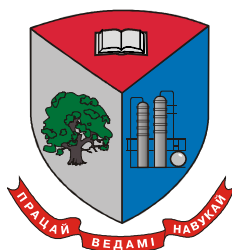


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Минское областное отделение РГОО
«Белорусское общество “ЗНАНИЕ”»
Международное общество ученых технического образования

*Посвящается
185-летию со дня рождения Д.И. Менделеева
160-летию лесотехнического образования Беларуси
55-летию организации НИЧ БГТУ*



ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Материалы докладов 83-й научно-технической конференции
профессорско-преподавательского состава,
научных сотрудников и аспирантов
(с международным участием)

4-15 февраля 2019 года

Минск 2019

УДК 53:51:005.745(0.034)

ББК 22я73

Ф 50

Физико-математические науки : материалы 83-й науч.-техн. конференции профессорско-преподавательского состава, научных сотрудников и аспирантов (с международным участием), Минск, 1-14 февраля 2019 г. [Электронный ресурс] / отв. за издание И. В. Войтов; УО БГТУ. – Минск : БГТУ, 2019. – 75 с.

Сборник составлен по материалам докладов научно-технической конференции сотрудников Белорусского государственного технологического университета и зарубежных участников. Описано влияние плотности потока ассистирующих ионов на толщину медного покрытия осажденного на алюминий и одновременного влияния адсорбированной и ионно-имплантированной примеси на электропроводность пленок фталоцианинов. Разработана компьютерная программа для расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллических наночастиц разных размеров, проведен лазерный синтез наночастиц оксидов цинка и меди для фотовольтаики. Описана энтальпийно-энтропийная компенсация при связывании ионов цинка со свободными основаниями и дважды депротонированными формами порфиринов.

Рассмотрены различные варианты учета ван-дер-ваальсовских короткодействующих и кулоновских дальнедействующих взаимодействий на основе использования базисного кристаллического распределения, изложены результаты моделирования по методу Монте-Карло трехмерного ионного керамического проводника при учете межзеренной границы. Показано, что учет близкодействующих взаимодействий и межчастичных корреляций приводит к качественным особенностям в поведении распределения заряда и электрического потенциала в керамических твердоэлектролитных системах, рассмотрены термодинамические и структурные особенности систем с конкурирующим взаимодействием.

Приведены новые математические модели задач лесопромышленного комплекса, движения вязкой жидкости и финансового рынка. Обсуждены вопросы стабилизации сложных динамических систем в классе линейных регуляторов. Показана роль дискретных ортогональных полиномов в построении решения уравнений динамики квантовых систем в поле лазерного излучения и описаны некоторые топологические свойства алгебры обобщенных операторов и построение правосторонней резольвенты для дискретного оператора взвешенного сдвига.

Рецензенты:

д-р физ.-мат. наук, проф. кафедры теоретической механики В.С. Вихренко

д-р физ.-мат. наук, зав. кафедрой физики Н.Н. Крук

канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры высшей математики И. К. Асмыкович

Главный редактор

ректор, профессор И.В. Войтов

© УО «Белорусский государственный
технологический университет», 2019

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Мисевич А.В., Почтенный А.Е., Долгий В.К.</i> Учет одновременного влияния адсорбированной и ионно-имплантированной примеси на электропроводность пленок фталоцианинов	6
<i>Лапто А.Н., Мисевич А.В., Почтенный А.Е.</i> Фотоэлектрические свойства гетероструктуры фталоцианин-периленовый пигмент.....	7
<i>Тульев В.В.</i> Влияние плотности потока ассистирующих ионов на толщину медного покрытия осажденного на алюминий методом динамического атомного перемешивания	8
<i>Чаевский В.В., Жилинский В.В., Романова А.М., Штемплук Р.Г.</i> Влияние параметров осаждения на структуру Cr-УДА/ZrN-покрытия сплава типа ВКЗ	9
<i>Мадьяров В.Р.</i> Определение времени релаксации носителей заряда в полупроводниках с помощью частотных характеристик фазового сдвига зондирующего излучения	12
<i>Бобрович О.Г.</i> Влияние воздействия термического отжига на дефектообразование в арсениде галлия при имплантации ионов фосфора.....	13
<i>Кленицкий Д.В., Крук Н.Н.</i> Определение фотофизических параметров красителей в экспериментах по возбуждению и релаксации флуоресценции	14
<i>Крук Н.Н., Кленицкий Д.В., Гладков Л.Л.</i> Влияние молекулярной структуры на энергию нижних возбужденных электронных синглетных и триплетных состояний свободных оснований корролов	15
<i>Крук Н.Н., Вершиловская И.В., Кленицкий Д.В., Люлькович Е.С.</i> Энтальпийно-энтропийная компенсация при связывании ионов цинка со свободными основаниями и дважды депротонированными формами порфиринов	16
<i>Наркевич И.И., Фарафонтова Е.В.</i> Разработка компьютерной программы для расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллических наночастиц разных размеров.....	17
<i>Наркевич И.И., Цях. А, Пагацан О.В.</i> Статистическое изучение возможности существования спектра мезоскопических неоднородностей плотности в объеме коллоидного раствора с потенциалом SALR.....	19
<i>Буцень А.В., Тарасенко Н.В., Тарасенко Н.Н., Шустова Е.А., Кирич В.В.</i> Лазерный синтез наночастиц оксидов цинка и меди для фотовольтаики	21
<i>Поплавский В.В., Бобрович О.Г., Дорожко А.В.</i> Формирование мембранно-электродных блоков топливных элементов с полимерным мембранным электролитом.....	22
<i>Бокун Г.С., Гапанюк Д.В.</i> Определение влияния короткодействия на эффекты экранирования в ионной системе.....	24
<i>Бокун Г.С., Головкин М.Ф.</i> Кластерное разложение для описания ионных систем	25

<i>Бокун Г.С., Д.Ди. Каприо</i> Особенности распределения электропотенциала в системе с притяжением первых, отталкиванием вторых и третьих соседей.....	26
<i>Бокун Г.С., Вихренко В.С.</i> Расчет емкости твердого электролита с учетом энергии Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия ионов	27
<i>Гришина В.С., Вихренко В.С., Цях А., Пекальски Я.</i> Основные состояния системы с $srla$ взаимодействием на треугольной решетке	28
<i>Грода Я.Г., Д. ди Каприо, Гапанюк Д.В.</i> Равновесные свойства решеточного флюида на кубической решетке с SALR-потенциалом	29
<i>Пекальски Я., Бильданов Э.Э.</i> Эффекты ограничений в ламеллярных самоорганизующихся структурах	30
<i>Ласовский Р.Н., Пацаган Т.Н.</i> Компьютерное моделирование трехмерной электропроводящей керамики с примесными ионами, сегрегированными на межзеренной границе	31
<i>Асмыкович И.К.</i> О выделении нулевой динамики в нормализуемых дескрипторных системах	32
<i>Волк А.М., Вилькоцкий А.И.</i> Математическая модель пленочного движения вязкой жидкости в конусной насадке	34
<i>Игнатенко В.В., Леонов Е.А.</i> Математическая модель лесопромышленной системы «Харвестер-форвардер».....	36
<i>Борковская И.М.</i> О построении стабилизирующего регулятора для гибридной дискретно-непрерывной системы	39
<i>Соловьева И.Ф.</i> К вопросу исследования задач с погранслоем	41
<i>Пономарева С.В., Пыжкова О.Н., Яблонская Н.Б.</i> Полугрупповые свойства операторов интегрирования дробного порядка Римана-Лиувилля	43
<i>Карлович Т.Б.</i> Влияние неравномерного нагрева поверхности загрязненных ребристых труб на теплопередачу аппаратов воздушного охлаждения	45
<i>Чайковский М.В.</i> Элементы экономико-математического анализа финансового рынка.....	46
<i>Якименко А.А.</i> Стабилизация трехмерной системы с запаздыванием нейтрального типа	48
<i>Яроцкая Л.Д.</i> Об интегральном преобразовании, связанном с преобразованием Контровича–Лебедева, в весовом пространстве L_2	49
<i>Савва В.А., Банжак С.</i> Роль дискретных ортогональных полиномов в построении решения уравнений динамики квантовых систем в поле лазерного излучения.....	52
<i>Архипенко О.А.</i> Построение правосторонней резольвенты для дискретного оператора взвешенного сдвига.....	54
<i>Мазель М.Х., Пиндрик О.И.</i> Некоторые топологические свойств алгебры обобщенных операторов	55

<i>Баранников Р.В., Абуляисова Л.К.</i> Квантово-химические электронно-энергетические характеристики цианобифенилов	57
<i>Бимендина А.У.</i> Условия вложения для пространств Лоренца и Бесова	59
<i>Смагулов Ж.К., Келесбек Н.К.</i> Информационные технологии как средство реализации уровневой дифференциации обучения физике в колледже	61
<i>Михайловская Л.В., Валаханович Е.В.</i> О необходимости преподавания исследования операций при подготовке специалистов в сфере военного управления	63
<i>Сакипова Ш.Е.</i> Инновационные технологии обучения	65
<i>Тенгаева А.А.</i> Безусловная базисность одной несамосопряженной задачи	67
<i>Shtefan N.I.</i> The influence of the external load amplitude on the degree of rotational shells deformation with fluid between them.....	69
<i>Shtefan N.I.</i> Deformation of the fluid-filled elastic structure under impulse loading....	71
<i>Седнеев Ю.В.</i> Современная периодическая система, числа и пределы Д.И. Менделеева	73

А. В. Мисевич, доц., канд. физ.-мат. наук;
А. Е. Почтенный, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
В. К. Долгий, доц., канд. физ.-мат. наук (БГАТУ, г. Минск)

УЧЕТ ОДНОВРЕМЕННОГО ВЛИЯНИЯ АДСОРБИРОВАННОЙ И ИОННО-ИМПЛАНТИРОВАННОЙ ПРИМЕСИ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПЛЕНОК ФТАЛОЦИАНИНОВ

Тонкие пленки фталоцианинов избирательно изменяют свою проводимость в зависимости от состава окружающей газовой среды. Это делает перспективным применение фталоцианинов для создания селективных газовых сенсоров. Однако недостаточная стабильность электрических свойств этих материалов, обусловленная присутствием в их составе некоторого количества посторонних адсорбированных примесей, затрудняет их практическое применение. Целью данной работы является разработка ионно-лучевой методики улучшения характеристик адсорбционно-резистивных сенсоров на основе пленок фталоцианинов и определение закономерностей влияния ионно-имплантированных и адсорбированных примесей на проводимость и сенсорные свойства пленок фталоцианинов.

