

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ ОМСКОЙ ОБЛАСТИ  
Федеральное государственное образовательное  
учреждение высшего образования  
ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. Ф.М. ДОСТОЕВСКОГО  
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН

## **ФМХ ОмГУ – 2018**

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

(Омск, 14 мая – 14 июня 2018 г.)

© ФГБОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», 2018

ISBN 978-5-7779-2280-9



УДК 53+51+54  
ББК 22я43+24я43  
Ф739

*Рецензенты:*

канд. биол. наук *М. Г. Потуданская*,  
канд. физ.-мат. наук *С. А. Сычев*

Ответственный за выпуск – канд. физ.-мат. наук *Г. М. Серолян*

**Ф739** **ФМХ ОмГУ – 2018** : сборник статей VI Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии (Омск, 14 мая – 14 июня 2018 г.). – Электрон. текст. дан. – Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2018. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM) ; 12 см.

**ISBN 978-5-7779-2280-9**

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:  
процессор с частотой 1,3 ГГц или выше; ОЗУ 512 Мб;  
Microsoft Windows XP/Vista/7/8/10; Adobe Acrobat Reader 8.0 и выше;  
CD-ROM; мышь

© ФГБОУ ВО «ОмГУ»  
им. Ф.М. Достоевского», 2018

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: 12.09.2018.  
1 электрон. опт. диск (CD-ROM); 12 см.  
Тираж 10 копий. Объем 5,7 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 изданию

### *Инструкция для читателей*

1. Для быстрого перехода к нужному разделу используйте интерактивное содержание:

- нажмите кнопку «Закладки» (иконка имеет вид  или ) на боковой (левой) панели;
- в открывшейся панели, прокручивая Содержание, найдите название раздела;
- кликнув по названию статьи, перейдите к его 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».

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ</b> .....	8
--------------------------------------	---

### СЕКЦИЯ

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

<i>Алин Ж. А.</i> Расчет течения в решетке тонких профилей .....	9
<i>Гульченко А. И.</i> Исследование одной задачи кластеризации графа .....	13
<i>Черных К. А.</i> Некоторые свойства задачи одного станка с временами поступления работ .....	17

### СЕКЦИЯ

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

<i>Аугалиева А. Б.</i> Исследование влияния материала и ориентации грани на процесс адсорбции монослойной пленки сплава $Fe_xNi_{1-x}$ .....	21
<i>Беломоин К. Ю.</i> Компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченных систем .....	25
<i>Болдырев М. И.</i> Моделирование свойств трехплечных структур с изингоподобными магнитными пленками и исследование эффектов старения .....	30
<i>Будько С. Н.</i> Расчет постоянных обменного взаимодействия для ферромагнитных металлов в объеме .....	34
<i>Драчев В. А.</i> Численное моделирование критического поведения неупорядоченных магнитных пленок .....	38
<i>Кайданович К. Ю.</i> Компьютерное моделирование критических свойств спиновых систем параллельным методом Ванга-Ландау .....	42
<i>Лаврухин И. В.</i> Расчет влияния дефектов на неравновесную критическую динамику начально упорядоченных систем .....	46
<i>Левицкий А. В.</i> Исследование неравновесного поведения магнитосопротивления в гейзенберговских магнитных структурах .....	51
<i>Маляренко П. Н.</i> Численное исследование влияния различных начальных состояний и дефектов структуры на значения флуктуационно-диссипативного отношения для двумерной модели Изинга .....	56
<i>Нагибин А. А.</i> Влияние дальнедействующей корреляции дефектов на неравновесное поведение сильно неупорядоченной трехмерной модели Изинга .....	62

<i>Пантелеев В. С.</i> Влияние эффекта «взрывной перколяции» на критические свойства сети.....	66
<i>Папушин А. С.</i> Исследование критического поведения трехмерной модели Изинга вблизи порога перколяции.....	70
<i>Поворознюк Е. С.</i> Расчеты магнитных моментов и интегралов обменного взаимодействия в мультислойной системе $\text{Co}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Cu}(100)$ .....	74
<i>Попов В. А.</i> Компьютерное моделирование поведения магнитных структур при динамическом фазовом переходе во внешнем осциллирующем поле.....	78
<i>Сергазин Д. Ж.</i> Исследование зависимости энергии адсорбции системы Fe/Cu/Fe от ориентации грани и параметра покрытия.....	82
<i>Фирстова М. М.</i> Исследование эффектов старения в неравновесном поведении мультислойной структуры Co/Cu.....	86
<i>Шаринова Ж. Б.</i> Численное моделирование критического поведения модели Изинга с подвижными дефектами.....	90

## СЕКЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

<i>Аманкулова Д.А.</i> Методика повышения уровня учебных возможностей школьников в процессе обучения физике.....	94
<i>Бескорвайная С. А.</i> Влияние глюкозы на кристаллизацию фосфатов кальция из плазмы крови человека.....	98
<i>Диденко Н. А.</i> Исследование синдрома обструктивного апноэ сна с помощью факторных моделей и дисперсионных комплексов.....	103
<i>Карина В. Д.</i> Вытекающие моды диэлектрических волноводов.....	107
<i>Кокош Д. Ю.</i> Влияние термического нагрева на биологически активный фосфат кальция легированный кремнием.....	111
<i>Корнеева М. Ю.</i> Фармакокинетическое моделирование и дозиметрическое планирование радионуклидной терапии костных метастазов.....	115
<i>Левицкая Е. А.</i> Особенности кристаллизации оксалатных почечных камней в физиологическом модельном растворе.....	119
<i>Лопандина А. А.</i> Применение электростатической силовой микроскопии для определения диэлектрической проницаемости гемоглобина на уровне индивидуальных молекул.....	123
<i>Отмахов К. А.</i> Применение метода распространения луча для расчета полей направляемых мод в оптическом модуляторе.....	127

<i>Пастушенко И. А.</i> Стандартизация тепловизионных измерений для клинических исследований передней поверхности шеи .....	131
<i>Подлинова А. А.</i> Исследование электрофизических свойств азот-металлосодержащих пленок поливинилена, полученных методом Spin-Coating .....	134
<i>Тимашев К. А., Москвитин А. В.</i> Исследование плотности теплового потока на предплечье человека .....	138
<i>Филонина Е. В.</i> Оптические свойства пленок диоксида кремния, полученных золь-гель методом .....	143
<i>Хлебникова О. А.</i> Изучение температурного распределения по поверхности голени при дозированной физической нагрузке в тренировочном процессе начинающих спортсменов .....	147
<i>Шефер К. И.</i> Расчет полей направляемых мод в полосковом диэлектрическом волноводе при наличии механических напряжений .....	151
<i>Шиц А. П.</i> Оценка влияния факторов на степень сердечно-сосудистых заболеваний при дисплазии соединительной ткани посредством дискретных дисперсионных комплексов .....	155
<i>Шмидт А. А.</i> Окисление меди и медных сплавов после облучения мощным ионным пучком .....	159
<i>Шулус И. К.</i> Особенности морфологии и электрических свойств полианилина, допированного додецилбензолсульфокислотой в присутствии растворителя .....	163
<i>Якунин Е. В.</i> Моделирование теплофизических процессов в структуре консольного калориметрического биосенсора .....	167
<i>Свердлова А. А.</i> Анализ формирования тепловых потоков в тонких образцах при воздействии импульсным лазерным пучком.....	171

## СЕКЦИЯ

### ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

<i>Паламарчук И. В.</i> Синтез новых производных 5-метил-7-фенилоксазоло [5,4-b]пиридина .....	175
--	-----

## Организационный комитет

---

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

## Секция

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИСКРЕТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

---

## РАСЧЕТ ТЕЧЕНИЯ В РИШЕТКЕ ТОНКИХ ПРОФИЛЕЙ

**Ж. А. Алин**

*Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент А. С. Толстуха*

В настоящее время существует динамично развивающийся класс задач обтекания решетки профилей по определению гидродинамических реакций на профиле. В данной работе представлен способ расчета течения в решетке тонких профилей с использованием метода конечных элементов. Эта задача многократно рассматривалась в работах [1–3], а данная работа отличается тем, что в качестве входных данных используются результаты продувок физического эксперимента, учитывающие оптимальные углы атаки и соответствующие им углы отставания воздушного потока [5]. Несмотря на то, что течение в проточной части лопаточной машины является сложным пространственным движением, имеет важное значение рассмотрение упрощенной модели течения в плоских межлопаточных каналах. Целью данной работы являются моделирование течения потока в решетке тонких профилей и разработка методики расчета основных параметров и реакций на профиле. Для этого ставится краевая задача и вводятся граничные условия, учитывающие особенности течения.

*Ключевые слова:* установившееся течение в решетке, безвихревое течение, метод конечных элементов, метод сопряженных градиентов.

Будем рассматривать стационарное течение идеальной однородной несжимаемой жидкости в области, ограниченной поверхностями непротекания, втекания и вытекания жидкости.  $u(x)$  – скорость в точке  $x$ . Уравнение неразрывности жидкости имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \operatorname{div}(\rho u). \quad (1)$$

Введем следующие предположения для движения жидкости:

- массовые силы пренебрежимо малы,
- жидкость несжимаемая и невязкая, тогда из уравнения, неразрывности следует  $\operatorname{div}(\rho u) = 0$  и  $\rho = \operatorname{const}$ ,
- движение жидкости установившееся, т. е.  $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ ,
- движение жидкости безвихревое,
- жидкость теплоизолированная и изэнтропическая.

Поскольку движение жидкости потенциально, то решение  $u(x)$  будем искать в виде  $u(x) \equiv \nabla \Phi$ , где  $\Phi = \Phi(x)$  – потенциал скоростей, являющийся решением для задачи:

$$\begin{cases} \Delta \Phi = 0, & x \in \Omega; \\ \nabla \Phi \cdot n = 0, & x \in T; \\ \nabla \Phi \cdot n = u_0, & x \in \Gamma_0; \\ \nabla \Phi \cdot n = u_1, & x \in \Gamma_1; \end{cases} \quad (2)$$

где  $\Omega$  – область задачи,  $T$  – граница непротекания,  $\Gamma_0, \Gamma_1$  – границы втекания и вытекания соответственно,  $n = n(x)$  – внешняя нормаль к области задачи. Условие согласования:

$$\int_{\Omega} \Phi dx = 0. \quad (3)$$

Основные элементы и геометрические параметры решеток профилей осевого компрессора приведены на рисунке.

Так как шаг решетки  $t$ , ее густота  $b/t$  и угол установки являются самыми значимыми параметрами, будем исследовать их влияние на течение в решетке.

Поставленную задачу будем решать методом конечных элементов [4]. Поскольку область задачи имеет периодические поверхности, то производится специальная нумерация узлов в сетке для удовлетворения условиям периодичности. Согласно методу взвешенных невязок решение аппроксимируется набором базисных функций. В результате задача сводится к системе алгебраических уравнений, которая будет решена методом сопряженных градиентов.

В связи с тем, что матрица системы имеет разреженный ленточный вид, применялись методы сжатия для оптимизации вычислений и экономии памяти. Для моделирования течения была разработана программа, в которой были учтены все теоретические расчеты и реализован алгоритм численного решения задачи. Так

как результат работы программы представляет собой очень большой объем данных, а значения переменных в узлах не всегда физичны, то необходимо извлечь значащую численную информацию и отобразить ее в графической форме для облегчения ее восприятия и интерпретации.

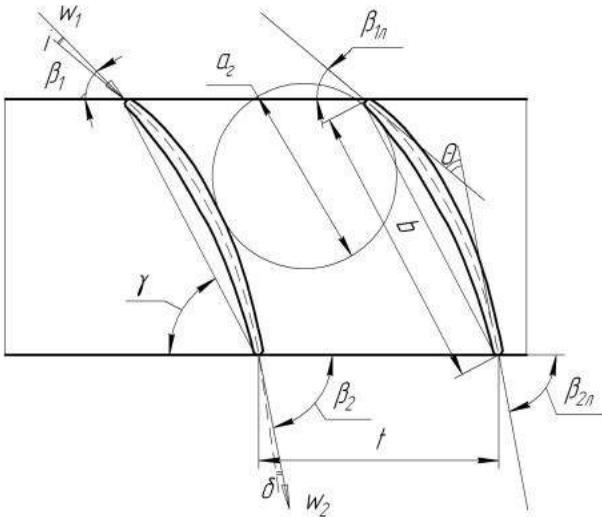


Схема компрессорной решетки

В данной работе был получен результат при оптимальных углах атаки и отставания воздушного потока, были вычислены скорость и давление на кромках профиля, изучены влияние основных параметров решетки на эффективность работы лопаточной машины.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Файзуллин Р.Т.* Расчет методом конечных элементов нестационарных аэродинамических характеристик решеток в дозвуковом потоке идеального газа // *Аэроупругость турбомашин: сб. статей.* Новосибирск, 1984.

[2] *Faizullin R.T., Tolstukha A.S.* Unsteady 2 and 3-dimensional Calculations in Cascades / *Unsteady Aerodynamics of Turbo-machines.* Tokyo: Elsevier, 1995. P 39–53.

[3] *Толстуха А.С.* Обтекание решеток произвольных лопастей идеальной несжимаемой жидкостью // Математические структуры и моделирование. Омск: ОмГУ, 2003. Вып. 11. С. 67–87.

[4] *Зенкевич О., Морган К.* Конечные элементы и аппроксимация. М., 1986. С. 93.

[5] *Холщевников К.В., Емин О.Н., Митрохин В.Т.* Теория и расчет авиационных лопаточных машин. М., 1986. С. 147–158.

---

Жаслан Аменгельдович Алин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
ИМИТ, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
alin.jaslan@mail.ru

# ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОЙ ЗАДАЧИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ГРАФА

А. И. Гульченко

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

В работе рассматривается задача кластеризации графа. Для задачи кластеризации графа с частичным обучением, в которой число кластеров равно двум, предложен приближенный полиномиальный алгоритм с доказанной гарантированной оценкой точности.

*Ключевые слова:* граф, кластеризация, NP-трудная задача, приближенный алгоритм, гарантированная оценка точности.

## Введение

В современном мире часто возникают задачи, в которых требуется распределить большой объем информации на несколько групп. Например, в задачи бухгалтера входит сортировка бумаг по их содержанию: договоры с поставщиками, контракты с контрагентами, расчетные бумаги и так далее. В сети интернет используются алгоритмы, относящие людей в различные группы по географическому и иным признакам.

В задачах кластеризации требуется разбить заданное множество объектов на несколько подмножеств (кластеров) только на основе сходства объектов друг с другом. Мера сходства оценивается по-разному и может быть определена различными способами. В машинном обучении задачи кластеризации относят к разделу обучения без учителя. Наряду с этим рассматриваются также задачи кластеризации с частичным обучением, в которых часть объектов (как правило, небольшая) изначально распределена по кластерам [3].

Исторически выделилось несколько вариантов задачи кластеризации графа, некоторые из которых открывались независимо и изучались под разными названиями (задача аппроксимации графа [2], Correlation Clustering [4], Cluster Editing [5]).

## 1. Определения и постановка задачи

Неориентированный граф  $G = (V, E)$  называется *обыкновенным*, если он не имеет петель и кратных ребер. Далее мы будем рассматривать только обыкновенные графы. Неориентированный

граф называется *кластерным графом*, если каждая его компонента связности является полным графом.

Обозначим через  $N_G(v)$  *окрестность* вершины  $v$ , т.е. множество вершин графа  $G = (V, E)$ , смежных с вершиной  $v$ . Через  $M_k(V)$  обозначим множество всех кластерных графов на  $V$ , имеющих ровно  $k$  непустых компонент связности,  $2 \leq k \leq |V|$ .

Пусть  $G_1 = (V, E_1)$  и  $G_2 = (V, E_2)$  – обыкновенные графы, определенные на одном и том же множестве вершин  $V$ . *Расстоянием* между графами  $G_1$  и  $G_2$  принято считать число несовпадающих ребер, т.е.  $\rho(G_1, G_2) = |E_1 \Delta E_2| = |E_1 \setminus E_2| + |E_2 \setminus E_1|$ .

Рассмотрим следующую задачу кластеризации графа, которая является одной из формализаций задачи кластеризации с частичным обучением.

**Задача SGC<sub>k</sub>.** Дан неориентированный граф  $G = (V, E)$  и целое число  $k$ ,  $2 \leq k \leq |V|$ . Выделено множество попарно различных вершин  $X = \{x_1, \dots, x_k\}$ . Требуется найти такой граф  $M^* \in M_k(V)$ , что

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

причем минимум берется по всем кластерным графам  $M$ , в которых никакие две вершины множества  $X$  не принадлежат одному и тому же кластеру.

В работе [1] доказано, что задача SGC<sub>k</sub> является NP-трудной на кубических графах при любом фиксированном  $k \geq 2$ .

## 2. Алгоритм приближенного решения задачи SGC<sub>2</sub>

Если  $M \in M_2(V)$ , то будем записывать  $M = M(V_1, V_2)$ , где  $V_1, V_2$  – множества вершин компонент связности кластерного графа  $M$ .

### Алгоритм А

*Вход:* неориентированный граф  $G = (V, E)$ ,  $|V| = n$ .

*Выход:* кластерный граф  $M \in M_2(V)$  – приближенное решение задачи SGC<sub>2</sub>.

*Шаг 1.* Для каждой вершины  $u \in V$  определим граф  $M_u \in M_2(V)$ :

А) Если вершина  $u$  смежна одновременно с вершинами  $x_1, x_2$  и не совпадает ни с одной из них, то полагаем:

$$M'_u = M(V'_1, V'_2), \text{ где } V'_1 = (\{u\} \cup N_G(u)) \setminus \{x_1\}, \quad V'_2 = V \setminus V'_1,$$

$M_u'' = M(V_1'', V_2'')$ , где  $V_1'' = (\{u\} \cup N_G(u)) \setminus \{x_2\}$ ,  $V_2'' = V \setminus V_1''$ .

Далее, если  $\rho(G, M_u') \leq \rho(G, M_u'')$ , то полагаем  $M_u = M_u'$ , иначе  $M_u = M_u''$ .

**Б)** Если вершина  $u$  не смежна одновременно с  $x_1, x_2$  и не совпадает ни с одной из них, то полагаем:

$M_u' = M(V_1', V_2')$ , где  $V_1' = (\{u\} \cup N_G(u)) \cup \{x_1\}$ ,  $V_2' = V \setminus V_1'$ ,  
 $M_u'' = M(V_1'', V_2'')$ , где  $V_1'' = (\{u\} \cup N_G(u)) \cup \{x_2\}$ ,  $V_2'' = V \setminus V_1''$ .

$V_1''$ .  
 Далее, если  $\rho(G, M_u') \leq \rho(G, M_u'')$ , то полагаем  $M_u = M_u'$ , иначе  $M_u = M_u''$ .

**В)** Если вершина  $u$  смежна ровно с одной из вершин  $x_1$  или  $x_2$  и не совпадает с другой, то полагаем:

$M_u = M(V_1, V_2)$ , где  $V_1 = \{u\} \cup N_G(u)$ ,  $V_2 = V \setminus V_1$ .

**Г)** Пусть вершина  $u$  совпадает с одной из вершин  $x_1$  или  $x_2$ .

Тогда, если  $u = x_1$ , то  $M_u = M(V_1, V_2)$ , где

$V_1 = (\{u\} \cup N_G(u)) \setminus \{x_2\}$ ,  $V_2 = V \setminus V_1$ ,

иначе, если  $u = x_2$ , то  $M_u = M(V_1, V_2)$ , где

$V_1 = (\{u\} \cup N_G(u)) \setminus \{x_1\}$ ,  $V_2 = V \setminus V_1$ .

*Шаг 2.* Среди всех графов  $M_u$  выберем такой граф  $M \in \mathbf{M}_2(V)$ , что

$$\rho(G, M) = \min_{u \in V: M_u \in \mathbf{M}_2(V)} \rho(G, M_u).$$

*Конец алгоритма.*

Доказана следующая гарантированная оценка точности предложенного алгоритма.

**Теорема.** Пусть  $n \geq 3$ . Тогда для любого  $n$ -вершинного графа  $G = (V, E)$  верно неравенство

$$\rho(G, M) \leq \left(3 - \frac{6}{n}\right) \rho(G, M^*),$$

где  $M \in \mathbf{M}_2(V)$  – кластерный граф, построенный алгоритмом,  $M^* \in \mathbf{M}_2(V)$  – оптимальное решение задачи  $\mathbf{SGC}_2$  на графе  $G$ .

### ЛИТЕРАТУРА

[1] Ильев В.П., Ильева С.Д. О задачах кластеризации графов // Вестник Омского университета. 2016. № 2. С. 16–18.

- [2] *Ильев В.П., Фридман Г.Ш.* К задаче аппроксимации графами с фиксированным числом компонент // Доклады АН СССР. 1982. Т. 264, № 3. С. 533–538.
- [3] *Bair E.* Semi-supervised clustering methods // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics. 2013. Vol. 5, no 5. P. 349–361.
- [4] *Bansal N., Blum A., Chawla S.* Correlation clustering // Machine learning. 2004. Vol. 56. P. 89–113.
- [5] *Ben-Dor A., Shamir R., Yakhimi Z.* Clustering gene expression patterns // J. Comput. Biol. 1999. Vol. 6, no 3–4. P. 281–297.

---

Анастасия Ивановна Гутьченко,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
ИМИТ, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
441879632@mail.ru

## НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ЗАДАЧИ ОДНОГО СТАНКА С ВРЕМЕНАМИ ПОСТУПЛЕНИЯ РАБОТ

К. А. Черных

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

Рассматривается задача минимизации средневзвешенного времени завершения выполнения работ на одном станке. Для каждой работы известен срок поступления работ в систему и длительность выполнения. Возможны прерывания. При произвольных длительностях работ задача NP-трудна в сильном смысле. Если длительности всех работ совпадают, то ее вычислительная сложность неизвестна. В работе излагаются важные свойства задачи.

*Ключевые слова:* теория расписаний, одностадийные системы, прерывание.

На единственной машине необходимо выполнить  $n$  работ. Заданы моменты поступления в систему  $r_i$ , длительности выполнения  $p_i$  и веса работ  $\omega_i$ ,  $i=1,2,\dots,n$ . Машина в каждый момент времени может выполнять только одну работу. Требуется найти расписание выполнения работ, при котором взвешенная сумма моментов их завершения  $\sum \omega_i C_i$  будет наименьшей.

Если прерывания запрещены, то, даже для единичных весов, задача  $1 | r_i | \sum C_i$  NP-трудна [1]. Но при равных длительностях задача  $1 | r_i; p_i = p | \sum \omega_i C_i$  полиномиально разрешима [2]. При возможности прерываний выполнения работ для задачи  $1 | r_i; pmtn | \sum C_i$  существует полиномиальный алгоритм [3], но для произвольных весов задача  $1 | r_i; pmtn | \sum \omega_i C_i$  является NP-трудной в сильном смысле [4]. Сложность задачи с одинаковыми длительностями  $1 | r_i; p_i = p; pmtn | \sum \omega_i C_i$  неизвестна. Ниже описываются свойства этой задачи.

### Некоторые свойства оптимальных решений

В задаче с прерываниями оптимальному набору моментов завершения работ  $(C_1, C_2, \dots, C_n)$  может соответствовать бесконечно много расписаний выполнения отдельных фрагментов работ. Для того чтобы избежать такой множественности рассматриваются оптимальные расписания с определенными свойствами. Важно, что эти свойства не исключают друг друга, то есть **существует** оптимальное расписание, обладающее следующими известными свойствами:

**Свойство 1.** Все моменты прерываний работ принадлежат множеству  $\{r_1, r_2, \dots, r_n\}$ . Более того, если в таком расписании имеется прерывание в момент  $r_i$ , то в этот момент начинает выполнение работа  $i$ . Соответственно, число прерываний не может быть больше чем  $n-1$ .

**Свойство 2.** Одна работа может быть прервана  $n-1$  раз.

**Свойство 3.** Может быть прервана  $n-1$  работа.

**Свойство 4.** В оптимальном расписании работа с наибольшим весом выполняется непрерывно.

**Свойство 5.** Если  $\omega_i < \omega_j$  и  $r_i \geq r_j$ , то в оптимальном расписании работа  $j$  целиком выполняется раньше работы  $i$ .

Это позволяет ввести на множестве работ частичный порядок. Если работы  $i$  и  $j$  таковы, что  $\omega_i < \omega_j$  и  $r_i < r_j$ , то такие работы *независимы* и порядок их выполнения может быть различным.

**Лемма о фрагментах.** Если существует оптимальное расписание, в котором работа  $j$  прерывает работу  $i$ , то существует оптимальное расписание, в котором работа  $j$  целиком завершится до возобновления работы  $i$ .

**Лемма о порядке.** Пусть работы  $i$  и  $j$  независимы, то есть  $r_i < r_j$  и  $\omega_i < \omega_j$ . Если в оптимальном расписании  $S_i \geq r_j$ , то  $S_i \geq C_j$ , где  $S_i$  — время начала выполнения работы  $i$ .

**Теорема о трех работах.** Если интервалы  $(r_i, r_i + p)$  трех работ попарно пересекаются, то существует оптимальное расписание, в котором работа с наибольшим весом не может завершиться последней из них.

Доказательство основано на прямом сравнении длины расписаний возможных вариантов порядка выполнения работ. Из теоремы вытекает, что, если интервалы  $(r_i, r_i + p)$  попарно пересекаются для некоторого подмножества работ, то работа с наибольшим весом будет выполняться либо первой, либо второй.

### **Алгоритм решения задачи**

Упорядочиваем работы в порядке неубывания времен поступления  $r_1 \leq r_2 \leq \dots \leq r_n$ . Если времена поступления совпадают, то по неубыванию весов.

Алгоритм заключается в последовательном просмотре моментов  $r_i$  и ветвлении вариантов в случае конфликта работ. Важными свойствами для реализации алгоритма являются следующие:

**Утверждение 1.** В любом варианте конфликт происходит между работой, выполняемой в момент  $r_i$ , и работой  $i$ .

**Утверждение 2.** В момент окончания  $C_j$  некоторой работы  $j$  однозначно определяется какая из ранее начатых работ продолжит свое выполнение.

**Следствие.** Для построения оптимального расписания достаточно рассмотреть  $2^{n-1}$  вариантов расписаний.

Основной целью дальнейших исследований является сокращение числа вариантов. В частности, в случае попарного перекрытия интервалов  $(r_i, r_i + p)$  для всех работ число вариантов удалось сократить до  $n^2$ . Полиномиальное число вариантов также получается в случае, когда интервалы  $(r_i, r_i + p)$  перекрываются только у одной пары работ.

### **ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Lenstra J.K., Rinnooy Kan A.H.G., Brucker P.* Complexity of machine scheduling problems // *Ann. of Discrete Math.* 1977. № 1. P. 343–362.

[2] *Baptiste P.* Scheduling equal-length jobs on identical parallel machines // *Discrete Appl. Math.* 2000. № 103 (1). P. 21–32.

[3] *Baker K.R.* Introduction to Sequencing and Scheduling // John Wiley and Sons, New York, 1974.

[4] *Labetoulle J., Lawler E.L., Lenstra J.K., Rinnooy Kan A.H.G.* Preemptive scheduling of uniform machines subject to release dates // In *Progress in combinatorial optimization* (Waterloo, Ont., 1982). P. 245–261. Academic Press, Toronto, Ont. 1984.

---

Ксения Андреевна Черных,  
Омский филиал Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,  
1 год аспирантуры,  
644099, Омск, ул. Певцова, 13, (3812) 236567,  
ksech@bk.ru

## Секция

# ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

---

### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАТЕРИАЛА И ОРИЕНТАЦИИ ГРАНИ НА ПРОЦЕСС АДСОРБЦИИ МОНОСЛОЙНОЙ ПЛЕНКИ СПЛАВА $Fe_xNi_{1-x}$

**А. Б. Аугалиева**

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

В данной работе проводится исследование активированной адсорбции ферромагнитных пленок в рамках метода функционала спиновой плотности (МФСП) с учетом температурных эффектов и неоднородного распределения намагниченности. Рассчитывалась энергия адсорбции для систем  $Fe_xNi_{1-x}/W$  и  $Fe_xNi_{1-x}/Au$  с ориентацией поверхностной грани подложки с низкими индексами Миллера в зависимости от концентрации компонент сплава и параметра покрытия с учетом эффектов перемешивания атомов адсорбата и атомов субстрата.

*Ключевые слова:* энергия адсорбции, метод функционала спиновой плотности, монослойные пленки.

Ультратонкие ферромагнитные пленки являются объектом интенсивных исследований [1–2], что во многом определяется возможностями их применения. Важное практическое применение находят не только пленки чистых металлов, но и их сплавы, чьи свойства тесно связаны с магнитным состоянием. Сплав Fe и Ni и называют пермаллой. Классический пермаллой – это сплав с концентрацией никеля около 75 %. Такой классический пермаллой обладает самыми высокими магнитными свойствами, которые достигаются за счет специального метода производства.

В настоящей работе была применена методика расчета энергетических характеристик активированной адсорбции ферромагнитных пленок, основанная на использовании метода функционала спиновой плотности с учетом температурных эффектов [3] на случай двухкомпонентных сплавов на базе представлений о бинарных системах. Исходные параметры для сплава определялись как суперпозиция соответствующих параметров для компонент сплава с коэффициентами пропорциональными концентрации компонентов.

Модельная система представляет собой пленку толщиной  $h$  адсорбируемую на плоской металлической поверхности с областью перемешивания толщиной  $l$ , задаваемых соотношениями:

$$h = pd^a + (1 - p)d^s \quad l = p'd^a + (1 - p')d^s, \quad (1)$$

где  $d^a, d^s$  – расстояние между плотноупакованными гранями,  $p, p'$  – относительная доля магнитных атомов в пленке и в подложке.

Энергии адсорбции соответствует работа, приходящаяся на один адсорбированный атом, необходимая для удаления адсорбированной частицы с поверхности подложки [3]:

$$E_{ads}(\theta) = (\sigma(\infty) - \sigma)/n_s^a, \quad (2)$$

где межфазная энергия  $\sigma$  и поверхностная концентрация  $n_s^a$  являются функцией параметра покрытия  $\theta$ , определяющим степень заполнения атомами адсорбата поверхности подложки.

Для описания температурной зависимости относительной намагниченности  $m(T)$  применялась двумерная XY-модель. Для температуры Кюри использовалось выражение:

$$T_c(\theta) = \theta[xT_c^{Fe}(\theta = 1) + (1 - x)T_c^{Ni}(\theta = 1)]. \quad (3)$$

На рис. 1 представлены графики зависимости доли адатомов в пленке от параметров покрытия  $\theta$  при концентрации компонент сплава  $X = 0.5; 0.75$  при  $T = 300K$  для систем  $Fe_xNi_{1-x}/W$  и  $Fe_xNi_{1-x}/Au$  для различных ориентаций поверхностной грани.

Из рис. 1 видно, что при  $X = 0.5$  и  $\theta < 0.8$  на  $W$  подложке образуется монослойная пленка при всех ориентациях поверхности. При увеличении концентрации и параметра покрытия наблюдается перемешивание особенно для рыхлой грани. Для подложки из  $Au$  наблюдается обратная ситуация.

На рис. 2 представлены графики зависимости энергии адсорбции от концентрации компонент сплава при  $\theta = 1$  а)  $T = 0$  б)  $T = 300$ .

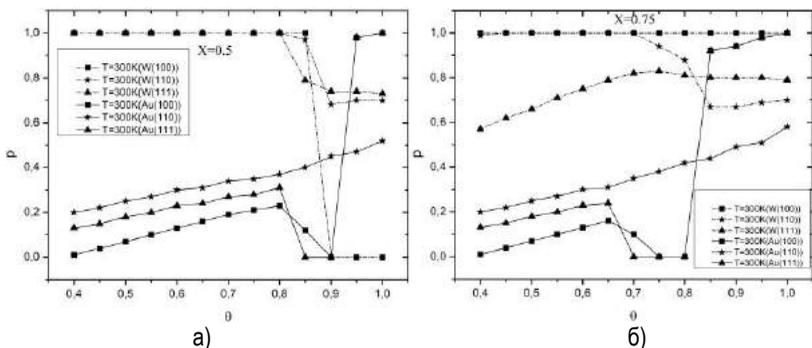


Рис. 1. Зависимость доли адатомов в пленке от параметров покрытия  $\theta$  при концентрации компонент сплава а)  $X = 0.5$  б)  $X = 0.75$

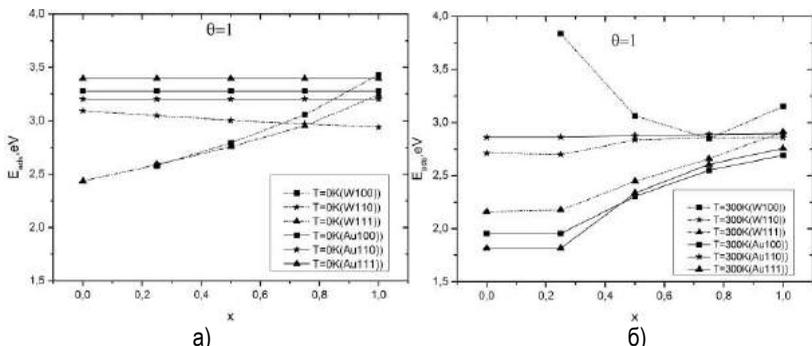


Рис. 2. Зависимость энергии адсорбции от концентрации компонент сплава при  $\theta = 1$  при а)  $T = 0$ ; б)  $T = 300K$

При  $T = 0K$  энергия адсорбции слабо меняется с ростом концентрации железа  $X$  для всех систем кроме рыхлых граней  $W$  подложки, для которой наблюдается увеличение энергии адсорбции. При  $T = 300K$  для грани  $[110]$  энергия адсорбции остается постоянной при росте концентрации. Для  $W[100]$  при  $T = 300K$   $E_{ads}$  имеет минимум при  $X = 0.75$ . Для всех остальных случаев при  $T = 300K$   $E_{ads}$  плавно увеличивается.

На рис. 3 представлены данные зависимости энергии адсорбции от параметра покрытия  $\theta$  при концентрации компонент сплава 0.5; 0.75 при  $T = 300K$ .

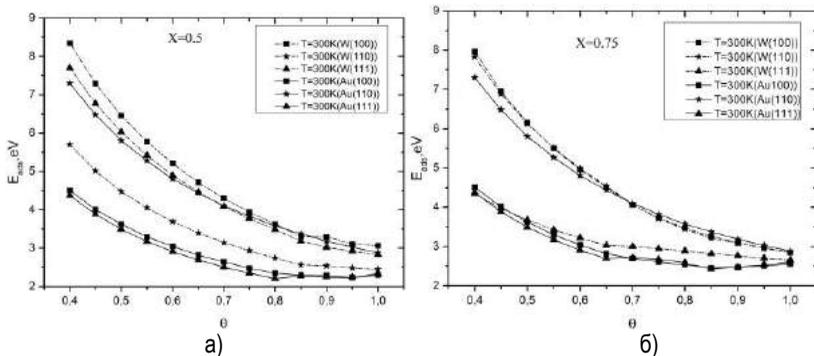


Рис. 3. Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия  $\theta$  при концентрации компонент сплава а)  $X = 0.5$  б)  $X = 0.75$  при  $T = 300\text{K}$

Из данных приведенных на рис.3 можем заметить, что энергия адсорбции уменьшается с ростом параметра покрытия  $\theta$  для всех представленных систем. Энергия адсорбции для плотноупакованной грани минимальна, как для грани подложки  $W[110]$  так и для  $Au[111]$ . Энергия адсорбции атомов сплава на подложке из  $W$  больше, чем на подложке  $Au$  для соответствующих граней.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Pepperhoff W., Acet M. Constitution and Magnetism of Iron and Its Alloys.* Springer: Berlin, 2010.
- [2] *Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G. Magnetism in ultrathin film structures // Reports on Progress in Physics.* 2008. Vol. 71. P. 056501–056578.
- [3] *Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А. Теоретические и экспериментальные методы в физике поверхности.* Омск, 2009.

---

Алия Булатовна Аугалиева,  
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
 физический факультет, 1-й курс магистратуры  
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
 augalievaa@mail.ru

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

К. Ю. Беломоин

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

В статье проведено моделирование критической релаксации намагнитченности в трехмерной модели Изинга, разбавленной немагнитными атомами примеси. Изучены кубические системы с линейным размером  $L = 144$  и концентрациями спина  $p = 0,5$ ;  $p = 0,6$ ;  $p = 0,8$ ;  $p = 0,95$ . Динамический критический индекс  $z$  определяется методом Монте-Карло совмещенным с методом динамической ренормализационной группы.

*Ключевые слова:* трехмерная модель Изинга, динамический критический индекс.

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 приближении к точке фазового перехода.

Под критической динамикой чаще всего понимают, как раздел теории критического поведения и статистической физики, описывающий динамические свойства физической системы в или вблизи критической точки.

Является продолжением и обобщением критической статистики, позволяя описывать величины и характеристики системы, которые нельзя выразить лишь через одновременные равновесные функции распределения. Такими величинами являются, например, коэффициенты переноса, скорости релаксации, разновременные

корреляционные функции, функции отклика на зависящие от времени возмущения.

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  $lgm_b = k_b lgt + n_b$  путем их приведения через точки пересечения  $k_b lgt + n_b$  в середине интервалов  $\Delta m_b$ . В результате формула для определения  $z$  переходит в выражение: [6]

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

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 моделирования на рис. 1 уже усредненное значение по 1000 прогонам.

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

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

Для рассмотренных примесных систем получены следующие результаты:  $z(0,95) = 2,19 \pm 0,006$ ,  $z(0,8) = 2,28 \pm 0,005$ ,  $z(0,6) = 2,57 \pm 0,008$ ,  $z(0,5) = 2,65 \pm 0,006$ .

