. М.; Берлин, 2015. 153 с.

[3] *Тархов Л.Г.* Добыча и первичная переработка газа и газового конденсата / Л.Г. Тархов, Е.Ю. Беляева. Пермь, 2012. 175 с.

Мария Владимировна Гончаренко,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
maria_ru55@mail.ru.

ПРИМЕНЕНИЕ ИК-СПЕКТРОМЕТРИИ ОТРАЖЕНИЯ ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ РАЗЛИЧНЫХ ОБЪЕКТОВ

А. П. Комов

*Научные руководители: д-р хим. наук, профессор И. В. Власова,
канд. хим. наук Е. Н. Терехова*

ИК-спектрометрия многократного нарушения полного внутреннего отражения (МНПВО) отличается относительной доступностью аппаратного обеспечения, практически отсутствием пробоподготовки и малым временем анализа. Это делает данный вариант ИК-спектрометрии весьма перспективным для экспрессного изучения как жидких, так и твердых образцов разной природы. Однако возможности метода применительно к целям классификации разнообразных образцов мало изучены. В работе оценены возможности классификации образцов каучуков, лекарственных веществ и компонентов резиновых смесей по ИК-спектрам МНПВО с применением хемометрического алгоритма – метода главных компонент.

Ключевые слова: ИК-спектрометрия, ИК-спектры многократного нарушения полного внутреннего отражения, метод главных компонент, классификация образцов.

ИК-спектрометрия нашла в настоящее время широкое применение. Метод используют для определения группового состава нефтепродуктов, обнаружения фальсификации пищевых продуктов и кормов, при изучении лекарственных веществ, каучуков и многих других объектов. Но во всех случаях требуется пробоподготовка образцов, что увеличивает длительность и трудоемкость анализа. Так, для каучуков ГОСТ 28665-90 [1] предполагает анализ пиролизата или плёнок, осаждённых из раствора на бромидкалевой пластинке.

Вариантом ИК-спектрометрии, пока еще не нашедшим широкого применения, является метод многократного нарушения полного внутреннего отражения, МНПВО (ИК-спектрометрия отражения). Для снятия спектров этим методом необходима соответствующая приставка, помещаемая в кюветное отделение стандарт-

ного ИК-спектрометра. Данная приставка позволяет получать ИК спектр тонкого поверхностного слоя образца практически без пробоподготовки. При анализе каучуков методом МНПВО достаточно поместить образец соответствующих размеров на призму. Так же на призме можно размещать порошки и жидкости. Таким образом, использование приставки МНПВО не только облегчает пробоподготовку но и расширяет перечень изучаемых объектов, когда анализ невозможен стандартными для ИК спектроскопии методами.

Базовым методом хемометрики при решении задач классификации является метод главных компонент (МГК, Principal Component Analysis, PCA). С математической точки зрения PCA – это декомпозиция исходной матрицы X , которая, в случае спектроскопии, составлена из данных об интенсивности поглощения образцов при определённом количестве длин волн (волновых чисел). Цель PCA – извлечение из этих данных информации о составе образца. Важно уметь правильно выбрать спектральный диапазон, или даже отдельные длины волн, которые были бы достаточны для надёжной классификации образцов.

Для изучения возможностей классификации образцов по их ИК спектрам отражения с использованием МГК были выбраны следующие типы объектов: каучуки (20 образцов), лекарственные препараты (11 образцов), компоненты резиновых смесей (20 образцов). Спектры снимали на ИК-Фурье спектрометре ФСМ 1201 производства ООО «Инфраспек», Санкт-Петербург, с приставкой МНПВО 36 горизонтального типа в диапазоне $4000\text{--}650\text{ см}^{-1}$ с шагом 2 см^{-1} . Для хемометрической обработки данных использовали программу UnscramblerX 10.4.

Поскольку спектр МНПВО образуется примерно в первом мкм поверхности образца, использовали образцы заведомо большей толщины для устранения её влияния на интенсивность спектра.

Показано, что спектры отражения хорошо воспроизводятся как по волновым числам, так и по интенсивности пиков. Все исследованные объекты – каучуки, таблетки, компоненты резиновых смесей – дают достаточно детальные спектры. В качестве примера на рис. 1 приведены ИК спектры двух типов каучуков.