Тонкие пленки безметалльного фталоцианина, фталоцианина меди и хлорзамещенного фталоцианина меди были модифицированы имплантацией ионов железа, платины и кислорода. Исследование влияния адсорбированных примесей на проводимость пленок выполнено методом циклической термодесорбции в вакууме. Анализ экспериментальных данных основывался на теоретической модели многоуровневого прыжкового электропереноса. Сопоставление результатов теоретических расчетов с экспериментом показывает, что в зависимости от концентрации адсорбированной и ионно-имплантированной примеси, электроперенос может осуществляться как по собственным, так и по примесным центрам локализации фталоцианина, либо по совместной системе собственных и примесных центров локализации. Определены численные значения микроскопических параметров электропереноса: радиусы локализации электронов и концентрации центров локализации.

Разработанная методика и установленные режимы ионно-лучевого модифицирования сенсорных слоев фталоцианинов позволили повысить чувствительность и воспроизводимость кривых адсорбционно-резистивного отклика.

А. Н. Лаппо, ассист.;
А. В. Мисевич, доц., канд. физ.-мат. наук;
А. Е. Почтенный, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ФТАЛОЦИАНИН-ПЕРИЛЕНОВЫЙ ПИГМЕНТ

В результате исследования были получены многослойные тонкопленочных гетероструктуры на основе фталоцианина меди (CuPc) и N,N'-диметилдиимида перилентетракарбоновой кислоты (периленовый пигмент) с различным чередованием слоев. При исследовании полученных гетероструктур использовались оптическая спектроскопия, измерение спектров фото-ЭДС и фотопроводимости, которые проводились с помощью монохроматора спектрофотометра SPECORDM40.

Установлено, что экстремумы на спектрах фото-ЭДС соответствуют экстремумам на спектрах оптического поглощения органических слоев, что указывает на увеличенную светочувствительную область и спектральную ширину области преобразования излучения по сравнению с однослойными элементами на основе барьера Шоттки.

Изучение влияния адсорбированного кислорода на электрофизические свойства гетероперехода периленовый пигмент/CuPc показало, что при увеличении концентрации кислорода на границе раздела происходит уменьшение фото-ЭДС, тогда как фотопроводимость органических слоев сохраняется.

Экспериментально показана возможность управления электрофизическими свойствами гетероперехода между двумя органическими полупроводниками с прыжковым механизмом проводимости путем внедрения адсорбированных примесей на границу раздела между органическими полупроводниками. Установлено, что уменьшение концентрации адсорбированного кислорода на границе раздела между слоями периленовый пигмент и CuPc позволяет увеличить фото-ЭДС солнечного элемента Au / периленовый пигмент / CuPc / ITO до 0,35 В.

ВЛИЯНИЕ ПЛОТНОСТИ ПОТОКА АССИСТИРУЮЩИХ ИОНОВ НА ТОЛЩИНУ МЕДНОГО ПОКРЫТИЯ ОСАЖДЕННОГО НА АЛЮМИНИЙ МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО АТОМНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

В данном докладе обсуждаются экспериментальные результаты по изучению приповерхностных слоев структур Cu/Al, сформированных методом динамического атомного перемешивания (ДАП). В качестве подложки использовался алюминий чистотой 99,995%, на которую наносилось Cu-покрытие. Скорость осаждения покрытия составляла $0,120 \pm 0,005$ нм/с, время осаждения покрытия – 323 ± 2 с. Толщина покрытия, осажденного без ионного ассистирования, составляет $38,8 \pm 6,6$ нм. В качестве ассистирующих ионов использовались ионы аргона с энергией 6 кэВ. Плотность тока в ионном пучке при осаждении покрытия менялась в интервале от 4 до 20 мкА/см², что обеспечивало изменение интегрального потока Φ ассистирующих ионов аргона в интервале от $0,8 \cdot 10^{16}$ до $4 \cdot 10^{16}$ ион/см². При постоянной скорости осаждения покрытия это позволяло изменять параметр I/A (отношение плотности потока I ассистирующих ионов к плотности потока A атомом осаждаемого покрытия) – в интервале от 0,04 до 0,13. Осаждение покрытия происходило при вакууме в мишенной камере $2 \cdot 10^{-5}$ – $2 \cdot 10^{-6}$ Торр. Элементный состав приповерхностных слоев сформированных структур изучался методом резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием. Энергия ионов гелия составляла 2 МэВ, угол влета 0°, угол вылета 15°, угол рассеяния 165°. Энергетическое разрешение анализирующей системы составляло 13 кэВ, что обеспечивало разрешение по глубине ~11 нм.

Изучение элементного состава показало, что Cu/Al структуры содержат атомы осаждаемого металла меди, атомы аргона, атомы алюминия из подложки и атомы технологической примеси кислорода. На основе данных РОР были определены толщины Cu/Al структур, сформированные при различных значениях I/A . Из сравнения полученных данных следует, что в области $I/A = 0,08-0,13$ данные расчета и эксперимента совпадают. При значении $I/A \sim 0,04$ экспериментально определенная толщина в два раза меньше теоретически рассчитанной. По нашему мнению, при таком параметре происходит преимущественное распыление атомом осаждаемого покрытия.

УДК 674.055:621.934(043.3)

В. В. Чаевский, канд. физ.-мат. наук, доц.;

В. В. Жилинский, канд. хим. наук, доц.;

А. М. Романова, канд. пед. наук, ст. преп.

(БГТУ, г. Минск)

Р. Г. Штемплюк, канд. техн. наук, гл. инженер

(НП ЗАО «Синта», г. Минск)

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ОСАЖДЕНИЯ НА СТРУКТУРУ Cr-УДА/ZrN-ПОКРЫТИЯ СПЛАВА ТИПА ВКЗ

Применение синтетических алмазов, полученных методом детонационного синтеза, и известных как ультрадисперсные алмазы (УДА) или наноалмазы детонационного синтеза (ДНА) [1] в электрохимических и химических покрытиях приводит к повышению их износостойкости, коррозионной стойкости др. [1], что используется для деревообрабатывающего инструмента. Сформированные методом конденсации вещества из плазменной фазы в вакууме с ионной бомбардировкой (КИБ) ионно-плазменные покрытия на базе нитридов или карбидов тугоплавких металлов на лезвиях ножей инструмента существенно увеличивают его период стойкости [2]. Формирование градиентных покрытий на режущей кромке инструмента путем создания композиционного электрохимического покрытия (КЭП) между ионно-плазменным покрытием и основой уменьшает интенсивность износа основы [2].

Для выполнения работы были выбраны фрезы с ножами фирмы Leitz (Германия) из твердого сплава карбида вольфрама WC – 3 вес.% Co (аналог в СНГ – сплавы типа ВКЗ), которые широко применяются в деревообрабатывающей промышленности Республики Беларусь.

Целью данной работы было разработать методику послойного осаждения, синтезировать на поверхности лезвий твердосплавных ножей комбинированным методом КИБ и гальванической обработкой Cr-УДА/ZrN-покрытия и исследовать структуру, фазовый и элементный состав сформированных слоев.

На лезвия ножей фрез методом КИБ осаждались ZrN-покрытия по стандартной методике [2]. Затем на подготовленную поверхность ZrN-покрытия осаждались Cr-УДА-КЭП из базового электролита

хромирования с добавлением УДА марки "УДА-ВК" – 5 г/л и слои электрохимической меди из сернокислого электролита и химического никеля из раствора на основе гипофосфита натрия с целью получения адгезии Cr-УДА-КЭП к твердому сплаву.

СЭМ-снимок поперечного излома образца (рис. 1а) показывает наличие слоев различной микроструктуры и толщины.

Рисунки 1б, в показывают присутствие кобальта в ZrN-покрытии и в Ni-слое, а также подтверждают факт того, что Cr-УДА слой и промежуточные слои меди и никеля не перемешиваются друг с другом и ZrN-покрытием.

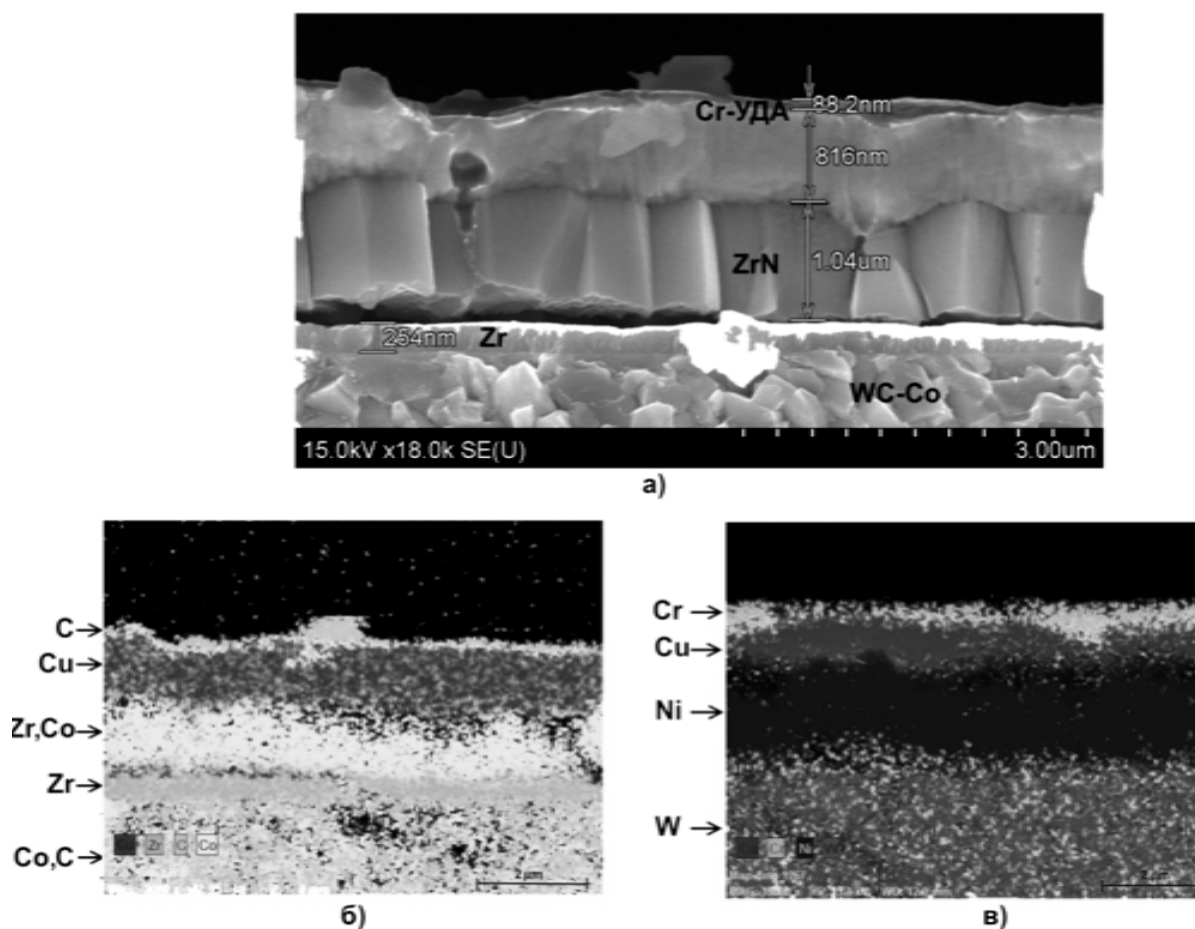


Рисунок 1 – Микроструктура образца с Cr-УДА/ZrN-покрытием в характеристическом рентгеновском излучении

На этапе ионной очистки поверхности подложки при синтезе покрытий методом КИБ температура достигает значения 1300°C. Такая температура способствует выходу кобальта на поверхность твердого сплава WC-Co в результате сублимации, когда давление паров

кобальта над поверхностью сплава является достаточно высоким [3].