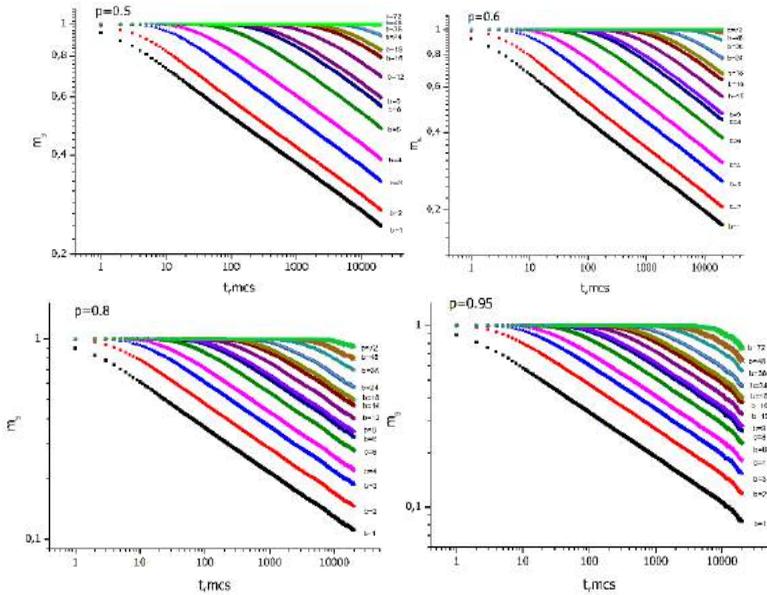


Рис. 1. Изменение  $m_1$  и  $m_b$  намагниченности от времени при  $p = 0,5$ ;  $p = 0,6$ ;  $p = 0,8$ ;  $p = 0,95$ .

### 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	2.5926	2,5104	2,2676	2,2401
9	2.6122	2,5367	2,2750	2,2263
12	2.6651	2,5902	2,2764	2,2147
16	2.6959	2,6247	2,3014	2,1990
18	2.6927	2,6287	2,3062	2,2025

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 увеличе-

нием  $b$ . С другой стороны, изменения перенормированной намагниченности  $mb$  со временем уменьшаются при больших значениях  $b$ , следовательно, значения  $z$  возрастают.

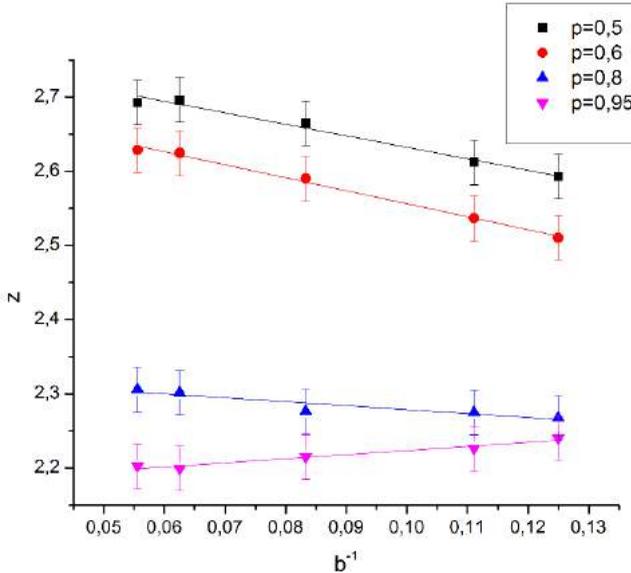


Рис. 2. Зависимость динамического показателя  $z$  от  $b$  для различных спиновых концентраций  $p$

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

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мицка А.И., Шубиной Т.С. Фазовые переходы и критические явления / под ред. С.В. Вонсовского. М.: Мир, 1973. 419 с.
- [2] Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир, 1973. 425 с.
- [3] Prudnikov V.V., Vakilov A.N., Zolotarev S.A. Journal of Physics: Conference Series 510 (2014) 012019.
- [4] Прудников В.В., Вакилов А.Н. ЖЭТФ. 1993. Т. 103, вып. 3. С. 962–969.
- [5] Jan N., Moseley L.L., Stauffer D. Dynamic Monte Carlo renormalization group // J. Stat.

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

---

Константин Юрьевич Беломоин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
locobv@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 П. В. Прудников*

Представлены результаты численного исследования методом Монте-Карло особенностей неравновесного поведения мультислойной магнитной структуры с магнитными пленками, свойства которых описываются моделью Изинга. Для структур с толщинами пленок  $N = 2; 4$  монослоев был осуществлен расчет временных зависимостей автокорреляционной функции при эволюции системы из начального низкотемпературного состояния системы и временах ожидания  $t_w = 30; 50; 100$ . Анализ полученных зависимостей выявил эффекты старения, характеризующиеся замедлением корреляции системы с ростом времени ожидания. Показано, что эффекты старения осуществляются в структурах с ультратонкими магнитными пленками не только вблизи критической температуры, но и во всей низкотемпературной фазе.

*Ключевые слова:* метод Монте-Карло, автокорреляционная функция, эффекты старения, модель Изинга.

Исследование макроскопических статистических систем, характеризующих медленной динамикой, и изучение свойств структур, состоящих из ультратонких магнитных пленок, вызывают повышенный интерес исследователей [1] как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения [2] уже несколько десятков лет. При медленной эволюции данных систем из неравновесного начального состояния в них наблюдаются эффекты старения и такое явление, как нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы.

Известно, что вблизи температуры фазового перехода второго рода время релаксации системы является аномально большой величиной, в результате чего статистическая система в критической точке не достигает равновесия в течение всего процесса ре-

лаксации. При таких условиях рассматриваемая система демонстрирует ряд интересных особенностей своего неравновесного поведения, такие как эффекты старения [1]. Эффекты старения проявляются на неравновесном этапе эволюции системы при временах  $t \ll t_{rel}$  и выражаются в осуществлении двухвременных зависимостей корреляционной функции от времени ожидания  $t_w$  и времени наблюдения  $t - t_w$ . Время ожидания определяется временем, прошедшим 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 на данный момент особенности неравновесной критической динамики [1] могут служить основой для понимания и адекватной интерпретации экспериментальных данных, полученных для различных мультислойных магнитных структур [3]. В отличие от объемных систем, где эффекты старения проявляются вблизи критической точки, в магнитных сверхструктурах с наномасштабной периодичностью наблюдать особенности поведения систем с медленной динамикой можно в более широких температурных интервалах за счет эффектов, связанных с увеличенной в этих структурах характеристической корреляционной длиной спин-спиновых корреляций, приводящих к увеличению времени релаксации [4].

В представленной работе методом Монте-Карло было осуществлено моделирование неравновесного поведения мультислойных структур из магнитных изингоподобных пленок, разделенных немагнитной металлической пленкой. Толщина металлической прослойки подбирается таким образом, чтобы дальнедействующее и осциллирующее межслоевое обменное РККИ-взаимодействие между спинами ферромагнитных слоев носило эффективный антиферромагнитный характер. За счет этого взаимодействия намагниченности соседних ферромагнитных слоев ориентируются противоположно друг другу. Значение обменного интеграла  $J_1$ , определяющего взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки, бралось  $J_1 / k_B T = 1$ , а взаимодействие между пленками задавалось значение  $J_2 = -0.5 J_1$ . Линейные размеры магнитных пленок выбирались  $L = 48$  и толщинами

$N = 2; 4$  (в единицах моноатомных слоев) и накладывались периодические граничные условия в плоскости пленки.

Гамильтониан рассматриваемой системы задавался выражением:

$$H = -J_k \sum_{i,j} S_i^z S_j^z, \quad (1)$$

где  $J_k = J_1$  – интеграл обменного взаимодействия для системы изинговских спинов  $S_i^z = \pm 1$  внутри ферромагнитных пленок и  $J_k = J_2$  для обменного взаимодействия спинов между пленками.

Был проведен расчет двухвременной зависимости автокорреляционной функции при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1$  при временах ожидания  $t_w = 30; 50; 100$  с температурами теплового резервуара равными критическим  $T_c(N)$ , зависящими от толщины  $N$  ферромагнитных пленок.

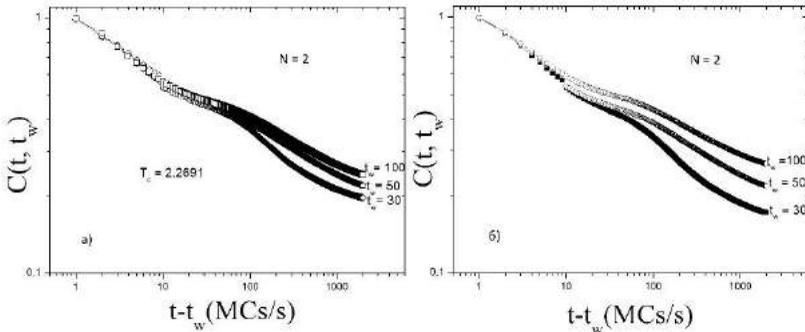


Рис. 1. Временная зависимость автокорреляционной функции при временах ожидания  $t_w = 30; 50; 100$  для структур с толщинами пленок  $N = 2$  при  $T_c(N)$  (а) и  $T_c(N)/2$  (б).

Графики, результатов исследования, представленные на рис. 1 и 2, демонстрируют наличие в структурах эффектов старения, т. е. рост времени корреляции с увеличением времени ожидания  $t_w$  – “возраста” системы. Кроме того, анализ графиков показывает, что эффекты старения возникают в мультислойных структурах не только при критических температурах, но и при температурах  $T = T_c(N)/2$  с усилением эффектов старения.

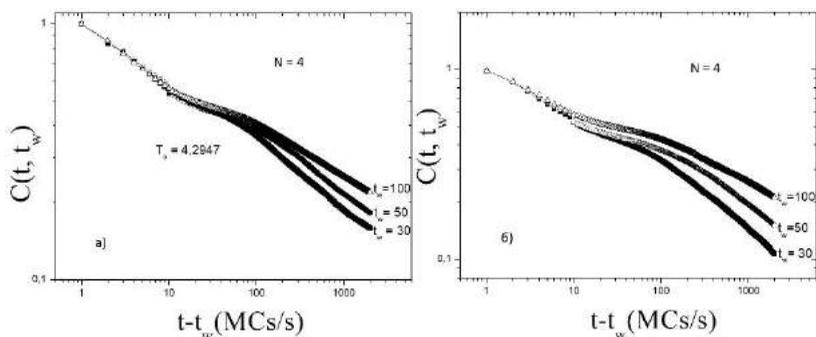


Рис. 2. Временная зависимость автокорреляционной функции при временах ожидания  $t_w=30;50;100$  для структур с толщинами пленок  $N = 4$  при  $T_c(N)$  (а) и  $T_c(N)/2$  (б).

Существование неравновесных эффектов важно учитывать при практическом использовании мультислойных магнитных структур в качестве элементов приборов спинтроники с эффектами гигантского магнитного сопротивления [4].

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания // УФН. 2017. Т. 187. С. 817–855.
- [2] Vaz C.A. F., Bland J.A.C., Lauhoff G. Magnetism in ultrathin film structures // Rep. Prog. Phys. 2008. Vol. 71. P. 056501–056578.
- [3] Mukherjee T., Pleimling M., Binek Ch. Probing equilibrium by nonequilibrium dynamics: aging in Co/Cr superlattices // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. 134425.
- [4] Прудников В.В., Прудников П.В., Пуртов А.Н., Мамонова М.В. Эффекты старения в неравновесном поведении мультислойных магнитных структур // Письма в ЖЭТФ. Т. 104. С. 797–805.

---

Максим Игоревич Болдырев,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а (3812) 644238,  
boldy.maksim@gmail.com

# РАСЧЕТ ПОСТОЯННЫХ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ В ОБЪЕМЕ

С. Н. Будько

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

В данной работе, в рамках первопринципных расчетов с использованием программного комплекса VASP и программного комплекса SPR-KKR, исследовано влияние постоянных решетки на обменные взаимодействия для ферромагнитных металлов, а именно для железа, кобальта и никеля.

*Ключевые слова:* VASP, SPR-KKR, обменное взаимодействие.

В ферромагнетиках при температуре меньше критической магнитные моменты атомов ориентируется параллельно друг другу [1]. Вследствие этого в твердом теле имеются области – домены с большими спонтанными магнитными моментами. Поэтому ферромагнитные пленки применяют в микроэлектронике и вычислительной технике в качестве магнитных носителей для записи и хранения информации в запоминающих устройствах. Яркими представителями ферромагнетиков являются железо, кобальт и никель. Исследование этих металлов позволяет получать ценную информацию о магнитных свойствах ферромагнетиков, углублять наши знания по многим вопросам в области магнетизма.

Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) – программа для моделирования материалов атомного масштаба из первых принципов [2]. В рамках VASP был применен метод проекционно-присоединенных волн (PAW) и псевдопотенциал в приближении GGA PBE.

В данной работе проводились расчеты в программном комплексе VASP постоянных решетки для ОЦК Fe, ГЦК Co и ГЦК Ni. Рассчитанные значения в сравнении с экспериментальными данными представлены в таблице 1.

Расчеты интегралов обменного взаимодействия проводились с использованием пакета SPR-KKR (спин-поляризованный релятивистский метод Корринги-Кона-Ростокера). Пакет SPR-

KKR позволяет рассчитать электронную структуру произвольных трехмерных периодических систем [6].

Т а б л и ц а 1

**Результаты расчетов постоянных решетки для ферромагнетиков в сравнении с экспериментальными данными**

a, Å	Fe	Co	Ni
Эксперимент	2,866 [3]	3,42[4]	3,52 [5]
VASP	2,833	3,517	3,513

Расчеты выполнялись в два этапа. На первом (программа `kkrcsf`) проводились самосогласованные расчеты *self-consistent field* (SCF) потенциала и волновых функций многоэлектронной системы. На втором (программа `kkrgen`) вычислялись функции Грина, которые применялись для вычисления обменного интеграла системы  $J_{ij}$ .

Основная идея метода ККР заключается в определении функции Грина для системы с фиксированной энергией. Для этого задается *t*-матрица, которая описывает рассеивания от каждого индивидуального атомного рассеивателя, охарактеризованное неперекрывающимися и пространственно ограниченными потенциалами. Совместное применение уравнения Дайсона, атомных *t*-матриц и структурных констант *G* позволяет задать так называемый оператор пути рассеяния  $\tau^{ij}$ . Интересующие нас обменные константы входят в гамильтониан Гейзенберга в следующем виде [6]:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j. \quad (1)$$

Для вычислений параметров магнитного обменного взаимодействия в методе Коринги-Кона-Ростокера (KKR), между парами атомов в рамках теории многократного рассеяния применяются формулы Лихтенштейна:

$$J_{ij} = \frac{1}{4\pi} \text{Im} \int^{E_f} dE \text{Trace} (t_{i\uparrow}^{-1} - t_{i\downarrow}^{-1}) \tau_{\uparrow}^{ij} (t_{j\uparrow}^{-1} - t_{j\downarrow}^{-1}) \tau_{\downarrow}^{ij}. \quad (2)$$

В таблице 2 представлены результаты расчета с помощью пакета SPR-KKR энергии системы  $E$ , спинового  $\mu_{spin}$  и орбитального магнитного момента  $\mu_{orb}$ .

Таблица 2

## Результаты расчетов энергии и магнитных моментов

	$E, \text{эВ}$	$\mu_{spin}, \mu_B$	$\mu_{orb}, \mu_B$	$N_1$	$N_2$
Fe	-2541,1897	2,2372	0,0513	8	6
Co	-2782,3245	1,5827	0,0713	12	6
Ni	-3036,8247	0,5985	0,0497	12	6

Рассчитанные в пакете SPR-KKR с экспериментальными  $a_{exp}$  и полученными нами  $a_{vasp}$  постоянными решетки (табл. 1) средние значения обменного интеграла для ближайших соседей  $\bar{J}_1$  и для следующих за ближайшими  $\bar{J}_2$  приведены в таблице 3. На рисунке изображена зависимость параметров обменного взаимодействия от расстояния между атомами ( $R_1 = 0,866 \times a$  для ОЦК,  $R_1 = 0,707 \times a$  для ГЦК,  $R_2 = 1,00 \times a$ ).

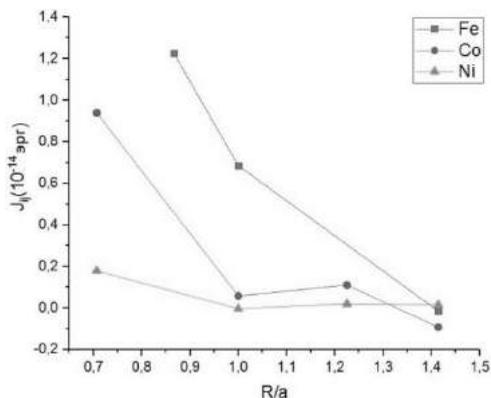
Таблица 3

## Результаты расчетов обменных интегралов

	$\bar{J}_1, 10^{-14} \text{эрг}$			$\bar{J}_2, 10^{-14} \text{эрг}$		
	Fe	Co	Ni	Fe	Co	Ni
$a_{exp}$	2,758	1,831	0,389	1,862	0,082	-0,009
$a_{vasp}$	2,674	2,047	0,179	1,493	0,127	-0,004

По результатам расчетов, приведенным в таблице 3, можно сделать следующие выводы. Наибольшим обменным взаимодействием обладает Fe. Для Fe и Co обменное взаимодействие носит ферромагнитный характер. У Ni же обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями имеет очень слабый антиферромагнитный характер  $J_1 = -0,004 \times 10^{-14} \text{эрг}$ .

Изменение постоянной решетки тем сильнее сказывается на значении обменного интеграла, чем он меньше. Так изменение постоянной решетки для Co на  $\Delta a = 0,1 \text{Å}$ , а для Ni всего на  $\Delta a = 0,007 \text{Å}$  приводит к изменению  $J_1$  на  $0,2 \times 10^{-14} \text{эрг}$ , что соответствует 10 % для кобальта и 54 % для никеля. Для железа  $\Delta a = 0,03 \text{Å}$  приводит к  $\Delta J_1 = 0,08 \times 10^{-14} \text{эрг} = 3 \%$ .



Зависимость обменных интегралов от расстояния

Исследования поддержаны грантами РФФИ № 17-02-00279 и № 18-42-550003. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики ОмГУ и ЦКП Центр данных ДВО РАН.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Квантово-статистическая теория твердых тел. Омск, 2014. 492 с.
- [2] Marsman G., Kresse M. VASP the GUIDE. Wien. 2000. P. 208.
- [3] Huhne T., Zecha C., Ebert H. Full-potential spin-polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker method implemented and applied to bcc Fe, fcc Co, and fcc Ni // Phys. Rev. 1998. В 58. 10238.
- [4] Haglund J., Fernandez Guillermet A., Grimvall G., Korling M., Theory of bonding in transition-metal carbides and nitrides // Phys. Rev. B 1993. 48. 11685.
- [5] Wijn H. P. J. Magnetic Properties of Metals. Berlin. 1991. P. 190.
- [6] Huhne T., Zecha C., Ebert H. A spin polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker (SPR-KKR) code for Calculating Solid State Properties: manual. Munchen, 2012. P. 108.

---

Сергей Николаевич Будько,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
serg.b.n@mail.ru

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК

**В. А. Драчев**

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

В данной работе проведено моделирование критического поведения в пленках с заданным линейным размером, но разными толщинами. Толщина пленок будет постоянно увеличиваться. Расчет критической температуры будет происходить с помощью кумулянта Биндера четвертого порядка и корреляционной длины.

*Ключевые слова:* критическая температура, кумулянт Биндера, корреляционная длина, магнитные ультратонкие пленки.

Критическая точка - это точка на фазовой плоскости, в которой оканчивается кривая фазового равновесия. Соответствующие ей температура и давление носят название критической температуры  $T_c$  и критического давления  $P_c$ . При температурах выше  $T_c$  и при давлениях больше  $P_c$  не существует различных фаз, и тело всегда однородно.

Расчет проводился по алгоритму Вольфа, с числом шагов 50000 МК, где 1 МК = 10 переворотам кластера. Использовался гамильтониан Изинга, вида:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N S_i S_j.$$

В данной работе рассматривался кумулянт Биндера четвертого порядка:

$$U = \frac{1}{2} \left( 3 - \frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} \right),$$

где,  $M^2$  – квадрат намагниченности,  $M^4$  – 4-я степень намагниченности. Скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают статистическое усреднение.

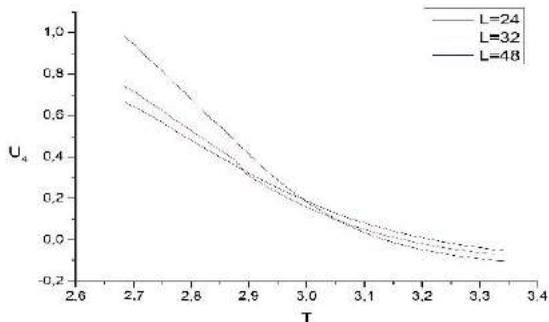


Рис. 1. Критическая температура пленок с линейным размером  $L = 24, 32, 48$ , с толщиной пленки  $N = 2$ .  $T_c = 2.965(085)$

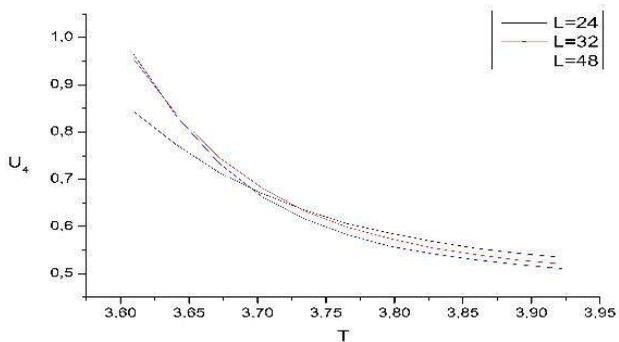


Рис. 2. Критическая температура пленок с линейным размером  $L = 24, 32, 48$ , с толщиной пленки  $N = 4$ .  $T_c = 3.68(05)$

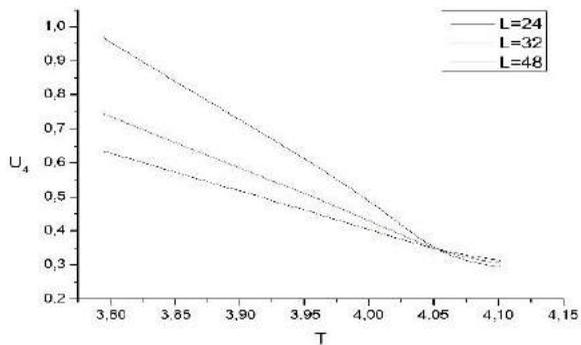


Рис. 3. Критическая температура пленок с линейным размером  $L = 24, 32, 48$ , с толщиной пленки  $N = 8$ .  $T_c = 4.055(005)$

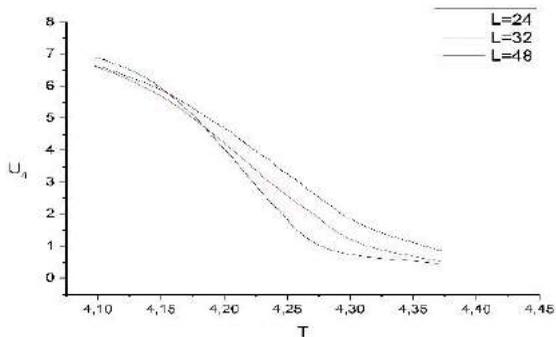


Рис. 4. Критическая температура пленок с линейным размером  $L = 24, 32, 48$ , с толщиной пленки  $N = 12$ .  $T_c = 4.13(03)$

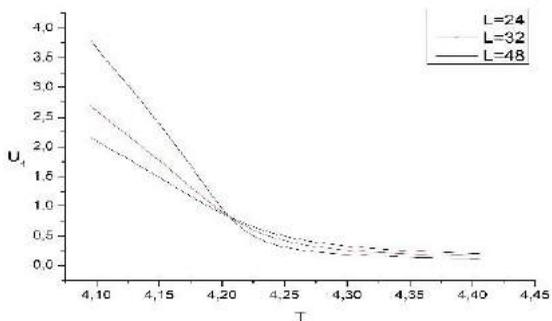


Рис. 5. Критическая температура пленок с линейным размером  $L = 24, 32, 48$ , с толщиной пленки  $N = 16$ .  $T_c = 4.205(005)$

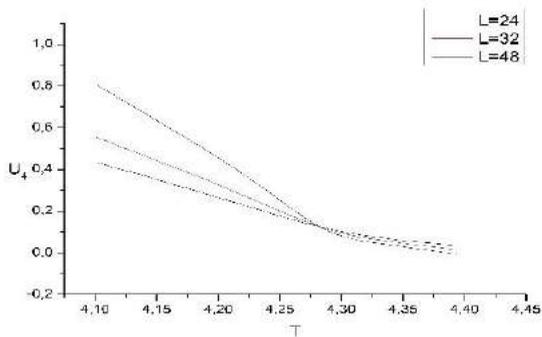


Рис. 6. Критическая температура пленок с линейным размером  $L = 24, 32, 48$ , с толщиной пленки  $N = 24$ .  $T_c = 4.25(005)$

Таблица 2

**Критическая температура и приведенная температура,  
от число монослоев**

$N$	$T_c(N)$	$1 - \frac{T_c(N)}{N_c(N \rightarrow \infty)}$
2	2.965	0.30443
4	3.68	0.13669
8	4.055	0.04872
12	4.13	0.03112
16	4.205	0.01353
24	4.25	0.00297

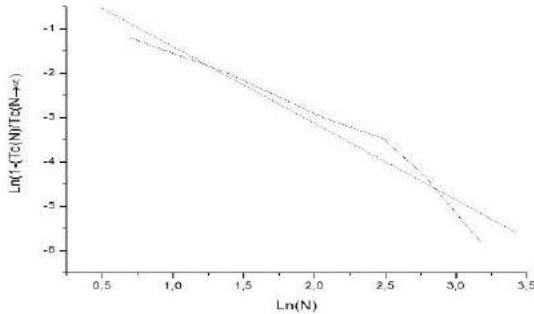


Рис. 7. Температурная зависимость, от пленок разной толщины

Относительное изменение температуры с ростом толщины можно описать с помощью соотношения:

$$\epsilon_l = 1 - \frac{T_c(N)}{T_c(N \rightarrow \infty)} = c_0 N^{-\lambda}.$$

Проведя представленные вычисления, получаем следующие значения  $\lambda = 1,73$ . Отсюда находим индекс  $\nu = 1 / \lambda$ .  $N = 0,57 \pm 0,2$ .

---

Вадим Анатольевич Драчев,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
wadim555@mail.ru

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПИНОВЫХ СИСТЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ МЕТОДОМ ВАНГА-ЛАНДАУ

К. Ю. Кайданович

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

В данной работе, был применен параллельный метод Ванга-Ландау к исследованию критических свойств трехмерной модели Гейзинберга. Разработан параллельный алгоритм, при помощи которого были получены плотности энергетических состояний для систем с размером  $L = 8, 16, 32$  и термодинамические величины, такие как внутренняя энергия, свободная энергия, энтропия и теплоемкость, намагниченность и восприимчивость.

*Ключевые слова:* алгоритм Ванга-Ландау, термодинамические величины, критические свойства.

В настоящее время существует достаточно много алгоритмов для исследования критических свойств спиновых систем. К ним можно отнести многосеточные алгоритмы, оверрелаксационные, алгоритмы, основанные на идеях ренормализационной группы, кластерные алгоритмы [1]. Так же для повышения эффективности используют различные гибридные алгоритмы. В частности, активно используются такие алгоритмы, как алгоритм Метрополиса [2], однокластерный алгоритм Вольфа [3], многокластерный алгоритм Свендсен-Ванга [4].

В приведенных выше алгоритмах реализуется марковский процесс блуждания в конфигурационном пространстве системы. Помимо вышеуказанных, существует метод, позволяющий путем единичного моделирования получить значения термодинамических величин в широком температурном интервале – это алгоритм Ванга-Ландау [5]. За счет того, что в процессе немарковского блуждания по энергетическому спектру системы он не попадает в метастабильное состояние локального энергетического минимума – не возникает проблемы критического замедления. Данный метод позволяет единожды вычислив плотность энергетических состояний системы получить основные термодинамические величины в широком температурном интервале.

Данная работа посвящена вычислению различных термодинамических характеристик, так как внутренняя энергия, свободная энергия, энтропия и теплоемкость, а так же намагниченность и восприимчивость системы с помощью алгоритма Ванга-Ландау. Используя данный алгоритм, мы получили равномерное распределение по энергиям и добились плоскости гистограммы посещений энергетических уровней. Подобрав вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, мы смогли вычислить ранее известную плотность состояний.

Нами был реализован параллельный метод Ванга-Ландау для применения к исследованию критических свойств спиновых систем. На данном этапе он позволяет использовать до 16-ти потоков выполнения для разделения и обработки исходного энергетического интервала. Существует возможность масштабирования алгоритма. Моделирование проводилось при следующих параметрах:

1. Уточняющий параметр  $f \approx \exp \approx 2.7182818284$ .
2. Минимальное значение параметра  $f_{min} = 10^{-8}$ .
3. Критерий плоскости  $flat_{threshold} = 0.8$ .
4. Количество параллельных потоков  $PP = 1 - 16$ .
5. Количество шагов Монте-Карло, на которых выполняется проверка плоскости гистограммы  $skip_{msc} = 10^4$ .
6. Перекрытие соседних энергетических интервалов  $overlap = 0.95$ .
7. Размеры исследуемых решеток  $L = 8, 16, 32$ .
8. Размер общего энергетического интервала  $top_b = 2L^D$ , где  $D$  – размерность системы.

Далее была использована статистическая сумма, так как алгоритм Ванга-Ландау основан на ее представлении в виде разложения по числу уровней с данной энергией  $E$ :

$$Z = \sum_E G(E) \exp \left\{ -\frac{E}{k_B T} \right\}. \quad (1)$$

Это позволило получить плотность энергетических состояний, из которых возможно вычислить все температурные зависимости наблюдаемых величин по формулам для статистической суммы и среднего значения наблюдаемой величины [6]:

$$Z(T) = \sum_E G(E) \exp \left\{ -\frac{E}{k_B T} \right\} g(E) dE, \quad (2)$$

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{Z(T)} \int \tilde{A}(E) \exp \left\{ -\frac{E}{k_B T} \right\} g(E) dE. \quad (3)$$

Внутренняя энергия вычисляется по следующей формуле:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) \exp\left\{-\frac{E}{k_B T}\right\}}{\sum_E g(E) \exp\left\{-\frac{E}{k_B T}\right\}} = \langle E \rangle. \quad (4)$$

Теплоемкость:

$$C(T) = \frac{dU(T)}{dT} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (5)$$

Свободная энергия:

$$F(T) = -k_B T \ln \sum_E g(E) \exp\left\{-\frac{E}{k_B T}\right\}. \quad (6)$$

Энтропия:

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}. \quad (7)$$

Графики зависимости (рис. 1–3) были получены с использованием параллельного алгоритма Ванга-Ландау. Все графики представлены в зависимости от температуры.

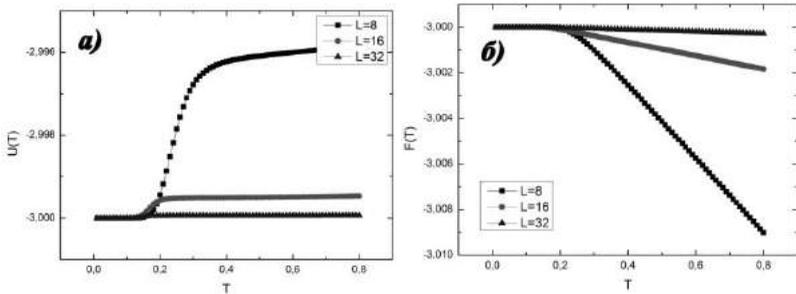


Рис. 1. Графики зависимости а) внутренней энергии  $U$  и б) свободной энергии  $F$  от температуры  $T$  для  $L = 8, 16, 32$

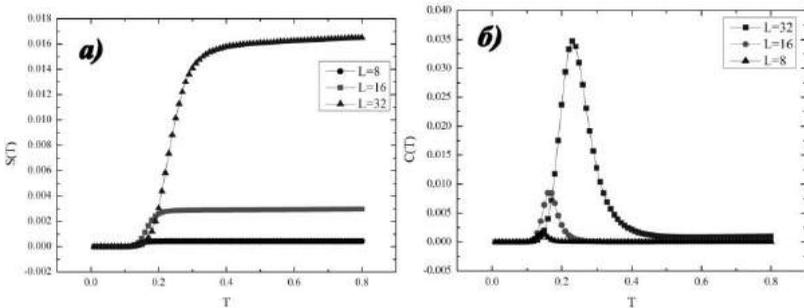


Рис. 2. Графики зависимости а) энтропии  $S$  и б) теплоемкости  $C$  от температуры  $T$  для  $L = 8, 16, 32$

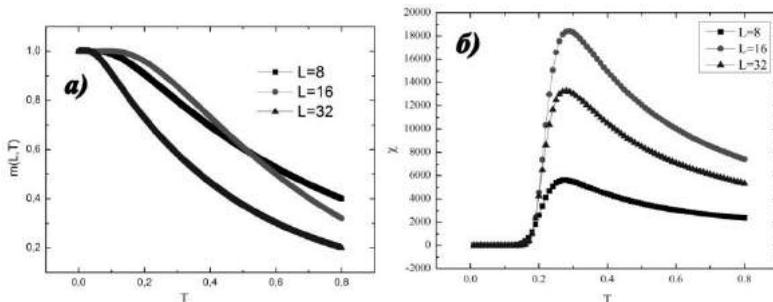


Рис. 3. Графики зависимости а) намагниченности  $M$  и б) восприимчивости  $\chi$  от температуры  $T$  для  $L = 8, 16, 32$

### ЛИТЕРАТУРА

[1] Камиллов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло // УФН. 1999. Т. 169, вып. 7. С. 773–795.

[2] Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования // ФИЗМАТЛИТ. 2009. 224 с.

[3] Wolf U. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 62. P. 361.

[4] Edwards R.G., Sokal A.D. Generalization of the Fortuin-Kasteleyn-Swendsen-Wang representation and Monte Carlo algorithm. // Phys. Rev. D. 1988. Vol. 38. P. 6.

[5] Wang F., Landau D.P. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. P. 2050.

[6] Vogel T., Li Y.W., Wust T., Landau D.P. Generic, Hierarchical Framework for Massively Parallel Wang-Landau Sampling // Phys. Rev. Letters. 2013. P. 5.

---

Кристина Юозефовна Кайданович,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
kaidanovich.kristina@mail.ru

# РАСЧЕТ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ НА НЕРАВНОВЕСНУЮ КРИТИЧЕСКУЮ ДИНАМИКУ НАЧАЛЬНО УПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

И. В. Лаврухин

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

Представлены методика и результаты ренормгруппового описания неравновесной критической релаксации трехмерной модели Изинга с эволюцией из упорядоченного начального состояния для «чистых» систем и систем с низким содержанием дефектов. Проведен расчет двухвременных зависимостей для корреляционной функции и функции отклика, а также универсального флуктуационно - диссипативного отношения в однопетлевом приближении при фиксированной размерности пространства  $d = 3$ .

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

Спиновые стекла [1], системы вблизи точки 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 актуальной проблемой. Одним из наиболее интересных явлений, проявляющихся на неравновесном этапе эволюции, является эффект *старения*: корреляционная функция и функция отклика системы проявляют нетривиальную двухвременную зависимость от времен  $s$  и  $t > s$ , где  $s$  – «возраст» системы, время, прошедшее с момента приготовления системы до начала измерения ее свойств, а  $t$  – время измерения. При этом время релаксации системы растет с увеличением ее «возраста». Для равновесной динамики данные функции зависят только от временного промежутка  $t - s$ .

Явление старения сопровождается нарушением флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ), для описания которого вводится такое новое понятие как флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО) [2]. Наше исследование связано с изучением мето-

дами 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:

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

приведена в критическое состояние из начального низкотемпературного состояния ( $t = 0$ ). В (1)  $\varphi$  – параметр порядка с  $\varphi(t = 0) \neq 0$ ,  $r_0 \sim T - T_c$  – приведенная температура,  $\zeta(x)$  – поле дефектов структуры с гауссовым распределением  $\langle \zeta(x) \rangle = 0$ ,  $\langle \zeta(x)\zeta(y) \rangle = \nu\delta(x - y)$ , где  $\nu$  – положительная константа, пропорциональная концентрации дефектов и квадрату величины их потенциала. Для случая систем без примесей  $\zeta(x) \equiv 0$ .