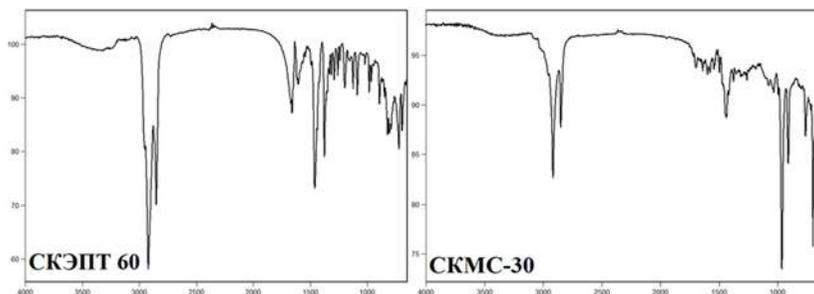


Рис. 1. Спектры поглощения каучуков:
 СКЭПТ 60 – этиленпропилендиеновый каучук;
 СКМС-30 – бутадиен-стирольный (метилстирольный) каучук

Установлено, что большое влияние на интенсивность поглощения полос в спектрах оказывает агрегатное состояние образца. По уменьшению интенсивности их можно выстроить в следующий ряд: жидкие образцы; каучуки; порошкообразные образцы (чем выше дисперсность, тем интенсивнее спектр); таблетированные лекарственные препараты.

С целью классификации методом главных компонент для всех типов образцов изначально использовали весь спектральный диапазон. Затем диапазон поочередно сокращали со стороны больших и меньших длин волн. Затем использовали только несколько волновых чисел с максимальными дисперсиями. Последний вариант оказался наиболее информативным. Для каучуков оптимальное количество волновых чисел, позволяющее проводить идентификацию и классификацию в зависимости от типа каучука, равно пяти, для лекарственных препаратов – десяти.

Каучуки при этом разделяются на четыре группы (рис. 2):

1 – каучуки, содержащие незамещённое бензольное кольцо (стирольный и этилбензольный);

2 – метилстирольные каучуки;

3 – нитрильные каучуки;

4 – каучуки, не имеющие характеристических заместителей.

Из лекарственных препаратов были сгруппированы образцы, содержащие ацетилсалициловую кислоту, ибупрофен и дибазол. При этом влияния парацетамола на расположение образцов в координатах PC1-PC2 не обнаружено.

СРАВНЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ РАЗНЫХ СПОСОБОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СУММАРНОГО СОДЕРЖАНИЯ АРЕНОВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

А. В. Мамонтова

Научный руководитель: канд. пед. наук, доцент С. В. Усова

Методами ИК-, УФ-спектрометрии и ГЖХ определяли суммарное содержание моноциклических ароматических углеводородов (аренов) в углеводородных смесях и в водных растворах, которые по составу схожи с составом природных и сточных вод. Наиболее экспрессным методом определения суммарного содержания аренов является УФ-спектрометрия.

Ключевые слова: гидрохимический анализ, газожидкостная хроматография, спектрометрия, моноциклические ароматические углеводороды, суммарное содержание.

Постановка задачи. Анализ литературы показал, что в гидрохимическом анализе основное внимание уделяется оценке общего содержания УВ в виде показателя «нефтепродукты». Для определения суммарного содержания углеводородов в водах используют гравиметрию, флуориметрию, УФ- и ИК-спектрометрию, а также газовую хроматографию. Применение наиболее надежного метода – ИК-спектрометрии – ограничено из-за необходимости работать с токсичным четыреххлористым углеродом. Наиболее информативен метод ГЖХ, однако работ по хроматографическому определению суммы УВ в водах мало (это, в основном, зарубежные работы).

Суммарное содержание аренов в водах определяют методом УФ- или ИК-спектрометрии [1; 2]. Однако оптимальные условия такого анализа не определены, точность и чувствительность соответствующих методик не охарактеризована, не изучены факторы, вызывающие появление систематических погрешностей. Поэтому целью данной работы является исследование возможностей точного ИК- и УФ-спектрометрического и газохроматографического определения суммарного содержания аренов в водных растворах.

Объекты и методика исследования. Основными объектами были: а) растворы индивидуальных углеводов в CCl_4 и в н-гексане; б) углеводородные смеси, включающие индивидуальные арены, а также растворитель; в) водные растворы, включающие в себя смеси аренов. Для приготовления смесей использовали 6 разных углеводов: бензол, толуол, п-ксилол, о-ксилол, м-ксилол, этилбензол.

Систематические погрешности при оценке суммарного содержания аренов в неразделенных смесях при использовании хемометрических алгоритмов анализа в ИК- и УФ-спектрометрии ниже, чем при пересчете на стандартное вещество или использовании многоволновой спектрометрии (тот же вывод можно сделать и при сравнении обобщенных погрешностей анализа) (табл. 1).