Ионно-плазменные покрытия, сформированные методом КИБ, имеют пористую структуру. Поэтому кобальт диффундирует по порам в ZrN-покрытии. Присутствие кобальта в Ni-слое связано с наличием дефектов в его структуре [4].

ЛИТЕРАТУРА

1 Долматов, В. Ю. Ультрадисперсные алмазы детанационного синтеза: свойства и применение / В. Ю. Долматов // Успехи химии, 2001. – Т. 70, № 7. – С. 687-708.

2 Влияние комбинированной гальванической и КИБ обработки на износ лезвия стальных ножей дереворежущего инструмента / И. И. Бавбель [и др.] // Труды БГТУ, 2015. – № 2: Лесная и деревооб-
раб. пром-сть. – С. 254-257.

3 Линник, С. А. Влияние кобальта на адгезионную прочность поликристаллических алмазных покрытий на твердых сплавах WC-Co / С. А. Линник, А. В. Гайдайчук, В. В. Охотников // ЖТФ, 2018. – Т. 88, вып. 2. – С. 214-218.

4 Влияние параметров электрохимического осаждения на структуру и фазовый состав покрытия сплавом Ni-P / В. В. Чаевский [и др.] // Труды БГТУ, 2016. – № 6: Физ.-мат. науки и информатика. – С. 106-109.

Мадьяров В.Р., доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ПОМОЩЬЮ ЧАСТОТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ФАЗОВОГО СДВИГА ЗОНДИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Методы на основе зондирования полупроводников излучением СВЧ-диапазона позволяют определить их проводимость и подвижность [1,2], а также такие фундаментальные параметры электронного переноса, как эффективную массу и время релаксации носителей заряда. В данной работе представлены результаты экспериментального определения времени релаксации τ по измеренному частотному сдвигу $\Delta\epsilon$ диэлектрической проницаемости с помощью интерферометра. Для обработки результатов использовалось выражение для диэлектрической проницаемости образца, полученное из решения кинетического уравнения Больцмана переноса заряда в полупроводнике. В области частот $\omega\tau \sim 1$ в приближении сферических энергетических время релаксации можно оценить по наклону частотной зависимости $\Delta\epsilon(\nu^2)$. В диапазоне 30–75 ГГц для образцов *n*-Si и *n*-Ge. наблюдается близкий к линейному рост фазового сдвига с частотой, причем для германия значение сдвига фаз больше по сравнению со значениями, полученными для *n*-Si.

Анализ данных показывает, что кривые, полученные для измеренных значений τ , лучше всего соответствуют значениям τ в диапазоне $(3-5) \cdot 10^{-13}$ с. Зависимости времени релаксации от температуры для обоих образцов были получены с использованием значения производной $d(\Delta\epsilon) / d(\nu^2)$ из соответствующей зависимости, в диапазоне зондирующих частот 30–65 ГГц для каждой температуры. В этом диапазоне зависимость $\Delta\epsilon(\nu^2)$ близка к линейной и наблюдался наименьший разброс $\Delta\epsilon$. Аппроксимация полученных экспериментальных данных степенными функциями показывает, что наблюдаемое температурное уменьшение времени релаксации можно описать зависимостями $\tau = 7 \cdot 10^{-10} T^{-1,34}$ для Ge и $\tau = 3,8 \cdot 10^{-10} T^{-1,28}$ для Si. Полученные значения соответствуют времени релаксации носителей вследствие их рассеяния на тепловых колебаниях решетки. Значение подвижности, рассчитанной с использованием измеренных значений τ , для кремния составило $0,16 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, что хорошо согласуется с известными данными.

О. Г. Бобрович, доц., канд. физ-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

ВЛИЯНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ ПРИ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ ФОСФОРА

Свойства имплантированных слоев кристаллов в значительной мере зависят, как от типа иона внедряемого в кристалл, так и от дефектов, которые образовались в них при облучении. В настоящей работе методом резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия с $E_0 = 1$ МэВ в сочетании с каналированием (РОРКИ) исследовано дефектообразование в кристаллах (111) GaAs, имплантированных ионами фосфора с энергией 60 кэВ до дозы $4 \cdot 10^{14}$ см⁻², после термической обработки. Имплантация проводилась при плотности тока 2,5 мкА/см², при которой наблюдалась аморфизация поверхностного слоя кристалла GaAs. Стационарный термический отжиг проводился в течение 15 мин в интервале температур 150–450°С. Спектры РОРКИ ионов гелия регистрировались поверхностно-барьерным детектором с $\Delta E = 15$ кэВ в условиях стандартной ($\theta = 150^\circ$) геометрии. При этом достигалось разрешение по глубине в 5,96 нм/канал.

Анализ энергетических спектров обратного рассеяния ионов гелия от кристаллов GaAs, имплантированных ионами P⁺ и отожженных при различных температурах показал, что слоевая концентрация дефектов уменьшается с увеличением температуры отжига. Так при температуре отжига $t = 350$ °С значение слоевой концентрации дефектов снижается в два раза, а при температуре $t = 450$ °С – в три раза в сравнении со слоевой концентрацией дефектов исходного не отожженного образца, которая составляла $2,7 \cdot 10^{17}$ ат/см². Глубина максимальной концентрации дефектов сравнима с глубиной проникновения ионов фосфора с соответствующей энергией в кристалл арсенида галлия. При термическом отжиге кристаллов GaAs имплантированных ионами фосфора происходит не только снижение концентрации первичных радиационных дефектов, но и их перестройка, что следует из анализа изменения уровня деканалирования за пиком повреждений, которое может быть также связано с формированием в арсениде галлия дефектов структуры разного типа.

Д. В. Кленицкий, доц., канд. физ.-мат. наук;
Н. Н. Крук, зав. кафедрой физики, д-р физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КРАСИТЕЛЕЙ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ВОЗБУЖДЕНИЮ И РЕЛАКСАЦИИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

Изучение фотофизических процессов, происходящих в электронно-возбужденных состояниях сложных органических молекул, является одной из важнейших задач современной молекулярной физики, оптики и спектроскопии. Это объясняется особой ролью такого рода процессов в природных системах и в фотохимии, а также растущими применениями их в многочисленных технических приложениях (активные среды и элементы управления лазерных систем, средства для люминесцентного анализа и контроля, фоторегистрирующие среды и т. д.). Основной целью фотофизики является количественное исследование излучательных и безызлучательных процессов дезактивации энергии электронного возбуждения. Измерение квантовых выходов безызлучательных процессов внутренней и интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние представляет собой достаточно сложную задачу. В работе предложен способ экспериментального измерения квантового выхода в триплетное состояние и времени жизни триплетного состояния в экспериментах по возбуждению флуоресценции прямоугольными световыми импульсами с длительностью импульса превышающей время жизни триплетного состояния. Данный способ основан на изучении временного профиля флуоресценции от плотности потока фотонов возбуждающего излучения. Получены зависимости стационарного значения интенсивности флуоресценции, а также времени релаксации интенсивности к стационарному значению от плотности потока фотонов возбуждающего излучения. Данные зависимости являются нелинейными и определяются квантовым выходом в триплетное состояние и временем его жизни. С увеличением плотности потока фотонов стационарные значения интенсивности флуоресценции возрастают, а время релаксации уменьшается. Показано, что повышение квантового выхода в триплетное состояние приводит к уменьшению стационарных значений интенсивности флуоресценции и времени релаксации.

Н. Н. Крук, зав. кафедрой физики, д-р физ.-мат. наук
Д. В. Кленицкий, доц., канд. физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск);

Л.Л. Гладков, проф., д-р физ.-мат. наук
(Белорусская государственная академия связи, г. Минск)

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ НА ЭНЕРГИЮ НИЖНИХ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИНГЛЕТНЫХ И ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ СВОБОДНЫХ ОСНОВАНИЙ КОРРОЛОВ

Семейство терапиррольных соединений, родоначальником которого является молекула порфина, включает в себя группы макрогетероциклических соединений, в которых два соседних пиррольных (пирролениновых) кольца, соединяются между собой C_a-C_a связью, одной из которых являются корролы. Квантово-химическими методами изучен тип неплоскостных искажений тетрапиррольного макроцикла для ряда производных свободного основания коррола.

Показано, что седлообразный тип неплоскостных искажений присущ двум соединениям с наибольшими значениями параметра $\Delta 23$, равными 0,380 и 0,413 Å; конформеры со значением параметра $\Delta 23 = 0,304-0,326$ Å следует характеризовать как пограничные структуры, в которых одно из пиррольных колец лежит в плоскости 7C; остальные соединения имеют волнообразный тип неплоскостных искажений. С использованием полуэмпирического метода ZINDO/S рассчитаны энергии вертикальных $S_0 \rightarrow S_1$ и $S_0 \rightarrow T_1$ переходов и установлено, что с ростом степени неплоскостных искажений макроцикла, которая характеризовалась параметром $\Delta 23$, наблюдается линейный рост величины энергетического зазора $\Delta E(S_1-T_1)$ между нижними возбужденными S_1 и T_1 состояниями.

Отмечено, что величина $\Delta E(S_1-T_1)$ различается для соединений с близкими значениями параметра $\Delta 23$, но различной длиной C_a-C_a связи в дипиррольном фрагменте. При этом наклон линейной зависимости в обоих случаях в пределах ошибки близок и составляет 6600–7900 $\text{см}^{-1}\text{Å}^{-1}$. В триплетном T_1 состоянии оба NH таутомера 5,10-мезитил-15-2,6-дихлоропиримидинил-коррола обладают более искаженным макроциклом по сравнению с основным S_0 состоянием, причем величины параметра $\Delta 23$ равны 0,330 и 0,246 для таутомеров T_1 и T_2 соответственно при одинаковой длине C_a-C_a связи.