Действие системы имеет вид:

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

Функция отклика системы  $R(t, s)$ :

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

Для учета ненулевого среднего значения намагниченности системы, удобно перейти к новым переменным:

$$\psi(t) = \varphi(t) - m(t), \quad \tilde{\psi}(t) = \tilde{\varphi}(t). \quad (8)$$

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

$$\partial_t m(t) + \frac{\Omega}{3} m^3(t) + \frac{\Omega g_0}{2} \int (dq) C_q^0(t, t) + O(g_0^2) = 0, \quad (9)$$

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

$$R_q^0(t, s) = \theta(t-s) \exp[-q^2(t-s) - \int_s^t dt' m^2(t')], \quad (10)$$

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

В приближении среднего поля можно положить в уравнении (9)  $g_0 = 0, v_0 = 0$ , что приводит к значениям затравочных функций:

$$R_q^0(t, s) = \left( \frac{s}{t} \right)^{3/2} e^{-q^2(t-s)}, \quad (12)$$

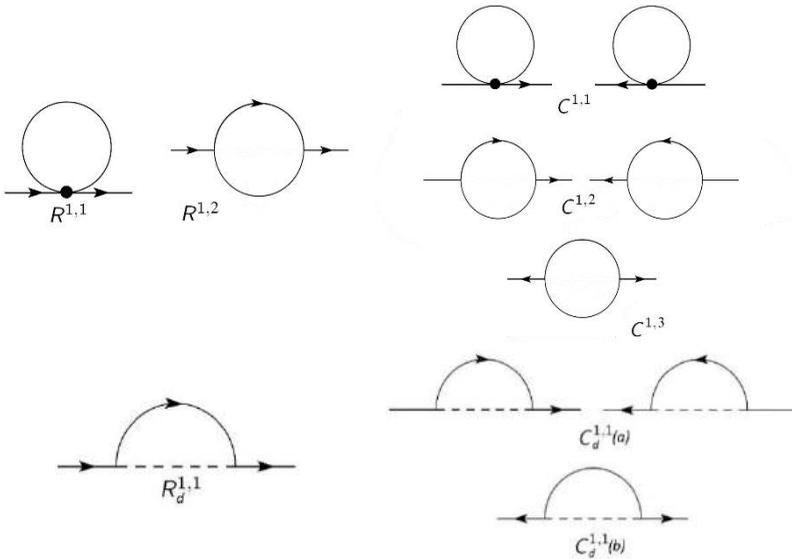
$$C_q^0(t, s) = 2 \frac{e^{-q^2(t+s)}}{(st)^{3/2}} \int_0^s dt' t'^3 e^{2q^2 t'} \quad (13)$$

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

При учете влияния флуктуаций в однопетлевом приближении сначала из (9) вычисляется новое выражение, описывающее поведение намагниченности, а затем новые значения затравочных функций (10), (11). В выражениях для корреляционной функции и функции отклика будут возникать флуктуационные поправки, определяемые однопетлевыми диаграммами Фейнмана:

$$R(t, s) = R_{q=0}^0(t, s) - \frac{g_0}{2} R^{1,1} + g_0 R^{1,2} + v_0 R_d^{1,1}, \quad (14)$$

$$C(t, s) = C_{q=0}^0(t, s) - \frac{g_0}{2} C^{1,1} + g_0 C^{1,2} + \frac{g_0}{2} C^{1,3} + v_0 C_d^{1,1}. \quad (15)$$



В результате осуществления описанных операций в однопетлевом приближении при  $d = 3$  было получено для чистых систем предельное значение ФДО  $X^\infty = 0.75$ , а для систем с дефектами  $X_d^\infty = 0.76$ . Значение  $X^\infty = 0.75$  можно сравнить с результатами, полученными в рамках методов  $\varepsilon$ -разложения 0.78 [4] и методами Монте-Карло 0.77(6) [5] и 0.784(5) [6]. Видно, что флуктуационные эффекты приводят уменьшению значения ФДО относи-

тельно среднеполевого результата 0.8. В отличие от метода  $\varepsilon$ -разложения, проблема расходимости временных интегралов в петлевых вкладах при  $s \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty$  нами решалась выделением ведущих временных зависимостей с учетом конечного предела для  $t \gg s$ . В работе [6] методами Монте-Карло было учтено влияние дефектов на значения ФДО и для системы со спиновой концентрацией  $p = 0.95$  были получены значения  $X_d^\infty = 0.740(6)$  в режиме старения, которое близко к полученному в данной работе, и  $X_d^\infty = 0$  в долговременном режиме. Согласно работе [6], равенство ФДО нулю обусловлено динамикой доменных стенок и их пиннингом на дефектах структуры. Данные эффекты не учитывались в данной работе.

Исследования поддержаны грантом РФФИ № 17-02-00279.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Cugliandolo L.F., Kurchan J.* // Phys. Rev. Lett., 1993. Vol. 71. P. 173.
- [2] *Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В.* Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания // УФН. 2017. Т. 187. С. 817–855.
- [3] *Mukherjee T., Pleimling M., Binek Ch.* // Phys. Rev. B, 2010. Vol. 82. 134425.
- [4] *Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F.* // J. Stat. Mech., 2006, 06016.
- [5] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Pospelov E.A., Malyarenko P.N., Vakilov A.N.* // Prog. Theor. Exp. Phys., 2015. 053A01. P. 1–20.
- [6] *Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102, вып. 3. С. 192–201.

---

Иван Владимирович Лаврухин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 4-й курс аспирантуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
jovanni.omsu@gmail.com

# ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО ПОВЕДЕНИЯ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ

**А. В. Левицкий**

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

Представлены результаты численного исследования неравновесного поведения коэффициента магнитосопротивления мультислойных магнитных структур с различными толщинами ферромагнитных гейзенберговских ОЦК-пленок, а так же результаты численного исследования температурной зависимости коэффициента магнитосопротивления. Исследовано влияние эффектов одноосной и кубической анизотропии. Проведенные исследования показали, что параметры одноосной и кубической анизотропии оказывают существенное влияние на коэффициент 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 расчета временной и температурной зависимости коэффициента магнитного сопротивления мультислойных структур с различными толщинами ферромагнитных гейзенберговских ОЦК-пленок. Исследовано

влияние эффектов одноосной и кубической анизотропии на характеристики мультислойных структур.

Описание магнитных свойств тонких ОЦК-пленок и структур на их основе проводилось на основе применения изотропной модели Гейзенберга и дополнительных слагаемых, описывающих эффекты влияния одноосной и кубической анизотропии.

Гамильтониан модели записывается в виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \{S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z\} - K_1 \sum_i (S_i^z)^2 - K_2 \sum_i (S_i^z)^4, \quad (1)$$

где  $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  – трехмерный единичный вектор в узле  $i$ ,  $J_1$  – обменный интеграл, характеризующий обменное взаимодействие ближайших спинов,  $K_1, K_2$  – параметры одноосной и кубической анизотропии соответственно.

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.  $J_1 > 0$  – обменный интеграл, характеризующий взаимодействие ближайших спинов в пленках, а  $J_2 < 0$  задает взаимодействие между спинами различных ферромагнитных пленок структуры с реализацией антиферромагнитной конфигурации с противоположными направлениями намагниченностей пленок.  $\vec{m}_1, \vec{m}_2$ .

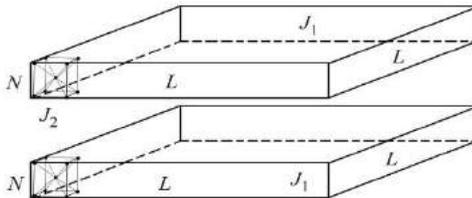


Рис 1. Мультислойная структура, состоящая из двух ферромагнитных пленок, разделенных пленкой немагнитного металла;

$L$  и  $N$  – линейные размеры пленок.  $J_1$  и  $J_2$  – обменные интегралы

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

Коэффициент магнитосопротивления для мультислойных магнитных структур определяется соотношением:

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

На рис. 2 представлена рассчитанная температурная зависимость коэффициента магнитного сопротивления мультислойной структуры при значениях констант анизотропии  $K_1 = -0.3$  и  $K_2 = 0.3$ . Расчет проведен для пленок с линейным размером  $L = 32$  и толщинами  $N = 3 \div 9$ .

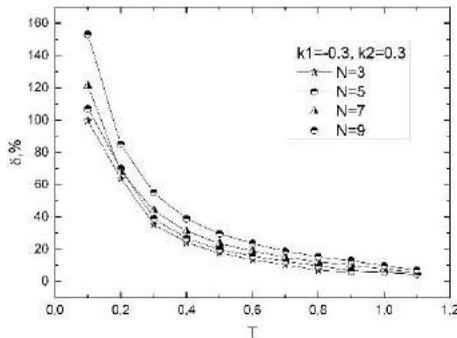


Рис 2. Температурная зависимость коэффициента магнитосопротивления  $\delta_h(T)$  для трехпленочной структуры с толщинами пленок  $N = 3 \div 9$ , параметр одноосной анизотропии  $K_1 = -0.3$  и параметр кубической анизотропии  $K_2 = 0.3$

Из приведенного графика видно, что структуры с  $N = 3 \div 9$  характеризуются последовательным увеличением коэффициента магнитного сопротивления с ростом толщины пленок.

На рис. 3 представлена временная зависимость коэффициента магнитного сопротивления мультислойной структуры с эволюцией из низкотемпературного начального состояния при температуре  $T = 0.4$  в единицах обменного интеграла при значении констант анизотропии  $K_1 = \pm 0.3$  и  $K_2 = 0.3$ . Расчет проведен для пленок

с линейным размером  $L = 32$  и толщиной  $N = 9$ . В случае когда  $K_1 < 0$  намагниченность ориентируется в плоскости пленки, и наоборот, при  $K_1 > 0$  – перпендикулярно плоскости пленки.

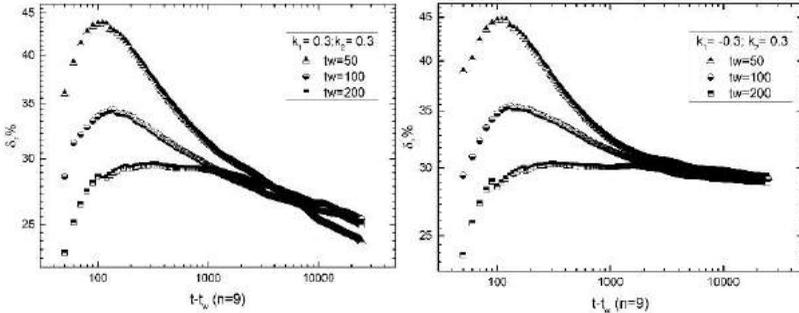


Рис. 3. Временная зависимость магнитосопротивления  $\delta h(T)$  для трехпленочной структуры с толщиной пленок  $N = 9$  при температуре  $T = 0.4$  и временах ожидания  $t_w = 50, 100, 200$  MCS/s

Анализ графиков (рис. 3) показывает проявление эффектов старения в неравновесном двухвременном поведении магнитосопротивления структуры, т. е. зависимость от времени ожидания  $t_w$  – времени начала измерения магнитосопротивления («возраста» системы). Видно, что в случае, когда намагниченность ориентируется в плоскости пленки, система приходит в состояние равновесия на временах наблюдения  $t - t_w > 3\text{--}4\ 000$  MCS/s, в то время как в случае с ориентацией намагниченности перпендикулярно плоскости пленки, система не приходит в состояние равновесия при текущем времени наблюдения  $t - t_w = 30\ 000$  MCS/s. Отметим также, что с ростом времени ожидания  $t_w$  наблюдается более быстрый переход магнитосопротивления к равновесным значениям. Так при времени ожидания  $t_w = 200$  MCS/s магнитосопротивление гораздо быстрее выходит на равновесное значение, чем при временах  $t_w = 50$  и  $100$  MCS/s.

Исследования поддержаны грантом РФФИ № 17-02-00279.

## ЛИТЕРАТУРА

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

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

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

[4] *Прудников В.В., Прудников П.В., Романовский Д.Е.* Моделирование методами Монте-Карло мультислойных магнитных структур и расчет коэффициента магнитосопротивления // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102. С. 759–765.

---

Александр Владимирович Левицкий,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
sacha080895@mail.ru

# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ И ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА ЗНАЧЕНИЯ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАТИВНОГО ОТНОШЕНИЯ ДЛЯ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

П. Н. Маляренко

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

Осуществлено исследование методами Монте-Карло влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение двумерной модели Изинга при ее эволюции из различных начальных состояний. На основе анализа двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости проведено исследование нарушений флуктуационно-диссипативной теоремы и вычислены значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения.

*Ключевые слова:* двумерная модель Изинга, эффекты старения.

Поведение систем, характеризующихся аномально медленной динамикой, в настоящее время вызывает большой интерес исследователей. 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, испытывающих фазовые переходы второго рода [2], так как критическая динамика таких систем характеризуется аномально большими временами релаксации  $t_{rel}$ .

Эффекты старения наблюдаются на временах  $t \ll t_{rel}$ . Они выражаются в осуществлении двухвременных зависимостей корреляционной функции и функции отклика от времени наблюдения  $t$  и времени ожидания  $t_w$ . Время ожидания характеризует промежуток от момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. При медленной эволюции из неравновесного начального состояния старение системы проявляется в замедлении релаксационных процессов при увеличении времени ожидания  $t_w$ . Принципиально важным проявлением медленной динамики является нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ)

[1; 2], которая 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  $X(t > t_w \gg t_{rel}) = 1$ . 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.

В данной работе мы представляем результаты численного Монте-Карло исследования влияния дефектов структуры на значения ФДО для двумерной модели Изинга. Гамильтониан модели Изинга, разбавленной немагнитными атомами примеси, с учетом влияния внешнего магнитного поля  $h$  задается выражением:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} p_i p_j S_i S_j - h \sum_i p_i S_i, \quad (3)$$

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

В [3; 4] было показано, что присутствие некоррелированных дефектов является несущественным для статического критического поведения двумерной модели Изинга, сохраняя значения критических индексов равными индексам чистой модели, а именно  $\beta = 0.125$  и  $\nu = 1$ , и приводя лишь к логарифмическим поправкам в термодинамических и корреляционных характеристиках. В то же время, в работе [5] при исследовании критической динамики модели было выявлено, что вблизи порога спиновой перколяции динамический критический индекс  $z$ , определяющий температурную зависимость времени релаксации, демонстрирует зависимость от концентрации дефектов с нарушением стандартной формы динамического скейлинга. В связи с этим, ожидается весьма нетривиальным влияние дефектов на характеристики неравновесного поведения модели.

Нами было осуществлено моделирование системы с применением алгоритма тепловой бани. Осуществлялось вычисление автокорреляционной функции

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

и динамической восприимчивости [1]:

$$\chi(t, t_w) = \frac{1}{TN} \sum_{i=1}^N \left[ \langle p_i S_i(t) \Delta S_i(t_w) \rangle \right], \quad \Delta S_i(t_w) = \sum_{s=0}^{t_w} [S_i(s) - S_i^W(s)], \quad (5)$$

где  $N = pL^2$  – число спинов, функция  $\Delta S_i(t_w)$  вычисляется в процессе моделирования с момента времени  $t = 0$  до  $t = t_w$ ,  $S_i^W = th(J \sum_{m \neq i} p_m S_m / T)$ . Расчет значений ФДО осуществлялся в соответствии с соотношением:

$$X(t, t_w) = \lim_{C \rightarrow 0} T \frac{\partial \chi(t, t_w)}{\partial C(t, t_w)}, \quad (6)$$

затем вычислялось предельное значение ФДО (2).

Моделирование систем проводилось на кубической решетке с линейным размером  $L=1024$  со спиновыми концентрациями  $p = 1.0, 0.9$  и  $0.8$  при соответствующих критических температурах  $T_c$ . Формировались начальные состояния системы со значениями намагниченности, равными  $m_0 = 1$  и  $m_0 = 0.01 \ll 1$ . Поведение автокорреляционной функции и динамической восприимчивости исследовалось для времен ожидания  $t_w = 20, 40, 40, 80$  шагов Монте-Карло на спин.

На рис. 1 (а) представлены графики зависимостей  $T\chi$  от  $C$  для случая эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 = 0.01$ . Для получения предельного значения ФДО была проведена процедура определения значений  $X(t_w)$  на основе соотношения (6) для каждого значения времени ожидания  $t_w$ .

К полученным значениям  $X(t_w)$  была затем применена экстраполяция  $X(t_w \rightarrow \infty)$ , которая и позволила определить искомые предельные значения ФДО:  $X^\infty(p=1.0) = 0.339(19)$ ,  $X^\infty(p=0.9) = 0.317(21)$ ,  $X^\infty(p=0.8) = 0.256(23)$ . Для «чистой» и слабо неупорядоченной ( $p = 0.9$ ) систем данные значения совпадают в пределах погрешности, следовательно, эти системы относятся к одному классу универсальности. Для сильно неупорядоченных систем предельное значение ФДО начинает зависеть от концентрации де-

фффектов, что связано с влиянием кроссоверных эфффектов перколяционного поведения [6].

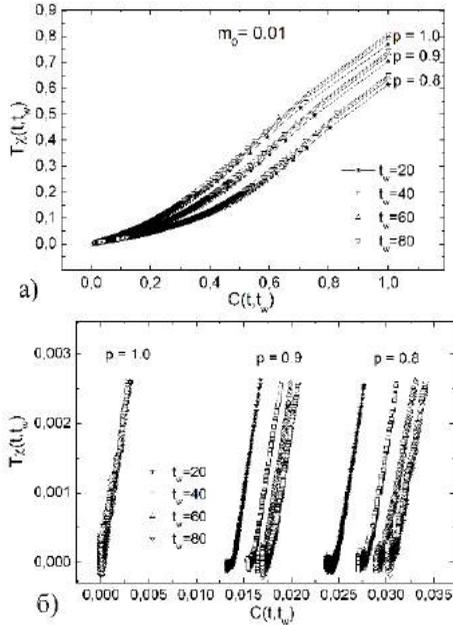


Рис. 1. Зависимости восприимчивости от автокорреляционной функции, определяющие флуктуационно-диссипативное отношение для различных концентраций спинов  $p$  в случае  $m_0 = 0.01$  (а) и  $m_0 = 1$  (б)

На следующем этапе исследования рассматривался случай низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1$ . Из рис. 1 (б) видно, что для «чистой» системы зависимость  $T_\chi$  от  $C$  имеет линейный характер для временного интервала  $t - t_w \geq t_w \gg 1$  изменения автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  и характеризуется предельным значением ФДО  $X^\infty = 0.751(24)$ . Данное значение находится в очень хорошем согласии с теоретико-полевым значением  $X^\infty = 0.75$  [1].

Однако для структурно неупорядоченных систем с  $p = 0.9$  и  $p = 0.8$  для случая  $m_0 = 1$  за счет эфффектов сильного замедления корреляционных эфффектов на временах  $t - t_w \sim t_w \gg 1$  из-за пиннинга доменных стенок на дефектах в графиках зависимостей

$T\chi$  от  $C$  (рис. 1, б) проявляется наличие двух линейных участков: первый участок соответствует изменению автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  на временах  $t - t_w \geq t_w \gg 1$ , а второй – значениям  $C(t, t_w)$  для долговременного этапа эволюции с  $t - t_w \gg t_w \gg 1$ . Второму участку соответствуют предельные значения ФДО  $X^\infty = 0$ . В то же время, анализ зависимостей  $T\chi$  от  $C$  на первых участках, осуществленный на основе выражения (8) без рассмотрения предела  $C \rightarrow 0$ , показывает, что если к определенным значениям  $X(t_w)$  применить аппроксимацию  $X(t_w \rightarrow \infty)$ , тогда можно получить значения  $X(p=0.9) = 0.748(25)$  и  $X(p=0.8) = 0.714(26)$ . При этом значение ФДО для системы с  $p = 0.9$  оказывается близким к значению  $X^\infty = 0.751(24)$  для «чистой» модели Изинга.

В данной работе выявлено существенное влияние начального состояния и дефектов структуры на неравновесную критическую динамику двумерной модели Изинга. Выявлена реализация двух типов универсального поведения, соответствующих высокотемпературному и низкотемпературному начальным состояниям. Показано, что слабо неупорядоченная система относится к классу универсальности «чистой» и характеризуется тем же набором характеристик критического поведения. В случае низкотемпературного начального состояния в неупорядоченных системах наблюдается сильное замедление корреляционных эффектов вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах. В результате предельные значения ФДО, определяемые динамикой доменов в долговременном режиме, становятся равными нулю.

Исследования поддержаны грантом РФФИ № 17-02-00279.

## ЛИТЕРАТУРА

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

[2] *Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В.* Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания // *УФН.* 2017. Т. 187, вып. 8. С. 817–855.

[3] Доценко Вик.С., Доценко Вл.С. Фазовый переход в 2D модели Изинга с примесными связями // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 33. С. 40–43.

[4] Shalaev B.N. Critical behaviour of the two-dimensional Ising model with random bonds // Phys. Reports. 1994. Vol. 237. P. 129–188.

[5] Прудников В.В., Марков О.Н. Компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченных двумерных изинговских систем // Письма в ЖЭТФ. 1994. Т. 60. С. 24–29.

[6] Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н. Эффекты сверхстарения и перколяционного кроссовера в неравновесном критическом поведении двумерной неупорядоченной модели Изинга // Письма в ЖЭТФ. Т. 107, вып. 9. С. 595–603.

---

Петр Николаевич Маляренко,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 3-й курс аспирантуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
petr.malyarenko@yandex.ru

# ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕЙ КОРРЕЛЯЦИИ ДЕФЕКТОВ НА НЕРАВНОВЕСНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СИЛЬНО НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

**А. А. Нагибин**

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

Осуществлено компьютерное моделирование критического поведения сильно неупорядоченной трехмерной модели Изинга с линейными дефектами. Были определены критические характеристики и сопоставлены полученные значения с результатами других работ.

*Ключевые слова:* трехмерная модель Изинга, линейные дефекты.

В последние годы много исследований было посвящено влиянию замороженных дефектов структуры на критическое поведение твердых тел. Исследование влияния дефектов структуры и эффектов их корреляции является актуальным направлением современной физики, так как практически все материалы содержат примеси и другие дефекты структуры. Дальнодействующая корреляция дефектов может модифицировать критические свойства неупорядоченных систем. 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].

## Исследование влияния дальнедействующей корреляции дефектов на критическое поведение систем методами компьютерного моделирования

Модель изотропной неупорядоченной системы с дальнедействующей корреляцией дефектов была предложена А.

Вейнрибом и Б.И. Гальпериным [3]. В этой модели предполагается, что корреляционная функция случайной локальной температуры  $g(x - y) = \langle\langle T_c(x)T_c(y) \rangle\rangle - \langle\langle T_c(x) \rangle\rangle^2$  убывает с расстоянием по степенному закону:

$$g(x - y) \sim |x - y|^{-\alpha},$$

где  $\alpha$  – параметр корреляции дефектов структуры. В реальных системах такое поведение может реализоваться, если флуктуации  $T_c(x)$  обусловлены рядом внутренних и внешних термодинамических параметров с большой дисперсией характерных пространственных масштабов, когда результирующая корреляционная функция  $g(x)$  может быть аппроксимирована некоторым эффективным степенным законом.

### Результаты

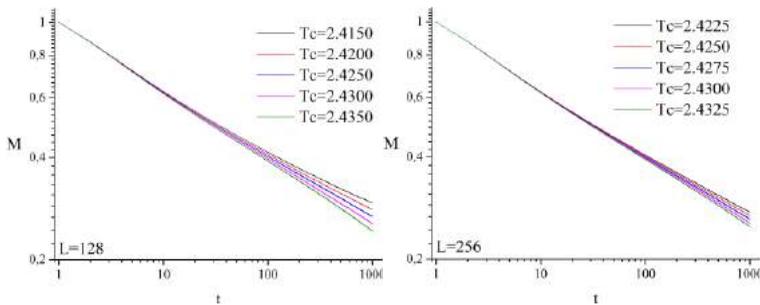


Рис. 1. Временная зависимость намагниченности  $M(t)$  для решетки с  $L = 128, 256$  при различных температурах  $T$

На рис. 1 приведены временные зависимости намагниченности  $M(t)$  для образцов с линейными размерами  $L = 128$  при температурах  $T = 2.4150, T = 2.4200, T = 2.4250, T = 2.4300$  и  $T = 2.4350$ , и при  $L = 256$  при температурах  $T = 2.4225, T = 2.4250, T = 2.4275, T = 2.4300, T = 2.4325$  представленные в двойном логарифмическом масштабе. Анализ данных кривых позволил определить критическую температуру системы для линейных размеров  $L = 128$  равную  $T_c = 2.4250$  и для  $L = 256$  равную  $T_c = 2.4275$ , соответственно.

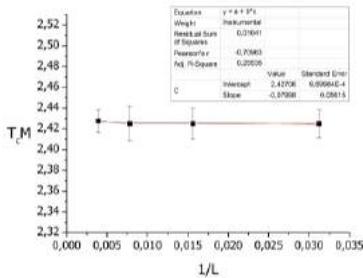


Рис. 2. Зависимость критических температур, полученных из намагниченности для различных значений  $L=32, 64, 128, 256$

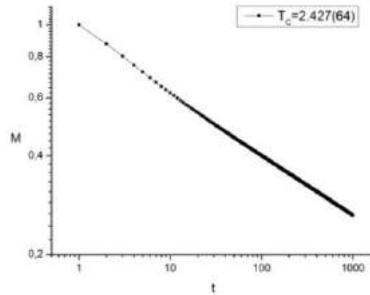


Рис. 3. Критическая температура  $T_c$  при линейном размере  $L = \infty$

На рис. 2 приведена зависимость критических температур, полученных из намагниченности для различных значений  $L = 32, 64, 128, 256$ . А на рис. 3 приведена критическая температура  $T_c$  при линейном размере  $L = \infty$ .

### Критические температуры намагниченности от линейного размера

$L$	$1/L$	$T_c$	$\delta$
32	0,03125	2,425	0,01377
64	0,01563	2,425	0,01485
128	0,00781	2,425	0,0166
256	0,00391	2,4275	0,01071

### Заключение

В данной работе было осуществлено компьютерное моделирование неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга с дальнедействующей корреляцией дефектов со спиновой концентрацией  $p = 0.6$ . Была получена критическая температура равная  $T_c = 2.427(64)$ . Сравнивая полученную критическую температуру  $T_c$  с трехмерной моделью Изинга с линейными дефектами ( $T_c = 3.9281(1)$ )[3], можно сделать вывод, что при увеличении спиновой концентрации, критическая температура уменьшается.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты No.17-12-00279, 18-42-550003 и гранта МД-6868.2018.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики ОмГУ, ЦКП Центр данных ДВО РАН, суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

### ЛИТЕРАТУРА

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

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

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

[4] *Pasquale Calabrese, Andrea Gambassi, Florent Krzakala.* Critical aging of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Issue 06. 2006. 06016.

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

---

Алексей Андреевич Нагибин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 955653,  
alexnagibin94@gmail.com

## ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТА «ВЗРЫВНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ» НА КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕТИ

**В. С. Пантелеев**

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

Представлены результаты численного моделирования влияния эффекта «взрывной перколяции» на критические свойства сети. Сравнения данного процесса со случайным процессом генерации случайной сети Ердеш-Реньи. Смоделированы сети размеров  $N=1000-50000$  узлов. Анализ критических свойств таких величин, как параметр порядка  $S(t)$  и восприимчивость  $\chi(t)$ , показывает нам, что выбор процесса формирования сети существенно влияет на поведение этих величин.

*Ключевые слова:* взрывная перколяция, Аклоптус процесс, случайные сети.

Перколяционный переход относится к появлению в решетке гигантского связанного кластера или сети, когда узлы связаны случайно. В данной работе будем рассматривать перколяцию связывания. При перколяции связывания процесс начинается с  $N$  несвязанных узлов. На каждом временном шаге между двумя выбранными узлами добавляется ребро. Число ребер  $E$ , добавленных в систему на определенном временном шаге, деленным на размер системы  $N$ , равно контрольному параметру  $t = E/N$ , описывающему фазовый переход (ФП). Параметр порядка  $S(t)$  определяет долю узлов, принадлежащих к гигантскому или самому большому 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  $t_c$ .

В 2009 году был разработан [1] конкурентный процесс перколяции, позже получивший название Аклоптус процесс (АП). По сути дела, АП отличается от традиционных некоррелированных моделей перколяции. 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 наи-

меньшим. В итоге одно ребро остается, а другое отбрасывается. Альтернатива этому, правило сумм (ПС), в котором устанавливается связь там, где сумма кластеров минимальна. В Аклоптус процессе гигантский кластер возникает после нескольких шагов, которые намного меньше размера системы. Как следствие, параметр порядка демонстрирует чрезвычайно резкое изменение в точке перколяции. На первый взгляд такое поведение напоминает разрывной переход, именно поэтому Аклоптус процесс был назван «взрывной перколяцией» [1].

Фундаментальное различие между классической перколяцией и Аклоптус процессом состоит в том, что последний следует конкурентному правилу, которое включает нелокальную или даже глобальную информацию о графе. Хорошо известно, что введение дальнедействующих взаимодействий при перколяции может изменить класс универсальности ФП или даже тип перехода. Таким образом, перколяционная модель с нелокальной конкуренцией, например Аклоптус процесс, может приводить к резким переходам.

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 Аклоптус 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, и такой принцип подавления порождает необходимую «пороховую бочку», т. е. есть обильные малые кластеры в определенном диапазоне до начала перехода [2]. Как правило, после нескольких этапов небольшие/средние кластеры сливаются друг с другом, и резко возникает гигантское скопление. Процесс взрывной перколяции наблюдается также в модели DLCA [3], модели охвата кластерного рассеяния [4] и модели взрывчатой синхронизации [5].

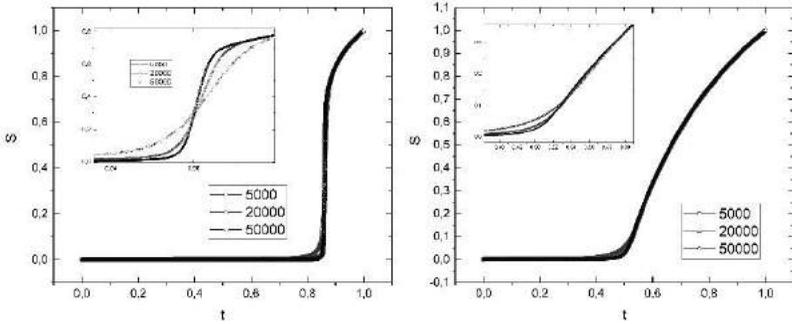


Рис. 1. График зависимости параметра порядка  $S(t)$  от времени  $t$ , для Аклоптус процесса (слева) и случайного процесса Эрдеш-Реньи (справа) при различных размерах сети  $N=5000, 20000, 50000$ .

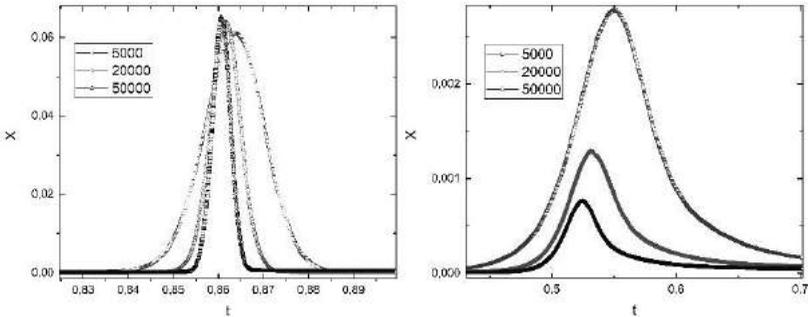


Рис. 2. График зависимости восприимчивости  $\chi$  от времени  $t$ , для Аклоптус процесса (слева) и случайного процесса Эрдеш-Реньи (справа), при различных размерах сети  $N=5000, 20000, 50000$ .

При анализе поведения параметра порядка при случайном процессе построения сети видно, что параметр порядка плавно возрастает с течением времени, в то время как при Аклоптус процессе параметр порядка резко увеличивает свое значение, что характерно для эффекта взрывной перколяции. Если проводить сравнение этих процессов, то можно заключить, что эффект взрывной перколяции смещает значение  $t_c$  в большую сторону, по сравнению со случайными сетями. Поведение графиков восприимчивости при различных размерах сети сходно. С ростом размера сети значение  $t_c$  уменьшается. При увеличении размеров сети было вы-

явлено, что восприимчивость в Аклоптус процессе возрастает, а при Эрдеш-Реньи процессе наоборот убывает.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 17-12-00279, 18-42-550003 и гранта МД-6868.2018.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики ОмГУ, ЦКП Центр данных ДВО РАН, суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Achlioptas D.* Explosive percolation in random networks. *Science* 323. 2009. 1453–1455.
- [2] *Friedman E.J.* Construction and analysis of random networks with explosive percolation. *Phys. Rev. Lett.* 103. 2009. 255701.
- [3] *Cho Y.S.* Discontinuous percolation transitions in real physical systems. *Phys. Rev. E* 84. 2011. 050102.
- [4] *Cho Y.S.* Avoiding a spanning cluster in percolation models. *Science* 339. 2013. 1185–1187.
- [5] *Zhang X.* Explosive synchronization as a process of explosive percolation in dynamical phase. *Sci. Rep.* 4. 2014. 5200.

---

Владимир Сергеевич Пантелеев,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
panteleevvova@mail.ru

# ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ 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 так же определено значение динамического критического индекса  $Z$ , характеризующего эффективность алгоритма приведения системы к состоянию равновесия.

*Ключевые слова:* модель Изинга, перколяционно-кластерный метод.

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 является 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 решетке спинов с линейным размером  $L = 128, 192, 256$  при спиновых концентрациях  $p = 0.688, 313, 500$ . 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 пересечению кумулянтов было определено значение критической температуры.

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

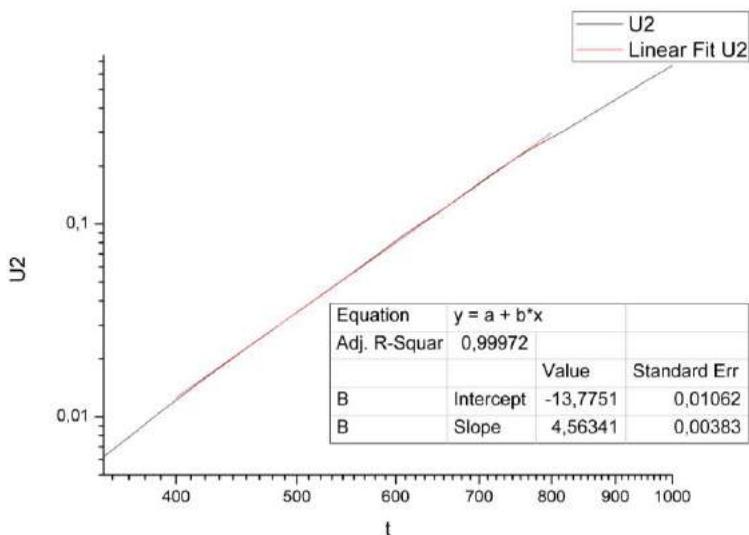
Таблица 1

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

<i>Концентрация спинов, <math>p</math></i>	<i>Значения критической температуры, <math>T_c</math></i>	<i>Значения, полученные ранее, <math>T_c</math> [4]</i>
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 си-

стемы, используется динамический критический индекс  $Z$ , который характеризует величину критического замедления времен релаксации системы при приближении к критической температуре.



Для определения критического индекса  $Z$  были использованы кумулянты Биндера второго порядка. Полученные данные представлены в таблице 2.

Таблица 2

**Значения критического индекса  $Z$ , полученные для перколяционного метода и метода Метрополиса**

<i>Концентрация</i>	<i><math>T_c</math></i>	<i>Индекс <math>Z_n</math></i>	<i>Индекс <math>Z_m</math></i>
0.688 313 500	3.091 266	0.657 40(55)	1.970 54(166)

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

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 17-12-00279, 18-42-

550003 и гранта МД-6868.2018.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики ОмГУ, ЦКП Центр данных ДВО РАН, суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

### ЛИТЕРАТУРА

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

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

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

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

---

Александр Сергеевич Папушин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 4-й курс аспирантуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а,  
as.ollaf@gmail.com

# РАСЧЕТЫ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ И ИНТЕГРАЛОВ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МУЛЬТИСЛОЙНОЙ СИСТЕМЕ $\text{Co}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}/\text{Cu}(100)$

**Е. С. Поворознюк**

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

В данной работе в рамках первопринципного подхода осуществлен расчет полной энергии системы, магнитных моментов атомов для различных спиновых конфигураций и интегралов обменного взаимодействия для ближайших и следующих за ближайшими соседями для трехслойной структуры  $\text{Co}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}/\text{Cu}$ . Проведено исследование влияния эффектов решеточной релаксации на рассчитанные магнитные и энергетические характеристики.

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

Инновационные тенденции развития в современных исследованиях, в частности в области магнетизма, сместились в направлении изучения наноразмерных структур, в том числе, тонких магнитных пленок. Интерес к тонким магнитным пленкам вызван их большим практическим применением и наблюдаемыми в мультислойных структурах явлениями как гигантское и туннельное магнитосопротивление [1].

Для осуществления первопринципных расчетов в данной работе применялся лицензионный программный пакет VASP (Vienna Ab-Initio Simulation Package) [2], предназначенный для моделирования атомно-молекулярных и электронно-ядерных систем методами квантовой механики с использованием набора псевдопотенциалов и метода проекционно-присоединенных волн (PAW). Интегрирование по зоне Бриллюэна выполнялось на сетке Монкхорста – Пака  $8 \times 8 \times 1$ . Энергия обрезания плоской волны составляла 350 эВ.

Система моделировалась с помощью периодической 36-атомной суперячейки  $2 \times 2$  (4 атома в слое), состоящей из трех ато-

марных слоев немагнитной подложки с ориентацией поверхностной грани (100) и трех атомарных слоев ферромагнитного сплава с обеих сторон пластины. Сплав образован на 50 % из атомов Co и на 50 % из атомов Ni расположенных в шахматном порядке. Так как ультратонкая пленка повторяет структуру подложки, то атомная структура суперячейки для  $\text{Co}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}\text{Cu}$  соответствовала ГЦК структуре. А в качестве ее постоянной была выбрана постоянная решетки медной подложки  $a = 3.6367(5) \text{ \AA}$  полученная нами в результате расчетов с учетом оптимизации параметров решетки [3].

В данной работе исследовались случаи коллинеарного магнетизма, где спины атомов ориентированы в одном направлении перпендикулярном поверхности. Были рассмотрены несколько магнитных конфигураций: ферромагнитная (ФМ), две антиферромагнитные (АФ1 и АФ2) и две ферримагнитные конфигурации (М1 и М2), направления спинов для них указано на рис. 1.