Таблица 1

Погрешности оценки суммарного содержания аренов в модельных смесях методами ИК- и УФ-спектрометрии

Метод расчета	Показатель			
	ИК-спектрометрия		УФ-спектрометрия	
	$ \delta , \%$	RMSEP	$ \delta , \%$	RMSEP
Одномерная градуировка ($X_{ст}$)	≤ 55	0,36	≤ 55	0,14
Многомерная градуировка ($N = 7$)	≤ 45	0,25	≤ 31	0,086
ПЛС-1 при $N > 50$	≤ 33	0,17	≤ 25	0,075

Систематические погрешности при использовании газохроматографического определения суммарного содержания аренов в модельных смесях, полученные при пересчете модельных смесей аренов на градуировочную зависимость суммарного содержания аренов от суммарной площади пиков ниже (не превышаю 12 % отн.), чем при нахождении суммарной концентрации как суммы концентраций аренов, найденных по индивидуальным градуировочным зависимостям.

Методика экстракции: мерным цилиндром отмеряют 200 мл анализируемого раствора, переносят в делительную воронку, добавляют 40 г NaCl на 1 л воды, подкисляют 1 мл серной кислоты (концентрация 1:1) и встряхивают до растворения соли, добавляют

10 мл растворителя и встряхивают в течение 4 минут (концентрирование в 20 раз). Для того чтобы учесть неполноту экстракционного извлечения аренов из водных растворов необходимо строить градуировочную зависимость из экстрактов, полученных из водных растворов. Для спектрометрических методов анализа были построены ПЛС-градуировки, а для хроматографии градуировочную зависимость суммарного содержания аренов от суммарной площади пиков. Погрешности в ИК-спектрометрии значительно выше, чем в УФ-спектрометрии и ГХ (табл. 2).

Таблица 2

Погрешности (δ , %), возникающие при анализе имитатов вод

№ смеси	C_{Σ} , мг/л	ИК-спектрометрия	УФ-спектрометрия	ГХ
1	14,0	-26	7	-9
2	22,6	32	8	4
3	40,9	-27	14	-24
4	11,1	13	-25	10
5	13,5	50	-21	23

Таблица 3

Характеристики методик определения суммарного содержания аренов в водных растворах

Характеристика	ИК-спектрометрия	УФ-спектрометрия	ГХ
C_{\min} , мг/л	0,50	0,10	0,10
δ , %	≤ 62	≤ 25	≤ 25
Рабочий диапазон линейности, мг/л	15–100	5–500	5–500
Время анализа, мин	30	20	60

Из данных таблицы видно, что ИК-спектрометрия меньше всего подходит для определения суммарного содержания аренов в водах из-за низкой чувствительности, высокой погрешности и небольшого диапазона линейности. К тому же в ИК-спектрометрии необходимо использовать токсичный четыреххлористый углерод.

Наиболее экспрессным методом определения суммарного содержания аренов является УФ-спектрометрия, которая не уступает в чувствительности и в точности определения суммарного содержания аренов в водах. Хроматографию из-за длительности анализа лучше использовать, когда нам необходимо знать покомпонентный состав воды.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Mamontov G. Matrix Isolation Fluorescence and Fourier Transform Infrared Spectroscopy of Polycyclic Hydrocarbons / G. Mamontov, E.L. Wehry, E.R. Kemmerer // Anal. Chem. 1977. Vol. 49, № 1. P. 86–90.*

[2]. *Wehry E.L. Analysis of Polycyclic Hydrocarbons by Matrix Isolation Fluorescence and Fourier Transform Infrared Spectroscopy / E.L. Wehry, G. Mamontov, E.R. Kemmerer et al. // Polynucl. Aromat. Hydrocarb., 2nd Int. Symp. Anal. Chem. And Biol. / ed. by P.W. Jones and R. I. Freudenthal. N. Y.: Raven Press, 1978. Vol. 3. P. 193–202.*

Анастасия Вячеславовна Мамонтова,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского
2-й курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
Anastasia.m731193@mail.ru.