Н. Н. Крук, зав. кафедрой физики, д-р физ.-мат. наук;
И.В. Вершиловская, ассист., канд. биол. наук;
Д. В. Кленицкий, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
Е.С. Люлькович, инж. (РУП «Белмедпрепараты», г. Минск)

ЭНТАЛЬПИЙНО-ЭНТРОПИЙНАЯ КОМПЕНСАЦИЯ ПРИ СВЯЗЫВАНИ ИОНОВ ЦИНКА СО СВОБОДНЫМИ ОСНОВАНИЯМИ И ДВАЖДЫ ДЕПРОТОНИРОВАННЫМИ ФОРМАМИ ПОРФИРИНОВ

Молекулярные сенсоры на ионы металлов могут быть разработаны на основе использования реакции комплексообразования ионов металлов с тетрапиррольными макроциклами. При комплексообразовании повышается молекулярная симметрия (D_{4h} по сравнению с D_{2h} в случае свободных оснований), что сопровождается существенными изменениями с электронных спектров поглощения и спектров флуоресценции, которые могут быть использованы в качестве источников аналитических сигналов. Нами исследовано комплексообразование ионов цинка с десятью производными порфиринов.

Обнаружен гистерезис константы скорости комплексообразования ионов Zn^{2+} с молекулами свободных оснований порфиринов как функции кислотности макроциклического ядра $pK_{a1,2}$ и предложена интерпретация данного явления на основании модели, подразумевающей инверсию скоростей процессов, определяющих шаги, которые лимитируют скорость комплексообразования: одна из ветвей гистерезисной зависимости наблюдается, когда стадией, лимитирующей скорость комплексообразования, является отрыв протонов, а другая, – когда непосредственно связывание иона металла определяют общую скорость реакции комплексообразования.

Впервые обнаружена энтальпийно-энтропийная компенсация для комплексообразования иона металла с серией порфиринов различной структуры, а электронные эффекты периферических заместителей предложено рассматривать, как первопричину корреляции между величинами энтальпии ΔH^\ddagger и энтропии ΔS^\ddagger активации. Показано, что перераспределение электронной плотности между периферическими заместителями и макроциклом посредством как резонансного, так и индуктивного эффектов является причиной наблюдаемых различий в величинах константы скорости комплексообразования иона металла.

И.И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук
 Е.В. Фарафонтובה, ст. преп., канд. физ.-мат. наук
 (БГТУ, г. Минск)

РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ ПРОГРАММЫ ДЛЯ РАСЧЕТА СТРУКТУРНЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ РАЗНЫХ РАЗМЕРОВ

Ранее [1] были изложены результаты расчетов микроструктуры и термодинамических характеристик сферических кристаллических наночастиц полученные в предположении, что заполнение ячеек ω_i и ω_j метода условных распределений молекулами системы происходит независимо друг от друга, т. е. двухъячеечные числа заполнения $n_{ij} \approx n_i n_j$. В дальнейших расчетах учитывается корреляция при заполнении всевозможных пар ячеек в объеме наночастицы. В двухуровневом молекулярно-статистическом подходе используются потенциалы Φ средних сил, которые в силу неоднородности системы являются функционалами от искомым полей плотности. В случае однокомпонентной системы интегральное уравнение для потенциалов средних сил имеет следующий вид:

$$f_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\}) = \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i} f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\}) + \frac{n_{ij}^{av}}{n_i} f_{ij} \{n_l\}. \quad (1)$$

Здесь

$$f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\}) = \frac{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)\right\} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{jk}(\vec{q}_j, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_j}{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{jk}(\vec{q}_j, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_j}, \quad (2)$$

$$f_{ij} \{n_l\} = \frac{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}, \quad \theta = kT, \quad (3)$$

$$n_{ij}^{aa} \{n_l\} = n_i - n_{ij}^{av} \{n_l\}, \quad (4)$$

$$n_{ij}^{av} \{n_l\} = \frac{1}{2A_{ij}} \left\{ \left[(n_i - n_j) A_{ij} - 1 \right] + \sqrt{\left[(n_i - n_j) A_{ij} - 1 \right]^2 + 4n_i (1 - n_j) A_{ij}} \right\}, \quad (5)$$

$$A_{ij} = f_{ij}^{(a)}\{n_l\} - 1, \quad (6)$$

$$f_{ij}^{(a)}\{n_l\} = \frac{\int_{\omega_i} f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\}) \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}. \quad (7)$$

Из физических соображений ясно, что в связи с короткодействующим межмолекулярным потенциалом $\Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)$ потенциалы в неоднородной среде должны наиболее сильно зависеть от плотности в ближайших ячейках, окружающих выделенную пару ячеек ω_i и ω_j . В связи с этим, в численных расчетах достаточно учесть зависимость потенциалов $\Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})$ только от чисел заполнения в ячейках ω_i , ω_j , принадлежащих первым трем координационным сферам и воспользоваться методикой усреднения потенциала Леннард–Джонса, которая была разработана ранее. Функционалы энтропии S , внутренней энергии U и свободной энергии F сферической наночастицы определяются по следующим формулам:

$$S\{n_p\} = -\sum_{p=1}^P Z_p \left(n_p \ln n_p + (1 - n_p) \ln(1 - n_p) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J n_{pj} \ln G_{pj} \right), \quad (8)$$

$$U\{n_p\} = \sum_{p=1}^P Z_p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J (n_p n_j G_{pj} \Phi(b_p, r_{pj}, b_j)), \quad F\{n_p\} = U\{n_p\} - \theta S\{n_p\}. \quad (9)$$

Здесь Z_p – число узлов, принадлежащих координационной сфере с номером p ; $J = 42$ – число узлов, принадлежащих трем координационным сферам с центрами, совпадающими с центром ячейки ω_p , по узлам которых выполняется суммирование в уравнениях (8) и (9).

Учитывая вышесказанное, для решения замкнутой системы интегральных и алгебраических уравнений (1)–(9) разработана компьютерная программа с привлечением пакета Mathcad и проведены контрольные расчеты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич, И. И. Численно-аналитический расчет равновесных характеристик наночастиц в рамках двухуровневого молекулярно-статистического метода / И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова, Н. А. Липай // Наноструктуры в конденсированных средах. Сборник научных статей. 2018. Минск – С. 124–130.

И.И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
 А. Цях, проф., д-р. физ.-мат. наук (ИФХ Польской АН, г. Варшава);
 О.В. Пагацан, ведущий науч. сотр., д-р. физ.-мат. наук
 (ИФКС НАН Украины, г. Львов)

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ СПЕКТРА МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ ПЛОТНОСТИ В ОБЪЕМЕ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА С ПОТЕНЦИАЛОМ SALR

В работе [1] в рамках двухуровневого статистического метода установлено, что если к условию экстремальности свободной энергии добавить уравнение диффузии, то полученное решение для поля плотности указывает на возможность реализации устойчивых состояний системы с наноразмерными неоднородностями поля плотности, которые образуют периодическую пространственную структуру во всем макроскопическом объеме. Дальнейшие численные исследования функционала свободной энергии коллоидных растворов с использованием потенциала SALR (Short-range Attraction and Long-rang Repulsion) показывают, что функционал таких систем может иметь не один, а несколько минимумов с разными значениями длин волн, для которых свободная энергия меньше энергии однородного состояния. В этих расчетах потенциал SALR используется в виде суммы двух членов: потенциала Леннард–Джонса и экранированного потенциала Кулона, которые записываются в безразмерной форме:

$$\Phi(r) = 4(r^{-12} - r^{-6}) + Ar^{-1}e^{-\alpha r}, \quad A = 1,27; \quad \alpha = 0,5. \quad (1)$$

Здесь расстояния и потенциалы рассчитываются в единицах линейного (σ) и энергетического (ϵ) параметров потенциала Леннард–Джонса соответственно.

В качестве примера этих расчетов на рис.1 приведен график зависимости относительной вариации $\epsilon_{\Omega} = \Delta\Omega\{n_i\} / \Omega(n)$ термодинамического функционала $\Omega\{n_i\} = F\{n_i\} - \mu \sum n_i$ от волнового числа $k = 2\pi/\lambda$ для заданного значения чисел заполнения ячеек n однородной коллоидной системы, определяющего объемную плотность системы при безразмерной температуре $\theta = 0,4$ (B – амплитуда гармонической неоднородности с волновым числом k ; λ_1 и λ_2 – длины волн, которые соответствуют минимумам относительной вариации ϵ_{Ω}).

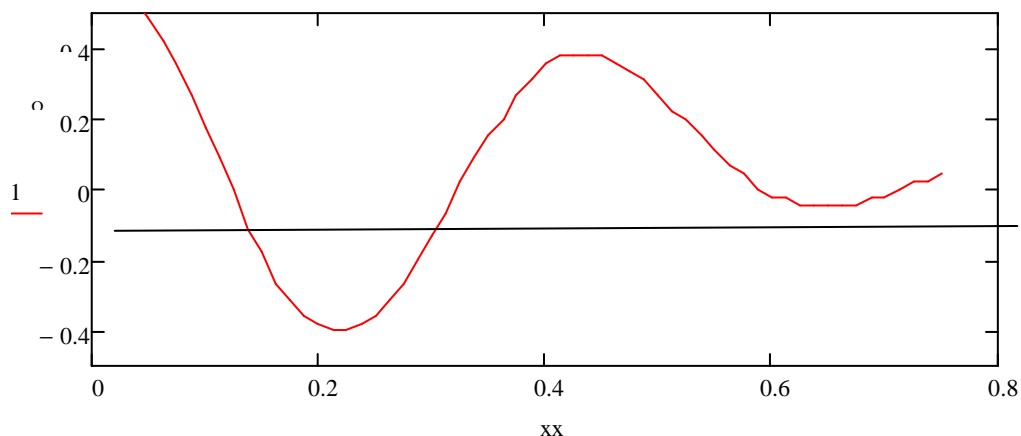


Рисунок 1 – Зависимость вариации ϵ_{Ω} функционала Ω от волнового числа k ($\theta = 0,4$; $n = 0,05$; $B = 0,04$; $\lambda_1 \approx 28,7$; $\lambda_2 \approx 9,6$)

Из рисунка 1 видно, что гармоническая неоднородность поля плотности с длинами волн λ_1 и λ_2 приводит к уменьшению функционала Ω (точки минимума на графике рисунка). Это означает, что коллоидная система с мезоскопическими неоднородностями λ_1 и λ_2 оказывается термодинамически более устойчивой по сравнению с однородной системой, которой соответствует волновое число $k = 0$ ($\lambda = \infty$).