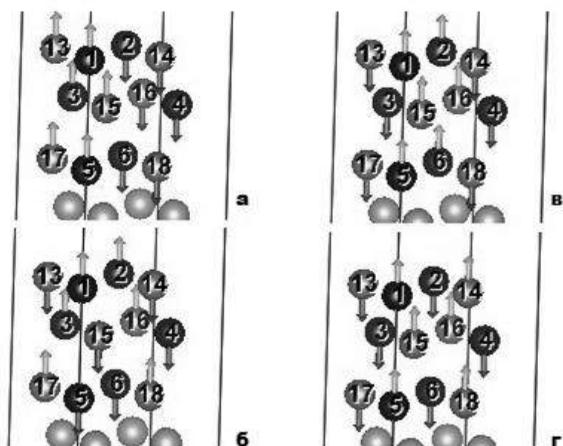


Рис. 1. Спиновые конфигурации: а, б) антиферромагнитные в, г) ферримагнитные состояния. Атомы Co с номерами 1–6

Результаты расчетов магнитных моментов атомов для ферромагнитного и ферримагнитных конфигураций, приведенные в таблице 1, показывают, что моменты принимают наибольшее значение в ферромагнитной конфигурации в атомном слое, наиболее удаленном от подложки.

Таблица 1

**Значения магнитных моментов атома пленки  
в i-ом слое  $\mu_i$  и среднего  $\mu_{tot}$**

Состояние	$\mu_3$ мВ/ат		$\mu_2$ мВ/ат		$\mu_1$ мВ/ат		$\mu_{tot}$ мВ/ат
	Co	Ni	Co	Ni	Co	Ni	
ФМ	1,877	0,695	1,659	0,467	1,675	0,655	1,213
M1	1,816	0,298	1,719	0,487	1,623	0,177	0,172
M2	1,843	0,753	1,638	0,338	1,541	0,587	0,297

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

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

где  $n$  – число ячеек в пленке.

Значения интегралов обменного взаимодействия могут получены по формуле:

$$N_{ij} J_j = \Delta E_i = E_i^{A\Phi} - E^\Phi, \quad (2)$$

где  $N_{ij}$  – число всех пар атомов в ячейке с антипараллельными спинами для i-го антиферромагнитного состояния.

Таблица 2

**Расчитанные значения полных энергий системы для различных  
спиновых конфигураций обменных и интегралов  
(нижняя строка с учетом релаксации, верхняя без учета)**

$E^\Phi$ , эВ	$E_1^{A\Phi}$ , эВ	$E_2^{A\Phi}$ , эВ	$E^{M1}$ , эВ	$J_1$ , $10^{-14}$ эрг	$J_2$ , $10^{-14}$ эрг
-185,022	-182,601	-183,084	-182,586	-0,460	3,615
-185,998	-183,745	-184,197	-186,171	-0,431	3,369

По полученным результатам можно сделать вывод, что энергетически более выгодными являются ферромагнитное и первое ферримагнитное состояния. Значение обменного интеграла с учетом релаксации меняется незначительно – уменьшается на 7%. Из

результатов расчета следует, что константа  $J_1$  способствует антиферромагнитному упорядочению магнитных моментов ( $J_1 < 0$ ), а константа  $J_2$ , способствует возникновению ферромагнитной конфигурации магнитных моментов, при этом ее величина в несколько раз больше, чем константа  $J_1$ . Это обусловлено тем, что при шахматном расположении атомов компонент сплава, взаимодействие ближайших соседей, в большей степени, описывается взаимодействием атомов Co с атомами Ni, а взаимодействие следующих за ближайшими соседями описывается только взаимодействием атомов одного и того же типа.

Рассчитанные значения интегралов  $J_1$  и  $J_2$  обменного взаимодействия между атомами в пленке сплава могут быть применены в исследовании мультислойных магнитных структур с эффектами гигантского магнитосопротивления [1].

Исследования поддержаны грантами РФФИ № 17-02-00279 и № 18-42-550003. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики ОмГУ и ЦКП Центр данных ДВО РАН.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Romanovskiy D.E., Mamonova M.V., Prudnikov V.V., Prudnikov P.V.* Monte Carlo simulation of magnetic multilayered structures with the effects of giant magnetoresistance // J. Siberian Federal University. Mathematics & Physics. 2017. Vol. 10, no. 1. P. 65–70.

[2] *Kresse P. G., Furthmuller J.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B 1996. Vol. 54. P. 11169.

[3] *Kondrashov R.A., Mamonova M.V., Povorozhnik E.S., Prudnikov V.V.* First-principles investigations of the atomic structure and magnetic properties of Ni and Co films on Cu substrate // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2017. Vol. 38, no. 5. P. 940–943.

---

Евгений Сергеевич Повorozнюк,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 75-53-58,  
proaspovoroz@icloud.com

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ  
МАГНИТНЫХ СТРУКТУР  
ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ  
ВО ВНЕШНЕМ ОСЦИЛЛИРУЮЩЕМ ПОЛЕ**

**В. А. Попов**

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

В работе проводится моделирование динамического поведения изингоподобной пленки во внешнем периодическом магнитном поле методами Монте-Карло. Осуществлено исследование магнитных свойств системы при динамическом фазовом переходе.

*Ключевые слова:* динамический фазовый переход, метод Монте-Карло, модель Изинга, тонкие пленки.

Исследование динамического фазового перехода в мультислойных магнитных структурах и тонких пленках является чрезвычайно актуальной задачей. Явление динамического фазового перехода, впервые, было выявлено для двумерной кинетической модели Изинга в работе [1]. В работе [2] было экспериментально показано существование динамического фазового перехода в мультислойной магнитной структуре [Co(0.4 нм)/Pt(0.7нм)]<sub>3</sub> с сильной перпендикулярной анизотропией.

Процесс неравновесной релаксации намагниченности системы во внешнем осциллирующем поле может характеризоваться параметром порядка  $Q(z)$ :

$$Q(z) = \frac{1}{2t_{1/2}} \oint m(t, z) dt,$$

где  $m(t, z)$  – намагниченность в слое  $z$ ,  $t_{1/2}$  – полупериод внешнего магнитного поля.

В данной работе исследовалось поведение тонкой изингоподобной пленки конечной толщины с числом слоев  $N = 5$  во внешнем осциллирующем поле:

$$H = -J_b \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - J_s \sum_{\{i, j\}} S_i S_j - H(t) \sum_i S_i,$$

где  $S_i = \pm 1$  – изинговские спины,  $\langle \dots \rangle$  – суммирование по узлам в объеме материала,  $\{ \dots \}$  – суммирование по узлам на поверхности пленки.

На рис. 1 показана временная зависимость намагниченности во внешнем осциллирующем поле. При  $\Theta = \Theta_c$  происходит динамический фазовый переход.

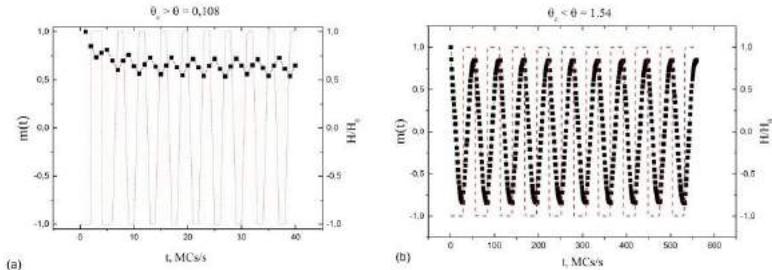


Рис. 1. Зависимость намагниченности от времени в поверхностном слое при  $\Theta = 0.108 < \Theta_c$  и  $\Theta = 1.54 > \Theta_c$  для системы с  $L = 32$ .

График слева демонстрирует динамически упорядоченную фазу, справа – динамически неупорядоченную фазу

В работе было исследовано поведение поверхностного параметра порядка в зависимости от величины амплитуда внешнего поля.

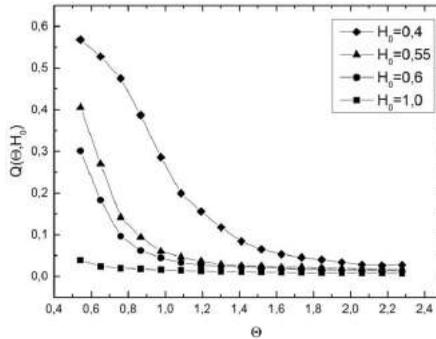


Рис. 2. Зависимость поверхностного параметра порядка от  $\Theta$  для системы с  $L=32$  при различных амплитудах внешнего поля

На рис. 3 изображены общие график зависимости параметра порядка  $Q$  от  $\theta$ . Параметр порядка демонстрирует поведение, характерное для фазового перехода второго рода в области  $\theta = 0.1-0.6$ .

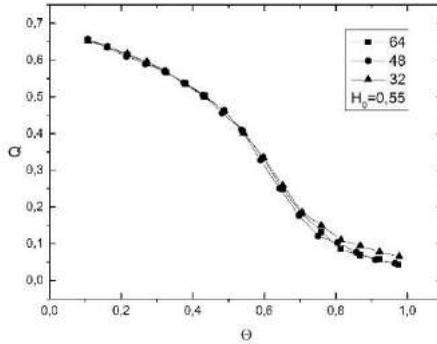


Рис. 3. Общий график зависимость параметров порядка  $Q$  от  $\theta$  в поверхностном слое для разных линейных размеров решетки

Были получены кумулянты Биндера поверхностного слоя для разных линейных размеров решетки.

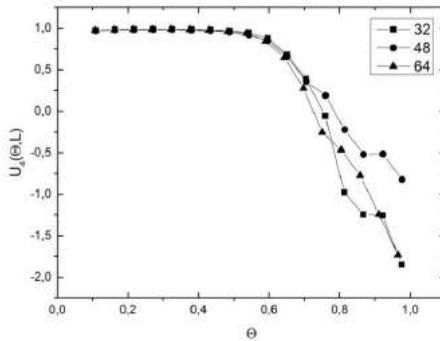


Рис. 4. Кумулянты Биндера поверхностного слоя для разных линейных размеров решетки

В данной работе проведено численное исследование динамического фазового перехода в изингоподобной пленки во внешнем периодическом магнитном поле с выделенной поверхностью и числом слоев  $N = 5$ , находящейся во внешнем осциллирующем поле. Произведены исследования поведения системы во внешнем магнитном поле с различными амплитудами. Все расчеты проводились при  $H_0 = 0,55$ . На основе поведения восприимчивости и кумулянтов Биндера было показано существование динамического фазового перехода. Все усреднения проводились по 100 прогонкам.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 17-12-00279, 18-42-550003 и гранта МД-6868.2018.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики ОмГУ, ЦКП Центр данных ДВО РАН, суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Lo W.S., Pelcovits R.A.* Ising model in a time-dependent magnetic field // *Phys. Rev. A.* 1990. Vol. 42. P. 7471.

[2] *Robb D.T., Xu Y.H., Hellwig O., McCord J., Berger A., Novotny M.A., Rikvold P.A.* Evidence for a dynamic phase transition in Co Pt magnetic multilayers // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 78. P. 134422.

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

[4] *Park H., Pleimling M.* Surface Criticality at a Dynamic Phase Transition 31 // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 175703.

[5] *Pleimling M.* Critical Phenomena at perfect and non-perfect surfaces // *J. Phys. A.* 2004. Vol. 37. P. R79.

[6] *Прудников П.В., Попов В.А.* Моделирование критических свойств магнитных структур во внешнем периодическом поле // XLI Региональная научно-практическая конференция «Молодежь третьего тысячелетия»: сборник научных статей. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2017.

---

Владислав Александрович Попов,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
tower96@mail.ru

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭНЕРГИИ АДсорбЦИИ СИСТЕМЫ Fe/Cu/Fe ОТ ОРИЕНТАЦИИ ГРАНИ И ПАРАМЕТРА ПОКРЫТИЯ

**Д. Ж. Сергазин**

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

В данной работе, в рамках первопринципных расчетов с использованием программного комплекса VASP, исследовано влияние на адсорбцию монослойных пленок железа ориентации грани поверхности Cu с учетом релаксации для параметров покрытия  $\Theta = 0,25$  и  $\Theta = 1$ .

*Ключевые слова:* программный комплекс VASP, энергия адсорбции.

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.

Развитие современной вычислительной техники и методов решения больших систем уравнений позволяют получить при расчете свойств веществ из первых принципов точность, сопоставимую с получаемой в эксперименте. Vienna Abinitio Simulation Package (VASP) – программа для моделирования материалов атомного масштаба из первых принципов [1] с применением приближения PAW PBE [2; 3].

Данная работа посвящена вычислению энергии адсорбции монослойной ферромагнитной пленки на немагнитной подложке В качестве подложки в данной работе рассматривались грани меди (111) и (110).

На рис. 1 изображено расположение атомов на поверхности системы Fe/Cu/Fe при параметре покрытия  $\Theta = 1$ .

Заштрихованные атомы это адсорбированные атомы железа, атомы без штриховки – атомы подложки меди.

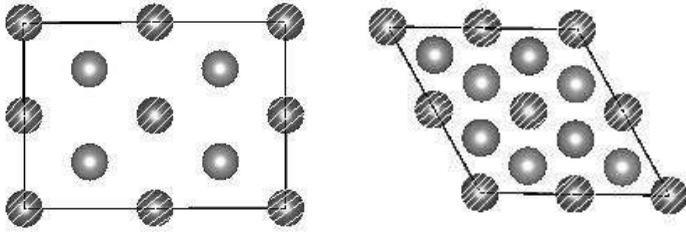


Рис. 1. Суперячейка системы Fe/Cu/Fe с ориентацией грани: а) (110) б) (111)

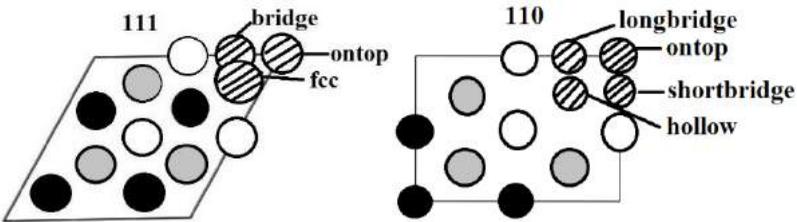


Рис. 2. Суперячейка системы Fe/Cu при  $\Theta = 0,25$

На рис. 2 изображена кристаллическая решетка системы Fe/Cu с адсорбированными атомами железа в различных конфигурациях. Черным цветом обозначены атомы первого слоя медной подложки, серым – второго и белым – третьего. Заштрихованными атомами обозначены адсорбированные атомы Fe.

Энергия адсорбции системы Fe/Cu/Fe (адсорбированный атом железа расположен с двух сторон субстрата) с параметром покрытия  $\Theta=1$  (четыре адсорбированных атома железа расположены на четырех атомах подложки меди) вычислялась по следующей формуле:

$$E_{ads} = \left( E_{full}^{Fe/Cu/Fe} - E_{clear}^{Cu} - 2 * 4 * E_{bulk}^{Fe} \right) / 2, \quad (1)$$

где  $E_{ads}$  это энергия адсорбции,  $E_{full}$  полная энергия системы Fe/Cu/Fe,  $E_{clear}^{Cu}$  – энергия чистой подложки меди,  $E_{bulk}^{Fe}$  энергия атома железа в объеме.

Для системы Fe/Cu (адсорбированный атом железа на подложке меди с одной стороны) с параметром покрытия  $\Theta = 0,25$

энергия адсорбции вычисляется как разница полной энергии системы, энергии чистой подложки меди и энергии атома железа в объеме:

$$E_{ads} = E_{full}^{Fe/Cu/Fe} - E_{clear}^{Cu} - E_{bulk}^{Fe}. \quad (2)$$

В табл. 1 приведены расчеты энергии адсорбции для ориентации грани (110) и (111) системы Fe/Cu/Fe с параметром покрытия  $\Theta = 1$  при толщине вакуумного слоя 4 Å.

В табл. 2 и 3 приведены данные: энергии адсорбции и магнитного момента для системы Fe/Cu с одним адсорбированным атомом железа с параметром покрытия  $\Theta = 0,25$  (один адсорбированный атом железа расположен на четырех атомах меди).

Таблица 1

**Результаты расчетов  $E_{ads}$  и магнитного момента**

<i>Ориентация грани</i>	<i><math>M, M_B</math></i>	<i><math>E_{ads}, эВ</math></i>
110	2,453	-4,014
111	2,157	-3,749

Таблица 2

**Результаты расчетов энергии адсорбции и магнитного момента при  $\Theta = 0,25$  с ориентацией грани (111)**

<i>Конфигурация</i>	<i><math>M, M_B</math> (111)</i>	<i><math>E_{ads}, эВ</math> (111)</i>
Fcc	3,362	-2,380
Bridge	3,294	-2,300
Ontop	3,235	-1,981

Таблица 3

**Результаты расчетов энергии адсорбции и магнитного момента при  $\Theta = 0,25$  с ориентацией грани (110)**

<i>Конфигурация</i>	<i><math>M, M_B</math> (110)</i>	<i><math>E_{ads}, эВ</math> (110)</i>
hollow	3,019	-3,081
longbridge	3,171	-2,911
shortbridge	3,803	-1,622
ontop	3,809	-1,392

Видно, что для грани (111) в конфигурации fcc в сравнении с другими положениями атома железа энергия адсорбции минимальна, а магнитные моменты атомов принимают максимальные значения, а для (110) наиболее энергетически выгодной конфигурацией является hollow, когда атом Fe расположен в междоузлии.

Сравнение энергии адсорбции при различных параметрах покрытия показывает, что при  $\Theta = 1$  энергия адсорбции меньше, чем при  $\Theta = 0,25$ . Аналогичная зависимость от параметра покрытия была получена в работах [2; 3] при адсорбции Co на подложке из Cu.

Исследования поддержаны грантами РФФИ № 17-02-00279 и № 18-42-550003. Для проведения расчетов были использованы ресурсы вычислительной лаборатории кафедры теоретической физики ОмГУ и ЦКП Центр данных ДВО РАН.

#### ЛИТЕРАТУРА

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

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

[3] *Pentcheva R., Scheffler M.* Initial adsorption of Co on Cu (001): A first-principles investigation // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. 155418.

---

Даулет Жумабекович Сергазин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
sergazin-daulet@mail.ru

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ СТАРЕНИЯ В НЕРАВНОВЕСНОМ ПОВЕДЕНИИ МУЛЬТИСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЫ СО/СU

**М. М. Фирстова**

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

В данной научно-исследовательской работе решается задача численного изучения методами компьютерного моделирования неравновесного поведения магнитных мультислойных структур. Вычисляются значения автокорреляционной функции для различного числа слоев  $N = 3; 5; 7; 9$ . Рассматривается возникновение эффектов старения автокорреляционной функции от времен ожидания и получение скейлинговой зависимости автокорреляционной функции с линейным размером системы  $L = 64$ . Результаты исследования получены из высокотемпературного начального состояния системы.

*Ключевые слова:* ферромагнитная пленка, высокотемпературное начальное состояние, автокорреляционная функция, время ожидания.

Изучение свойств мультислойных магнитных пленок актуально [1] в связи с уникальными физическими характеристиками [2], с точки зрения применения в приборах спинтроники и магнитных сверхструктур на их основе [3].

При рассмотрении подобных систем, в случае медленной эволюции из неравновесного начального состояния в данных системах наблюдаются эффекты старения и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы [4].

Выявленные к настоящему времени особенности неравновесного критического поведения могут служить основой для понимания и интерпретации экспериментальных данных, полученных для мультислойных структур на основе Co/Cr [5]. Исследование макроскопических систем, характеризующихся медленной динамикой, а так же изучение свойств мультислойных структур на их основе [2] вызывает в настоящее время значительный интерес [6].

В данной работе рассматривается задача проведения численного исследования особенностей неравновесного поведения мультислойных структур.

тислойной магнитной структуры из ферромагнитных пленок, разделенных слоем немагнитного металла.

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, бра-лось  $J_1 = 1$ , а для взаимодействия между пленками  $J_2 = -0.3J_1$ . Отрицательность  $J_2$  показывает, что в данных структурах толщина немагнитной прослойки и осциллирующее межслоевое обменное РККИ взаимодействие между спинами ферромагнитных слоев носило эффективный антиферромагнитных характер [7].

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

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

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

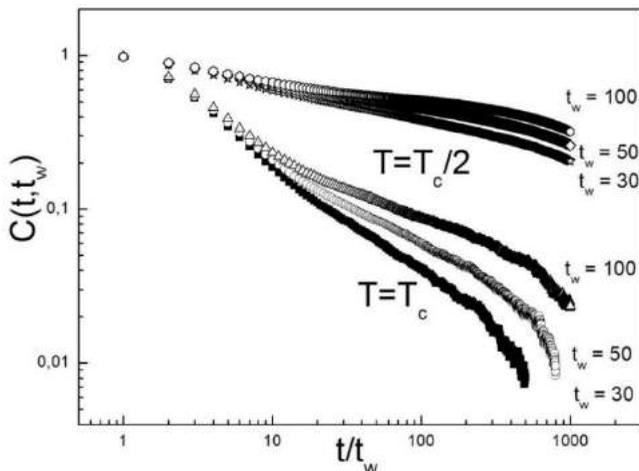
Вид и параметры гамильтониана выбраны таким образом, чтобы соответствовать мультислойной структуре Co(0.6nm)/Cr/Co(0.6nm) [6].

Неравновесное поведение реализовывалось переводом системы из данных начальных состояний в состояния при температурах теплового резервуара равных критической температуре [3].

Двухвременная зависимость автокорреляционной функции [3]:

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

Исходя из результатов, приведенных на рисунке зависимости автокорреляционной функции от времени наблюдения при временах ожидания  $t_w = 30; 50; 100$  демонстрируют наличие в системе эффектов старения, т. е. зависимости временного спадания корреляционных эффектов от времени ожидания.



Зависимость автокорреляционной функции при  $N=5$  от времени наблюдения при временах ожидания  $t_w = 30; 50; 100$  при  $T = T_c(2.9033)$ , и так же при  $T = T_c/2(1.4516)$

Расчеты двухвременных зависимостей автокорреляционной функции методами Монте-Карло позволили выявить возникновение эффектов старения в мультислойных магнитных структурах не только при  $T = T_c$ , но и в широком диапазоне температур  $T < T_c$ . Исходя из приведенных выше выводов существование данных неравновесных эффектов обязательно необходимо учитывать при практическом использовании мультислойных магнитных структур в качестве элементов приборов спинтроники с эффектами гигантского магнитного сопротивления [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект No.17-02-00279) и грантом МД-6868.2018.2 Президента РФ.

Для выполнения расчетов использованы вычислительные ресурсы лаборатории прикладной теоретической физики и параллельных вычислений ОмГУ.

#### ЛИТЕРАТУРА

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

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

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

[4] *Berthier L. Kurchan. J.* Non-equilibrium glass transitions in driver and active matter // Nature Phys. 2013. 9. 310 p.

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

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

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

---

Марина Максимовна Фирстова,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
ffi-95@mail.ru

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА С ПОДВИЖНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Ж. Б. Шарипова

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

В данной работе исследована динамика систем с замороженными дефектами, методом коротковременной динамики. Произведена оценка динамических характеристик, таких как критические индексы  $\alpha$ ,  $\nu$  и  $\gamma$ , выявлена критическая температура заданной бесконечной системы  $T_c(L)$ .

*Ключевые слова:* двумерная модель Изинга, метод коротковременной динамики, заморожены дефекты структур, критические индексы.

Исследование критической динамики неупорядоченной двумерной модели Изинга представляет собой значительный интерес. Особое внимание уделяется системам с примесями, в случае замороженных дефектов, так как динамика таких систем не исследована [1; 2].

Данное исследование посвящено вычислению критических индексов  $\alpha$  и  $\gamma$  для данной системы, нахождению температуры бесконечной системы, с помощью которой найден критический индекс  $\nu$ .

Двумерная модель Изинга описывается гамильтонианом вида:  
$$H = - \sum_{i,j=j\pm 1} p_i p_j (J_1 s_i s_j - \varphi_1) + \sum_{i,j=j\pm 2} p_i p_j (J_2 s_i s_j - \varphi_2), \quad (1)$$
где  $J_1, \varphi_1, J_2$  и  $\varphi_2$  характеризуют обменное и молекулярное взаимодействие для ближайших соседей и следующих за ближайшими соответственно. Данный вид гамильтониана применяется при моделировании процессов адсорбции на поверхности твердых тел [4].

Моделирование проводилось при ряде параметров  $T = 0.4..1.5$  с шагом 0,055;  $p = \theta$ ;  $p_s = 0.8$ ; MCS = 10000 для решеток  $L = 8, 12, 24$  и  $32$ . Вычисляемыми величинами являются температурные зависимости  $\chi(T)$  и  $C(T)$ , также средняя намагниченность  $\langle M \rangle$  с помощью которых были найдены значения критических индексов и критическая температура бесконечной системы.

На рис. 1 изображена температурная зависимость кумулянтов Биндера 4-го порядка, с помощью которой получено значение критической температуры бесконечной системы  $T_c(L) = 0.539 \pm 0.055$ . Данный метод нахождения критической температуры заключается в построении температурной зависимости кумулянтов, при пересечении которые образуют «треугольник», в точке пересечения медиан данного треугольника и находится критическая температура [5].

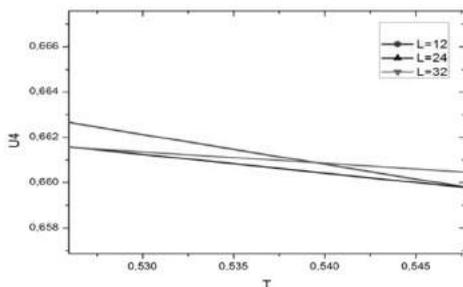


Рис. 1. Температурная зависимость кумулянтов Биндера 4-го порядка для  $L = 12, 24$  и  $L = 32$

Согласно зависимостям 2 и 3 были найдены критические индексы:  $\alpha = 0,12(3)$  и  $\gamma = 1,13(7)$ , где  $\tau$  было определено как пик для рассматриваемых величин, изображенных на рис. 2 и 3.

$$c \sim |\tau|^{-\alpha}, \quad (2)$$

$$\chi \sim |\tau|^{-\gamma}. \quad (3)$$

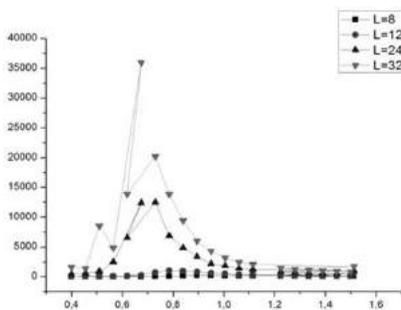


Рис. 2. Температурная зависимость восприимчивости  $\chi(T)$  для  $L=12, 24$  и  $L=32$ , при  $T = 0.4..1.5$  с шагом  $0,055$

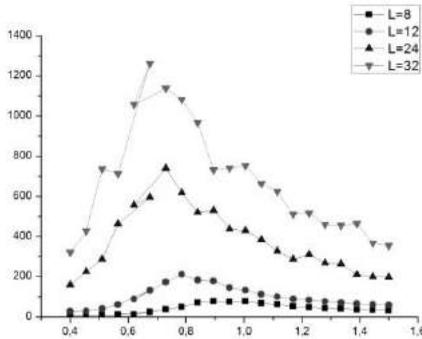


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости  $C(T)$  для  $L=12, 24$  и  $L=32$ , при  $T = 0.4..1.5$  с шагом  $0,055$

Индекс  $\nu$  был определен как  $\xi = |T - T_c|^{-\frac{1}{\nu}}$ , где под значением  $T$  принималась критическая температура бесконечной системы  $T_c(L)=0,539$ .

#### Значения критических индексов и сравнение их с результатами компьютерного моделирования

	метод	$\alpha$	$\gamma$	$\nu$
Heuer, 1993, $p = 0.8$	(MC)	–	1,35(3)	0,68(2)
Calabrese et. Al, 2003, $p = 0.8$	(MC)	–	1,33(8)	0,68(3)
Результаты данной работы $p = 0.8$	(MC)	0,12(3)	1,13(7)	0,80(6)

Сопоставление результатов данной работы со значениями критических индексов показывает хорошее согласие для двумерных систем с замороженными дефектами, моделируемых методом Монте-Карло.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] Вакилов А.Н., Прудников П.В., Прудников В.В. Суперкомпьютерные технологии в образовании и науке. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2013. С. 246.

[2] Муртазаев А.К. Исследование критических явлений в спиновых решеточных системах методами Монте-Карло // PACS numbers: 05.10.Ln, 05.70.Jk, 75.40.Cx.

[3] *Прудников В.В., Дорофеев С.В.* Критическое поведение модели Изинга с дальнедействующей корреляцией дефектов: метод коротковременной динамики // Вестник Омского университета. 2006. № 1. С. 27–29.

[4] *Прудников В.В., Вакилов А.Н.* Компьютерное моделирование процессов адсорбции на поверхности твердых тел и образования поверхностных наноструктур // Вестник Омского университета. 2011. № 2. С. 70–75.

[5] *Harris A.B.* Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C. 1974. Vol. 7. № 6. P. 1671–1692.

[6] *Jan N., Moseley L.L., Stauffer D.* Dynamic Monte Carlo renormalization group // J. Stat. Phys. 1983. Vol. 33, no. 1. P. 1–11.

[7] *Stauffer D.* Coarse graining, Monte Carlo renormalization, percolation threshold and critical temperature in the Ising model // nJ. Phys A. 1984. Vol. 17. P. L. 925–928.

---

Жанна Бейсембаевна Шарипова,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
zhannacooperation@yandex.ru

## Секция

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

---

### МЕТОДИКА ПОВЫШЕНИЯ УРОВНЯ УЧЕБНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ШКОЛЬНИКОВ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКЕ

**Д. А. Аманкулова**

*Научный руководитель: д-р пед. наук, доцент М. П. Ланкина*

В статье определяется понятие учебных возможностей школьников, описывается диагностика уровня учебных возможностей и методика его повышения в процессе обучения физике.

*Ключевые слова:* учебные возможности, уровни учебных возможностей, диагностика, методика повышения уровня учебных возможностей.

В современном обществе выявлена общая тенденция снижения качества знаний школьников, выражающаяся в виде школьной неуспеваемости, на которую влияют внешние и внутренние факторы. К внешним относят факторы, указывающие на целостность системы образования, влияние социума, а к внутренним – индивидуальные особенности учащегося. Повлиять на внутренние факторы нам не удастся, но мы можем повлиять на процесс обучения, используя при этом педагогические средства.

Понятие неуспеваемости зачастую связывают с учебными возможностями школьника – это его способности усвоения данного ему материала. Изучение учебных возможностей связано с *обучаемостью и обученностью* учащегося, с его *работоспособностью*, самостоятельностью, отношением к учению, заинтересованностью. При правильном сочетании этих аспектов с программой обучения физике можно развить учебные возможности, тем самым устранить неуспеваемость.

На констатирующем этапе педагогического эксперимента диагностика выявления уровней учебных возможностей школьников происходила по разработанной нами методике, включающей следующие элементы: анкету; тестовые задания по физике; комплект разноуровневых задач; тест на определение доминирующего типа восприятия информации; тест Беннета для оценки уровня развития технического мышления.

Констатирующий эксперимент проводился в БОУ Омской области «Многопрофильный образовательный центр развития одаренности № 117» в 9В (первая группа) и в 9Г (вторая группа) классах, не являющимися профильными по физике [1].

Результаты выполнения теста по физике были сопоставлены со шкалой отметок.

По уровням учебных возможностей школьники распределялись по следующим основаниям: анализ ответов на вопросы анкеты, результат тестирования, количество и уровень сложности решенных задач.

К первому – низкому – уровню отнесем учащихся, получивших отметку «2» за тест, не представивших ни одного правильного решения задачи, выразивших отрицательное отношение к предмету «физика», в анкете отметивших у себя неумение преодолеть лень.

На втором – среднем – уровне поместим учащихся, получивших «3» за тест, проявивших положительное отношение к предмету, представивших правильные решения 1–2 задач любой группы сложности с графическими элементами, продемонстрировавших способность преодолевать свою лень.

К третьему – высокому – уровню отнесем школьников, получивших за тест «4» или «5», проявивших положительное отношение к предмету, приведших правильные решения более двух задач любой группы сложности и любой формы представления информации, показавших способность преодолевать лень.

Результат распределения школьников двух групп по уровням учебных возможностей получился следующим: в первой группе число учащихся, имеющих низкие учебные возможности – 5, средние – 11, высокие – 8; во второй группе низкие учебные возможности имеют 11 человек, средние – 11, высокие – 2. «Группу

риска» образуют обучающиеся с низким уровнем учебных возможностей. Таких ребят 9 Г классе оказалось в 2 раза больше, чем в 9 В. Поэтому в дальнейшем нашем исследовании 9 В класс будет контрольной группой, а 9 Г – экспериментальной.

Обработка полученных результатов с помощью многофункционального критерия Фишера показывает, что доли учащихся с высоким уровнем учебных возможностей в двух группах значительно различаются, а для долей учащихся с низкими учебными возможностями значимых различий не выявлено [1].

Использование традиционных методов и форм обучения и педагогической диагностики не всегда приводит к повышению учебных возможностей учащихся. Однако существует ряд форм и методов, применение которых способствует повышению мотивации к учебно-познавательной деятельности. Поэтому нами предлагается следующая методика обучения физике школьников, имеющих низкие учебные возможности, которая состоит из трех этапов [2].

Первый этап проводится в игровой форме. Выяснилось, что испытуемые имеют различные доминирующие типы восприятия информации, поэтому на первом этапе обучения чередуются все типы представления информации. Игра называется «Брейн – ринг «Физика вокруг нас», состоит из 4 раундов, включающих задания по всем темам физики. В процессе обучения на первом этапе методом наблюдения выявлялась активность школьников. Нас интересовала работа тех ребят, которые имели низкие учебные возможности.

Второй этап обучения заключается в решении задач. На одном занятии разбираются задачи из демо-версии ОГЭ 9 класса по физике, в соответствии с учебными возможностями школьников. На другом занятии учащиеся решают задачи, аналогичные разобраным на предыдущем уроке.

Третий этап обучения требует от испытуемых самостоятельности, ответственности, сообразительности и других личностных качеств, а также применения знаний по физике. Каждой группе учащихся предлагаются 5-6 тем для опытов из какого-либо раздела физики, которые должны быть выполнены, оформлены и объяснены учащимися. В ходе этой работы ребята самостоятельно отмечали появившиеся у них трудности при выполнении опытов, т.е. нам удалось поставить их в рефлексивную позицию. В результате с препят-

ствиями справилось больше половины школьников. Каждой команде выставлялась средняя оценка, полученная суммированием всех оценок за каждый проект. Оценивание происходило по следующим критериям: содержательность информации, взаимосвязь с теорией, сопровождение фото-, аудио- или видеоматериалами, оригинальность проведения опыта, оформление презентации.

По окончании трех этапов обучения повторно проводится тест на выявление уровней учебных возможностей школьников.

Диагностика показала, что в экспериментальной группе больше половины учащихся перешли с первого на более высокие уровни учебных возможностей. В трех случаях прослеживается регресс, в причинах которого также следует разобраться детально. В контрольной группе сравнение результатов первичной диагностики и итогового теста с помощью многофункционального критерия Фишера не выявило статистически значимых отличий.

Подводя итоги поискового этапа нашей исследовательской работы, можем говорить об эффективности предложенной и апробированной методики повышения учебных возможностей.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Аманкулова Д.А., Ланкина М.П., Пастухова Ю.В.* Диагностика учебных возможностей школьников в процессе обучения физике // *Фундаментальные науки и образование [Электронный ресурс]: мат-лы VI Всерос.науч.-практ. конф. с междунар. участием. Бийск: АГГПУ им. В.М. Шукшина, 2016. С. 197–205. 1 CD-ROM.*

[2] *Аманкулова Д.А., Ланкина М.П.,* Низкие учебные возможности школьников: структура и способы их выявления // *Молодежь третьего тысячелетия [Электронный ресурс]: сборник научных статей–Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, 2017. С. 762–766. 1 CD-ROM.*

---

Динара Абаевна Аманкулова,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, 89609979112,  
mada-26-07@mail.ru

# ВЛИЯНИЕ ГЛЮКОЗЫ НА КРИСТАЛЛИЗАЦИЮ ФОСФАТОВ КАЛЬЦИЯ ИЗ ПЛАЗМЫ КРОВИ ЧЕЛОВЕКА

**С. А. Бескоровайна**

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

Исследованы фосфаты кальция, синтезированные из прототипа плазмы крови человека при варьировании концентрации глюкозы и времени кристаллизации. С помощью методов рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии обнаружено, что увеличение концентрации глюкозы в модельном растворе приводит в основном к образованию фазы гидроксиллапатита, при этом фаза фторгидроксиллапатит (ФГА) кристаллизуется из плазмы крови только при концентрации глюкозы  $9,1 \cdot 10^{-3}$  моль/л в течение 2 недель.

*Ключевые слова:* фосфаты кальция, биологические жидкости, растворение, кристаллизация, пересыщение, плазма крови.

## **Введение**

Известно, что важным компонентом плазмы крови человека являются моносахариды, например, глюкоза. Увеличение содержания сахара в крови и как следствие в слюне наблюдается при сахарном диабете [1]. Для людей с этой патологией отмечена склонность к камнеобразованию в полости рта. Поэтому, изучение процессов кристаллизации малорастворимых соединений, образующихся в организме человека, с целью профилактики и предотвращения заболеваний является перспективным направлением исследований [2].

Целью настоящего исследования являлось изучение влияния глюкозы на кристаллизацию фторапатита из плазмы крови человека.

## **Экспериментальная часть**

Кристаллизацию проводили в модельном растворе плазмы крови с добавкой глюкозы при температуре 40 °С. Для времени кристаллизации – 4, 6, 8 недель были использованы добавки глюкозы в 50 раз больше физиологической концентрации (физиологическая концентрация –  $4,55 \cdot 10^{-3}$  моль/л). Для времени синтеза

2 недели использовались добавки в 2, 5, 10, 15, 20, 25, 50 раз больше физиологической концентрации. Фазовый анализ проводили с использованием дифрактометра ДРОН-3М на  $\text{CuK}\alpha$ -излучении, исследование структуры соединений осуществлялось на ИК-спектрометре «ФТ-02».