СИНТЕЗ 2,6-БИСОКСАЗОЛО[5,4-В]ПИРИДИНОВ

М. В. Мацукевич

Научный руководитель: д-р хим. наук, профессор И. В. Кулаков

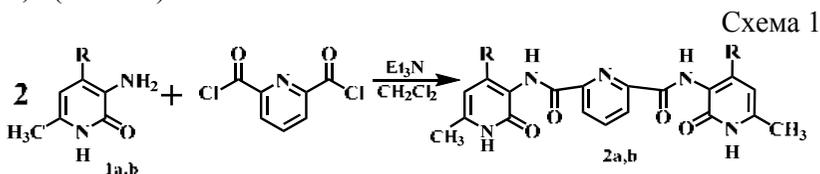
При взаимодействии 4-арилзамещенных 3-аминопиридонов с дихлорангидридом пиридин-2,6-дикарбоновой кислоты были получены соответствующие диамиды, нагревание которых в течение 5 ч с оксихлоридом фосфора приводило к образованию бисоксазоло[5,4-*b*]пиридинов.

Ключевые слова: 4-арил-3-аминопиридоны, диамиды пиридин-2,6-дикарбоновой кислоты, бисоксазоло[5,4-*b*]пиридины, внутримолекулярная циклизация.

Одной из актуальных задач современной органической химии является поиск новых практически полезных соединений, которые можно использовать в качестве эффективных биомаркеров, люминофоров, комплексообразователей и т. д.

Ранее нами в [1; 2] был показан весьма перспективный метод получения 4,6-дизамещенных 3-аминопиридин-2(1*H*)-онов, которые послужили хорошими синтонами в синтезе ряда конденсированных и сопряженных гетероциклических систем [1; 3].

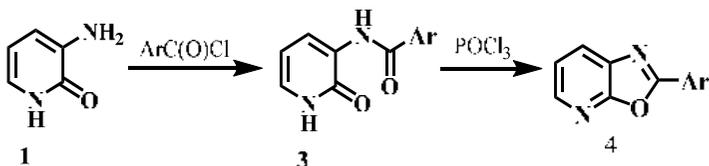
Нами было показано, что 4-арилзамещенные 3-аминопиридин-2(1*H*)-оны **1a,b** при нагревании с дихлорангидридом пиридин-2,6-дикарбоновой кислоты в присутствии ТЭА образуют диамиды **2a,b** (схема 1).



В работе [4] была описана общая схема ацилирования 3-аминопиридонов типа **1** замещёнными бензоилхлоридами. Реакцию авторы [4] проводили при нагревании в пиридине в течение 15 ч с выходом продуктов бензоилирования около 90 %. Дальнейшее

нагревание бензамидов **3** с POCl_3 в течение 5 ч приводит к образованию 2-оксазоло[5,4-*b*]пиридинов **4** с выходом 62 % (схема 2).

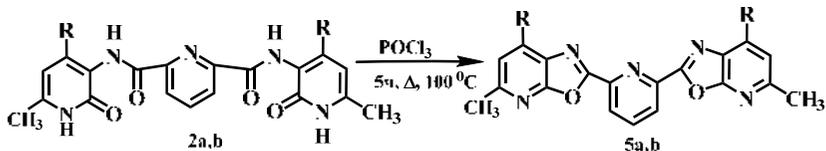
Схема 2



Полученные 2-оксазоло[5,4-*b*]пиридины **4** проявили биологическую активность в качестве некислотных противовоспалительных средств.

Поскольку наши диамиды **2a,b**, являются аналогами бензамидов **3**, нами была осуществлена попытка получения на их основе аналогичных, но замещенных по пиридиновому кольцу 2,6-бисоксазоло[5,4-*b*]пиридинов **5a,b**. Установлено, что при нагревании диамидов **2a,b** в течение 5ч с оксихлоридом фосфора происходит их циклизация и образуются с выходом около 80 % симметричные бисоксазоло[5,4-*b*]пиридины **5a,b** (схема 3).

Схема 3



a: R= Ph; b: R= 3,4-(MeO)₂C₆H₃

Состав, строение и индивидуальность синтезированных веществ **5a,b** подтверждена данными ИК, ЯМР ¹H, ¹³C спектроскопией.

Так, в ИК-спектрах **5a, b** отсутствуют полосы поглощения N-H и C=O амидных групп, характерных для исходных диамидов **2a,b**. В спектрах ЯМР ¹H соединений **5a,b** помимо исчезновения амидных протонов, фиксируется значительное смещение протонов Н-5 и Н-5' в слабое поле от 6.10 м.д. (для исходных диамидов **2a,b**) до 7.79 м.д. вследствие ароматизации пиридинового кольца.