В качестве заключения следует отметить, что имеется возможность модифицировать двухуровневую статистическую теорию с целью изучения адсорбции коллоидных частиц из водных растворов на заряженных поверхностях, рассматривая коллоидный раствор как систему, которая находится во внешнем поле заряженной поверхности либо рассматривая их как единую систему с соответствующим общим гамильтонианом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И. И., Бокун Г. С. Исследование наноструктуризации вещества в рамках двухуровневого молекулярно-статистического описания // Международная научно-исследовательская конференция «Приоритетные направления современных научных исследований XXI века». Сборник научных статей. –Трехгорный: ТТИ НИЯУ МИФИ, 2016. –С. 3–5.

А.В. Буцень, ассист. (БГТУ, г. Минск)
Н.В. Тарасенко, чл.-корр. НАН Беларуси., д-р физ.-мат наук;
Н.Н. Тарасенко; Е.А. Шустова; В.В. Кирис
(Институт физики НАН Беларуси, г. Минск)

ЛАЗЕРНЫЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЦИНКА И МЕДИ ДЛЯ ФОТОВОЛЬТАИКИ

Материалы для фотовольтаических элементов нового поколения должны быть эффективными, стабильными, экологически чистыми, энергосберегающими и недорогими. Наиболее перспективными материалами являются полупроводниковые наноматериалы, в частности, оксиды металлов и кремниевые квантовые точки. Они представляют особый интерес для фотоэлектрических преобразователей из-за их оптических и электронных свойств, обусловленных поверхностными и квантово-размерными эффектами. Например, оксид меди (CuO) представляет собой полупроводник р-типа с шириной запрещенной зоны 1,5 эВ, которая близка к идеальной ширине запрещенной зоны 1,4 эВ, что необходимо в солнечных элементах для обеспечения эффективного поглощения излучения солнечного спектра. Наночастицы ZnO в качестве активного слоя солнечного элемента могут преобразовывать до 40% падающих фотонов на длине волны 500 нм.

В настоящей работе наночастицы кремния, а также оксидов меди и цинка синтезированы методом импульсной лазерной абляции в жидкостях (дистиллированная вода и этанол) с использованием излучения Nd: YAG лазера, работающего на частоте основной гармоники (1064 нм). С применением абсорбционной спектроскопии, просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии изучены оптические и структурно-морфологические свойства образовавшихся частиц.

Показана возможность создания слоев пленки путем осаждения и сборки коллоидных частиц в организованных структурах на поверхности подложки из оксида индия и олова (ITO). Обсуждаются перспективы применения изготовленных структур для создания фотовольтаических элементов на их основе.

УДК 621.793:539.234:539.534.9

В. В. Поплавский, доц., канд. физ.-мат. наук;
О. Г. Бобрович, доц., канд. физ.-мат. наук;
А. В. Дорожко, доц., канд. техн. наук (БГТУ, г. Минск)

ФОРМИРОВАНИЕ МЕМБРАННО-ЭЛЕКТРОДНЫХ БЛОКОВ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ПОЛИМЕРНЫМ МЕМБРАННЫМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ

Мембранно-электродный блок является основным функциональным компонентом топливного элемента с полимерным мембранным электролитом. Он состоит из ионопроводящей мембраны и контактирующих с ней каталитических, а также диффузионных слоев из углеродных материалов с развитой поверхностью, через которые осуществляются подвод топлива и окислителя, токосъем, а также отвод продуктов электрохимической реакции.

Разработаны режимы подготовки компонентов и формирования мембранно-электродных блоков для топливных элементов прямого окисления метанола и этанола; разработана и изготовлена соответствующая оснастка.

Диффузионные слои формируемых мембранно-электродных блоков изготовлены нами из специальных углеродных материалов Toray Carbon Fiber Paper TGP-H-060 T и AVCarb[®] Carbon Fiber Paper P50. Каталитические слои формировали на поверхности диффузионных слоев поочередным ионно-ассистируемым осаждением платины и одного из редкоземельных металлов (Ce, Gd, Dy, Yb, Ho) в качестве активирующей добавки. Состав металлов, вводимых в формируемые каталитические слои, обусловлен особенностями многостадийного механизма окисления метанола и этанола [1–3]. Формирование слоев осуществлялось осаждением металлов из плазмы вакуумного дугового разряда в режиме, при котором в качестве ассистирующих процессу осаждения используются ускоренные ($U = 5$ кВ) ионы осаждаемого металла. Изготовлены экспериментальные образцы электрокатализаторов. Измерением активности образцов в процессах окисления этанола и метанола показана эффективность разрабатываемой технологии формирования электрокатализаторов. Отличительной особенностью полученных электрокатализаторов является их более высокая активность в процессе окисления более сложных молекул этанола по сравнению с метанолом, где требуется обеспечить разрыв химической связи C–C. Установлены закономерности формирования каталитических слоев и влияния активирующих редкоземельных металлов в качестве добавок на активность формируемых платиносодержащих

электрокатализаторов в реакциях окисления этанола и метанола, заключающегося в удалении адсорбированных продуктов реакции на промежуточной стадии окисления топлива вследствие активации молекул воды или гидроксильных групп и в увеличении активности электрокатализаторов [4, 5].

В качестве полимерного мембранного электролита взята мембрана DuPont™ Nafion® N 115, материал которой представляет собой фторуглеродный полимер, содержащий функциональные сульфогруппы SO_3^- и обладающий высокой катионной проводимостью во влажном состоянии. Проведена подготовка образцов электролита к формированию мембранно-электродных блоков, включающая операции удаления поверхностных загрязнений путем кипячения в растворах перекиси водорода и серной кислоты и формирования на поверхности каталитических слоев методом ионно-ассистируемого осаждения металлов. Экспериментальные образцы мембранно-электродных блоков различного состава на основе диффузионных слоев – носителей катализаторов Toray Carbon Fiber Paper TGP-H-060 T и AVCarb® Carbon Fiber Paper P50, полученных наноразмерных электрокатализаторов и электролита Nafion® N 115 сформированы посредством прессования под давлением $p = 8$ МПа в специально разработанном кондукторе при температуре $T = 140^\circ\text{C}$ и продолжительности $t = 4$ мин.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Iwasita, T. Electrocatalysis of methanol oxidation / T. Iwasita // *Electrochim. Acta.* – 2002. – Vol. 47, No. 22–23. – P. 3663–3674.
- 2 Pereira, L. G. Investigation of the CO tolerance mechanism at several Pt-based bimetallic anode electrocatalysts in a PEM fuel cell / L. G. Pereira, V. A. Paganin, E. A. Ticianelli // *Electrochim. Acta.* – 2008. – Vol. 54, No. 7. – P. 1992–1998.
- 3 Mechanisms for enhanced performance of platinum-based electrocatalysts in proton exchange membrane fuel cells / Su Liang Dong-Ha Lima [et al.] // *Chem Sus Chem.* - 2014. – Vol. 7, No. 2. – P. 361–378.
- 4 Poplavsky, V. V. Ion-Beam Formation of Electrocatalysts for Fuel Cells with Polymer Membrane Electrolyte / V. V. Poplavsky, A. V. Dorozhko, V. G. Matys // *J. Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* – 2017. – Vol. 11, No. 2. – P. 326–332.
- 5 Ion Beam Formation of Electrocatalysts for Direct Methanol and Ethanol Fuel Cells on the Basis of Carbon Catalyst Supports / V.V. Poplavsky [et. al.] A. // *Acta Physica Polonica A.*– 2017. – Vol. 132, №. 2. – P. 278–282.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КОРОТКОДЕЙСТВИЯ
НА ЭФФЕКТЫ ЭКРАНИРОВАНИЯ В ИОННОЙ СИСТЕМЕ**

Для определения бинарной функции применяется второе уравнение цепочки ББГКИ. Выражение для искомой функции выбираем в виде

$$F_2(i, j) = C_{ij} e(i, j) \Omega(i, j) \exp\left(-\beta \left(\sum_{k \neq i, j} (\varphi_k(i) + \varphi_k(j)) \right)\right) \quad (1)$$

Где

$e(i, j) = \exp(-\beta \Phi(i, j))$, $\Omega(i, j) = \exp(-\beta \omega(i, j))$, $\Phi(i, j)$, $\omega(i, j)$ - межчастичные потенциалы коротко и дальне действия, $\varphi_k(i)$ - одночастичные потенциалы средних сил.

Условную тройную функцию распределения аппроксимируем выражением

$$F_3(k/i, j) = F_2(k/i) e(k, j) + F_2(k/j) e(k, i) - F_1(k) \quad (2)$$

Подставив (2) в уравнение цепочки для бинарной функции получим замкнутое уравнение, определяющее искомый экранированный потенциал:

$$\frac{\partial \omega(i, j)}{\partial q^i} = \frac{\partial V(i, j)}{\partial q^i} - \int \frac{\partial U(i, k)}{\partial q^i} f(i, k) F_2(k/i) - \int \frac{\partial U(i, k)}{\partial q^i} \Omega(i, k) F_2(k/j) + \int \frac{\partial U(i, k)}{\partial q^i} F_1(k)$$

где $U(i, j) = \Phi(i, j) + V(i, j)$, $V(i, j)$ - кулоновский потенциал, f -функция Майера.

Последнее уравнение в случае однородной среды, при пренебрежении коротко действием и разложении в правой части экспонент в ряд приводит к результату Дебая, выражаемому уравнением:

$$\omega(i, j) = V(i, j) - \int V(i, k) \omega(k, j) dq^k$$

В работе получено решение уравнения, определяющего экранированные потенциалы при учете коротко действия. Рассмотрен случай, когда выражение для экранированного потенциала совпадает с дебаевским, но с новым коэффициентом затухания.

УДК 531.19

Г.С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
М. Ф. Головкин, член-корр. НАН Украины, проф., д-р физ.-мат. наук
(ИФКС, г. Львов)

КЛАСТЕРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ИОННЫХ СИСТЕМ

Для описания ионных систем в конденсированном состоянии применяется кластерное разложение по модифицированным с помощью одночастичных потенциалов средних сил майеровскими функциями. В качестве базисной используется система с дальнедействующим кулоновским взаимодействием частиц, находящихся во внешнем поле, создаваемом одночастичными потенциалами средних сил. Ранее базис включал только одночастичные потенциалы средних сил. Внесенные изменения позволяют существенно повысить точность описания изучаемых систем. Кроме отмеченного уточнено выражение для бинарной функции базисной системы.