### Результаты и их обсуждение

Методом рентгенофазового анализа (РФА) установлено, что при используемых в эксперименте условиях кристаллизации образуются фазы ГА (гидроксиапатит), ОКФ (октокальцийфосфат), ФГА (фторгидроксилапатит) и БР (брушит). На рис. 1 представлены дифрактограммы осадков, синтезированных из модельного раствора для разных времен кристаллизации и концентраций глюкозы. Количественный анализ показал, что процентное содержание фазы ГА составляет 70 %, ОКФ- 10 %, БР- 10 % и ФГА-10 %.

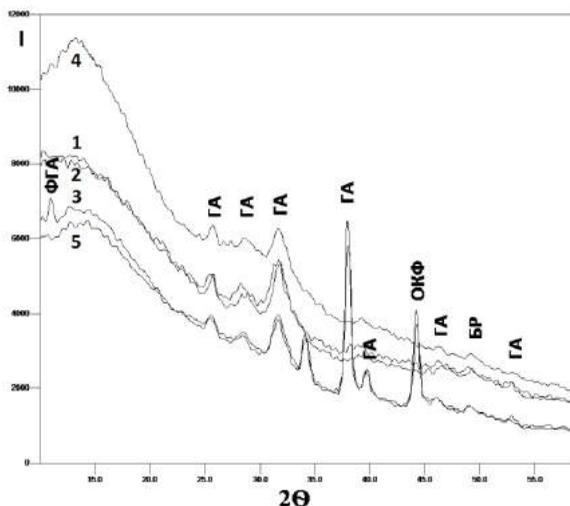


Рис. 1. Дифрактограммы осадков, синтезированных из модельного раствора:  
 1–2 недели, без глюкозы; 2–4 недели,  $4,55 \cdot 10^{-3}$  моль/л,  
 3–2 недели,  $9,1 \cdot 10^{-3}$  моль/л, 4–2 недели,  $114 \cdot 10^{-3}$  моль/л,  
 5–6 недель,  $227 \cdot 10^{-3}$  моль/л

На рис. 2 представлена гистограмма иллюстрирующая изменение средних размеров кристаллитов в кристаллизующихся фазах при различных концентрациях глюкозы.

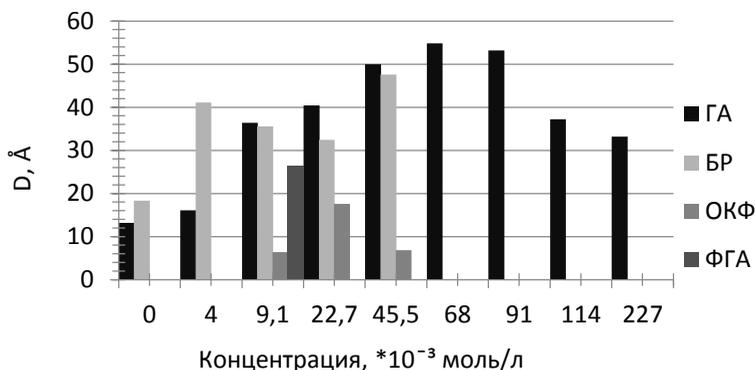


Рис. 2. Зависимость средних размеров кристаллитов от концентрации глюкозы для кристаллизующихся фаз

Видно, что при увеличении концентрации глюкозы размер кристаллитов ГА и БР увеличивается. При концентрациях от  $68$  до  $227 \cdot 10^{-3}$  моль/л фаза БР отсутствует. Кристаллиты ОКФ появляются только на 8 неделе кристаллизации, и при увеличении концентрации глюкозы средний размер кристаллитов увеличивается в два раза при концентрации  $22,7 \cdot 10^{-3}$  моль/л, дальнейшее увеличение приводит вновь к образованию кристаллитов ОКФ малых размеров. При дальнейшем повышении концентрации глюкозы фаза ОКФ не образуется. Кристаллы ФГА появляются только на 2 неделе кристаллизации при увеличении концентрации  $C_{\text{физ}} * 2 = 9,1 \cdot 10^{-3}$  моль/л.

С целью уточнения влияния параметров кристаллизации на структурные фрагменты были исследованы ИК-спектры синтезированных образцов. На рис. 3 представлены ИК-спектры осадков, полученных при варьировании времени (рис. 3а) и концентрации глюкозы (рис. 3б).

Установлено, что при анализе осадков, полученных при варьировании  $t = 4, 6, 8$  недель, при  $C_{\text{физ}} * 50 = 0,227$  моль/л (рис.3а) и при варьировании концентрации глюкозы  $C_{\text{физ}} * 5, 15, 20, 25, 50$ , при  $t = 2$  недели (рис.3б), образцы имеют следующие полосы поглощения: при  $\lambda = 565 \text{ см}^{-1}$  наблюдается трижды вырожденное деформационное колебание O–P–O в  $\text{PO}_4^{3-}$  (рис.3а) и (рис. 3б). При

$\lambda = 867 \text{ см}^{-1}$  наблюдается деформационное колебание O–C–O в  $\text{CO}_3^{2-}$  А-типа (рис. 3а) и (рис. 3б). При  $\lambda = 1033 \text{ см}^{-1}$  наблюдается асимметричное валентное колебание P – O в  $\text{PO}_4^{3-}$  (рис. 3а) и (рис. 3б). При  $\lambda = 1454 \text{ см}^{-1}$  (рис. 3а) и  $\lambda = 1446 \text{ см}^{-1}$  (рис. 3б) наблюдается асимметричные валентные колебания C–O в  $\text{CO}_3^{2-}$  В-типа. Данные частоты характерны для случая частичного встраивания карбонат-ионов в позиции фосфатных тетраэдров в структуре основного фосфата кальция (В-тип замещения). При  $\lambda = 1645 \text{ см}^{-1}$  (рис. 3а) и  $\lambda = 1628 \text{ см}^{-1}$  (рис. 3б) наблюдается деформационное колебание H–O–H в  $\text{H}_2\text{O}$ . И при  $\lambda = 3407 \text{ см}^{-1}$  (рис. 3а) и  $\lambda = 3402 \text{ см}^{-1}$  (рис. 3б) наблюдаются валентные колебания OH в  $\text{H}_2\text{O}$ .

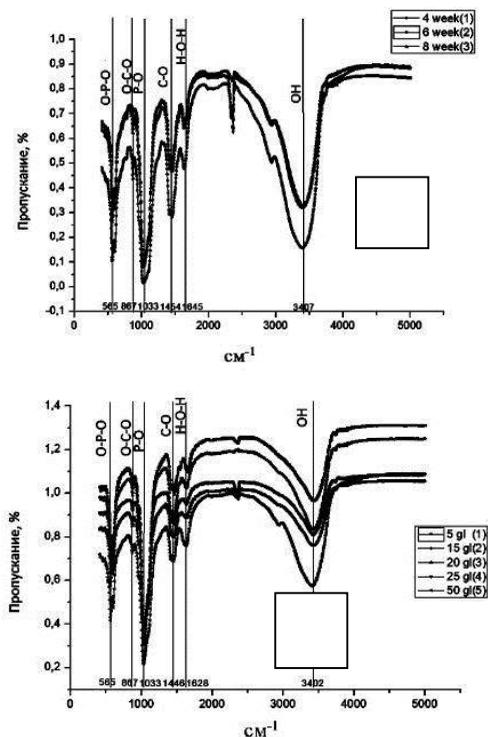


Рис. 3. ИК-спектры осадков, полученных при варьировании времени синтеза  $t = 4, 6, 8$  недель, при  $C_{\text{физ}} * 50 = 227 * 10^{-3}$  моль/л (а) и при варьировании концентрации глюкозы  $C_{\text{физ}} * 5, 15, 20, 25, 50$ , при  $t = 2$  недели (б)

Рентгенофазовый анализ показал, что в чистом виде ФГА кристаллизуется из плазмы крови только при концентрации глюкозы, превышающей физиологическое значение в два раза ( $9,1 \cdot 10^{-3}$  моль/л.), в течение 2-х недель. Средние размеры кристаллитов ФГА составили 26,4 Å. При остальных условиях кристаллизации формируется фазы - ГА, ОКФ и БР. Предварительный анализ ряда ИК-спектров для образцов с концентрацией глюкозы, превышающей физиологическое значение в 5, 15, 20, 25, 50 раз показал присутствие характерных полос для фаз ГА, БР и ОКФ.

### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Чиканова Е.С.* Кинетика образования и роста твердой фазы из модельных растворов биологических жидкостей: дис. ... канд. хим. наук. Омск, 2017. С. 92–94.

[2] *Голованова О.А., Солодянкина А.А.* Кристаллизация фосфатов кальция из растворов, моделирующих состав плазмы крови человека // Бутлеровские чтения: интернет-конференция. 2013. Т. 36, № 11. С. 104–109.

---

София Анатольевна Бескоровайная,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а,  
benq585256545@mail.ru

# ИССЛЕДОВАНИЕ СИНДРОМА ОБСТРУКТИВНОГО АПНОЭ СНА С ПОМОЩЬЮ ФАКТОРНЫХ МОДЕЛЕЙ И ДИСПЕРСИОННЫХ КОМПЛЕКСОВ

**Н. А. Диденко**

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

Статья посвящена проблеме выявления факторов прямо или косвенно оказывающих влияние на наличие у пациентов синдрома обструктивного апноэ сна (СОАС). С помощью факторных моделей определены существенные факторы для четырех групп пациентов по степени тяжести СОАС. Многофакторные дисперсионные комплексы сведены к однофакторным логическим решающим функциям. Определено, что наибольшее корреляционное отношение среди множества комбинаций параметров имеет ИМТ.

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

Целью работы является выявление с помощью факторного анализа и дисперсионных комплексов факторов, оказывающих влияние на наличие у пациентов СОАС.

Исследование проводилось на базе сомнологического отделения многопрофильного центра современной медицины «Евромед» (г. Омск) в рамках совместного научного сотрудничества. В нем приняли участие 253 пациента, у которых определялись 6 параметров для дисперсионного анализа: индекс массы тела (ИМТ), хронический тонзиллит (ХТ), хронический вазомоторный ринит (ХВР), ретромикрогнатия (РМГ), искривление носовой перегородки (ИНП) и пол, для факторного анализа дополнительно использовались следующие параметры: сатурация, индекс десатураций, возраст.

Первый вычислительный эксперимент проводился с помощью факторного анализа четырех групп с разной степенью тяжести апноэ, а именно: контрольная группа, пациенты с легкой, средней и тяжелой степенями тяжести апноэ.

Факторный анализ позволяет получить информацию о том, есть ли в массиве данных латентные факторы, которые оказывают

влияние на наличие заболевания. Факторное исследование проводилось по следующей схеме (рис. 1), где  $Y$  – матрица исходных данных,  $Z$  – матрица стандартизованных исходных данных,  $R$  – корреляционная матрица,  $\lambda$  – матрица собственных значений и  $U$  – матрица собственных векторов матрицы  $R$ ,  $A$  – матрица отображения,  $V$  – факторная структура после варимакс вращения [2].

$$Y_{mn} \rightarrow Z_{mn} \rightarrow R_{mm} \rightarrow \begin{matrix} \lambda \\ U \end{matrix} \rightarrow A_{mr} \rightarrow V_{mr}$$

Рис 1. Схема факторного анализа

Процесс выбора числа факторов, достаточных для описания системы, состоит в визуальном анализе графиков собственных значений корреляционных матриц методом «каменистой осыпи» (рис. 2).

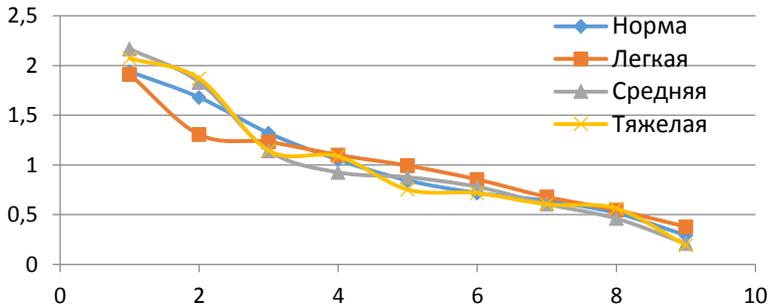


Рис. 2. Собственные значения корреляционных матриц

Анализируя графики собственных значений корреляционной матрицы можно увидеть, что для контрольной группы нет ярко выраженных факторов, которые могут оказывать влияние на наличие СОАС, следовательно, можно говорить об отсутствии нарушений гомеостаза в рамках данной системы. При переходе от легкой степени протекания заболевания к тяжелой, влияние факторов нарастает.

По значениям факторных нагрузок после варимакс-вращения определяется вклад параметров в каждый фактор. При легкой степени СОАС основное влияние на наличие заболевания оказывают гендерное различие, а также факторы, связанные с воспали-

тельными процессами в верхних дыхательных путях. При средней степени тяжести СОАС в основной фактор выделяются нарушения сатурации крови, дополнительным фактором является гендерное различие и возраст. При тяжелой степени СОАС сатурация снижена, наибольшее воздействие оказывает наличие РМГ и ИНП, в меньшей степени влияет хронический тонзиллит.

Второй эксперимент посвящен анализу дисперсионных комплексов. Дисперсионный комплекс – это совокупность градаций с привлеченными для исследования дискретными переменными или характеристиками, средними по каждой градации и по всему комплексу [3]. Основная идея эксперимента состоит в представлении исходных значений организованных факторов или их сочетаний в виде однозначных логических решающих функций, т. е. построение многофакторного дисперсионного комплекса можно свести к построению наборов однофакторных комплексов. Построение ЛРФ в дисперсионном комплексе для конкретного сочетания организованных факторов осуществляется переходом исходного набора значений в  $g_{\max}$ -ную систему счисления, где  $g_{\max}$  – максимальное значение из градаций организованных факторов.

Были проанализированы 64 различные комбинации с помощью однофакторного дисперсионного анализа. Мерой, по которой происходил анализ комплексов, является квадрат корреляционного отношения, вычисляемый по следующей формуле:

$$\eta_{\xi\phi}^2 = \frac{1}{\sigma_{\xi}^2} \sum_{i=0}^{n_{\phi}} \sum_{j=0}^{n_{\xi}} (M(\xi | x_i) - M(\xi))^2 p(x_i, y_j),$$

где  $\xi$  – результативный признак, а  $y_j$  – его  $j$ -ое значение,  $\phi$  – организованный фактор, а  $x_i$  – его  $i$ -ое значение,  $\sigma_{\xi}^2$  – дисперсия результативного признака  $\xi$ ,  $M(\xi | x_i)$  – математическое ожидание результативного признака при условии  $x_i$ ,  $M(\xi)$  – математическое ожидание результативного признака  $\xi$ ,  $p(x_i, y_j)$  – вероятность появления значений величин  $x_i, y_j$ .

В таблице представлены значения корреляционного отношения, для комбинаций параметров, имеющих максимальное значение для определенного числа параметров.

## Максимальные значения корреляционного отношения для разного числа параметров

	$\eta$	$\eta^2$
ИМТ	0,43	0,18
Пол	0,3	0,09
ИМТ+Пол	0,54	0,29
ИНП+Пол	0,37	0,14
ИМТ+ИНП+Пол	0,57	0,32
ХТ+ИНП+Пол	0,4	0,16
ИМТ+ХТ+ИНП+Пол	0,61	0,37
ХТ+ХВР+ИНП+Пол	0,44	0,19
ИМТ+ХТ+ИНП+РМГ+ПОЛ	0,65	0,42
ХТ+ХВР+ИНП+ПОЛ	0,48	0,23
воздействие всех факторов	0,71	0,5

Наибольшее влияние оказывает совокупность всех факторов. Комбинации факторов, содержащих параметр вес, почти всегда имеют большее значение силы влияния, нежели комбинации, которые не содержат данный параметр, причем квадраты корреляционного отношения во всех приведенных случаях различаются почти в 2 раза. Также стоит отметить, что параметры Пол и ИНП присутствуют во всех максимальных значениях квадрата корреляционного отношения, следовательно, также оказывают максимальное влияние на наличие СОАС.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бузунов Р.В., Легейда И.В., Царева Е.В. Храп и синдром обструктивного апноэ сна у взрослых и детей: Практическое руководство для врачей. М., 2013. 125 с.
- [2] Иберла К. Факторный анализ / пер. с нем. В.М. Иванова. М.: Статистика, 1980. 397 с.
- [3] Плохинский Н.А. Биометрия. М.: Изд-во МГУ, 1970. 367.

---

Наталья Андреевна Диденко,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а,  
tusik-didenko@mail.ru

# ВЫТЕКАЮЩИЕ МОДЫ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ

В. Д. Карина

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

Рассчитаны характеристики направляемых и вытекающих мод диэлектрического планарного симметричного волновода. Для определения комплексных корней характеристического уравнения использовался принцип аргумента.

*Ключевые слова:* диэлектрические волноводы, направляемые моды, вытекающие моды.

Оптические планарные волноводы (рис. 1) состоят из тонкой диэлектрической пленки с малыми оптическим поглощением и показателем преломления  $n_1$ , расположенной на прозрачной подложке с относительно малым поглощением и показателем преломления  $n_2$ , немного меньшим  $n_1$ . Показатель преломления среды над пленкой равен  $n_0$ .

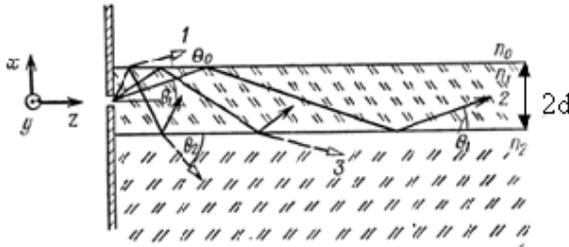


Рис. 1. Лучи в планарном волноводе

Лучи, для которых угол  $\theta_1$  удовлетворяет условию:

$$\theta_{2c} < \theta_1 < \theta_{0c}, \quad (1)$$

где  $\theta_{2c} = \arccos(n_2/n_1)$ ,  $\theta_{0c} = \arccos(n_0/n_1)$ , испытывают полное внутреннее отражение от границ пленки. Они соответствуют так называемым направляемым модам волновода, их поля в основном сосредоточены внутри пленки.

Постоянные распространения ТЕ-мод симметричного волновода ( $n_0 = n_2$ ) находятся из решения характеристического уравнения [1]:

$$\operatorname{tg} 2U = \frac{2UW}{U^2 - W^2}, \quad (2)$$

где  $U = d\sqrt{k^2 n_1^2 - \beta^2}$ ,  $W = d\sqrt{\beta^2 - k^2 n_2^2}$ ,  $k$  – волновое число для вакуума,  $\beta$  – проекция волнового вектора на ось  $z$  или постоянная распространения.

Вещественные  $\beta$  соответствуют направляемым модам. Для направляемых мод  $kn_2 \leq \beta \leq kn_1$  и для каждой частоты принимает дискретный набор значений. Равенство  $\beta = kn_2$  определяет частоты отсечки, то есть наименьшие частоты направляемых мод, которые могут распространяться в волноводе. Однако уравнение (2) имеет и комплексные дискретные корни. Они соответствуют волнам с частотами ниже частот отсечки. Поля этих волн затухают в направлении распространения и не убывают в направлении, перпендикулярном границам волноводной пленки. Эти волны называются вытекающими модами. Направляемые моды могут трансформироваться в вытекающие моды при изменении толщины волноводной пленки, показателей преломления пленки и окружающей среды и частоты волны. Через вытекающие моды можно выразить моды излучения, для которых значения  $\beta$  непрерывны и лежат в интервале  $0 < \beta < kn_2$ .

Для вычисления комплексных корней уравнения (2) использовался принцип аргумента [2]. Согласно теореме Гаусса:

$$\sigma_p = \frac{1}{2\pi j} \oint_C z^p \frac{f'(z)}{f(z)} dz = \sum_{k=1}^N \zeta_k^p, \quad (3)$$

где  $f(z)$  – функция комплексного аргумента  $z$ ,  $\zeta_k$  – корни, этой функции, лежащие внутри контура  $C$ ,  $P = 0, 1, 2, \dots$ ,  $j$  – мнимая единица.

Через  $\sigma_1, \dots, \sigma_N$  вычисляются коэффициенты полинома  $S(z)$  степени  $N$ , имеющего те же корни,  $\zeta_1 \dots \zeta_N$  как и у функции  $f(z)$  внутри  $C$ :

$$S(z) = \sum_{k=0}^N c_k z^k, \quad (4)$$

$c_N = 1$ , коэффициенты  $c_k$  задаются с помощью рекуррентных формул:

$$(N-k)c_k + \sigma_1 c_{k+1} + \sigma_2 c_{k+2} + \dots + \sigma_{N-k} c_N = 0, \quad (5)$$

где  $k = N-1, \dots, 0$ .

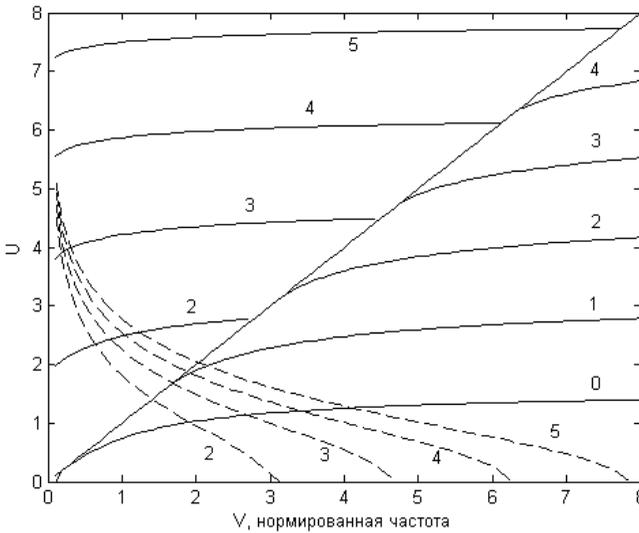


Рис. 2. Зависимости вещественных и мнимых частей  $U$  от нормированной частоты

Нули многочлена  $S(z)$ ,  $\zeta'_i$ , не совпадают с нулями функции  $f(z)$ ,  $\zeta_i$ , из-за ошибок, полученных при вычислении интеграла (3). Поэтому необходимо выполнить уточнение корней. Для того чтобы уточнить корень  $\zeta'_i$  вычисляем интегралы:

$$I_1 = \frac{1}{2\pi j} \oint_{C_R} \frac{dz}{f(z)}, \quad (6)$$

$$I_2 = \frac{1}{2\pi j} \oint_{C_R} \frac{z dz}{f(z)}. \quad (7)$$

В качестве контура интегрирования выбираем окружность с центром в  $\zeta'_i$ :

$$I_1 = \frac{1}{f'(\zeta_i)}, \quad (8)$$

$$I_2 = \frac{\zeta_i}{f'(\zeta_i)}. \quad (9)$$

Следовательно, уточненный корень равен  $\zeta_i = I_2 / I_1$ .

На рис. 2 представлены графики зависимостей вещественных (сплошные кривые) и мнимых частей (пунктирные кривые)  $U$  от нормированной частоты  $V = kd\sqrt{n_1^2 - n_2^2}$ . Числа у кривых – номера мод. Вытекающей моды с номером 0 не существует. Прямая соответствует условию отсечки:  $\text{Re}(U) = V$ . Части кривых, расположенные ниже и выше этой прямой, являются зависимостями  $\text{Re}(U)$  от  $V$  для направляемых и вытекающих мод соответственно.

### ЛИТЕРАТУРА

[1] Унгер Х.-Г. Планарные и волоконные оптические волноводы. М., 1980. 646 с.

[2] Anemogiannis E., Glytsis E.N. Multilayer Waveguides: Efficient Numerical Analysis of General Structures// Journal of lightwave technology, 1992. Vol. 10, № 10. P. 1344–1351.

---

Виктория Дмитриевна Карина,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
karinadoch@bk.ru

## **ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО НАГРЕВА НА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЙ ФОСФАТ КАЛЬЦИЯ ЛЕГИРОВАННЫЙ КРЕМНИЕМ**

**Д. Ю. Кокош**

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

Представлены результаты рентгенографического анализа фосфата кальция легированного кремнием различной концентрации, подвергнутого термическому нагреву. Обнаружено встраивание силикат ионов в кристаллическую решетку гидроксилатапата и уменьшение размеров кристаллитов, что способствует увеличению удельной поверхности и повышению биорезорбируемости.

*Ключевые слова:* фосфат кальция, кремний, биополимер, композитный материал, рентгенофазовый анализ.

Одним из перспективных способов повышения биорезорбируемости и остеоиндукции биоматермалов на основе гидроксилатапата (ГА) является химическое модифицирование гидроксилатапата биогенными элементами [1]. Силикат-ионы являются естественной компонентой межтканевой жидкости. Кремний это жизненно важный микроэлемент для формирования кости и поддержания нормальной ее структуры, необходим для процесса минерализации костной ткани. Известно, что синтетические кальций-фосфатные биоматериалы, содержащие кремний в своих структурах, обладают повышенной биологической активностью по сравнению с незамещенным ГА, способствуют улучшению пролиферации остеобластов, росту внеклеточного матрикса, а также ускорению минерализации костной ткани [2].

Целью настоящей работы является изучение влияния термического нагрева на структурно-фазовый состав фосфата кальция при варьировании концентрации кремния и времени кристаллизации.

В качестве объектов исследования использовались образцы фосфата кальция с различной концентрацией кремния (5 %, 15 %, 20 %, 30 %), полученные при временах кристаллизации 24 ч и 48 ч по методу осаждения [4]. Отжиг осуществлялся при температурах 800 °С, 900 °С, 1000 °С в течение 1 часа. Исследование характери-

стик полученных образцов проводилось с использованием методов рентгенофазового анализа.

Исследования показали, что при кристаллизации происходит образование стехиометрического ГА гексагональной сингонии. Дифрактограммы ГА и Si-ГА идентичны и полностью соответствуют дифрактограмме эталонного гидроксиапатита, что свидетельствует о монофазности синтезируемых образцов.

Анализ образцов фосфата кальция отожженных при температуре 800 °С после 24 ч кристаллизации показал, что с увеличением концентрации Si происходит сдвиг пиков в сторону больших углов и возрастание интенсивности дифракционных максимумов, что свидетельствует о повышении степени кристалличности формирующегося ГА (рис. 1).

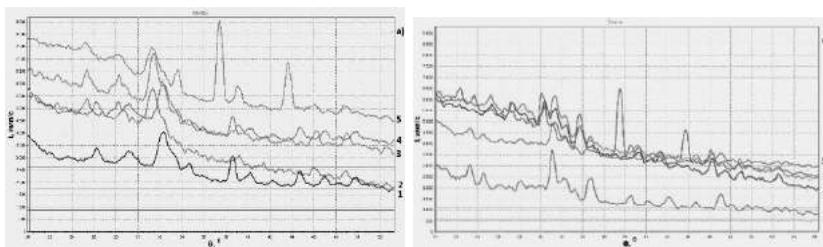


Рис. 1. Дифрактограммы фосфата кальция отожженного при температурах а) 800 °С и б) 1000 °С (время кристаллизации 24 ч): 1 – чистый ГА, 2 – ГА+5%Si, 3 – ГА+15%Si, 4 – ГА+20%Si, 5 – ГА+30%Si

При увеличении температуры отжига до 900 °С максимальная интенсивность пиков наблюдается при концентрации кремния 15 %. Отжиг при температуре 1000 °С привел к смещению пиков в сторону больших углов, что соответствует уменьшению межплоскостных расстояний и изменению параметров элементарной ячейки порошка Si-ГА по сравнению с не модифицированным ГА. Это свидетельствует о встраивании в решетку силикат-ионов с увеличением концентрации Si до 20 %.

В таблице представлены отношения параметров элементарной ячейки с/а для всех исследованных в работе композитов. Происходит преимущественный рост с-оси с увеличением концентрации кремния. Параметры элементарной ячейки сравнивались с

данными международной картотеки JCPDS карточка № 9-432:  $a = 9,418 \text{ \AA}$ ;  $c = 6,884 \text{ \AA}$ ) для ГА стехиометрического состава [3].

### Отношение параметров $c/a$ ГА и Si-ГА для разных температур отжига

	Без отжига	800	900	1000
	$c/a$	$c/a$	$c/a$	$c/a$
ГА-24ч	0,697	0,730	0,730	0,719
ГА-48ч	0,695	0,728	0,730	0,718
ГА+5%Si-24ч	0,719	0,730	0,707	0,719
ГА+5%Si-48ч	0,713	0,728	0,705	0,718
ГА+15%Si-24ч	0,731	0,743	0,717	0,730
ГА+15%Si-48ч	0,728	0,745	0,715	0,725
ГА+20%Si-24ч	0,732	0,743	0,717	0,757
ГА+20%Si-48ч	0,732	0,741	0,716	0,756
ГА+30%Si-24ч	0,732	0,755	0,765	0,768
ГА+30%Si-48ч	0,731	0,752	0,763	0,764

Установлено, что объем элементарной ячейки изменяется от  $56,28 \text{ \AA}^3$  (при  $n = 5\%$  Si без отжига) до  $71,68 \text{ \AA}^3$  (при  $n = 30\%$  Si  $T = 1000 \text{ }^\circ\text{C}$ ), что свидетельствует о встраивании Si в решетку ГА.

На рис. 2 представлено изменение размеров кристаллитов от концентрации кремния для разных температур отжига.

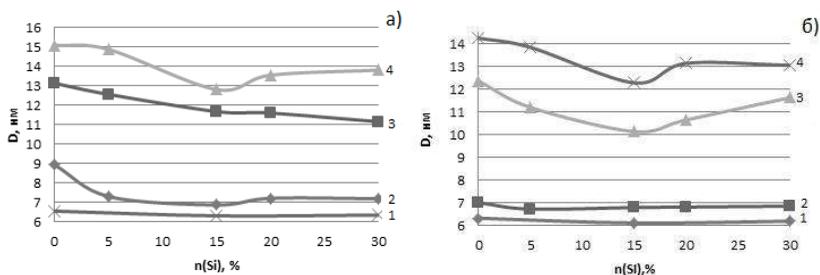


Рис. 2. Зависимость размеров ОКР от концентрации Si при различной температуре отжига а) 24 ч кристаллизации, б) 48 ч кристаллизации:  
1 – ГА без отжига, 2 – 800  $^\circ\text{C}$ , 3 – 900  $^\circ\text{C}$ , 4 – 1000  $^\circ\text{C}$

Из рис. 2 видно, что размеры кристаллитов ГА, синтезированного в течение 24 ч. выше у образцов, отожженных при темпе-

ратуре 1000 °С, при этом максимальное значение наблюдается у чистого ГА. Минимальные размеры кристаллитов обнаружены у ГА без отжига и с отжигом при концентрации Si- 15%. С добавлением кремния в ГА уменьшается размер кристаллитов, тем самым увеличивается удельная поверхность и биорезорбируемость материала.

### **Заключение**

Обнаруженное уменьшение размеров кристаллитов ГА при кристаллизации кремний-замещенного гидроксилapatита приводит к увеличению удельной поверхности, что способствует лучшей резорбируемости и биоактивности ГА. С увеличением температуры отжига наблюдается повышение степени кристалличности.

### **ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Захаров Н.А., Беляевская Т.В., Чалых А.Е.* Ультрадисперсные порошки биосовместимого  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ : синтез, термообработка, свойства. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2006. Т. 8, № 1. С. 18–24.

[2] *Климашина Е. С.* Синтез, структура и свойства карбонатзамещенных гидроксилapatитов для создания резорбируемых biomaterialов: автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 2011. 23 с.

[3] Powder Diffraction File (inorganic phases). Swarthmore: Joint Committee on Powder Diffraction Standards (JCPDS) File # 9-432.

[4] <http://www.findpatent.ru/patent/258/2580728.html>.

---

Дарья Юрьевна Кокош,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
kokoshdasha@yandex.ru

# ФАРМАКОКИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДОЗИМЕТРИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ РАДИОНУКЛИДНОЙ ТЕРАПИИ КОСТНЫХ МЕТАСТАЗОВ

**М. Ю. Корнеева**

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

Разработан программный комплекс расчета индивидуальных фармакокинетических и дозиметрических характеристик при радионуклидной терапии костных метастазов на основе четырехкамерной модели кинетики остеотропного РФП в организме человека. Приведены две методики расчета поглощенных доз. Приведены и проанализированы результаты моделирования.

*Ключевые слова:* фармакокинетическое моделирование, радиофармпрепарат, дозиметрическое планирование, программный комплекс.

Целью данной работы являлась разработка программного комплекса расчета индивидуальных фармакокинетических и дозиметрических характеристик при радионуклидной терапии костных метастазов.

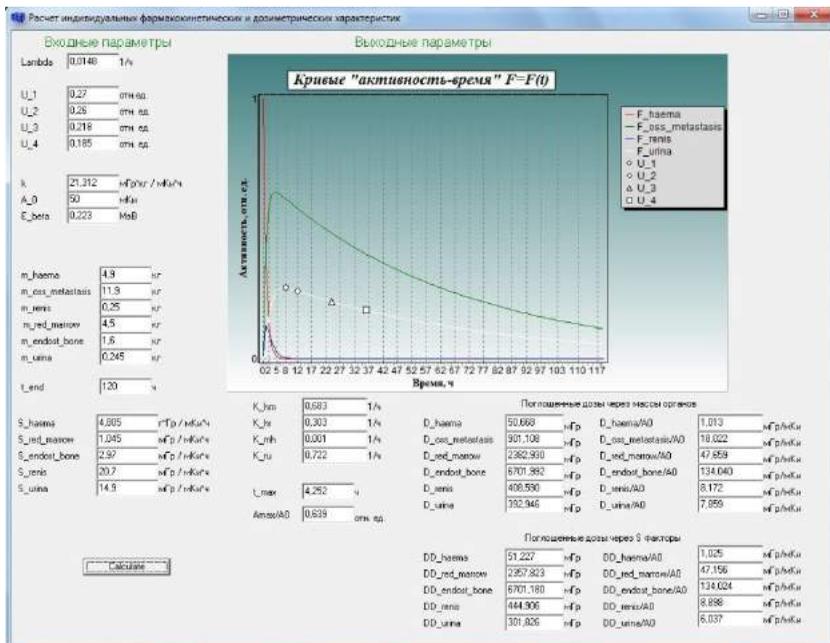
Для описания кинетики остеотропного РФП в организме была использована четырехкамерная модель [1], в которой выделены следующие компартменты: плазма крови, костная ткань с метастазами, почки и резервуар выведения (мочевой пузырь). Система уравнений для данной модели и нахождение функций активности в каждой камере, а также методика определения транспортных констант, отражающих процессы накопления-выведения РФП для каждой камеры, представлены в наших работах [2; 3].

Зная временные зависимости функций накопления-выведения  $^{153}\text{Sm}$ -оксабифора в камерах, можно рассчитать поглощенные радиационные дозы в критических органах, моделируемых соответствующими кинетическими камерами. В данной работе было использовано два подхода к расчету поглощенных доз: через массы соответствующих критических органов и через S-факторы. Первый подход был рассмотрен в наших работах [2; 3]. В рамках

второго подхода используется следующая общая формула для расчета поглощенной дозы на соответствующую камеру:

$$D = A_0 \cdot S(M \leftarrow I) \cdot \int_0^{\infty} F(t) dt,$$

где  $A_0$  – введенная активность,  $F(t)$  – функция удержания РФП в соответствующей камере,  $S$  –  $S$ -фактор для конкретного органа,  $I$  – орган-источник,  $M$  – орган-мишень. В данном случае была рассмотрена ситуация, когда орган-мишень является органом-источником. Табличные значения  $S$ -факторов для каждого органа были взяты из [4–6].



Графический интерфейс программного комплекса расчета фармакокинетических и дозиметрических характеристик

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 раз-

личного происхождения. На рисунке представлен графический интерфейс программного комплекса на примере данных для первого пациента. Программой рассчитаны транспортные константы, время максимального накопления РФП и относительная активность в камере костной ткани с метастазами, поглощенные дозы на каждую камеру в рамках двух подходов, а также построен график функций активности для каждой из четырех камер модели.

### **Заключение**

1. Разработан программный комплекс моделирования и дозиметрического планирования при радионуклидной терапии костных метастазов. С использованием результатов радиометрических измерений экскреции РФП у трех пациентов, проходящих радионуклидную терапию, рассчитаны кинетические параметры динамики активности в организме, позволившие определить двумя способами дозиметрические характеристики облучения ряда критических органов.

2. Анализ результатов дозиметрических расчетов двумя способами показывает, что полученные в ходе радионуклидной терапии лучевые нагрузки на критические структуры пациентов (кровь, красный костный мозг, эндостальный слой кости, почки, мочевого пузыря) хорошо согласуются между собой и являются клинически допустимыми.

### **ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Доля О.П., Матусевич Е.С., Клепов А.Н.* Математическое моделирование кинетики транспорта остеотропного радиофармпрепарата в организме пациентов с метастазами в кости // *Ядерная медицина.* 2007. № 2. С. 40–50.

[2] *Корнеева М.Ю.* Модель кинетики остеотропного радиофармпрепарата в организме больных с костными метастазами // *ФМХ ОмГУ-2017: сборник статей V Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии.* Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2017. С. 136–139.

[3] *Матвеев А.В., Корнеева М. Ю.* Модель кинетики остеотропного радиофармпрепарата и определение поглощенных доз при радионуклидной терапии костных метастазов // *Вестн. Ом. ун-та,* 2018. Т. 23, № 1. С. 35–42.

[4] *Logan K.W., Volkert W.A., Holmes R.A.* Radiation dose calculations in persons receiving injection of samarium-153-EDTMP. // J. Nucl. Med., 1987, 28, No. 4, P. 505–509.