Таким образом, нами на основе N^2, N^6 -бис(6-метил-2-оксо-1,2-дигидропиридин-3-ил)пиридин-2,6-дикарбоксодиамидов **2a, b** получены продукты их циклизации в 2,6-бисоксазоло[5,4-*b*]пиридины **5a, b**, которые могут быть использованы в качестве потенциальных комплексообразователей, люминофоров, биомаркеров и т. д.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] A.S. Fisyuk, I.V. Kulakov, D.S. Goncharov, O.S. Nikitina, Y.P. Bogza, A.L. Shatsauskas. *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2014, 50, 217.
- [2] Ivan V. Kulakov, Mariya V. Matsukevich, Zarina T. Shulgau, Shyngys Sergazy, Tulegen M. Seilkhanov, Amrit Puzari, Alexander S. Fisyuk, *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2015, 51(11/12), 991.
- [3] I.V. Kulakov, O.S. Nikitina, A.S. Fisyuk, D.S. Goncharov, Z.T. Shul'gau, A. E.Gulyaev. *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2014, 50, 670.
- [4] Robert L. Clark, Arsenio A. Pessolano, Bruce Witzel, Thomas Lanza, T. Y. Shen. 2-(Substituted phenyl)oxazolo[4,5-*b*]pyridines and 2-(Sybstituted phenyl)oxazolo[5,4-*b*]pyridines as Nonacidic Antiinflammatory Agents // *J. Med. Chem.* 1978. Vol. 21, № 11. P. 1158–1162.

Мария Викторовна Мацукевич,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
m.v.matsukevich@chemomsu.ru.

СИНТЕЗ, ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ, ХИМИЧЕСКИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 3-(АРИЛМЕТИЛ)АМИНОПИРИДИН-2(1H)-ОНОВ

И. В. Паламарчук

Научный руководитель: д-р хим. наук, профессор И. В. Кулаков

Взаимодействием 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-она с ароматическими альдегидами получены соответствующие основания Шиффа, восстановление которых боргидридом натрия привело к 3-(арилметил)-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-онам. Ацилирование 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-она хлорацетилхлоридом в разных условиях приводит либо к соответствующим хлорацетидам, либо к 1H-пиридо[2,3-b][1,4]оксазин-2(3H)-онам.

Ключевые слова: 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-он, 1H-пиридо[2,3-b][1,4]оксазин-2(3H)-оны, внутримолекулярная циклизация, ЯМР-спектроскопия.

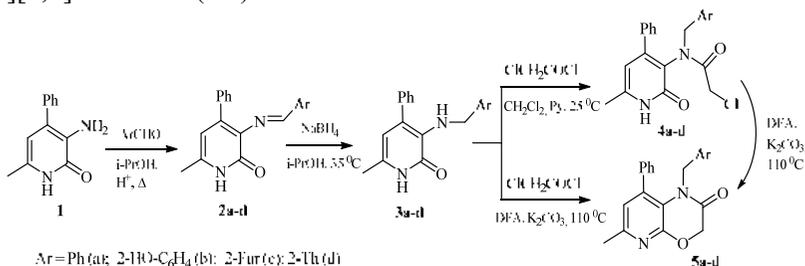
Известно, что производные 3-аминопиридин-2(1H)-онов представляют интерес в качестве потенциальных биологически активных соединений, что делает их привлекательными синтонами для синтеза новых перспективных в биологическом плане производных. Ранее нами был описан способ получения 4-арил-(гетарил-)замещенных 3-аминопиридин-2(1H)-онов, которые показали высокую антирадикальную активность [1]. В качестве одного из реакционных центров для возможной модификации полученных нами 4-арилзамещенных 3-аминопиридин-2(1H)-онов является первичная аминогруппа, позволяющая получать различные производные. Например, в работе [2] показан метод получения 3-[(арилметил)амино]пиридин-2(1H)-онов, среди которых выявлено несколько соединений, ингибирующие распространение ВИЧ-1 инфекции.

В связи с этим для нас представлял интерес осуществить синтез аналогичных производных на основе 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-она и изучить их некоторые химические свойства. Реакцией 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-она 1

с ароматическими альдегидами были получены новые основания Шиффа. Установлено, что реакция легко протекает в 2-пропанол с каталитическим количеством муравьиной кислоты. При этом синтез азометинов **2 a-d** проходил в течении 1-3 ч с выходами (78–95 %). Далее проводили восстановление азометинов **2 a-d** по классической схеме боргидридом натрия в растворе 2-пропанола при температуре 25–35 °С. При этом были получены соответствующие вторичные арилметиленаминопиридоны **3 a-d** с выходами 70–86 %.