Усовершенствованная функция удовлетворяет ряду дополнительных необходимых условий нормировки, что приводит к появлению требуемой симметрии свойств конденсированной ионной системы. На этой основе статистически изучаются равновесные характеристики подсистемы подвижных зарядов одного сорта с учетом наличия подсистемы неподвижных зарядов противоположного знака, создающих компенсирующий электрический фон.

Рассчитан химический потенциал системы, показано его симметрия относительно срединной концентрации.

Вычисления при различных температурах позволили определить область стабильности системы в зависимости от соотношения между энергиями коротко и дальнего действия.

Г.С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)
Д. Ди. Каприо, проф., д-р физ.-мат. наук (Высшая школа химии, г. Париж)

ОСОБЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОПОТЕНЦИАЛА В СИСТЕМЕ С ПРИТЯЖЕНИЕМ ПЕРВЫХ, ОТТАЛКИВАНИЕМ ВТОРЫХ И ТРЕТЬИХ СОСЕДЕЙ

Твердотельный электролит рассматривается как подсистема подвижных зарядов одного сорта с учетом наличия подсистемы неподвижных зарядов противоположного знака, создающих компенсирующий электрический фон. Распределение неподвижных зарядов под воздействием внешнего поля не изменяется. Неоднородное состояние создается перераспределением подвижных зарядов в приэлектродной области. Модель применяется для статистико-механического описания высокотемпературных ионных проводников и источников тока. Для получения функционала свободной энергии подсистемы подвижных зарядов в зависимости от распределения их плотности использована схема кластерного разложения по перенормированным майеровским функциям.

В качестве базисного использован гамильтониан системы, состоящей из электрических зарядов, движущихся в поле одночастичных ячеечных потенциалов средних сил. Бинарная функция базисной системы на основании результатов метода коллективных переменных выражена через экранированный потенциал и потенциалы средних сил. Найден функционал свободной энергии, из условия экстремальности которого найдено распределение плотности числа подвижных частиц и электрического потенциала в приграничной области электролита. Рассмотрено решение системы интегральных уравнений для потенциалов средних сил с учетом близко- и дальнего действия в решеточном приближении. В выражении для бинарной функции распределения выделена корреляционная составляющая, что позволило рассчитать коррелированную и некоррелированную части электрического потенциала, используя уравнение Пуассона. Рассматривается случай достаточно малых электрических полей, допускающий линейное разложение химического потенциала по отклонению концентрации зарядов от однородного распределения. Распределение потенциала и концентрации заряда описывается линейным дифференциальным уравнением четвертого порядка с комплексными значениями корней характеристического уравнения.

Г.С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук;
В.С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОЕМКОСТИ ТВЕРДОГО ЭЛЕКТРОЛИТА С УЧЕТОМ ЭНЕРГИИ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОВ

Для описания распределения электрического потенциала твердотельного электролита по объему и его электроемкости используется условие постоянства химического потенциала. Электролит рассматривается как подсистема подвижных зарядов одного сорта при наличии подсистемы неподвижных зарядов противоположного знака, создающих компенсирующий электрический фон. Распределение неподвижных зарядов под воздействием внешнего поля предполагается не изменяющимся. Неоднородное состояние создается перераспределением подвижных зарядов в приэлектродной области. Исходная система уравнений имеет вид:

$$\mu_i - \mu_b = \theta \ln \left(\frac{c_i(1-c_b)}{c_b(1-c_i)} \right) + \psi_i + z_i J \delta c_i + J (\delta c_{i-1} - 2\delta c_i + \delta c_{i+1}) + \sum_{j(i)} h_j \delta c_j = 0, \quad (1)$$

где c_i , μ_i – концентрация и химический потенциал в i -м молекулярном слое, перпендикулярном вектору напряженности однородного внешнего электрического поля, J – энергия ван-дер-ваальсовского взаимодействия ближайших соседей, h – корреляционная функция, $\delta c_i = c_i - c_b$, c_b – концентрация в объеме системы. Записанная система уравнений замыкается уравнением Пуассона $\psi'' = u \delta c(z)$. В ряде работ решение уравнений равновесия определялось в переменных концентрация-координата методом итераций или методом Ньютона–Рафсона, что позволяло найти решение только в определенных достаточно узких областях значений параметров теории.

В докладе показано, что решение системы уравнений (1) целесообразно искать с помощью подстановки

$$B = \frac{E^2}{2}; \quad E = -\frac{\partial \psi}{\partial z}; \quad u \delta c(z) = \psi'' = \frac{\partial B}{\partial \psi}; \quad u \delta c''(z) = \frac{\partial B}{\partial \psi} \frac{\partial^2 B}{\partial \psi^2} + 2T \frac{\partial^3 B}{\partial \psi^3}, \quad (2)$$

что позволяет вычислить электрическую емкость системы и сравнить полученные результаты с найденными другими авторами при учете лишь первых трех членов в правой части исходной системы (1).

В.С. Гришина, асп.;
 В.С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)
 А. Цях, проф., д-р; Я. Пекальски, д-р философии
 (ИФХ ПАН, г. Варшава, Польша)

ОСНОВНЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ С SRLA ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Рассматривается система частиц на треугольной решетке с конкурирующим взаимодействием: отталкивание ближайших и притяжение вторых (модель 1) или третьих (модель 2) соседей, SRLA – Short range Repulsion Long range Attraction, моделирующая систему коллоидных или биологических частиц на границе раздела двух жидкостей или газ-жидкость. Исследованы основные состояния систем (при температуре, стремящейся к нулю) в зависимости от интенсивностей взаимодействия и безразмерного химического потенциала. Обезразмеривание последнего выполняется по интенсивности притяжения вторых или третьих соседей J_2 . Отталкивание первых соседей также используется в безразмерном виде $J=J_1/J_2$.

Показано, что при увеличении химического потенциала состояния систем изменяются от вакуума (отсутствие частиц) последовательно до концентраций для модели 1: $1/3$, $2/3$, 1 (dense - плотное состояние); для модели 2: $1/4$, $3/8$, $1/2$, $5/8$, 1 (dense).

Для модели 1 последовательность состояний описывается уравнениями:

$$[\text{vacuum}] \mu < -3 < [1/3] < (-3+3J) < [2/3] < (-3+6J) < [\text{dense}], \text{ а для модели 2} \\
 [\text{vacuum}] \mu < -3 < [1/4] < (-3+2J) < [1/2] < (-3+4J) < [3/4] < (-3+6J) < [\text{dense}].$$

В приближении среднего поля для модели 1 получено выражение для параметра порядка, определенного как разность решеточных концентраций на подрешетках. Для концентраций $1/3$ и $2/3$ при $J=1$ в основных состояниях этот параметр равен соответственно 1 и -1. При малых ненулевых температурах и при соответствующих химических потенциалах он также близок к этим значениям, однако уравнение для его определения имеет один корень равный нулю, что соответствует однородному распределению плотности, и один или два ненулевых корня, что требует необходимости исследования устойчивости решений. По поведению параметра порядка можно судить, что в приближении среднего поля безразмерная критическая температура перехода упорядоченная – неупорядоченная фаза достаточно высокая, свыше 5.

Я. Г. Грода, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)
Д. ди Каприо, д-р (Высшая национальная школа химии Парижа, Франция)
Д. В. Гапанюк, зам. декана ф-та ХТиТ, канд. физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С SALR-ПОТЕНЦИАЛОМ

Исследована решеточная модель системы наночастиц либо макромолекул, части которой притягиваются на малых расстояниях и отталкиваются на больших (SALR – Short-range Attraction Long-range Repulsion). В качестве модели рассмотрен решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке.

Показано, что конкурирующие взаимодействия приводят к фазовым переходам типа порядок-беспорядок. При этом, в случае концентрации примесных частиц равной 0,5, упорядоченная фаза соответствует чередованию полностью заполненных и полностью пустых решеточных слоев. Для описания данного упорядоченного состояния и локализации точек фазовых переходов введен геометрический параметр порядка δ_c . С его помощью установлено, что критическое значение параметра взаимодействия равно $|J_1| / k_B T_c = 0,186$ и построена фазовая диаграмма системы.

Для аналитической оценки равновесных параметров системы предложено аналитическое квазихимическое приближение. Химический потенциал, термодинамический фактор и корреляционные функции определены как в рамках развитого приближенного подхода, так и в результате моделирования решеточной системы по методу Монте-Карло. Полученная зависимость термодинамического фактора системы от концентрации свидетельствует о сильном подавлении флуктуаций, характерном для упорядоченного состояния. В свою очередь сложный характер зависимости корреляционных функций, отражающих структурные особенности системы, от концентрации демонстрирует большое значение конкурирующих взаимодействий.

Разработанный аналитический подход позволяет правильно описать качественные особенности структурных свойств систем с конкурирующими взаимодействиями и может быть использован для количественной оценки термодинамических характеристик этих систем.

ЭФФЕКТЫ ОГРАНИЧЕНИЙ В ЛАМЕЛЛЯРНЫХ САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ СТРУКТУРАХ

Рассматривается система частиц на треугольной решетке с конкурирующим взаимодействием (притяжение ближайших и отталкивание третьих соседей), ограниченная шестиугольной стенкой, с которой частицы в данном случае не взаимодействуют. В основном состоянии (при температуре, стремящейся к нулю) и при значении безразмерного химического потенциала, равного 6, в системе наблюдается формирование упорядоченных ламеллярных концентрических колец с дефектом в центре. Получено аналитическое выражение для энергии на узел решетки и концентрации (плотности) частиц в системе в зависимости от ее размера. Результаты использования аналитического выражения и моделирования по методу Монте-Карло полностью совпадают.

Получены карты распределения частиц в системе при значениях температуры, соответствующих минимумам теплоемкости в ее зависимости от концентрации или химического потенциала. В отличие от мгновенных конфигураций системы, на которых наблюдаются флуктуационные нерегулярности структуры, усредненные карты распределения оказались регулярными и соответствующими симметрии ограничивающего шестиугольника. На усредненных картах при низких температурах наблюдается повышенная концентрация частиц в углах шестиугольников и увеличивающееся по мере увеличения температуры затухание чередующегося распределения плотности (два слоя преимущественно заполненных – два слоя преимущественно вакантных узлов) при удалении от стенок шестиугольника. При движении вдоль стенок для достаточно больших размеров системы (более 28 узлов вдоль грани) также наблюдается квазипериодичность в распределении плотности.

При увеличении температуры наблюдается плавление ламеллярной структуры и переходу от концентрических колец к закрученной структуре (при умеренных температурах). Показано, что при не очень высоких температурах или при внедрении треугольного клина, нарушающего симметрию, система может перейти из ламеллярной в спиральную структуру. Аналогичные хиральные структуры наблюдаются в диблок-сополимер тонких пленках, которые характеризуются интересными особенностями их оптических свойств.