[5] *Bouchet L. G., Bolch W.E., Howell R.W., Rao D.V.* S values for radionuclides localized within the skeleton. // J. Nucl. Med., 2000, 41, No. 1, P. 189–212.

[6] *Heggie J. C. P.* Radiation absorbed dose calculations for samarium-153 EDTMP localized in bone // J. Nucl Med., 1991, 32, No. 5, P. 840-844.

---

Мария Юрьевна Корнеева,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
korneevamaria11@gmail.com

## ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ОКСАЛАТНЫХ ПОЧЕЧНЫХ КАМНЕЙ В ФИЗИОЛОГИЧЕСКОМ МОДЕЛЬНОМ РАСТВОРЕ

**Е. А. Левицкая**

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

Изучены особенности кристаллизации одноводного оксалата кальция при варьировании концентрации добавок меди, цинка, железа и фосфатов кальция. С помощью рентгенофазового анализа установлено, что добавление фосфатов кальция приводит к образованию фаз карбонатгидроксилапатита и гидроксилапатита. При добавлении меди, цинка и железа фазовый состав оксалатов кальция сохраняется, однако изменяется степень кристалличности. В ходе экспериментов по растворению неорганических добавок обнаружено положительное влияние препарата «Аспаркам» на растворение оксалатных камней.

*Ключевые слова:* моногидрат оксалата кальция, неорганические добавки, кристаллизация, рентгенофазовый анализ, растворение.

Мочекаменная болезнь в настоящее время остается важной медико-социальной проблемой. В последнее время наблюдается тенденция к неуклонному росту заболеваемости. Гиподинамия, нарушение питания, снижение иммунологических параметров организма являются теми факторами риска, которые способствуют развитию нарушений фосфорно-кальциевого обмена как одного из компонентов процесса камнеобразования [1]. Несмотря на развитие и совершенствование оперативных технологий, таких как дистанционная и контактная литотрипсия, лапароскопическая уретеролитотомия, по мнению многих авторов, актуальным является применение консервативного лечения, направленного на растворение и самостоятельное отхождение почечных камней [2]. Известно, что образование оксалатных камней, во многом зависит от неорганических компонентов физиологических жидкостей [2]. Особенно важную роль играют железо, цинк, медь, фосфор содержание которых составляет большую часть от неорганического состава почечных камней, поэтому в качестве добавок были выбраны именно эти элементы [3].

Для кристаллизации использовали двухводный хлорид кальция и добавки меди, цинка, железа и фосфатов кальция различных концентраций. pH раствора доводили до необходимого значения при помощи 30 % раствора NaOH и раствора HCl. Для кристаллизации было подобрано пересыщение  $\gamma = 100$ . Фазовый анализ проводился с использованием методик качественного рентгенофазового анализа. Дифрактограммы снимались на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3М на медном  $K_{\alpha}$ -излучении.

На рис. 1 представлено сравнение дифрактограмм оксалата кальция без добавок и с добавками. Установлено, что синтез оксалата кальция в присутствии железа, цинка и меди не изменяет фазового состава, но приводит к изменению степени кристалличности. Так при добавке цинка и меди с концентрацией 0,00065 и 0,00129 ммоль/л; железа при всех используемых в эксперименте значениях концентраций происходит возрастание интенсивности рефлексов от плоскостей (101), (110) (рис. 1а), что свидетельствует о росте кристаллов моногидрата оксалата кальция. При добавке цинка и меди с концентрацией 0,00820 и 0,00032 ммоль/л значительных изменений количественного фазового состава не обнаружено, что говорит о том, что при этих концентрациях добавки цинка и меди не оказывают существенного влияния на рост кристаллов. Добавление фосфатов кальция приводит к образованию фазы карбонатгидроксилапатита и гидроксилапатита. Причем дифрактограммы фосфатов с концентрациями 146,4 ммоль/л, 109,8 и 73,2 ммоль/л практически идентичны и отличаются, только по величине интенсивности (рис. 1б). При добавлении фосфатов кальция с концентрацией 109,8 ммоль/л обнаружено возрастание процентного содержания фазы карбонатгидроксилапатита, что свидетельствует об уменьшении кристаллизации фазы оксалата кальция.

С целью изучения методов лечения и диагностики мочекаменной болезни, нами была проведена серия экспериментов по растворению синтезированного оксалата кальция без добавок и с добавками. Результаты эксперимента представлены в виде графика зависимости концентрации ионов  $Ca^{2+}$  от времени (рис. 2). Растворение проводили, используя препарат «Аспаркам». В течение часа фиксировались значения концентрации ионов кальция с различным интервалом.

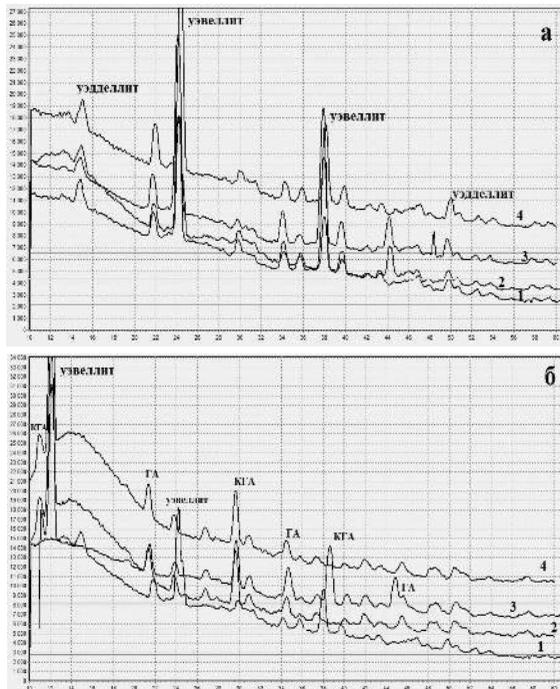


Рис. 1. Дифрактограммы оксалата кальция с добавлением цинка, железа, меди (а: 1 – CaOx ; 2 – CaOx+Zn; 3 – CaOx+Fe; 4 – CaOx +Cu) и с добавлением фосфатов (б: 1 – CaOx; 2 – CaOx +x4PO<sub>4</sub>; 3 – CaOx +x6PO<sub>4</sub>; 4 – CaOx +x8PO<sub>4</sub>)

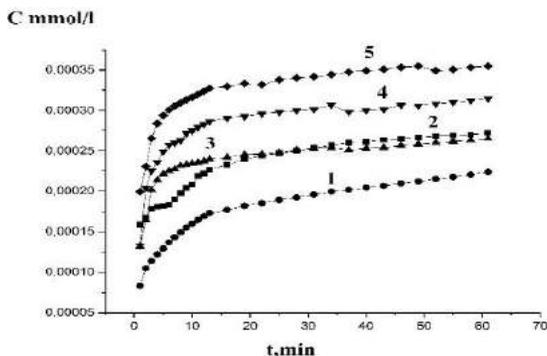


Рис. 2. Кинетика растворения оксалата кальция с различными добавками: 1 – CaOx+Zn; 2 – CaOx; 3 – CaOx+H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>; 4 – CaOx+Fe; 5 CaOx+Cu

Видно, что при растворении концентрация оксалата кальция без добавок и с добавками в растворе увеличивается, при этом скорости растворения оксалата кальция с добавками различаются. Самая высокая скорость растворения обнаружена у образцов с добавками меди (0,026 ммоль/мин), с меньшей скоростью растворяются железо (0,023 ммоль/мин) и фосфаты (0,02 ммоль/мин). Скорость растворения оксалата кальция без добавок – 0,012 ммоль/л, а самая низкая скорость растворения у образцов с добавкой цинка (0,007 ммоль/мин). Исходя из этого, можно сделать вывод о том, что препарат «Аспаркам» способствует ускоренному растворению оксалатов и неорганических компонентов мочевой кислоты, с максимальной скоростью для компонентов меди, а также предотвращает дальнейшую кристаллизацию оксалатных камней. Ограниченное количество калия в препарате позволяет расширить показания к его применению в случаях, где содержание калия в организме имеет клиническое значение.

Таким образом, в результате проделанной работы установлено, что неорганические компоненты физиологических жидкостей являются в основном катализаторами роста кристаллов оксалатов кальция. В ходе экспериментов по растворению моногидрата оксалата кальция с неорганическими добавками установлено положительное влияние препарата «Аспаркам» на растворение оксалатных камней, наиболее интенсивное растворение наблюдалось у оксалата кальция с добавкой меди.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Аляев Ю.Г., Руденко В.И., Газимиев М.С.* Мочекаменная болезнь. Актуальные вопросы диагностики и выбора метода лечения. М.: Тверь: Триада. 236 с.

[2] *Голованова О.А.* Патогенные минералы в организме человека. Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2007. 395 с.

[3] *Григорьев Н.А., Семенякин И.В., Малхасян В.А.* Мочекаменная болезнь. Урология, Приложение 2, 2016. С. 37–69.

---

Екатерина Анатольевна Левицкая,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
katrin\_great.94@mail.ru

# ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ГЕМОГЛОБИНА НА УРОВНЕ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ

**А. А. Лопандина**

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

Методом электростатической силовой микроскопии определена статическая диэлектрическая проницаемость индивидуальных молекул гемоглобина. Полученная величина диэлектрической проницаемости гемоглобина согласуется с литературными данными для белков.

*Ключевые слова:* гемоглобин, электростатическая силовая микроскопия, диэлектрическая проницаемость.

Гемоглобин (Hb), являясь одним из важнейших редокс-протеинов, рассматривается как перспективный материал для чувствительных элементов биосенсоров. Для изучения механизмов чувствительности и проектирования конструкции элементов, необходимо знать диэлектрические параметры молекул белка. Уникальным методом изучения диэлектрических свойств индивидуальных наноструктур является электростатическая силовая микроскопия (ЭСМ), обладающая высокой чувствительностью и латеральным разрешением порядка единиц нанометров.

Образец для исследования готовился следующим образом. На расщепленную поверхность высоко ориентированного пиролитического графита (ВОПГ) наносились 25 мкл готового водного раствора Hb с концентрацией 70 мкг/мл. После инкубации в течение 20 минут подложки аккуратно отмывались в дистиллированной воде для удаления неадсорбированного белка и высушивались на воздухе.

Сканирование поверхности ВОПГ с иммобилизованными молекулами Hb производилось на атомно-силовом микроскопе MFP-3D SA (Asylum Research). ЭСМ измерения проводились в естественной атмосфере, при постоянном электрическом смеще-

нии на зонде в диапазоне 1–7 В и высоте подъема зонда над образцом на втором проходе 30-100 нм. В работе использовались проводящие кантилеверы серии ETALON HA\_FM (NT-MDT SI, Россия) с Pt покрытием, с резонансной частотой ~100 кГц и радиусом закругления зонда ~35 нм.

На рис. 1 схематично представлена геометрия ЭСМ эксперимента. На подложке ВОПГ расположен исследуемый объект – молекула гемоглобина – высотой  $D$ . На постоянной высоте  $h$  над образцом находится зонд с радиусом закругления острия  $R_{tip}$ . Между зондом и подложкой прикладывается постоянное напряжение  $U$ .

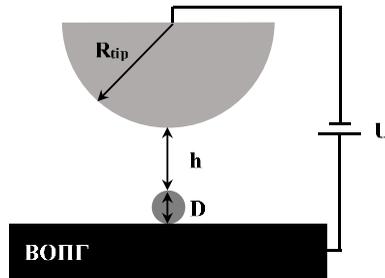


Рис. 1. Схематическое представление ЭСМ эксперимента

Согласно результатам работы [1] фазовый сдвиг колебаний кантилевера, обеспечиваемый емкостной связью зонд-образец задается выражением:

$$tg(\varphi) = \frac{Q}{2k} C''(h) U^2, \quad (1)$$

где  $Q$  и  $k$  – добротность и жесткость кантилевера, соответственно;  $C''(h)$  – вторая производная емкости системы зонд-образец.

Разность сдвига фаз колебаний кантилевера в присутствии и в отсутствии исследуемого объекта между можно записать как:

$$tg(\Delta\varphi) = \frac{Q}{2k} (C_2''(h) - C_1''(h)) U^2, \quad (2)$$

где, согласно [1], вторая производная емкости системы зонд-подложка есть:

$$C_1''(h) = 2\varepsilon_0(\pi R_{tip}^2) \frac{1}{h^3}, \quad (3)$$

вторая производная емкости системы зонд-объект-подложка есть:

$$C_2''(h) = 2\varepsilon_0(\pi R_{tip}^2) \frac{1}{(h+D/\varepsilon)^3}, \quad (4)$$

где  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость объекта – молекулы гемоглобина,  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная.

На основе уравнений (2)–(4) определялась диэлектрическая проницаемость молекул Нв. При расчетах использовались следующие параметры кантилевера:  $Q = 234$  и  $k = 3,4$  Н/м.

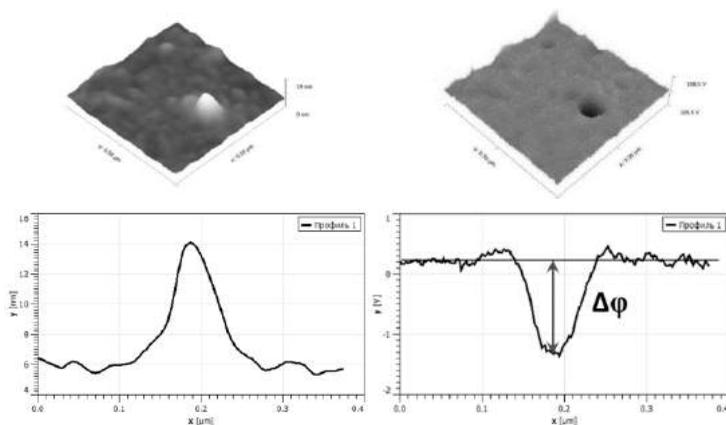


Рис. 2. 3D АСМ (слева) и ЭСМ (справа) изображения индивидуальной молекулы Нв и профили поперечного сечения изображений. ЭСМ изображение получено при  $h = 30$  нм и  $U = 7$  В.

На рис. 2 в качестве примера представлены 3D изображения молекулы Нв на поверхности ВОПГ, полученные на первом и втором проходах, а также профили поперечного сечения этих изображений вдоль молекулы Нв. По топографическим изображениям первого прохода определялась высота молекул Нв, а по ЭСМ изображениям второго прохода определялась разница между ЭСМ сигналом от подложки с молекулой белка и ЭСМ сигналом от подложки.

Для проверки того, что ЭСМ контраст от молекулы Нв обусловлен емкостной связью зонд-образец, а не связан с наличием свободных зарядов на молекуле белка, строился график зависимости  $\text{tg}(\Delta\varphi)$  от  $U^2$ . Рис. 3 демонстрирует строгую линейную зависимость  $\text{tg}(\Delta\varphi)$  от  $U^2$ , что согласно (1), свидетельствует о том, что контраст изображений молекул Нв определяется исключительно емкостной связью зонд-образец.

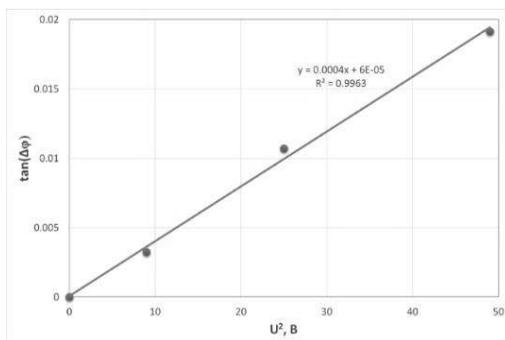


Рис. 3. Зависимость  $\text{tg}(\Delta\varphi)$  от  $U^2$  для молекулы Hb при  $h = 30$  нм.

В таблице представлены среднее значение и разброс величины диэлектрической проницаемости Hb, полученные на основе анализа ЭСМ изображений индивидуальных молекул.

### Диэлектрическая проницаемости Hb

Параметр	Рассчитанное значение	Литературные данные [2]
Диэлектрическая проницаемость Hb	2,51 $\square$ 1,57	2–4

Полученное значение средней диэлектрической проницаемости молекул гемоглобина хорошо согласуется с литературными данными [2].

### ЛИТЕРАТУРА

[1] *Staii C., Johnson A.T., Pinto N.J.* Quantitative Analysis of Scanning Conductance Microscopy // Nano letters. 2004. Vol. 4. № 5. С. 859–862.

[2] *Esteban-Ferrer D., Edwards M.A., Fumagalli L., Jurez A., Gomila G.* Electric Polarization Properties of Single Bacteria Measured with Electrostatic Force Microscopy // ACS nano. 2014. Vol. 8, № 10. P. 9843–9849.

---

Анастасия Александровна Лопандина,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
lopnasti@mail.ru

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЛУЧА ДЛЯ РАСЧЕТА ПОЛЕЙ НАПРАВЛЯЕМЫХ МОД В ОПТИЧЕСКОМ МОДУЛЯТОРЕ

**К. А. Отмахов**

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

Для проектирования оптических интегральных схем важно выполнить предварительный расчет распределений электрических полей световых волн в различных узлах схемы. В работе методом распространения луча выполнены расчеты распределений интенсивности световой волны в волноводном интерферометре типа Маха-Цендера, служащим модулятором.

*Ключевые слова:* оптическая интегральная схема, оптический модулятор, метод распространения луча.

Модулятор – важная компонента оптической интегральной схемы. С его помощью в световую волну вносится информация путем изменения одного из параметров волны. В настоящей работе рассматривается модулятор интенсивности интерференционного типа. В волноводном интерферометре типа Маха-Цендера [1] (рис. 1) с идентичными плечами при отсутствии приложенного напряжения фазовые сдвиги волн в обоих плечах одинаковы и в выходном волноводе интенсивность излучения максимальна. Подача напряжения вызывает вследствие электрооптического эффекта изменение показателя преломления одного из плеч. Фазовые сдвиги волн перестают быть одинаковыми. Интенсивность излучения в выходном волноводе уменьшается. При разности фаз, равной  $\pi$ , она обращается в нуль.

Для проектирования оптических интегральных схем важно выполнить предварительный расчет распределений электрических полей световых волн в различных узлах схемы. Аналитические расчеты возможны только в ограниченном числе случаев. Одним из численных методов решения волнового уравнения является метод распространения луча [2]. С помощью метода распространения луча ищется приближенное решение скалярного волнового уравнения (или уравнения Гельмгольца):

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

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

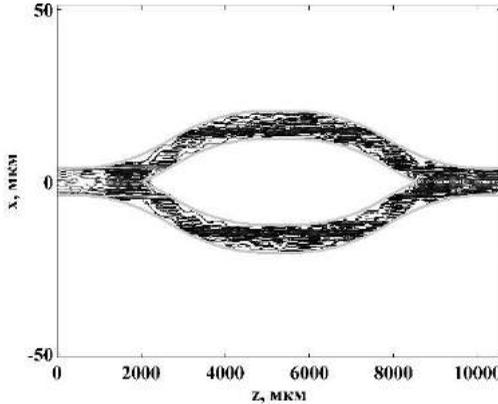


Рис. 1. Распределение интенсивности в модуляторе Маха-Цендера при отсутствии изменения показателя преломления в одном из плеч интерферометра

Пусть волна распространяется в оптическом волокне или волноводной пленке. Вдоль преимущественного направления распространения волны проводим ось  $z$ . Представим напряженность электрического поля в виде произведения быстро меняющейся функции  $z$  и огибающей, медленно меняющейся при изменении  $z$ :

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

$\beta$  – проекция волнового вектора на ось  $z$ , называемая постоянной распространения,  $j$  – мнимая единица.

Если показатель преломления волноводного канала мало отличается от показателя преломления окружающей среды,  $\beta$  можно считать равным волновому числу в окружающей среде:

$$\beta \approx kn_0, \quad (3)$$

$n_0$  – показатель преломления окружающей среды, считаем его независимым от координат.

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

$$n \rightarrow N = n - j\alpha / k. \quad (4)$$

С помощью метода эффективного показателя преломления [2] задачу можно свести к двумерной. Тогда уравнение на функцию  $\phi$  запишется так:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = -j \frac{1}{2kn_0} \nabla^2 \phi - \alpha \phi - jk [n(x, z) - n_0] \phi. \quad (5)$$

При численном решении уравнения область изменения  $z$  делится на малые отрезки  $h$ . Вычисление функции  $\phi(x, z + h)$  можно разделить на 3 этапа:

1. Распространение в свободном пространстве на первой половине шага  $h/2$ :

$$\phi\left(x, z + \frac{h}{2}\right) = F^{-1} \left[ \exp\left(-\frac{j\delta\gamma h}{2}\right) F \{ \phi(x, z) \} \right]. \quad (6)$$

2. Потери (или усиление) и изменение фазы на всем шаге  $h$ :

$$\bar{\phi}\left(x, z + \frac{h}{2}\right) = \exp\left\{-h[\alpha(x, z + h) + jk[n(x, z + h) - n_0]]\right\} \times \\ \times \phi\left(x, z + \frac{h}{2}\right). \quad (7)$$

3. Распространение в свободном пространстве на второй половине шага  $h/2$ :

$$\phi(x, z + h) = F^{-1} \left[ \exp\left(-\frac{j\delta\gamma h}{2}\right) F \left\{ \bar{\phi}\left(x, z + \frac{h}{2}\right) \right\} \right]. \quad (8)$$

Здесь оператор  $F$  обозначает преобразование Фурье,  $F^{-1}$  обозначает обратное преобразование Фурье,  $\delta\gamma = \left[ k^2 n_0^2 - (2\pi\rho)^2 \right]^{1/2} - kn_0$ ,  $\rho$  – пространственная частота.

Описанным методом выполнены расчеты распределения интенсивности в модуляторе Маха-Цендера при следующих параметрах: волноводные каналы имеют квадратное поперечное сечение, их ширина 8 мкм, толщина 8 мкм, расстояние между серединами плеч 25 мкм, их длины 800 мкм, угол между плечами при их разделении  $0.6^\circ$ , разность показателей преломления волноводных каналов и

окружающей среды составляет 0.3 % от показателя преломления волноводных каналов. Шаг принимался равным  $h = 0.1$  мкм.

На рис. 1 и 2 приведены результаты расчетов. Более темная окраска соответствует большей интенсивности. Во втором случае интенсивность на выходе меньше, чем в первом.

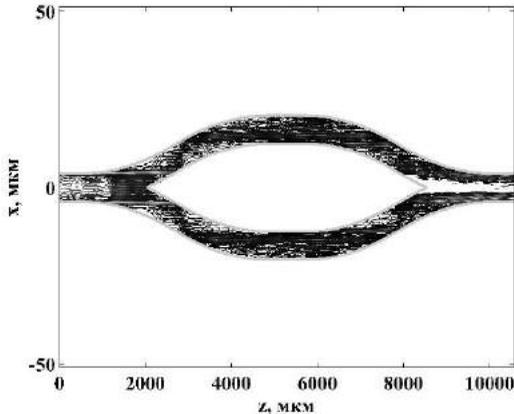


Рис. 2. Распределение интенсивности в модуляторе Маха-Цендера при наличии изменения показателя преломления в верхнем плече, приводящем к разности фаз  $\pi$  на выходе

Метод распространения луча может быть применен для расчета не только модуляторов, но и других устройств интегральной оптики.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Семенов А.С., Смирнов В.Л., Шмалько А.В. Интегральная оптика для систем передачи и обработки информации. М., 1990. 224 с.
- [2] Katsunari Okamoto, Fundamentals of Optical Waveguides. 2006. 561 с.

---

Кирилл Андреевич Отмахов,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
Шлеkojladkaaaa@gmail.com

# СТАНДАРТИЗАЦИЯ ТЕПЛОВИЗИОННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ДЛЯ КЛИНИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПЕРЕДНЕЙ ПОВЕРХНОСТИ ШЕИ

**И. А. Пастушенко**

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

Проведено тепловизионное обследование здоровых индивидуумов с помощью тепловизора «ТКВр-ИФП СВИТ». При анализе термограмм установлено, что оптимальным расстоянием от поверхности тела до объектива при записи термограмм, в положении сидя, является 50 см, отсутствие наклона шеи относительно горизонтальной и вертикальной оси тепловизионной камеры, профильная запись, после адаптации организма к условиям помещения для исследования.

*Ключевые слова:* термография, методика записи термограмм.

## **Введение**

Известно, что диагностические возможности тепловидения основаны на оценке особенностей распределения на поверхности тела зон излучения ИК (3–5 и 8–13 мкм) диапазона [1]. Так как этот метод бесконтактный, безвреден для больного и обслуживающего персонала, может выполняться многократно и при любой тяжести состояния больного, поэтому он является оптимальным для скрининг-диагностики (нативная диагностика) и оценки состояния исследуемого в период восстановления (функциональная диагностика), например, при восстановлении после операций на щитовидной железе или околощитовидных железах где, как правило повреждается возвратный нерв. Возможность нарушения или потери голоса связана с тем, что в непосредственной близости от щитовидной железы и околощитовидных желез проходят гортанные нервы – верхний и нижний. Нервы имеют очень малую толщину – верхний гортанный нерв имеет диаметр около 1 мм, а нижний гортанный нерв (его еще называют возвратным гортанным нервом) – от 2 до 4 мм. При этом и место прохождения нервов, и их количество, и диаметр могут различаться у разных людей. Расстояние от желез до нервов не более 1 мм. При раке щитовидной железы по-

вреждение возвратного нерва происходит в большинстве случаев. Симптомы повреждения возвратного нерва: затруднения при разговоре; нарушения фонации; затрудненное дыхание; утрата возможности самостоятельного дыхания (необходимость проведения трахеостомии).

Целью настоящего исследования являлось разработать методику записи термограмм при обследовании пациентов с повреждениями возвратного нерва.

### **Экспериментальная часть**

Обследование осуществлялось на группе здоровых на момент эксперимента мужчин и женщин, в возрасте от 18 до 30 лет, в помещении с постоянной температурой 19–21°C при относительной влажности 60–75 %. В выделенном пространстве были исключены выраженные воздушные потоки и температурные перепады. С целью исключения фонового излучения окна и батареи были экранированы. Исследование передней части шеи проводилось в положении сидя после 15-минутной адаптации к условиям помещения в состоянии мышечного покоя. В качестве области для исследования выбрана передняя поверхность шеи, верхняя часть грудной клетки, а также подчелюстная область, что обусловлено анатомическими особенностями. Запись термограмм проводилась программным обеспечением «Sibtherm» медицинским комплексом «ТКВр-ИФП СВИТ».

### **Результаты и их обсуждение**

При варьировании расстояния от 1 метра, до 20 см (с шагом в 10 см) в положении сидя, было установлено, что вся область при любой комплекции человека, имеющего любые размеры области шеи, полностью попадает в кадр, сохраняя при этом достаточное количество пикселей для статистических расчетов, на расстоянии 50 см от объекта исследования до объектива тепловизора.

Также была опробована съемка при различных поворотах головы, но в этом случае возникает вопрос необходимости фиксации. На данный момент оптимального способа не придумано, особенно если учитывать различную локализацию рубцовой ткани.

Для определения среднего времени релаксации, исследуемые проводили вне помещения 15 минут, после чего почти сразу производилась съемка необходимой для анализа области.

## **Заключение**

В ходе работы была определена необходимая область исследования: передняя поверхность шеи, верхняя часть грудной клетки, а также подчелюстная область, определено оптимальное расстояние для положения сидя равное 50 см. Также было выяснено, что температурный режим окружающей среды оказывает значительное влияние на организм, а следовательно искажает результаты исследования. На основании этого было определено среднее время релаксации для пациента равное 10 минутам. Для снижения погрешности в серии снимков, совершенных через необходимые временные промежутки, установлена необходимость создания устройств фиксации положений исследуемого.

## **ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Заяц Г.А., Коваль В.Т.* Медицинское тепловидение – современный метод функциональной диагностики // *Здоровье. Медицинская экология.* 2010. № 43. С. 27–33.

---

Инесса Александровна Пастушенко,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, 8-999-454-24-36,  
kiranoshii@gmail.com

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АЗОТ-МЕТАЛЛОСОДЕРЖАЩИХ ПЛЕНОК ПОЛИВИНИЛЕНОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ SPIN-COATING

**А. А. Подлинова**

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

Исследованы вольтамперные характеристики пленок, полученных после проведения дегидрохлорирования. Исследованы температурных зависимостей сопротивления пленочных образцов в диапазоне температур 290–400 К. Согласно полученным данным, добавки наполнителя ( $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ ) оказывают влияние на величину сопротивления пленок, а также на величину энергии активации. Синтезированные азот-металлосодержащие пленки поливиниленов, полученные методом Spin-Coating дают удельное сопротивление порядка  $10^7$ – $10^8$  Ом·см.

*Ключевые слова:* вольтамперные характеристики, температурные зависимости, пленки поливиниленов, сопротивление, энергия активации.

## **Введение**

В настоящее время производство углеродных материалов (УМ) является одним из самых масштабных в мире. Особое место занимают пористые углеродные материалы (ПУМ) [1].

Особенно актуальными задачами в области ПУМ являются создание материалов с заданной пористой структурой и обеспечение возможности их получения в разнообразных геометрических формах (волоконистые материалы, пленки, покрытия, гранулы, литые изделия и т. п.) [2].

Целью работы является исследование электрофизических свойств азот-металлосодержащих пленок поливиниленов, полученных методом Spin-Coating.

## **Описание исследуемых материалов:**

**Получение пленок.** Для получения пленок методом spin-coating использовали центрифугу установки фотолитографии. Частоту вращения шпинделя можно было плавно регулировать до максимального значения равного 3000 об/мин. Каплю раствора наносили дозатором в центр подложки и на малой частоте враще-

ния добивались равномерного распределения раствора по поверхности подложки в виде сплошного слоя.

Введем обозначения исследуемых материалов:

**PVC – 1.1:** материал, полученный дегидрохлорированием ПВХ в ДМСО под действием анилина.

**PVC – 1.2:** материал, полученный дегидрохлорированием ПВХ в ДМСО под действием анилина в присутствии 20 %  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$ .

**PVC – 1.3:** материал, полученный дегидрохлорированием ПВХ в ДМСО под действием анилина в присутствии 20 %  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ .

**Методика эксперимента.** На всех пленках были сняты вольтамперные характеристики (ВАХ) и температурные зависимости в координатах Аррениуса. А также получены изображения участков пленок в атомно-силовом микроскопе (АСМ). В данной работе использовалась схема измерения сопротивления (рис. 1).

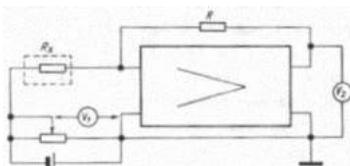


Рис. 1. Схема измерения сопротивления с помощью электрометрического усилителя У5-6

АСМ изображение поверхности пленок азотсодержащих поливиниленов (после стадии сушки в течение 24 часов и отжига при температуре  $60^\circ\text{C}$  в течение 0,5 часа) приведено на рис.2. Хорошо видно, что пленка имеет развитый рельеф и состоит из крупных и мелких частиц (гранул) округлой формы образующих пористый слой.

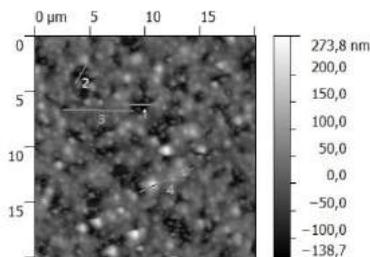


Рис. 2. АСМ изображение участка пленки азотсодержащих поливиниленов

ВАХ материала PVC – 1.1 имеет линейный характер (рис. 3.), зависимость описывается законом Ома.

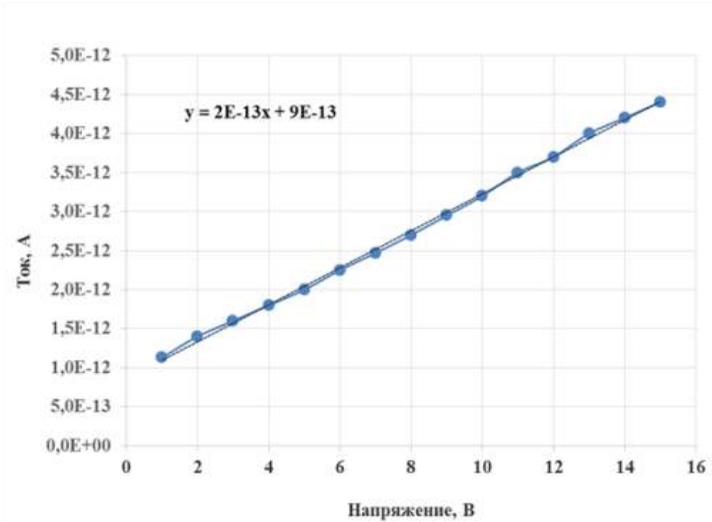


Рис. 3. ВАХ полимерного материала после проведения дегидрохлорирования ПВХ анилином (PVC – 1.1)

Температурная зависимость материала PVC – 1.2 носит активационный характер (рис. 4).

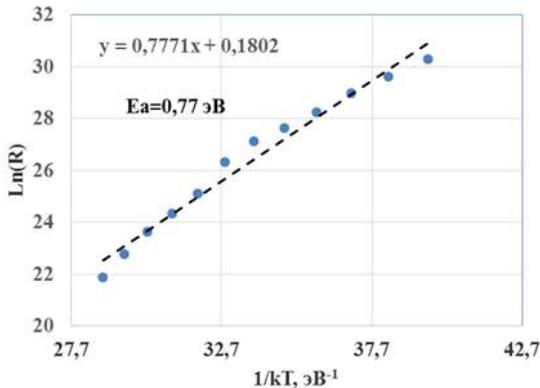


Рис. 4. Температурная зависимость сопротивления в координатах Арениуса полимерного материала после проведения дегидрохлорирования ПВХ анилином (PVC – 1.1)

Также были получены вольтамперные характеристики (ВАХ) и температурные зависимости в координатах Аррениуса для пленок с добавками наполнителя ( $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ ).

### **Заключение**

1) ВАХ материалов, полученных после проведения дегидрохлорирования под действием анилина имеют линейный характер и подчиняются закону Ома.

2) Добавки наполнителя ( $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ ) оказывают влияние на величину сопротивления пленок. Величина сопротивления пленки с добавкой  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$  уменьшилась в 20 раз, относительно пленки без добавки наполнителя.

3) Температурные зависимости, исследуемых образцов носят активационный характер. Энергии активации для материалов, после проведения дегидрохлорирования под действием анилина с добавками наполнителя составляет 0,67 эВ (PVC-1.2) и 0,49 эВ (PVC-1.3), что говорит о существовании энергетического барьера при перемещении заряда.

4) Синтезированные азот-металлосодержащие пленки поливиниленов, полученные методом Spin-Coating дают удельное сопротивление порядка  $10^7$ – $10^8$  Ом·см.

### **ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Солодовниченко В.С.* Синтез, строение и физикохимические свойства углеродных материалов на основе полихлорвиниленов: диссертация. Омск: ОмГТУ, 2013. 148 с.

[2] *Кодолов В.И., Хохряков Н.В.* Химическая физика процессов формирования и превращений наноструктур и наносистем: монография. Т. 2. Ижевск: ФГОУ ВПО ИжГСХА, 2009. 416 с.

---

Анастасия Александровна Поддинова,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
2404nastya@mail.ru

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ ТЕПЛОВОГО ПОТОКА НА ПРЕДПЛЕЧЬЕ ЧЕЛОВЕКА

**К. А. Тимашев, А. В. Москвитин**

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

Исследованы распределения температуры и поверхностной плотности теплового потока на предплечьях правой и левой руки человека. Определены коэффициенты теплоотдачи на участках предплечий. Проведено сравнение коэффициентов теплоотдачи поверхности предплечий при физической нагрузке и без нее.

*Ключевые слова:* клиническая термография, плотность теплового потока, коэффициент теплоотдачи организма, датчик теплового потока.

В последнее время все большее применение достижения физики находят в медицине. Немалый интерес представляют тепловые процессы, протекающие в человеческом теле. В данной работе исследовалась зависимость между тепловыми потоками и температурой на поверхности человеческого тела.

Цель: установить соответствие между тепловыми потоками и температурой на выбранных участках человеческого тела.

Объектом исследования в данной работе является связь между тепловыми потоками и поверхностной температурой человеческого тела.

Измерения плотности тепловых потоков проводились датчиком теплового потока ДТП 0924-Э-Д 27-0, датчиком с эпоксидным заливающим компаундом, выполненным в форме диска с диаметром 27 мм, без встроенной термопары, изготовленным АО НПП «Эталон». Датчик имеет коэффициент преобразования  $39 \text{ В}/(\text{Вт}/\text{м}^2)$  и сопротивление 317 Ом. Термограммы областей, в которых определялась плотность тепловых потоков, были получены тепловизором «ПергаМед».

В ходе работы измеряемой величиной являлось напряжение, в которое преобразовывался тепловой поток, проходя через датчик. Для измерения данного напряжения использовался мульти-

метр универсальный SBM PММ-1000 в режиме измерения постоянного напряжения, с пределом измерения в 200 мВ.

После снятия показаний вольтметра, напряжение было переведено в поверхностную плотность теплового потока с помощью формулы:

$$q = \frac{E}{K_{\text{пр}}}, \quad (1)$$

где  $q$  – поверхностная плотность теплового потока, Вт/м<sup>2</sup>;  $E$  – напряжение, мВ;  $K_{\text{пр}}$  – коэффициент преобразования, В/(Вт/м<sup>2</sup>),  $K_{\text{пр}} = 39 \text{ В}/(\text{Вт}/\text{м}^2)$  (известен от производителя датчика).