3-Аминопиридин-2(1*H*)-оны являются бинуклеофилами и, следовательно, могут быть использованы для синтеза конденсированных по связи С(2)–С(3) производных пиридина. Ранее мы изучили реакцию 3-аминопиридин-2(1*H*)-онов с хлорацетилхлоридом, приводящую при определенных условиях к циклическим 1*H*-пиридо[2,3-*b*][1,4]оксазин-2(3*H*)-онам [3]. С целью возможности протекания аналогичной циклизации с синтезированными вторичными аминами **3 a-d**, нами были проведены аналогичные реакции.

Ацилирование проводили в двух разных условиях: в хлористом метиле в присутствии пиридина при комнатной температуре и в диметилформамиде в присутствии K₂CO₃ при температуре 100 °С. При этом образующиеся на первой стадии соответствующие хлорацетамиды **4 a-d** в более жестких условиях реакции претерпевают внутримолекулярную циклизацию в 1*H*-пиридо[2,3-*b*][1,4]оксазин-2(3*H*)-оны **5 a-d**.



Структура соединений **2-5 a-d** была однозначно доказана ЯМР ¹H, ¹³C-спектроскопией, масс-спектрометрией, а также два соединения **3 a** и **5 c** - дополнительно проведенным рентгеноструктурным исследованием.

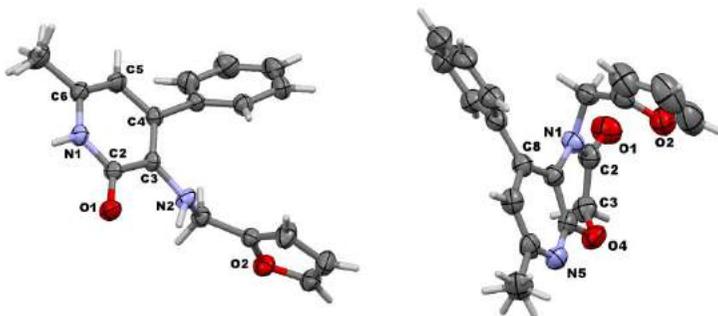


Рис. 1. Строение молекул **3 а** и **5 с** (50% тепловые эллипсоиды)

С целью обнаружения новых антиоксидантов среди синтезированных нами производных 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-она, были проведены испытания их антирадикальной активности в отношении радикала 2,2-дифенил-1-пикрилгидразида (DPPH•). Установлено, что в условиях данной тест-системы только соединения **3 а**, **б** проявили высокую антирадикальную активность, превышающую антирадикальную активность таких известных антиоксидантов как Тролокс и аскорбиновая кислота.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Kulakov I.V., Matsukevich M.V., Shulgau Z.T., Sergazy S., Seilkhanov T.M., Puzari A., Fisyuk A.S. // *Chem. Heterocycl. Compd.* 2015. 51. С. 991–996.
- [2] Saari W.S., Wai J.S., Fisher T.E., Thomas C.M., Hoffman J.M., Rooney C.S., Smith A.M., Jones J.H., Bamberger D.L. // *J. Med. Chem.* 1992. 35. P. 3792.
- [3] Fisyuk A.S., Kulakov I.V., Goncharov D.S., Nikitina O.S., Bogza Y.P., Shatsauskas A.L. // *Chem. Heterocycl. Compd.* 2014. 50. P. 217–224.

Ирина Валерьевна Паламарчук,
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 1-й курс магистратуры, химический факультет,
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
 i.v.palamarchuck@chemomsu.ru.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА 3-АМИНО-4-ФЕНИЛ-6-МЕТИЛПИРИДИН-2(1H)-ОНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

А. Л. Шацаускас, А. А. Абрамов, Э. Р. Сайбулина

Научный руководитель: д-р хим. наук, профессор А. С. Фисюк

Разработан новый подход к синтезу 3-амино-4-фенил-6-метилпиридин-2(1H)она, а также его производных. На основе полученного соединения синтезирован 2-метил-6-фенилбензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-он, а также ряд его производных, являющихся представителями нового класса гетероциклических соединений.

Ключевые слова: синтез 3-амино-4-фенил-6-метилпиридин-2(1H)она, гетероциклические соединения.