Р. Н. Ласовский, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
Т. Н. Пацаган, канд. физ.-мат. наук (ИФКС НАНУ, г. Львов)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩЕЙ КЕРАМИКИ С ПРИМЕСНЫМИ ИОНАМИ, СЕГРЕГИРОВАННЫМИ НА МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЕ

В настоящее время в электрохимических системах активно используются жидкие растворы ионных солей или полимерные ионообменные мембраны, что сопряжено с опасностью появления утечек и воспламенения. Переход к электрохимическим элементам с твердотельными электролитами позволит повысить прочность, долговечность, экологичность и безопасность источников энергии, расширить диапазон рабочих температур. Для описания твердотельных электролитов широко используются решеточные модели [1, 2]

Ионная проводимость поликристаллической керамики обычно намного ниже ионной проводимости монокристалла из-за наличия межзеренных границ. Они блокируют непрерывные области миграции ионов, что приводит к значительному сопротивлению.

Рассмотрена трехмерная модель оксидной керамики, содержащей зерно и межзеренную прослойку, описываемую слоем с сегрегированными неподвижными примесными ионами. Выполнено моделирование описанной системы по кинетическому методу Монте-Карло. При этом кулоновская энергия определялась суммированием по методу Эвальда.

Показано, что температурная зависимость числа частиц, прошедших через границу, которое пропорционально электрическому току, носит аррениусовский характер, что позволило определить энергию активации электропроводности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С., Вихренко В. С. Диаграммное приближение для неравновесных и неоднородных состояний решеточных систем // Труды БГТУ Сер. VI – физ.-мат. науки и информ. – 2010. – Вып. 18. – С. 59 – 62.
2. Bokun, G. S. Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Nanostructurization caused by first order phase transitions in systems with hopping dynamics // Solid State Ionics. – 2013. – Vol. 251. – P. 51–54.

И.К. Асмыкович, доц., канд. физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

О ВЫДЕЛЕНИИ НУЛЕВОЙ ДИНАМИКИ В НОРМАЛИЗУЕМЫХ ДЕСКРИПТОРНЫХ СИСТЕМАХ

Проблема выделения нулевой динамики в обыкновенных линейных системах является важной частью решения задачи обращения динамических систем [1] и синтеза наблюдателей в системах с неопределенностью. Для обыкновенных линейных систем разработаны алгоритмы выделения уравнений нулевой динамики для одно- и многовходных систем, получены их размерности и характеристические уравнения, исследованы условия устойчивости. Но в последние десятилетия в качественной теории управления активно изучаются более сложные виды систем, а именно, гибридные [2], дескрипторные [3, 4] или дифференциально-алгебраические [5, 6]. Особое внимание уделяется последним, библиографический указатель работ по которым насчитывает на данный момент более двух тысяч наименований, по которым регулярно издаются монографии [4], проводятся специальные форумы с подготовкой на них подробных обзоров [6].

Пусть объект управления описывается дескрипторной системой

$$\begin{aligned} S\dot{x}(t) &= Ax(t) + Bu(t), \\ Sx(0) &= Sx_0, \quad \det S = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

с условием регулярности

$$\det[\lambda S - A] \neq 0 \quad (2)$$

и выходом

$$y(t) = Cx(t). \quad (3)$$

Условие (2) обеспечивает существование и единственность решения (1) при достаточно гладких управляющих функциях $u(t)$. Основные задачи о нулевой динамике для такой системы можно решать путем приведения регулярного пучка $\lambda S - A$ к канонической форме Вейерштрасса [3, 4], или используя возможность нормализации системы линейной обратной связью по производной.

Определение 1. Система (1) с квадратной матрицей S называется нормализуемой, если существует обратная связь по производной, т.е. матрица F , такая что матрица $S - BF$ невырождена.

Из определения следует, что условия нормализации сводятся к

условиям разрешимости соответствующего матричного уравнения, которые могут быть записаны в достаточно разных формах [2, 4, 5].

Для нормализуемых дескрипторных систем можно использовать все результаты по качественной теории управления обыкновенными линейными системами при условии хорошей обусловленности матрицы $S - BF$.

Для многовходных и многовыходных дескрипторных систем удобнее при исследовании нулевой динамики использовать вторую эквивалентную форму из [4] и ее модификацию из [2]. т.е.

$$S = \begin{bmatrix} I_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \tilde{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & A_{13} & A_{14} \\ 0 & I_2 & 0 & 0 \\ A_{31} & 0 & 0 & 0 \\ A_{41} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \ddot{B} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \\ I_3 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Ильин А.В., Коровин С.К., Фомичев В.В. Методы робастного обращения динамических систем. М.: Физматлит, 2011.
2. Ivan K. Asmykovich On Finding Zero Dynamics for Descriptor Systems // 13th International scientific technical conference on actual problems of electronic instrument engineering (APEIE) – 39281 Proceedings APEIE – 2016 In 12 Volumes V. 1 Part 3 Novosibirsk 2016 3-6 октября 2016 г. P.116 – 119.
3. Асмыкович И.К. О синтезе наблюдателей для дескрипторных систем с неопределенностью // «Динамические системы: устойчивость, управление, оптимизация»: материалы Межд. научной конф. посвященной 100-летию со дня рождения академика Е.А. Барбашина. Минск, 24- 29 сентября 2018 г.). БГУ.: редкол. Ф.М. Кириллова (гл. ред) и др.– Минск: БГУ, 2018. – с. 61-63.
4. Feng Yu, Yagoubi M. Robust Control of Linear Descriptor Systems Publisher: Springer Singapore Mar 2017
5. Berger T., T. Reis Regularization of linear time-invariant differential-algebraic systems // Systems & Control Letters, V. 78, April 2015, P. 40-46
6. Ilchmann A., Reis T. Surveys in Differential-Algebraic Equations I - III Differential-Algebraic Equations Forum. Berlin, Heidelberg, Springer, 2013 - 2015.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЛЕНОЧНОГО ДВИЖЕНИЯ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ В КОНУСНОЙ НАСАДКЕ

Введение. Гидродинамика пленочных течений имеет важное значение при изучении ряда физико-химических процессов, для расчета оптимальных режимов работы технических.

Математическая модель. Исследуем стационарное осе симметричное ламинарное движение пленки вязкой жидкости по внутренней стенке вертикального конуса, вращающегося с постоянной угловой скоростью ω . Ось z цилиндрической системы координат направим вверх по оси конуса (рис. 1). При малых углах β наклона образующей конуса к его оси элементарные участки поверхности рассматриваем как цилиндры.

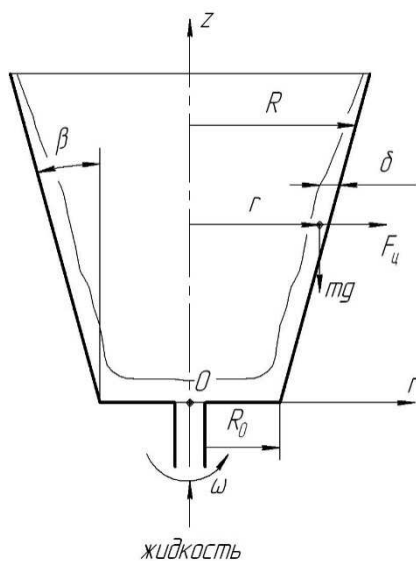


Рисунок 1 – Схема течения вязкой жидкости

Рассмотрим автомodelное решение $U = U(r)$ уравнений Навье – Стокса в цилиндрической системе координат. В этом случае уравнения Навье Стокса для касательной и продольной составляющих скорости принимают вид:

$$\mu \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r U_{\phi}) \right) = 0, \quad (1)$$

$$\mu \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dU_l}{dr} \right) \right) + \rho(a_l - g_l) = 0. \quad (2)$$

Из внешних действующих сил рассматриваем проекции на образующую конуса центробежной силы и силы тяжести, которые обуславливаются центробежным ускорением и ускорением свободного падения (рис. 1):

$$a_l = a_r \sin \beta; \quad g_l = g \cos \beta.$$

Считаем, что выполняется условие прилипания на стенке цилиндра и отсутствуют касательные напряжения на поверхности пленки. Тогда граничными условиями будут:

$$U_\varphi \Big|_{r=R} = \omega R, \quad U_z \Big|_{r=R} = 0. \quad (3)$$

$$\frac{dU_\varphi}{dr} \Big|_{r=R-\delta} = 0, \quad \frac{dU_l}{dr} \Big|_{r=R-\delta} = 0. \quad (4)$$

Находим общие решения уравнений (1) и (2) при выполнении граничных условий (3)-(4):

$$U_\varphi = \frac{\omega R^2}{R^2 + (R - \delta)^2} \left(r + \frac{(R - \delta)^2}{r} \right); \quad (5)$$

$$U_l = \frac{a_l - g_l}{4\nu} \left[R^2 - r^2 + 2(R - \delta)^2 \ln \frac{r}{R} \right]. \quad (6)$$

В зависимости от длины образующей l находим радиус в сечении конуса $R = R_0 + l \sin \beta$

Анализ результатов. Толщина пленки δ величина достаточно малая по сравнению с радиусом конуса R , поэтому для анализа можем ограничиться первыми слагаемыми разложения средних значений скоростей (5) и (6) в степенные ряды. В этом случае получаем:

$$\bar{U}_\varphi = \omega R, \quad \bar{U}_l = \frac{(a_l - g_l)\delta^2}{3\nu}, \quad a_r = \frac{\bar{U}_\varphi^2}{r} = \omega^2 R.$$

Отсюда получаем зависимость для средней скорости пленки по направляющей цилиндрической поверхности:

$$\bar{U}_l = \frac{(\omega^2 R \sin \beta - g \cos \beta)\delta^2}{3\nu}.$$

При заданном удельном расходе $q = \bar{U}_l \delta$ жидкости на единицу периметра конуса вычисляем толщину пленки жидкости в сечении конуса радиуса R :

$$\delta = \sqrt[3]{\frac{3q\nu}{\omega^2 R \sin \beta - g \cos \beta}}.$$

В.В. Игнатенко, доц., канд. физ.-мат. наук;
Е.А. Леонов, доц., канд. техн. наук;
(БГТУ, г. Минск)

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЛЕСОПРОМЫШЛЕННОЙ СИСТЕМЫ «ХАРВЕСТЕР-ФОРВАРДЕР»