На основании полученных значений поверхностной плотности теплового потока и температуры в месте расположения датчика теплового потока был определен коэффициент теплоотдачи поверхности, используя следующее выражение:

$$K_{\text{то}} = \frac{q}{T_{\text{пов}} - T_{\text{окр}}}, \quad (2)$$

$K_{\text{то}}$  – коэффициент теплоотдачи, Вт/(м<sup>2</sup>\*К);  $q$  – поверхностная плотность теплового потока, Вт/м<sup>2</sup>;  $T_{\text{пов}}$  и  $T_{\text{окр}}$  – температуры поверхности предплечья и окружающей среды, °С.

Для выяснения влияния физической нагрузки на процессы теплообмена были проведены измерения плотности теплового потока без физической нагрузки и с нагрузкой. Физическая нагрузка заключалась в 10 вращательных движениях в локтевом и плечевом суставах.

Показания снимались на 8 точках обоих предплечий трех пациентов. Интервал между точками составлял 3 см.

В результате проведенных исследований получены распределения температуры (рис. 1) и поверхностной плотности теплового потока (рис. 2) по поверхности предплечья и определены коэффициенты теплоотдачи (рис. 3) в зонах на данной поверхности.

Из представленных данных видно, что с приближением к локтевому суставу температура внутренней поверхности предплечья увеличивается, что очевидно связано с интенсивностью кровотока. В тоже время, плотность теплового потока слабо уменьшается. Сравнения для предплечий показывает, что поверхностная температура левого предплечья в среднем выше, чем у правого, все исследуемые были людьми с доминирующей правой рукой. Коэффициент теплоотдачи поверхности предплечья с приближе-

нием к локтевому суставу уменьшается в 1,3 раза. При проведении нагрузочной пробы коэффициент теплоотдачи увеличивается в 1,25 раза.

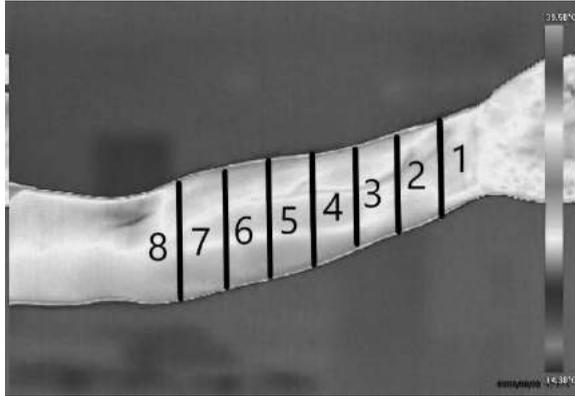


Рис. 1. Термограмма предплечья левой руки с обозначением зон измерения плотности теплового потока

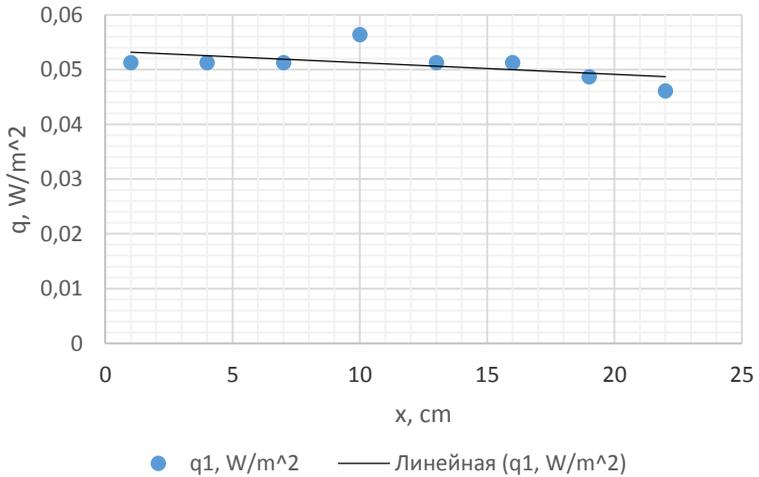


Рис. 2. Распределение теплового потока на предплечье правой руки

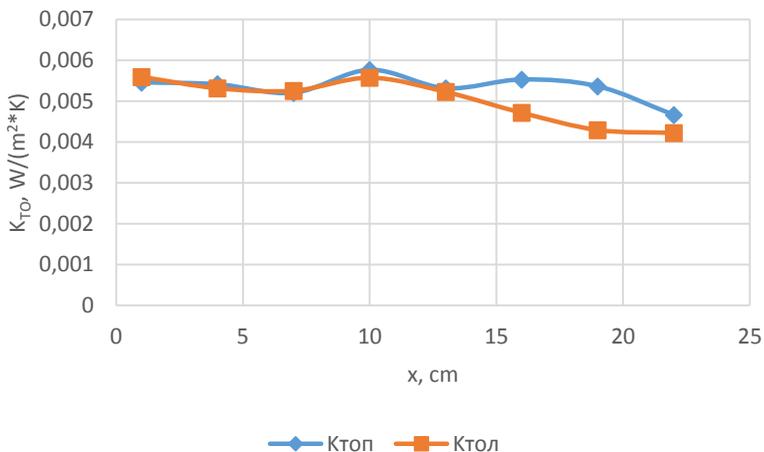


Рис. 3. Коэффициенты теплоотдачи на предплечьях правой и левой рук

Представленные результаты показывают, что, используя измерение температуры человеческого тела тепловизионным методом и измерение плотности тепловых потоков с помощью термоэлектрического датчика плотности теплового потока, можно определить все основные параметры, характеризующие тепловые процессы на поверхности человеческого тела. Данные результаты могут быть полезны для ранней диагностики патологий сердечно-сосудистой системы и для определения реакций организма на внешние воздействия, такие как нагрузочные пробы или изменения условий окружающей среды.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Теория теплообмена / под ред. А.И. Леонтьева. М.: Изд. МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1997. 683 с.
- [2] Цветков Ф.Ф., Григорьев Б.А. Теплообмен. М.: Изд. МЭИ, 2001. 549 с.
- [3] АО НИП «Эталон». URL: <http://www.omsketalon.ru>.
- [4] URL: <http://fiziologija.vse-zabolevaniya.ru>.
- [5] Лекция 8. Основы термодинамики и биоэнергетики. URL: <https://studydoc.ru>.

[6] Тепловизионный медицинский комплекс «ПергаМед», инструкция по эксплуатации.

[7] Мультиметр универсальный SBM PMM-1000, инструкция по эксплуатации.

[8] A. Pharo Gagge, Richard R. Gonzalez. Mechanisms of heat exchange: biophysics and physiology.

---

Кирилл Андреевич Тимашев,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
timashevkirill@gmail.com

Александр Владимирович Москвитин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
MoskvitinAV@omsu.ru

## ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ДИОКСИДА КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

Е. В. Филонина

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

В работе рассматриваются тонкие пленки диоксида кремния, полученные золь-гель методом, прошедшие отжиг при температурах в 200°C, 300°C, 400°C, 500°C и 600°C. Определен коэффициент пропускания и ширина запрещенной зоны пленок диоксида кремния. Выяснена зависимость коэффициента пропускания и ширины запрещенной зоны от температуры отжига.

*Ключевые слова:* золь-гель метод, коэффициента пропускания, ширины запрещенной зоны, диоксид кремния.

Пленки оксидов ряда металлов, получаемые золь-гель синтезом, нашли широкое применение как чувствительные слои микроэлектронных газовых сенсоров. Под золь-гель синтезом понимается совокупность процессов, при которых в изначально гомогенном растворе формируется дисперсная фаза, частицы которой в дальнейшем могут образовывать структурную сетку. Возможны несколько направлений использования золь-гель синтеза для формирования пленок оксидов металлов. Одним из этих направлений является прямое нанесение раствора с золей на подложку с последующим отжигом полученной пленки. Отличительной особенностью пленок оксидов металлов, полученных золь-гель синтезом, является их высокая пористость, которой можно управлять путем выбора режимов отжига. Наличие высокой пористости делает данные пленки перспективным носителем биорецепторов при построении микро и наноэлектронных биосенсоров[1].

Целью работы является исследование зависимости коэффициента пропускания пленок диоксида кремния, полученных золь-гель методом, от температуры отжига.

Рассмотрение проводится на примере пленок диоксида кремния, получаемых из растворов на основе TEOS.

В процессе формирования оксидной пленки из раствора следует выделить три этапа:

I этап – получение раствора. Начинается с приготовления раствора и включает в себя процесс его созревания. На этом этапе протекают две химические реакции: гидролиз и поликонденсация. В результате этих реакций в растворе формируются частицы золя. Ядро частицы составляет диоксид кремния. На поверхности частицы находятся ОН-группы.

На II этапе, проводится нанесение пленки из раствора. При нанесении оксидной пленки из раствора происходят следующие процессы: испарение растворителя из жидкой пленки; контактное взаимодействие между частицами золя и поверхностью подложки, в результате чего обеспечивается адгезия нанесенной пленки к подложке; контактное взаимодействие между частицами золя с образованием пространственной структуры, которая характеризует нанесенную пленку.

На III этапе, термообработка нанесенной пленки. При термообработке нанесенной оксидной пленки происходит спекание полимерных частиц, в результате чего окончательно формируется оксидная пленка [2].

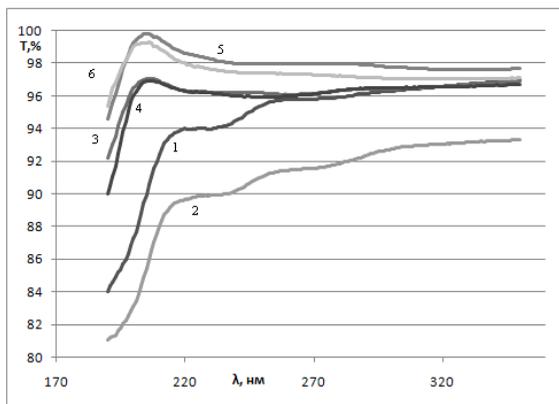
Для получения золь-гель раствора использовались: TEOS, этанол, дистиллированной воды и концентрированной HCl.

Созревание геля проходило в течение 35 дней [3].

В качестве подложек использовались подложки из кварцевого стекла. Нанесение раствора на подложку осуществлялось методом центрифугирования при 2000 оборотов в минуту. Сушка полученных пленок проводилась в интервале температур от 200 °C до 600 °C в атмосфере воздуха с интервалом, равным 100 °C, в течение 15 мин. В итоге были получены образцы пленок SiO<sub>2</sub>, сформированных при 25 °C, 200 °C, 300 °C, 400 °C, 500 °C и 600 °C.

Для полученных пленок произведено исследование оптических характеристик коэффициента пропускания. Исследовались спектры пропускания пленок на спектрофотометре СФ-56 дифференциальным методом в диапазоне 190–1100 нм.

На рисунке представлены спектры пропускания пленок диоксида кремния в диапазоне длин волн 180–350 нм.



Спектры пропускания пленок диоксида кремния в диапазоне 190–350 нм при температурах отжига:

1 – 25 °С, 2 – 200 °С, 3 – 300 °С, 4 – 400 °С, 5 – 600 °С, 6 – 500 °С

Из данных зависимостей видно, что в диапазоне от 210–230 нм происходит резкое возрастание коэффициента пропускания. Выше 230 нм значение коэффициента пропускания у всех пленок лежат в диапазоне от 90 % до 98 %. Наибольшее значение коэффициента пропускания характерны для пленок, прошедших отжиг при 600 °С (табл. 1).

Таблица 1  
Соотношение температуры отжига и коэффициента пропускания при 350 нм

<i>T</i> отж., °С	<i>T</i> , %
25	96,8
200	93,5
300	96
400	96
500	96,2
600	97,8

На основании полученной зависимости коэффициента пропускания, была определена ширина запрещенной зоны для пленок SiO<sub>2</sub>, полученных золь-гель методом. Ширина запрещенной зоны определялась из зависимости квадрата коэффициента пропускания

от энергии излучения. Представленные данные (табл. 2) показывают, что с увеличением температуры отжига от 200 °С до 600 °С ширина запрещенной зоны увеличивается от 5,25 эВ до 6,15 эВ.

Таблица 2

**Значения ширины запрещенной зоны в пленках диоксида кремния при разных температурах отжига**

<i>T отж, °С</i>	<i>E<sub>g</sub>, эВ</i>
25	5,4
200	5,25
300	5,9
400	6
500	6,1
600	6,15

В результате проведенных исследований были получены золь – гель методом тонкие пленки диоксида кремния и проведен их отжиг при 200 °С, 300 °С, 400 °С, 500 °С и 600 °С. Был исследован коэффициент пропускания и ширина запрещенной зоны полученных пленок. Установлено влияние температуры отжига на данные параметры пленок. Результаты исследования могут быть использованы при получении функциональных пленок на основе диоксида кремния, например пленок для носителей биорецептора в биосенсоре.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Buckley A.M., Greenblatt M.* Sol-Gel Preparation of Silica Gels // *Journal of Chemical Education*. 1994. Vol. 71(7). P. 599–602.
- [2] *Максимов А.И., Мошников В.А., Тауров Ю.М., Шилова О.А.* Основы золь-гельтехнологии нанокompозитов. 2-е изд. СПб.: Элмор, 2008.
- [3] *Шабанова Н.А., Саркисов П.Д.* Золь – гель технологии. Нанодисперсный кремнезем. М.: БИНОМ, 2012. 328 с.

---

Евгения Владимировна Филонина,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а,  
filonina94@mail.ru

**ИЗУЧЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ  
ПО ПОВЕРХНОСТИ ГОЛЕНИ  
ПРИ ДОЗИРОВАННОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ НАГРУЗКЕ  
В ТРЕНИРОВОЧНОМ ПРОЦЕССЕ НАЧИНАЮЩИХ СПОРТСМЕНОВ**

**О. А. Хлебникова**

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

Исследованы термограммы поверхности голени, записанные в лаборатории медицинской физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского на группе спортсменов начального уровня подготовки. С помощью программного обеспечения «Thermal Imaging Analyzer» обнаружено, что при предложенном тренировочном процессе увеличение физической нагрузки ведет к ускорению кровотока и общему снижению поверхностной температуры исследуемой области, из-за усиленного снабжения кровью задействованных в работе мышц.

*Ключевые слова:* термография, температурное распределение, физиология, физические нагрузки.

Терморегуляция организма основана на безусловных рефлексах соматической и вегетативной нервной системы, возможностях гуморальной регуляции [1]. Перераспределение кровотока, сужение сосудов кожи и подкожной жировой клетчатки – такой может быть реакция организма на физическую нагрузку, которая может привести к видимым изменениям на термограммах [2].

Целью исследования является изучение температурного распределения по поверхности голени при дозированной физической нагрузке в тренировочном процессе начинающих спортсменов.

Регистрация термограмм нижних конечностей для 10 человек, мужского пола, в возрасте от 18 до 20 лет, условно здоровых на момент эксперимента, проводилось в кондиционируемом помещении при температуре 22 °С и влажности 45–50 % в положении стоя, после 3-минутной адаптации к условиям помещения. в состоянии мышечного покоя и после физической нагрузки (20 минут бега). Запись термограмм в процессе выполнения функциональ-

ных проб проводилась в режиме видеозаписи встроенным программным обеспечением «Thermal Imaging Analyzer» и «Camera Controller» медицинским комплексом «ПергаМед».

Эксперимент показал что, повышение тонуса рабочей группы мышц ускоряет кровоток и энергообмен, приводя к изменению насыщенности кровью разных групп мышц. Потовые железы, реагируя на повышение энергообмена, выделяют на поверхность кожи влагу, что в совокупности с изменением кровотока дает эффект охлаждения (т. е. понижения общей поверхностной температуры).

На рис. 1–2 представлены термограммы одного из обследованных до и после физической нагрузки. Аналогичные распределения наблюдались для всех обследуемых. Распределение температуры по поверхности можно анализировать накладывая сетку вертикальных и горизонтальных линий вдоль которых определяются температуры. На рис. 3 представлена зависимость температуры от координаты (в ячейках записывающей термочувствительной матрицы) вдоль вертикальной линии, проведенной по правой голени, совпадающей на термограммах до и после физической нагрузки.

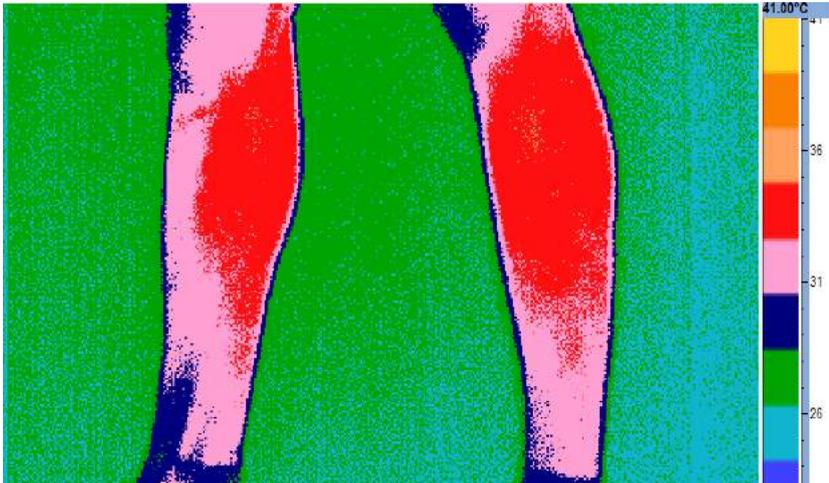


Рис. 1. Термограмма голени до проведения функциональной пробы

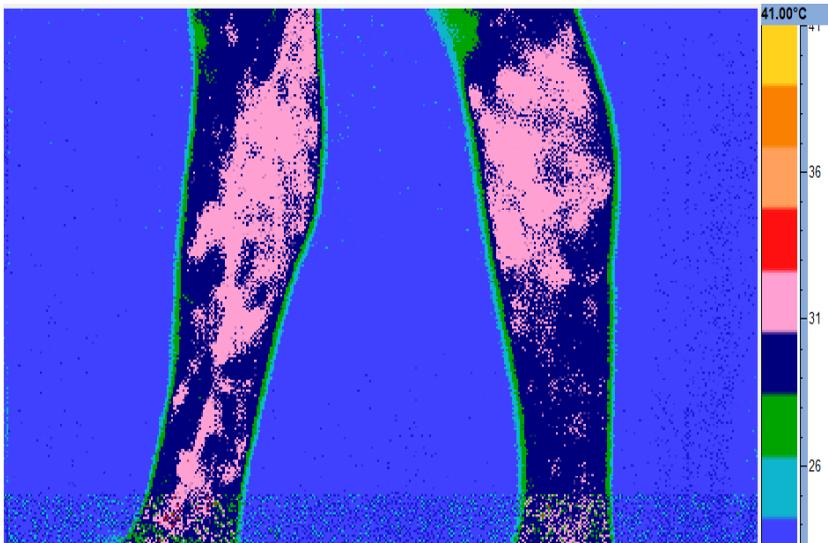


Рис. 2. Термограмма голени после проведения функциональной пробы

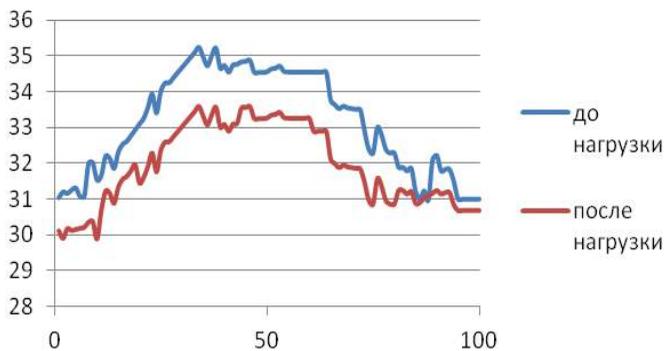


Рис. 3. Распределение температуры по поверхности голени для одного из обследованных

Вычисленная, средняя по группе, разность температур между показателями до и после нагрузки оставляет 1,67 °С. Можно выделить участки достоверного изменения температур, которые позволяют локализовать участки наибольшей активности мышц. Исследование температурных полей может служить индикатором степени участия мышц в тренировочном процессе. Выявленная

асимметрия распределения температур левой и правой голени является как результатом анатомо-физиологической асимметрии, например в расположении сосудов, так и разницы в активности соответствующих мышц.

Таким образом, установлено достоверное снижение температуры поверхности голени при физической нагрузке. Выявлена возможность локализации зон существенного снижения температур.

### **ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Ткаченко Ю.А., Голованова М.В., Овечкин А.М.* Клиническая термография. М.: Нижний Новгород, 1998.

[2] *Величко Т.И., Сергеева Л.В.* Медико-биологические основы физической культуры студента: учебно-методическое пособие. М.: Тольятти, 2014.

---

Ольга Алексеевна Хлебникова,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а,  
hl\_olga1996@mail.ru

# РАСЧЕТ ПОЛЕЙ НАПРАВЛЯЕМЫХ МОД В ПОЛОСКОВОМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВОЛНОВОДЕ ПРИ НАЛИЧИИ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ

К. И. Шефер

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

Выполнен расчет распределений напряженности электрического поля направляемых мод волновода с наложенной полоской, в котором существуют механические напряжения и изменения показателей преломления, вызванные механическими напряжениями. Расчеты выполнены методом конечных элементов.

*Ключевые слова:* волновод с наложенной полоской, механические напряжения, изменения показателей преломления, напряженность электрического поля направляемой моды, метод конечных элементов.

Рассмотрим волновод с наложенной полоской, 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.

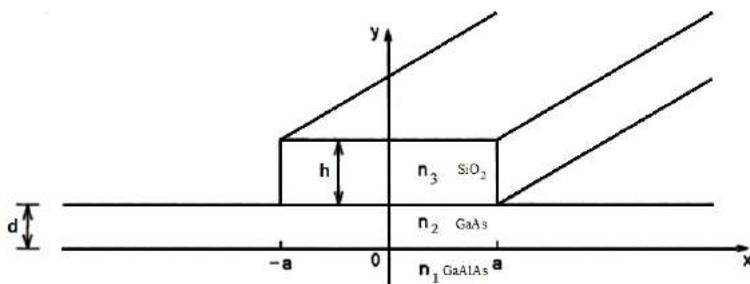


Рис. 1. Волновод с наложенной полоской

В [1] рассчитаны механические напряжения и вызванные ими изменения показателей преломления. В настоящей работе выполнен расчет распределений напряженности электрического поля направляемых мод волновода. Используется метод конечных элементов [2].

В этом методе решение волнового уравнения:

$$\nabla^2 \Phi + [k^2 n^2(x, y) - \beta^2] \Phi(x, y) = 0 \quad (1)$$

заменяется определением функции, для которой следующий функционал принимает стационарные значения:

$$I[\Phi] = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [\nabla^2 \Phi - (k^2 n^2 - \beta^2)] dx dy. \quad (2)$$

В (1) и (2)  $\Phi(x, y)$  – любая из поперечных компонент напряженностей электрического или магнитного полей,  $\nabla^2$  – двумерный оператор Лапласа,  $n$  – показатель преломления,  $k$  – волновое число для вакуума,  $\beta$  – проекция волнового вектора на направление распространения волны или постоянная распространения.

При вычислении функционала область интегрирования делится на небольшие участки – элементы, как правило, треугольные. Так как рассматриваемый волновод симметричен относительно оси  $y$ , то достаточно выполнить интегрирование только при  $x > 0$ . Границы области интегрирования в положительном направлении оси  $x$  и в положительном и отрицательном направлениях оси  $y$  являются фиктивными границами, их нужно выбрать достаточно далеко от центра волновода, чтобы амплитуды напряженностей электрического и магнитного полей на них обращались в нуль.

Напряженность поля  $\Phi(x, y)$  в треугольнике с номером  $e$  аппроксимируется линейной функцией координат  $x$  и  $y$ :

$$\Phi(x, y) = p_0^e + p_1^e x + p_2^e y. \quad (3)$$

Коэффициенты  $p_0^e$ ,  $p_1^e$ , и  $p_2^e$  выражаются через значения напряженности в вершинах  $i, j, k$  треугольника с номером  $e$ . Таким образом, функционал (2) выражается через координаты вершин треугольников и значения напряженности в них.

Из условия стационарности функционала следует, что производные от него по  $\Phi_i$  обращаются в нуль:

$$\frac{\partial I}{\partial \Phi_i} = \sum_{j=1}^m c_{ij} \Phi_j = 0, \quad (4)$$

где  $i = 1, \dots, m$ ,  $m$  – число вершин треугольников,  $c_{ij}$  – коэффициенты, выражающиеся через координаты вершин треугольников и постоянную распространения.

Уравнение (4) можно записать в матричном виде:

$$A\{\Phi\} = b\{\Phi\}, \quad (5)$$

где  $A$  – матрица размера  $m \times m$ , элементы которой выражаются через величины  $c_{ij}$ ,  $\{\Phi\}$  –  $m$ -мерный вектор-столбец с элементами, равными значениям напряженности в вершинах треугольников. (5) – уравнение на собственные значения и собственные векторы матрицы  $A$ . Собственное значение  $b$  равно нормированной постоянной распространения, а соответствующий собственный вектор  $\{\Phi\}$  дает распределение поля моды с этой постоянной распространения.

Расчеты выполнены для волновода, имеющего размеры:  $a = 15$  мкм,  $h = 4$  мкм,  $d = 2$  мкм. Длина волны принималась равной  $\lambda = 1.15$  мкм. На рис. 2 приведено распределение электрического поля при отсутствии напряжений для моды с безразмерной постоянной распространения  $\beta/k = 3.3640$ .

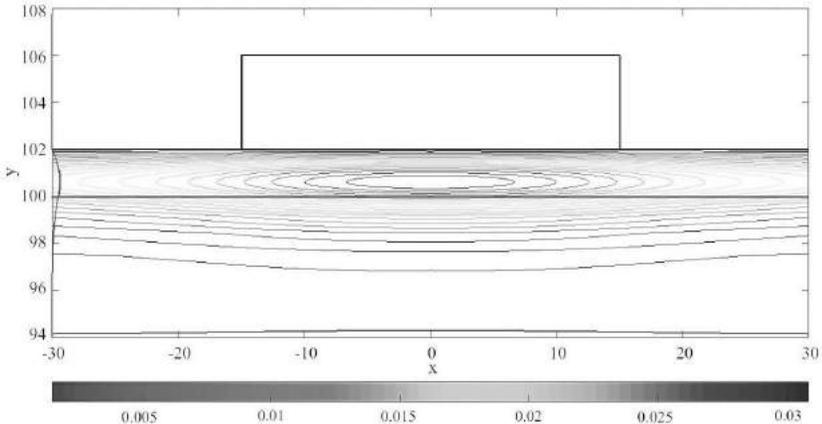


Рис. 2. Распределение электрического поля волны, без учета изменения показателей преломления;  $\beta/k = 3.3640$

На рис. 3 приведено распределение электрического поля одной из мод, которая получается из этой моды при наличии напряжений. Показатели преломления  $n_x$  и  $n_y$  пленки увеличиваются в области под центральной частью полоски, а под краями полоски уменьшаются, что приводит к более компактному распределению электрического поля.

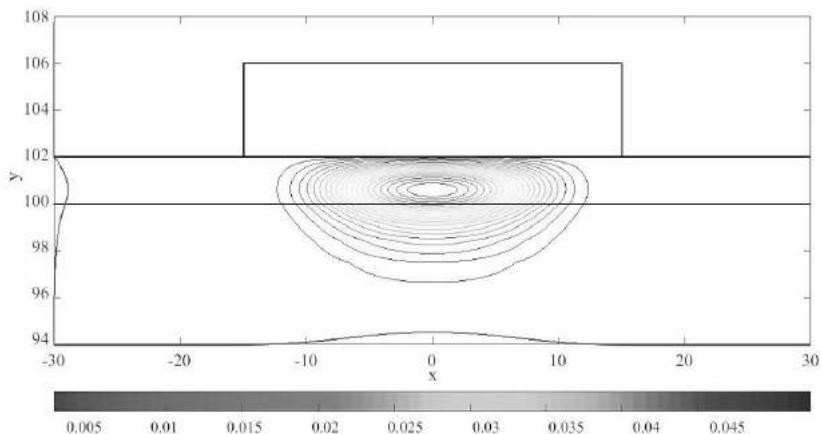


Рис. 3. Распределение электрического поля волны, поляризованной вдоль оси  $x$ , с учетом изменения показателя преломления;  $\beta/k = 3.3699$

## ЛИТЕРАТУРА

[1] Шефер К.И. Анализ изменений характеристик диэлектрических волноводов, вызванных механическими напряжениями, методом конечных элементов // Сборник статей V региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии. 2017. С. 156–159.

[2] Okamoto K. Fundamentals of Optical Waveguides / Second edition. J.: Elsevier, 2006. 578 с.

---

Константин Иванович Шефер,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а,  
konstantin.shef@mail.ru

**ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ФАКТОРОВ  
НА СТЕПЕНЬ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ  
ПРИ ДИСПЛАЗИИ СОЕДИНИТЕЛЬНОЙ ТКАНИ ПОСРЕДСТВОМ  
ДИСКРЕТНЫХ ДИСПЕРСИОННЫХ КОМПЛЕКСОВ**

**А. П. Шиц**

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

По результатам факторного анализа данных по сердечно-сосудистым заболеваниям (ССЗ) среди пациентов с дисплазией соединительной ткани (ДСТ) построены и проанализированы факторные диаграммы. По ним отобраны факторы, оказывающие влияние на развитие ССЗ среди пациентов с ДСТ, и проведен дисперсионный анализ.

*Ключевые слова:* факторный анализ, факторные диаграммы, дисплазия соединительной ткани, сердечно-сосудистые заболевания.

ССЗ – общее название заболеваний системы кровообращения, среди которых выделяют: инфаркты, заболевания сердца, заболевания артерий, заболевания вен. Иногда к ним относят также заболевания сосудов коронарного кровообращения [1].

Целью данной работы являлось построение факторных диаграмм, а также их интерпретация с целью выявить зависимость развития этих заболеваний у пациентов с ДСТ. В дальнейшем планируется провести дисперсионный анализ полученных данных для определения совместного влияния факторов.

В рамках данной работы были получены матрицы весовых факторных нагрузок для каждой группы пациентов. Далее были построены матрицы факторных значений для обеих групп относительно контрольной, а также составлены факторные диаграммы, представленные ниже (рис. 1–3).

Из диаграмм видно, что для выборок пациентов, страдающих ССЗ, факторы 11, 12, 13, 14 явно выбиваются из коридора от –3 до 3, что говорит о зависимости между данным фактором и развитием болезни.

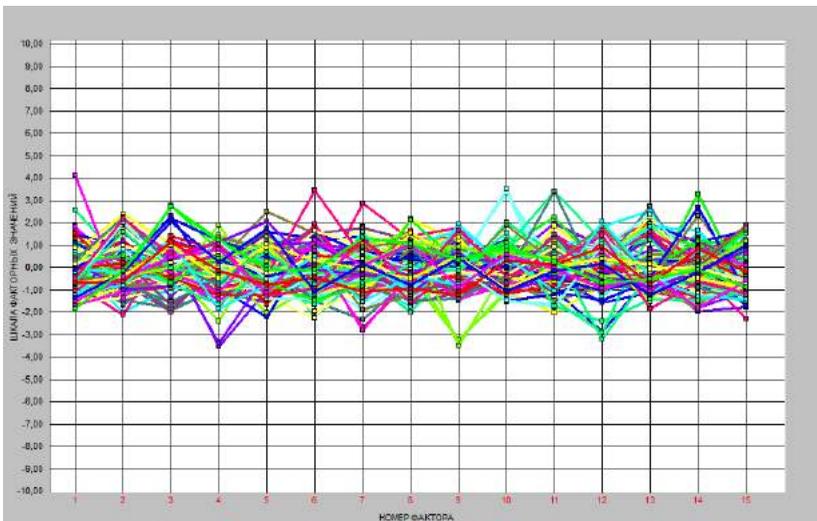


Рис. 1. Факторная диаграмма для контрольной группы

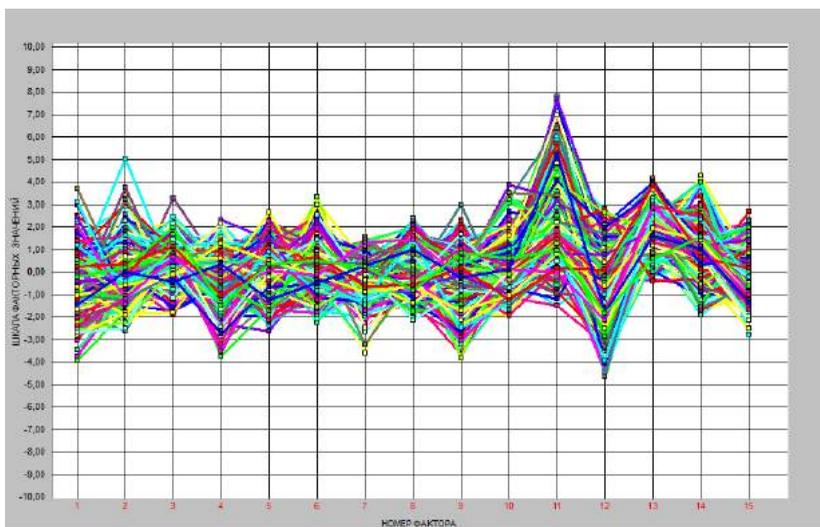


Рис. 2. Факторная диаграмма для группы пациентов, имеющих незначительные осложнения

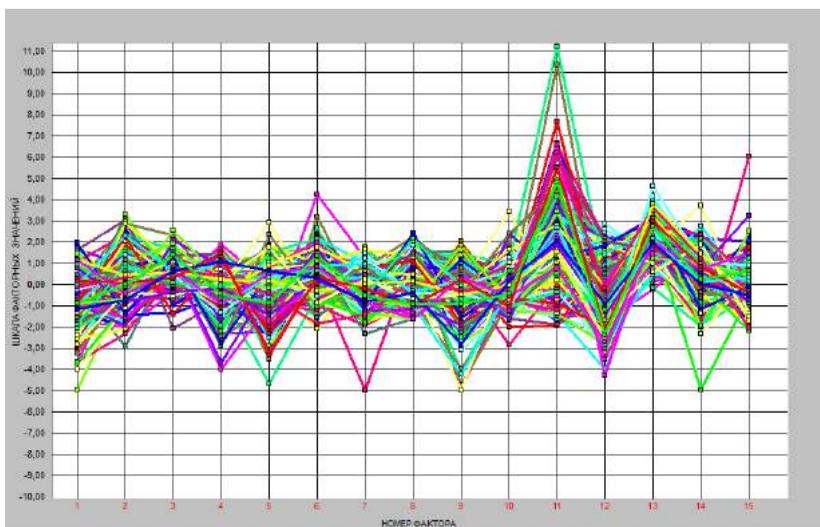


Рис. 3. Факторная диаграмма для группы пациентов со значительными осложнениями

**Корреляционные отношения для факторов, имеющих значительный вклад в общую дисперсию**

$\eta_{F11}^2$	$\eta_{F12}^2$	$\eta_{F13}^2$	$\eta_{F14}^2$	$\eta_X^2$
0,08	0,05	0,18	0,01	0,45

В проделанном исследовании рассматривались пять дисперсионных комплексов (совокупностей градаций с привлеченными дискретными характеристиками и средними величинами [2]): четыре однофакторных и один четырехфакторный (для оценки суммарного влияния). Ниже приведена таблица для основной характеристики, формируемой на базе дисперсионного комплекса – коэффициента влияния, гавного квадрату корреляционного отношения  $\eta^2$  (табл.).

**Заключение**

Аналитически и графически показана зависимость между развитием ССЗ и следующими четырьмя факторами (вместе объясняют 45 % общей дисперсии): а) степень сокращения аорты; б) эластичность крупных артерий (позвоночной и внутренней сон-

ной); в) эластичность аорты (этот фактор оказывает максимальный вклад в общую дисперсию и составляет 18%); г) нормализация кардиоцикла. Построены дисперсионные комплексы для дальнейшего проведения многофакторного дисперсионного анализа и оценки совместного влияния факторов.

### **ЛИТЕРАТУРА**

[1] *Коваленко В.Н., Лутай М.И., Братусь В.В. и др.* Руководство по кардиологии. Киев: МОРИОН, 2008. 1424 с.

[2] *Плохинский Н.А.* Биометрия. М.: Изд. Московского университета, 1970. 367 с.

---

Александр Павлович Шиц,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
sppklon@gmail.com

## ОКИСЛЕНИЕ МЕДИ И МЕДНЫХ СПЛАВОВ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ МОЩНЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ

А. А. Шмидт

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

Исследовано влияние облучения мощным ионным пучком (МИП) наносекундной длительности на окисление меди и ее сплавов. Установлено, что облучение МИП и последующее окисление на воздухе приводит к закономерному образованию оксидов меди на модифицированной поверхности чистой меди. Показано, что обеднение поверхностного слоя латуни цинком при воздействии МИП не приводит к заметному усилению окисления латуни при термическом отжиге на воздухе из-за диффузии цинка из объема к поверхности.

*Ключевые слова:* окисление, мощный ионный пучок, бронза, латунь, медь.

Обработка мощным ионным пучком (МИП) является одним из эффективных методов модифицирования поверхностных слоев металлов и сплавов [1; 3]. В зависимости от того, оказывается воздействие на чистый металл или сплав, изменяются пробеги ионов, энергия активации физических и химических процессов, протекающих при облучении [2]. Сопrotивление окислению является одним из важных свойств металлических материалов. Воздействие МИП на сплавы приводит к изменению содержания легирующих элементов в поверхностном слое, что должно сказываться на процессах окисления модифицированных МИП сплавов. Целью настоящей работы являлось исследование влияния облучения МИП на окисление меди и ее сплавов.