Аминопиридин-2(1H)-оны широко используются в качестве скаффолдов для синтеза биологически активных соединений [1–3]. Производные 3-амино-пиридин-2(1H)-онов обладают противовирусной активностью, в том числе против вируса СПИДа [4]. Наличие «встроенного» фрагмента аминокислоты делает 3-аминопиридин-2(1H)-оны привлекательными строительными блоками для синтеза пептидомиметиков. Ранее было показано, что в условиях реакции Гофмана 2-оксопиридин-3-карбоксамиды превращаются в оксазоло[5,4-b]пиридин-2(1H)-оны [5–7]. Эти соединения являются удобными синтонами для получения производных 3-аминопиридин-2(1H)-онов, труднодоступных другими методами.

Действием хлорной извести на амид **1** получен [1; 3] оксазоло[5,4-b]пиридин-2(1H)-он **2**, при нагревании в растворе щелочи в спирте превращен в аминопиридон **3**. Алкилированием оксазолон **2** этиловым эфиром бромуксусной кислоты, 2-йод-этанолом и 1-хлор-2-(2-метоксиэтокси)этаном получены оксазолонны **4 а-с**, щелочной гидролиз которых привел к соответствующим алкиламинопиридонам **5 а-с**.

Известно, что N-ацелированные 3-амино-4-арилхинолины могут вступать в реакцию Бишлера-Напиральского с образованием дибензо[с,f]-1,7-нафтиридинов [8; 9]. С целью изучения

этого подхода к синтезу бензо[с][1,7]нафтиридин-4(3H)-она **9** аминопиридон **3** был подвергнут воздействию бензоилхлорида с получением N-бензоил производного **6**, нагревание которого в среде POCl_3 не привело к образованию соединения **9**, основным продуктом оказался оксосоло[5,4-b]пиридин **7**. Однако, для синтеза конденсированных гетероциклами изохинолинов также используется реакция Пикте-Шпенглера [10–11]. Для исследования данного подхода действием бензальдегида на аминопиридон **3** в присутствии каталитических количеств муравьиной кислоты нами получено основание Шифа **8**, нагреванием которого в среде полифосфорной кислоты получен нафтиридин **9**. В дальнейшем данный синтез удалось осуществить в одну стадию нагреванием аминопиридона **3** и бензальдегида в среде полифосфорной кислоты.

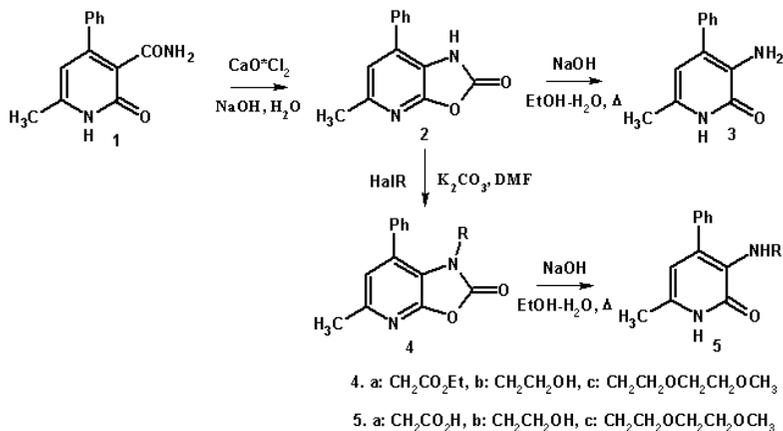


Рис. 1. Схема синтеза аминопиридона **3** и алкиламинопиридонов **5 а-с**

Действием пентахлорида фосфора на нафтиридин **9** получен 4-хлорнафтиридин **10**, нагреванием которого в среде пиридина в присутствии хлорида аммония или солянокислого гидразина получены 4-аминонафтиридины **11 а, б**, нагреванием в морфолиине, моноэтаноламине и диэтаноламине синтезированы соответствующие 4-аминонафтиридины **11 с-д**.