В качестве объектов исследования были выбраны образцы чистой меди, сплавы на основе меди – латунь Л63 (34,22–37,5 % Zn, до 0,07 % Pb, до 0,2 % Fe, до 0,005 % Sb, примесей не более 0,5 %), латунь ЛС59–1 (37,35–42,2 % Zn, 0,8–0,9 % Pb, примесей не более 0,75 %). Образцы механически шлифовали, полировали и подвергали облучению МИП. Обработку МИП проводили на ускорителе «ТЕМП» ионным пучком со следующими параметрами

пучка:  $H^+$  (30 %),  $C^{n+}$  (70 %); энергия частиц 200 кэВ; плотность ионного тока на мишени 100 А/см<sup>2</sup>; длительность импульса 60 нс. Кинетику процесса изучали методом окисления на воздухе в муфельной печи в течение 1,4 и 9 часов при температуре 400 °С. Фазовый состав исследовали на дифрактометре ДРОН–3М. Изучение морфологии поверхности проводилось на растровом электронном микроскопе JSM-6610LV, “JEOL” с энергодисперсионным анализатором Inca-350.

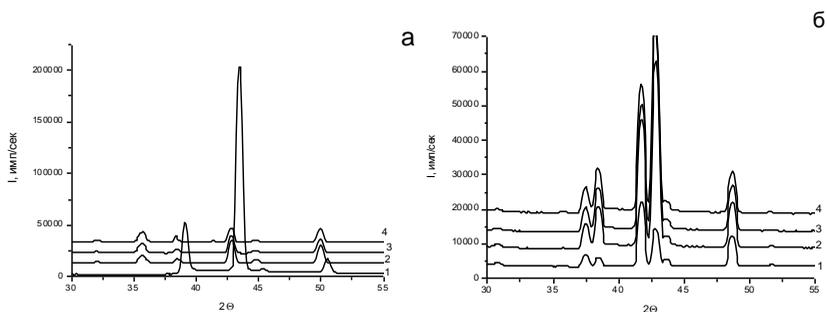


Рис. 1. Дифрактограмма меди (а) и латуни ЛС59-1 (б) после облучения

МИП с плотностью тока 100 А/см<sup>2</sup> и отжига: 1 – исходный; 2, 3 и 4 – отжиг 1, 4 и 9, соответственно.

На рис. 1 представлены дифрактограммы меди и латуни ЛС59-1 до и после облучения МИП с последующим отжигом при температуре 400 °С в течение 1,4 и 9-х часов. Установлено, что оксидный слой чистой меди состоит из фаз  $CuO$  и  $Cu_2O$  уже в необлученном состоянии. После облучения МИП и отжига процентное содержание оксидов закономерно возрастает. Латунь ЛС59-1, содержащая три основные фазы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $Pb$ , после облучения МИП и отжига фазового состава не изменяет (рис. 1б). Обнаруженное уширение пиков после облучения и перераспределение интенсивности свидетельствует о возникновении напряжений и фазовой перекристаллизации связанной с удалением цинка при облучении МИП. В латуни Л63 характер окисления аналогичен.

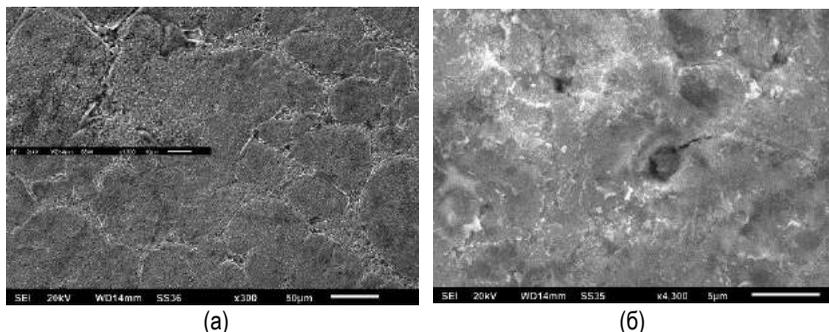


Рис. 2. Поверхность меди (а) и латуни LC59-1 (б) после облучения МИП с плотностью тока  $100 \text{ A/cm}^2$  и отжига в течение 9 часов

На рис. 2 представлены поверхности меди и латуни LC59-1 после облучения МИП и отжига в течение 9 часов. Установлено, что термообработка облученной меди приводит к закономерному образованию слоя хрупкого оксида, толщина которого увеличивается с возрастанием времени отжига, что приводит к его частичному отделению от поверхности меди. При окислении происходит проявление зеренной структуры (рис. 2а). На вставке показана морфология частиц сформированного оксидного слоя. На рис. 2б показана поверхность латуни после облучения МИП и последующего отжига при  $400 \text{ }^\circ\text{C}$  в течение 9 часов. Поскольку цинк, входящий в латунь легко окисляется и защищает основу сплава от интенсивного окисления, то был проведен рентгеновский микроанализ поверхностей меди и исследуемых латуней до и после облучения и отжига. Обнаружено, что в исходной латуни LC59-1 отношение  $\text{Zn}:\text{Cu}$  (в вес.%)  $R_{\text{Zn}:\text{Cu}} = 0.77$ , в облученной  $R_{\text{Zn}:\text{Cu}} = 0.65$ . Однако после отжига в облученной латуни  $R_{\text{Zn}:\text{Cu}} = 0.73$ . Это свидетельствует о том, что идет диффузия  $\text{Zn}$  из объема к поверхности. В пользу этого говорит и значение  $R_{\text{Zn}:\text{Cu}} = 0.80$  для необлученной латуни после отжига. Известно, что воздействие МИП на латуни приводит к обеднению  $\text{Zn}$  поверхностного слоя, из-за его высокой летучести. В этом случае удаление  $\text{Zn}$  из поверхностного слоя должно сказаться на окислении латуни. Рентгеновский микроанализ показывает незначительное увеличение кислорода в поверхностном слое облученной латуни. Эти данные хорошо согласуются с результатами рентгенофазового анализа. После облучения

образцов латуни Л63 плотностью тока  $100 \text{ А/см}^2$  15 импульсами кислорода на поверхности не обнаружено. После последующего отжига в течение 1 ч процентное содержание кислорода незначительно возрастает. Помимо этого после отжига наблюдаются трещины, выходящие из кратера (рис. 2б), что, по-видимому, связано как возникновением напряжений, так и с возникающей химической неоднородностью.

Установлено, что обеднение поверхностного слоя латуни Zn при воздействии МИП не приводит к заметному усилению окисления латуни при термическом отжиге на воздухе при  $400 \text{ }^\circ\text{C}$  из-за диффузии Zn из объема к поверхности. Отжиг облуженной МИП меди при аналогичных режимах не изменяет состава продуктов окисления, а соотношение фаз определяется продолжительностью отжига.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] Грибков В.А., Григорьев Ф.И., Калинин Б.А., Якушин В.Л. Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки материалов. М.: Круглый год, 2001. 528 с.

[2] Панова Т.В., Ковивчак В.С., Блинов В.И., Стукова К.М. Влияние обработки мощным ионным пучком на окислительные свойства металла и сплавов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 4. С. 12–16.

[3] Поут Дж.М. и др. Модифицирование и легирование поверхности лазерными, ионными и электронными пучками. М.: Машиностроение, 1987. 424 с.

---

Анна Андреевна Шмидт,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира, 55а, (3812) 406527,  
annitashmidt@mail.ru

# ОСОБЕННОСТИ МОРФОЛОГИИ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОИАНИЛИНА, ДОПИРОВАННОГО ДОДЕЦИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТой В ПРИСУТСТВИИ РАСТВОРИТЕЛЯ

**И. К. Шулус**

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

Методом окислительной химической полимеризации анилина синтезирован полианилин (ПАНИ) и получены пленки ПАНИ, постсинтезно допированные додецилбензолсульфокислотой (DBSA) в присутствии растворителя. Исследована морфология, молекулярная и электронная структура, проводимость полученных пленок ПАНИ. Обнаружено, что при допировании DBSA в присутствии растворителя молекулярные гранулы ПАНИ образуют фибриллярные структуры, при этом удельная электрическая проводимость пленок ПАНИ существенно возрастает.

*Ключевые слова:* полианилин, додецилбензолсульфокислота, атомно-силовая микроскопия, оптическая спектроскопия, фибриллярная морфология, проводимость.

Полианилин (ПАНИ) – электропроводящий полимер, являющийся перспективным материалом для создания широкого спектра электронных устройств. Для использования ПАНИ в различных приложениях актуальным является развитие методов формирования слоев полимера с заданной морфологией и свойствами путем варьирования условий синтеза и/или допанта.

Целью работы является получение и исследование особенностей молекулярной, надмолекулярной и электронной структуры, проводимости пленок ПАНИ, допированного додецилбензолсульфокислотой (DBSA) в присутствии растворителя N-метилпирролидона (NMP).

ПАНИ синтезирован методом химической окислительной полимеризации анилина в водном растворе соляной кислоты (HCl). Продуктом синтеза являлся ПАНИ в форме эмералдиновой

соли соляной кислоты (ES/HCl). В таком виде полимер нерастворим, поэтому его переводили в форму основания – дедопировали в водном растворе аммиака. ПАНИ в форме эмералдинового основания (ЕВ) растворяли в NMP, после чего наносили на необходимые для дальнейшего исследования подложки SiO<sub>2</sub>/Si, кварц и CaF<sub>2</sub>. Повторное допирование ЕВ осуществлялось смесью DBSA и NMP в соотношении (1:2).

Исследование морфологии пленок ПАНИ на подложках SiO<sub>2</sub>/Si выполнялись на атомно-силовом микроскопе MFP-3D SA (Asylum Research). Измерения проводились на воздухе в полуконтактном режиме сканирования. Спектры ИК-пропускания пленок ПАНИ на стеклах CaF<sub>2</sub> регистрировались на ИК-Фурье спектрометре VERTEX 70 (Bruker). Спектры УФ-Вид-пропускания пленок ПАНИ на кварцевых стеклах регистрировались на спектрофотометре СФ-56 (ЛОМО). Измеренные спектры пропускания T(λ) пересчитывались в спектры поглощения A(λ), на основе которых, с использованием теории Тауца определялась оптическая ширина запрещенной зоны ПАНИ.

На рис. 1 представлены АСМ изображения пленок ПАНИ в форме основания и соли DBSA. Пленки ПАНИ имеют гранулярную морфологию. Гранула представляет собой свернутую в клубок полимерную цепь макромолекулы ПАНИ.

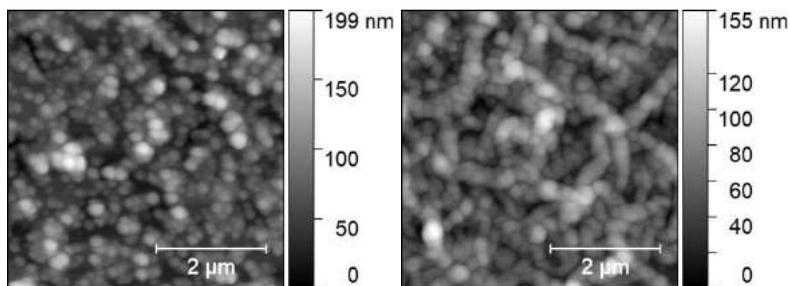


Рис. 1. АСМ изображения поверхности пленок ПАНИ в форме ЕВ (слева) и ES/DBSA (справа)

Особенностью морфологии пленок ПАНИ после допирования смесью DBSA и NMP является выстраивание гранул ПАНИ в

фибриллярные структуры. В пленках, допированных без участия растворителя фибриллярные структуры не наблюдаются.

Изучение пленок ПАНИ методом ИК-спектроскопии -показало, что молекулярная структура полимера сохраняется после допирования DBSA в присутствии растворителя NMP.

На рис. 2 представлены спектры поглощения пленок ПАНИ в форме основания и соли DBSA. Путем экстраполяции на ось энергии коротковолнового участка спектра, перестроенного в координатах Тауца, определялась величина оптической ширины запрещенной зоны ПАНИ.

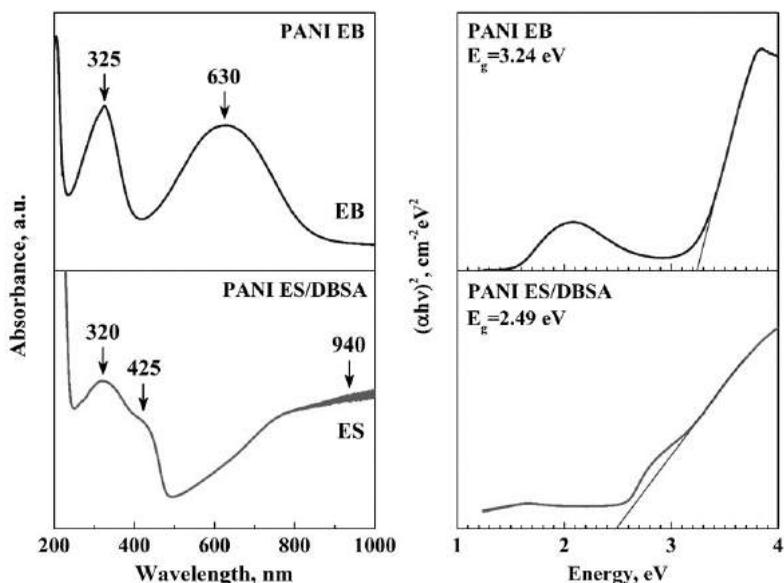


Рис. 2. Спектры поглощения пленок ПАНИ в форме EB и ES/DBSA (слева), спектры поглощения пленок ПАНИ, перестроенные в координатах Тауца (справа)

В таблице представлены результаты измерения параметров пленок ПАНИ в форме основания и соли DBSA. Для сравнения показаны параметры пленок ПАНИ, допированного DBSA без участия растворителя.

При допировании DBSA средний диаметр молекулярного клубка ПАНИ значительно увеличивается, что обусловлено встраи-

ванием в него крупной молекулы кислоты. При допировании в присутствии NMP диаметр гранул ПАНИ достигает наибольшего значения, что объясняется их набуханием в процессе растворения.

### Параметры пленок ПАНИ в форме EB и ES/DBSA

<i>Форма ПАНИ</i>	<i>Диаметр гранулы, нм</i>	<i>Ширина запрещенной зоны, эВ</i>	<i>Удельная проводимость, См/см</i>
EB	161 ± 33	3,24 ± 0,02	~10 <sup>-7</sup>
ES/DBSA, полученный в присутствии NMP	266 ± 40	2,49 ± 0,02	80,5 ± 13,6
ES/DBSA, полученный без участия NMP	227 ± 48	2,82 ± 0,02	50,7 ± 21,1

Ширина запрещенной зоны ПАНИ при допировании DBSA существенно уменьшается и достигает минимального значения при допировании в присутствии NMP. Наибольшее сужение запрещенной зоны ПАНИ при допировании смесью DBSA и NMP обусловлено появлением дополнительных и/или смещением текущих состояний в энергетическом спектре полимера за счет более эффективного взаимодействия участков полимерной цепи с молекулой кислоты.

Более существенный рост удельной проводимости пленок ПАНИ, допированного DBSA в присутствии NMP связан с более эффективным встраиванием молекулы кислоты в полимерную цепь. Кроме того, росту проводимости может способствовать специфическая фибриллярная морфология пленок ПАНИ, механизм формирования которой не ясен и требует дальнейшего исследования.

Автор выражает благодарность сотрудникам Омского научного центра СО РАН Лобову И.А. и Соколову Д.В. за помощь в выполнении работы.

---

Иван Константинович Шурус,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 1-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
isnoble@mail.ru

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СТРУКТУРЕ КОНСОЛЬНОГО КАЛОРИМЕТРИЧЕСКОГО БИОСЕНСОРА

Е. В. Якунин

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

В работе рассматриваются вопросы разработки аналитической модели для консольного калориметрического биосенсора, чтобы иметь возможность на этапе планирования рассчитать основные параметры. Приведены первые результаты моделирования с использованием данной модели.

*Ключевые слова:* биосенсор, математическое моделирование, калориметр, сенсор.

Проектирование и производство тепловых микросенсоров различных конструкций связано с необходимостью предварительного детального анализа их тепловых режимов и, в первую очередь, распределения температуры в двумерных структурах, являющихся в этих микросенсорах основными конструктивными элементами.

Цель данной работы заключается в моделировании процессов в теплофизическом биосенсоре. Полученные при моделировании данные о теплораспределении планируется использовать в дальнейшем для оптимизации структуры консольного калориметрического биосенсора на этапе разработки.

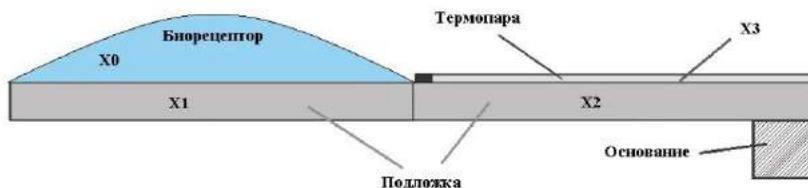


Рис. 1. Структура консольного калориметрического биосенсора

Для того, чтобы на этапе разработке оперировать различными характеристиками, которые влияют на параметры сенсора

(рис. 1), необходимо понимать процессы, происходящие во время работы сенсора.

Условно, можно разделить весь процесс преобразования концентрации измеряемого вещества в электрический сигнал биосенсора на 3 этапа:

1. Диффузия молекул измеряемого вещества в чувствительный слой биосенсора. Реакция с выделением тепла. На этом этапе необходимо учесть тот факт, что молекулы неравномерно распределяются в чувствительном слое, диффундируя вглубь. В работе [2] авторами были описаны особенности диффузии газов в пористую поверхность и предложены некоторые формулы, для количественного описания этих процессов:

$$C_A = C_{A,s} \frac{\cosh\left((L-x)\sqrt{k/D_k}\right)}{\cosh\left(L\sqrt{k/D_k}\right)}. \quad (1)$$

Используя формулу 1, можно получить график распределения концентрации измеряемого вещества вглубь чувствительного слоя, представленный на рис. 2.

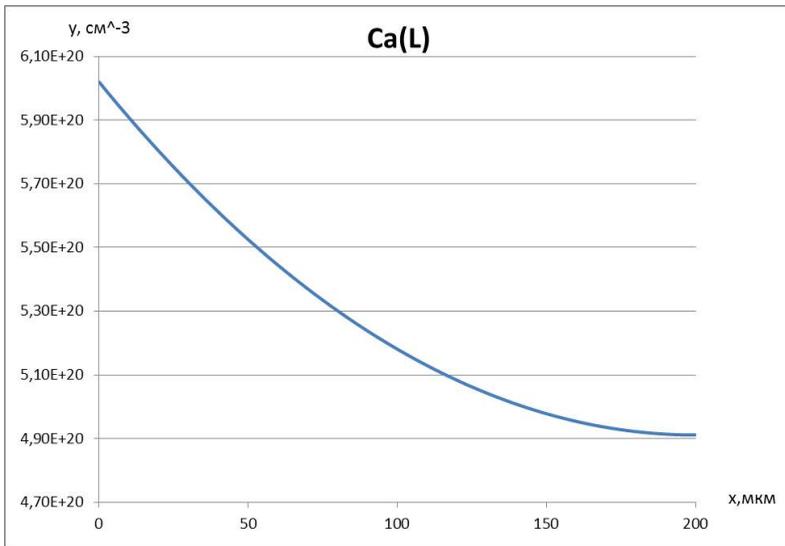


Рис. 2. Профиль распределения детектируемого вещества

2. Второй шаг – это нагрев подложки теплотой, которая была выделена во время реакции, и нагрев подложки этой теплотой. В этом процессе огромную роль играют такие структурные параметры как: толщина и длина подложки, материал подложки, толщины чувствительного слоя и слоя термопар, плотности зон и многое другое [3].

Все эти параметры необходимо учитывать и иметь возможность их изменять, чтобы проектировать биосенсоры на этапе разработки. Основные структурные параметры были взяты из работы [1]: толщина подложки 1 мкм, толщина слоя биорецептора 0.3 мкм, толщина слоя термопары 0.5 мкм, плотность подложки 2200 кг/м<sup>3</sup>, плотность слоя биорецептора 1000 кг/м<sup>3</sup>, плотность термопары 2320 кг/м<sup>3</sup>, удельная теплоемкость подложки. 740 Дж / (кг·К), удельная теплоемкость слоя биорецептора 2400 Дж / (кг·К), удельная теплоемкость термопары. 890 Дж / (кг·К), длина зоны 1 200 мкм, длина зоны 2 200 мкм, глубина слоя биорецептора 200 мкм. Используя эти данные, а также формулы (2) и (3) было найдено распределение температуры в структуре биосенсора, представленное на рис. 3:

$$T_1 = \frac{q_0}{A'} - \frac{q_{12}ch(p'x_1)}{\lambda'p'sh(p'x_1)} + T_0, \quad (2)$$

$$T_2 = \frac{q_{12}d'sh[p''(l_2 - x_2)]}{\lambda''p''d''ch(p''l_2)} + T_0. \quad (3)$$

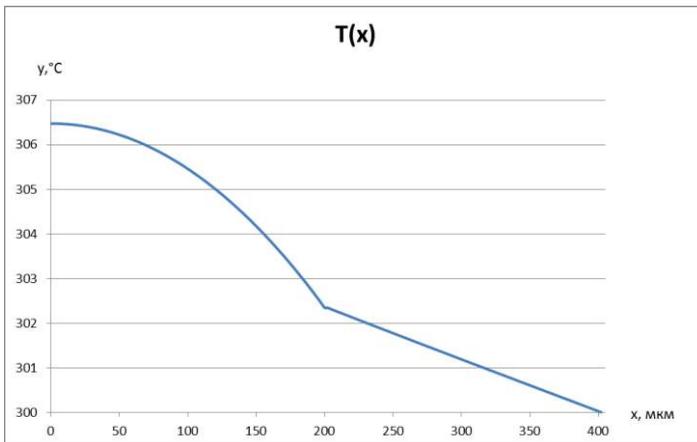


Рис. 3. График распределения температуры в структуре биосенсора

3. Третий этап заключается в том, чтобы используя данные о термопаре и температурное распределение рассчитать силу выходного сигнала. Выходной сигнал можно найти по формуле (4):

$$U_{\text{вых}} = (\alpha_1 - \alpha_2)N\Delta T. \quad (4)$$

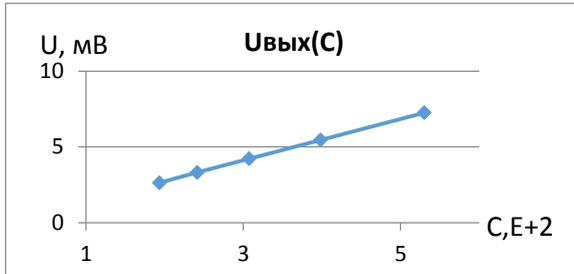


Рис. 4. Связь концентрации измеряемого вещества и выходного электрического сигнала сенсора

Каждой концентрации можно сопоставить уровень выходного сигнала. Таким образом, можно построить график, который будет связывать эти две величины. По сути, связь этих величин – основная задача сенсора рис. 4.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Козлов А.Г.* Математическое моделирование сенсорных структур: методические указания к практическим работам. Омск, 2002. С. 44–60.

[2] *Noboru Yamazoe, Kengo Shimanoe.* Theoretical approach to the gas response of oxide semiconductor film devices under control of gas diffusion and reaction effects. *Sensors and Actuators B. Chemical.* 2011. Vol. 154. P. 277–282.

[3] *Козлов А.Г.* Тепловые микросенсоры: классификация, основные типы // *Нано- и микросистемная техника.* 2006. № 4. С. 3–5.

---

Евгений Владимирович Якунин,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, 8-950-785-17-20,  
yakunin.evgeny.94@gmail.com

# АНАЛИЗ ФОРМИРОВАНИЯ ТЕПЛОВЫХ ПОТОКОВ В ТОНКИХ ОБРАЗЦАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ПУЧКОМ

А. А. Свердлова

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук, доцент Г. А. Вершинин

В работе решается методом функции Грина на отрезке пространственно-временное уравнение в частных производных гиперболического типа для теплового потока в среде, подверженной импульсному лазерному воздействию.

*Ключевые слова:* локально-неравновесный теплоперенос, моделирование, тепловые волны.

В расширенной необратимой термодинамике [1] гиперболическое уравнение для потока тепла в конечном образце толщины  $L$  с начальным распределением температуры  $T(x,0) = T_0$  выводится из релаксационного уравнения для потока тепла  $q$  и закона сохранения энергии [2] и имеет в одномерном случае вид:

$$\tau_p \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} + \frac{\partial q}{\partial t} = a \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} - a \frac{\partial Q}{\partial x}, \quad (1)$$

где  $a = \lambda / (\rho c_p)$  – коэффициент температуропроводности,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности,  $\rho$  – плотность среды,  $c_p$  – удельная теплоемкость,  $\tau_p$  – время релаксации теплового потока. Нагрев вещества моделировался тепловым источником:

$$Q(x,t) = \begin{cases} \frac{Q_0}{\Delta x} \left( \frac{t}{t_p} \right) \cdot e^{-\frac{t}{t_p}}, & 0 \leq x \leq \Delta x, \\ 0, & \Delta x < x \leq L, \end{cases} \quad (2)$$

где  $Q_0$  – полная энергия источника тепла,  $t_p$  – время действия теплового источника,  $\Delta x$  – глубина проникновения тепла.

Для данной задачи в качестве начальных и граничных условий выберем

$$q(x,0) = 0, \frac{\partial q(x,0)}{\partial t} = 0; \quad q(0,t) = 0, \quad q(L,t) = 0. \quad (3)$$

Далее, в уравнении (1) перейдем к безразмерным переменным (оставляя для них прежние обозначения):

$$t/t_p, \quad x/(a\tau_p)^{1/2}, \quad L/(a\tau_p)^{1/2}, \quad \Delta x/(a\tau_p)^{1/2}, \quad t_p/\tau_p,$$

и введем безразмерный поток  $J(x,t) = q(\sqrt{a\tau_p})/(\lambda T_0)$ , для которого уравнение запишется в виде:

$$\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + \frac{\partial J}{\partial t} = \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} - \frac{a\tau_p}{\lambda T_0} \frac{\partial Q(x,t)}{\partial x}. \quad (4)$$

Начальные и граничные условия, соответствующие уравнению (4), запишутся в виде:

$$J(x,0) = 0, \quad \frac{\partial J(x,0)}{\partial t} = 0; \quad J(0,t) = 0, \quad J(L,t) = 0. \quad (5)$$

Функцию  $Q(x,t)$  представим в виде:

$$Q(x,t) = \tilde{Q}_0(t) \cdot \theta(\Delta x - x), \quad (6)$$

где  $\theta(x)$  – тета-функция, а

$$\tilde{Q}_0(t) = \frac{Q_0}{\Delta x \sqrt{a\tau_p} \tau_p} \cdot \left( \frac{t}{t_p} \right) \cdot e^{-\frac{t}{t_p}}. \quad (7)$$

Аналитическое решение уравнения (4) с однородными граничными и начальными условиями (5) можно записать в виде [3]:

$$J(x,t) = \int_0^t \int_0^L \left[ -\frac{a\tau_p}{\lambda T_0} \frac{\partial Q(\xi,\tau)}{\partial \xi} \right] \cdot G(x,\xi,t-\tau) \cdot d\xi \cdot d\tau, \quad (8)$$

где  $G(x,\xi,t-\tau)$  – функция Грина для гиперболического уравнения, которая для краевой задачи на отрезке имеет вид [3]:

$$G(x,\xi,t-\tau) = \frac{2}{L} \cdot e^{-\frac{t-\tau}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n \xi}{L}\right) \cdot \frac{\sin(\lambda_n(t-\tau))}{\lambda_n}, \quad (9)$$

где  $\lambda_n = ((n^2 \pi^2 / L^2) - 1/4)^{1/2}$ .

Из выражения (7) для производной  $\partial Q(\xi,\tau)/\partial \xi$  получаем:

$$\partial Q(\xi,\tau)/\partial \xi = -\tilde{Q}_0(\tau) \cdot \delta(\Delta x - \xi), \quad (10)$$

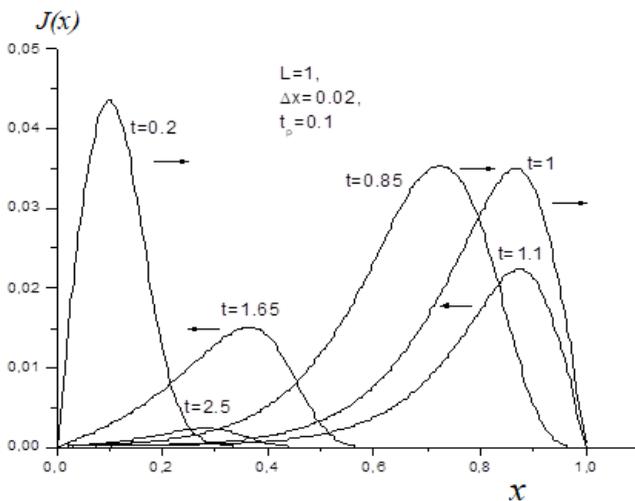
где  $\delta(x)$  – дельта-функция Дирака.

Подставляя (9) и (10) в (8), для потока будем иметь:

$$J(x,t) = A \cdot \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi n \Delta x}{L}\right) \cdot \frac{1}{\lambda_n} \cdot \int_0^t \frac{\tau}{t_p^2} \cdot e^{-\frac{\tau}{t_p}} e^{-\frac{t-\tau}{2}} \times \\ \times \sin(\lambda_n(t-\tau)) \cdot d\tau. \quad (11)$$

Здесь введено обозначение  $A = \sqrt{a} Q_0 / (\lambda T_0 \Delta x \sqrt{\tau_p})$ .

После интегрирования по времени в (11) получается громоздкое выражение, которое здесь опущено. Оно было положено в основу моделирования зависимости теплового потока от безразмерных координаты  $x$  и времени  $t$ . Результаты представлены на рис.



Зависимость теплового потока от координаты  $x$  и для различных  $t$ , полученная на основе выражения (11)

Из рисунка видно, что при временах  $t \leq 1$  тепловой поток в виде волн распространяется от передней поверхности к противоположной. При  $t = 1$  она отражается от правой границы образца, а при  $t = 1.1$  тепловой поток движется в обратном направлении. С увеличением времени ( $t = 1.65, t = 2.5$ ) значение амплитуды теплового потока уменьшается. Это связано с тем, что по прошествии некоторого количества времени по всему образцу наступает выравнивание температуры.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Д.* Расширенная необратимая термодинамика. М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. 528 с.

[2] *Соболев С.Л.* Локально-неравновесные модели переноса // УФН. 1997. Т. 167, № 10. С. 1095–1106.

[3] *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики: учебное пособие. М.: Наука, 2004. 743 с.

---

Александра Алексеевна Свердлова,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
физический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787,  
sverdlova\_sasha@mail.ru

## Секция

# ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

---

## СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 5-МЕТИЛ-7-ФЕНИЛОКСАЗОЛО [5,4-В]ПИРИДИНА

**И. В. Паламарчук**

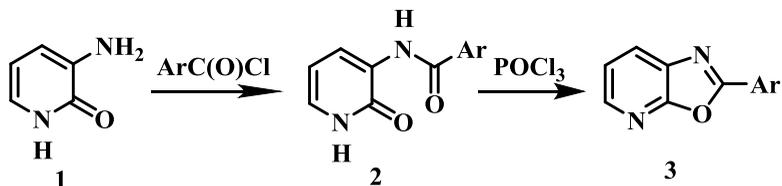
*Научный руководитель: д-р хим. наук, профессор И. В. Кулаков*

Взаимодействием 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-она с хлорацетилхлоридом получен соответствующий хлорацетамид, циклизация которого с оксихлоридом и пентаоксидом фосфора привело к 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-b]пиридину. Полученный 2-хлорметилксазоло[5,4-b]пиридин легко подвергается реакции замещения различными нуклеофильными агентами.

*Ключевые слова:* 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1H)-он, 2-хлор-N-(6-метил-2-оксо-4-фенил-1,2-дигидропиридин-3-ил)ацетамид, 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-b]пиридин, нуклеофильное замещение.

Известно, что производные оксазоло[5,4-b]пиридинов обладают ярко выраженной противовоспалительной и анальгетической активностью. Для некоторых из них активность сравнима с фенилбутазоном или индометацином, при этом они не вызывают раздражения в желудочно-кишечном тракте, которое вызывают многие кислотные противовоспалительные соединения [1].

Так, в литературе описан метод получения производных 2-оксазоло[5,4-b]пиридина **3**, заключающийся в ацилировании незамещенного 3-аминопиридона **1** с различными бензоилхлоридами и последующей циклизацией полученных бензамидов **2** с оксихлоридом фосфора [1].



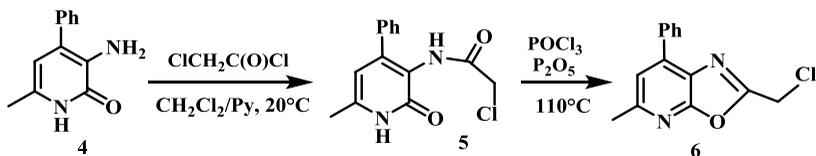
Следует отметить, что в литературе описаны, в основном, оксазоло[5,4-*b*]пиридины, полученные на основе бензамидов, т.е. амидов ароматических, а не алифатических кислот.

В связи с этим для нас представлял интерес осуществить синтез аналогичных производных на основе 3-амино-6-метил-4-фенилпиридин-2(1*H*)-она **4** и изучить их некоторые химические свойства. Так, реакцией 3-аминопиридина **4** с хлорацетилхлоридом был получен 2-хлор-*N*-(6-метил-2-оксо-4-фенил-1,2-дигидропиридин-3-ил)ацетамид **5**. Установлено, что 3-аминопиридин-2(1*H*)-он **4** ацилируется достаточно гладко в среде хлористого метилена в присутствии пиридина при комнатной температуре, при этом хлорацетамид **5** образуется с выходом 70 % [2].

Далее с полученным хлорацетамидом **5** проводились различные вариации условий по возможной циклизации в 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-*b*]пиридин **6**.

Оказалось, что на процесс циклизации **5** влияет достаточно много факторов, такие как чистота исходного хлорацетамида, количество взятого оксихлорида фосфора, время реакции, обработка и т.д.

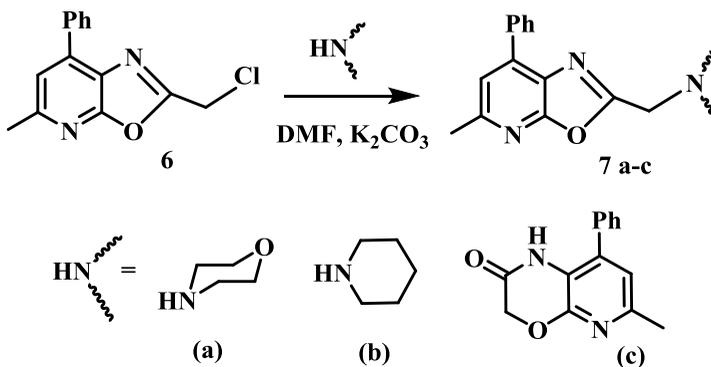
Наиболее приемлемый выход 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-*b*]пиридина **6** около 50 % был получен нами при кипячении с 10-ти кратным избытком оксихлорида фосфора в течении 4-х часов с добавлением эквивалентного количества пентаоксида фосфора.



Полученный 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-*b*]пиридин **6** представляет собой хорошо кристаллизующиеся кристаллы белого цвета, легко растворимые почти во всех органических растворителях.

Наличие в структуре **6** хлорметильной группы предполагает возможность протекания реакций замещения с различными нуклеофильными агентами.

Реакция нуклеофильного замещения показана пока нами на нескольких примерах. Установлено, что более приемлемые выходы в реакции и возможность выделения целевого продукта получены с применением вторичных аминов (морфолин, пиперидин) или даже менее реакционных амидов. Алкилирование первичных аминов сопряжено с протеканием побочных реакций, возможно связанных с разложением оксазолового цикла.



Реакцию проводили в диметилформамиде в присутствии поташа (либо с двойным эквивалентным количеством амина, часть которого служила акцептором выделяющегося при реакции хлороводорода) при комнатной температуре. Полученные соединения **7 a-c** также представляют собой белые кристаллические вещества, легко растворимые в большинстве органических растворителях и только в гексане при нагревании.

Структура полученных соединений **6**, **7a-c** была однозначно доказано ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ -спектроскопией, а соединение **7c** – дополнительно проведенной масс-спектрометрией высокого разрешения с

выявлением молекулярного иона, соответствующего брутто-формуле соединения **7c** –  $[M]^+ = 462.1688$ ,  $(C_{28}H_{22}O_3N_4)^+$ .

При спектральном  $^1H$  ЯМР исследовании установлено, что в спектре соединения **7a** отчетливо регистрируются пять ароматических протонов фенильного заместителя в области 7.45 – 8.06 м.д. Протон Н-6 пиридинового кольца проявляется узким синглетом при 7.39 м.д. Метиленовые протоны резонируют узким синглетом в области 3.93 м.д, что свидетельствует об их полной эквивалентности. В сравнении с химсдвигом исходного соединения **6** метиленовые протоны при замене хлора на морфолин смещаются от 4,74 м.д. до 3,93 м.д. Протоны морфолинового кольца выписываются триплетами в области сильного поля при 2.72 и 3.76 м.д.

Таким образом, нами впервые на основе хлорацетамида 3-аминопиридона получен 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазол[5,4-*b*]пиридин, который является хорошим синтоном для исследования реакций нуклеофильного замещения и синтеза многих N-, S- и O- производных с фармакофорным оксазол[5,4-*b*]пиридиновым фрагментом.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01143.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] *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.

[2] *Фисюк А.С., Кулаков И.В., Никитина О.С. и [др.]* Синтез 3-аминопиридин-2(1H)-онов и 1H-пиридо[2,3-*b*][1,4]оксазин 2(3H)-онов на их основе // *Химия гетероцикл. соединений.* 2014. № 2. С. 241.

---

Ирина Валерьевна Паламарчук,  
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
химический факультет, 2-й курс магистратуры,  
644077, Омск, пр. Мира 55а, (3812) 644238,  
i.v.palamarchuck@chemomsu.ru