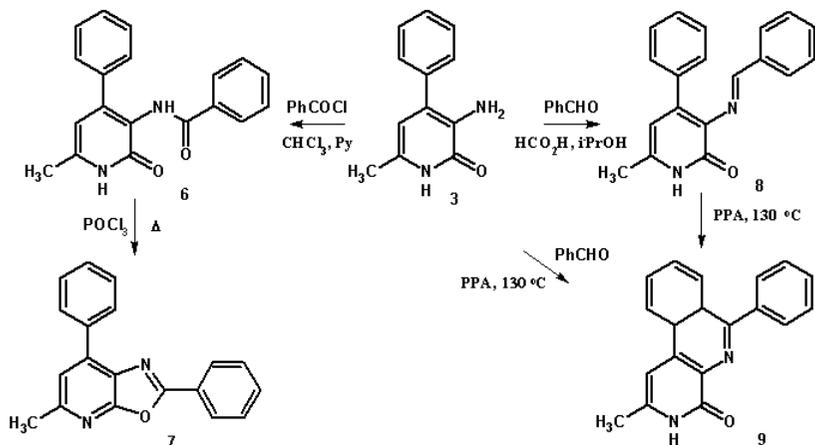
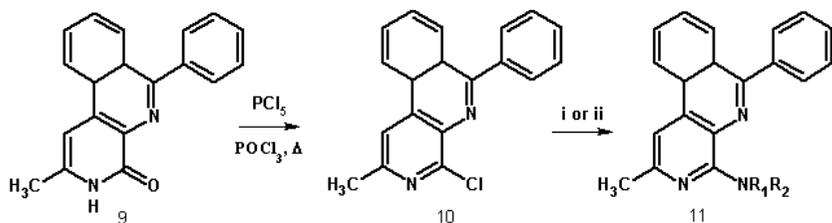


Рис. 2. Схема превращения аминопиридона **3** в оксозоло[5,4-*b*]пиридин **7** и бензо[*c*][1,7]нафтиридин **9**



11. i = $\text{NR}_1\text{R}_2\text{HCl}$, Py , reflux; **a**: $\text{R}_1=\text{R}_2=\text{H}$; **b**: $\text{R}_1=\text{H}$, $\text{R}_2=\text{NH}_2$.

ii = NR_1R_2 , 120°C ; **c**: $\text{R}_1=\text{R}_2=(\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{O}$; **d**: $\text{R}_1=\text{H}$, $\text{R}_2=\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$; $\text{R}_1=\text{R}_2=(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_2$

Рис. 3. Схема синтеза 4-амино-6-фенилбензо[*c*][1,7]нафтиридинов **11 a-e**

ЛИТЕРАТУРА

[1] Kusakabe K., Tada Y., Iso Y., Sakagami M., Morioka Y., Chomei N., Shinonome S., Kawamoto K., Takenaka H., Yasui K., Hamana H. i, Hanasaki K. // *Bioorg. Med. Chem.* 2013. Vol. 21. P. 2045–2055.

[2] Hoffman J. M., Wai J. S., Thomas C. M., [et al.] // *J. Med. Chem.* 1992. Vol. 35. P. 3784–3791.

[3] Zhang Y.-M., Fan X., Chakaravarty D., Xiang B., Scannevin R. H., Huang Z., Ma J., Burke S. L., Karnachi P., Rhodesa K. J., Jackson P. F. // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2008. Vol. 18. P. 409–413.

[4] Crawford J. J., Lee W., Young W. B. // US Patent 20150011461.

- [5] Gudrinietse É., Yure M., Pastors P., Karklinya A., Paliatis É. // Chem. Heterocycl. Compd. 1995. Vol. 31. P. 243–244.
- [6] Yure M. V., Shantare D. V., Gurdinietse É. Yu. // Chem. Heterocycl. Compd. 1996. Vol. 32. P. 473–475.
- [7] Shatsauskas A. L., Abramov A. A., Saibulina E. R., Palamarchuk I. V., Kulakov I. V., Fisyuk A. S. // Chem. Heterocycl. Compd. 2017. Vol. 53. P. 186–191.
- [8] Ockenden W., Schofield K. // J. Chem. Soc. 1953. Vol. 28. P. 3914–3919.
- [9] Schofield K., Theoba R. S. // J. Chem. Soc. 1951. Vol. 26. P. 2992–2995.
- [10] Bogza S. L., Kobrakov K. I., Malienko A. A., Perepichka I. F., Sujkov S. Yu., Bryce M. R., Lyubchik S. B., Batsanov A. S., Bogdan N. M. // Org. Biomol. Chem. 2005. Vol. 3. P. 932–940.
- [11] Zinchenko S. Yu., Efimenko R. A., Suikov S. Yu., Kobrakov K. I., Bogza, S. L. // Chem. Heterocycl. Compd. 2009. Vol. 45. P. 365–369.

Антон Леонидович Шацаускас,
Омский государственный технический университет,
3-й курс аспирантуры, НХИ,
644050, г. Омск, пр. Мира 11,
a.l.shatsauskas@chemomsu.ru.

Антон Алексеевич Абрамов,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
2-й курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
ava5593@mail.ru.

Элина Рафаэлевна Сайбулина,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1-й курс магистратуры, химический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,
e.r.saybulina@chemomsu.ru.