В лесозаготовительной промышленности на смену традиционным бензопилам и трелевочным тракторам пришли харвестеры (машины, выполняющие комплекс операций: валку деревьев, их очистку от сучьев и раскряжевку на нужные сортименты), форвардеры (машины, осуществляющие сбор и транспортировку сортиментов на погрузочный пункт, включая разгрузку, подсортировку и укладку сортиментов в штабели) и ряд других машин. Специалисту приходится анализировать работу

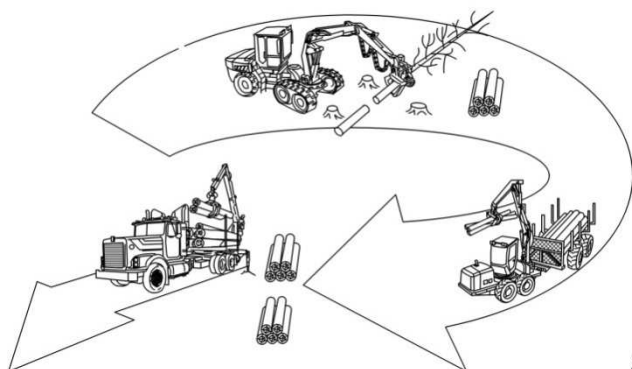


Рисунок 1 – Технологическая схема заготовки сортиментов системой машин «харвестер – форвардер»

как отдельных узлов машины, так и всей технологической линии (рисунок 1). При достаточно широком выборе однотипного оборудования, очень важно правильно сформировать его в эффективные технологические системы машин. Решение этих проблем практически невозможно без математического моделирования исследуемых объектов. Целью данного доклада является построение математической модели работы системы

лесозаготовительных машин «харвестер – форвардер» и анализ полученных решений для определения их оптимальных режимов работы.

Для построения математической модели рассмотрим граф состояний форвардера (рисунок 2).

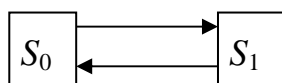


Рисунок 2 – Граф состояний форвардера

Форвардер может находиться в следующих состояниях: S_0 – простаивать из-за временного отсутствия заготавливаемых харвестером сортиментов; S_1 – осуществлять сбор и транспортировку сортиментов на погрузочный пункт.

Из свободного состояния S_0 в рабочее S_1 форвардер переходит с интенсивностью λ , где $\lambda = 1/t_3$ интенсивность заготовки сортиментов харвестером, t_3 – продолжительность цикла обработки сортиментов харвестером.

Работа системы лесозаготовительных машин «харвестер – форвардер» характеризуется следующими параметрами: харвестер осуществляет заготовку сортиментов на лесосеке с интенсивностью λ сортиментов в час; форвардер осуществляет сбор и транспортировку сортиментов на погрузочный пункт с интенсивностью μ сортиментов в час. При этом форвардер может находиться в следующих состояниях: S_0 – простаивать из-за временного отсутствия заготавливаемых харвестером сортиментов; S_1 – осуществлять сбор и транспортировку сортиментов на погрузочный пункт. Из свободного состояния S_0 в рабочее S_1 форвардер переходит с интенсивностью λ , обратно переход осуществляется с интенсивностью μ .

Обозначим $P_i(t)$ – вероятность того, что в момент времени t система машин «харвестер – форвардер» находится в состоянии S_i , тогда модель функционирования системы (дифференциальные уравнения Колмогорова для вероятностей состояний) будет иметь следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dP_0}{dt} = -\lambda P_0 + \mu P_1; \\ \frac{dP_1}{dt} = \lambda P_0 - \mu P_1; \\ P_0 + P_1 = 1. \end{cases} \quad (1)$$

Неизвестные параметры λ и μ устанавливаются следующим образом: $\lambda = 1/t_3$, где t_3 – продолжительность цикла заготовки сортиментов харвестером; $\mu = 1/t_T$, где t_T – продолжительность цикла сбора, транспортировки, разгрузки и подсортировки сортиментов форвардером.

При исследовании работы лесозаготовительного оборудования на протяжении длительного промежутка времени месяц, год и т.д. (установившийся режим работы), можно считать, что $P_0 = \text{const}$, $P_1 = \text{const}$ (финальные вероятности состояний). Ошибка при приня-

тии данного допущения не превышает 8% [2, 3].

В этом случае система дифференциальных уравнений (1) преобразуется в систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} 0 = -\lambda P_0 + \mu P_1; \\ 0 = \lambda P_0 - \mu P_1; \\ P_0 + P_1 = 1. \end{cases} \quad (2)$$

Решая систему уравнений относительно вероятностей состояний P_0 и P_1 получим выражения для расчета режимов работы системы машин «харвестер – форвардер»:

$$P_0 = \frac{\mu}{\lambda + \mu} \quad (3)$$

$$P_1 = \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \quad (4)$$

Полученные зависимости вероятностей состояний системы машин «харвестер – форвардер» позволяют установить рациональные значения параметров рассматриваемых машин. Технология работы с зависимостями следующая: на основе конкретных природно-производственных условий выбирается марка оборудования, например форвардера, работа которого характеризуется интенсивностью μ ; из зависимостей (3) и (4) устанавливается рациональное значение параметра λ , по которому в дальнейшем подбирается конкретная марка харвестера [2, 3].

На рис.3 приведен пример установления рациональной интенсивности λ работы харвестера в зависимости от конкретной интенсивности μ работы форвардера.

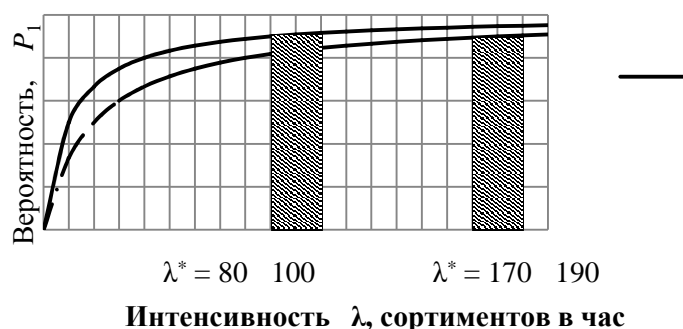


Рисунок 3 – Зависимости вероятностей состояний системы «харвестер – форвардер»

Принятый на основании рисунка 3 оптимальный диапазон значений λ^* позволяет осуществить выбор требуемого харвестера, обеспечивающего рациональную загрузку применяемого форвардера, т. к. при этом обеспечивается оптимальная величина вероятности его

работы P_1^* .

Данная математическая модель может быть использована на производстве, при составлении эффективной системы машин «харвестер – форвардер» в зависимости от конкретных природно-производственных условий, при наименьших экономических затратах.

Построение математической модели, ее решение и анализ, полученных решений могут быть использованы при обучении студентов, технических специальностей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Игнатенко В. В., Турлай И. В., Федоренчик А. С. Моделирование и оптимизация процессов лесозаготовок. Минск: БГТУ, 2004. 178 с.

2. Игнатенко В. В., Леонов Е. А. Установление рациональных параметров многооперационных машин в лесозаготовительной промышленности // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. 2015. Т. 3. № 5–4. С. 291–295.

3. Леонов Е. А., Игнатенко В. В., Клоков Д. В. Математическая модель работы рубильной машины с учетом ее технических отказов // Труды БГТУ. 2016. № 2: Лесная и деревообр. пром-сть. С. 40–44.

УДК 517.977

И.М. Борковская, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

О ПОСТРОЕНИИ СТАБИЛИЗИРУЮЩЕГО РЕГУЛЯТОРА ДЛЯ ГИБРИДНОЙ ДИСКРЕТНО-НЕПРЕРЫВНОЙ СИСТЕМЫ

Важнейшим свойством реальной системы управления является свойство устойчивости. В качественной теории управления динамическими системами задача стабилизации занимает одно из центральных мест. С помощью воздействия регулятора, построенного по принципу обратной связи, необходимо обеспечить устойчивость замкнутой системы. В докладе предлагаются способы выбора регулятора, обеспечивающего устойчивость гибридной дискретно-непрерывной системы с «многомерным» (2-D-мерным) временем, состоящей из непрерывной и дискретной составляющих:

$$\dot{x}_1(t, k) = A_{11}x_1(t, k) + A_{12}x_2(t, k) + B_1u(t, k), \quad t \in [0, +\infty), \quad (1)$$

$$x_2(t, k + 1) = A_{21}x_1(t, k) + A_{22}x_2(t, k) + B_2u(t, k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Для скалярного случая, когда система принимает вид

$$\dot{x}_1(t, k) = a_{11}x_1(t, k) + a_{12}x_2(t, k) + b_1u(t, k), \quad t \in [0, +\infty), \quad (3)$$

$$x_2(t, k+1) = a_{21}x_1(t, k) + a_{22}x_2(t, k) + b_2u(t, k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

проводится построение стабилизирующего регулятора, не выводящего систему за пределы рассматриваемого класса:

$$u(t, k) = q_1x_1(t, k) + q_2x_2(t, k). \quad (5)$$

Рассмотрим задачу стабилизации в смысле сильной асимптотической устойчивости и других видов устойчивости системы (3), (4) регулятором (5).

Характеристическим уравнением системы (1), (2) назовем уравнение вида

$$\det \begin{bmatrix} \lambda I_{n_1} - A_{11} & -A_{12} \\ -A_{21} & \mu I_{n_2} - A_{22} \end{bmatrix} = 0.$$

Можно показать, что выполнение условий на корни характеристического уравнения

$$\operatorname{Re} \lambda < 0 \text{ и } |\mu| < 1$$

является необходимым, а в скалярном случае и достаточным для сильной асимптотической устойчивости системы.

Теорема 1. Для того, чтобы система (3), (4) скалярных уравнений была сильно асимптотически устойчивой, необходимо и достаточно, чтобы выполнялись следующие условия:

$$1) a_{12}a_{21} = 0; \quad 2) |a_{22}| < 1, \quad a_{11} < 0.$$

Замкнутая система уравнений (3), (4), (5) имеет вид:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t, k) &= (a_{11} + b_1q_1)x_1(t, k) + (a_{12} + b_1q_2)x_2(t, k), \\ x_2(t, k+1) &= (a_{21} + b_2q_1)x_1(t, k) + (a_{22} + b_2q_2)x_2(t, k). \end{aligned}$$

Для выполнения первого условия теоремы 1 возможны следующие способы выбора регулятора (5):

$$1) q_2 = -\frac{a_{12}}{b_1}; \quad 2) q_1 = -\frac{a_{21}}{b_2}.$$

Тогда в первом случае при условии $\left| a_{22} - \frac{b_2a_{12}}{b_1} \right| < 1$ коэффициент q_1 можно выбрать следующим образом:

$$\text{при } b_1 > 0: \quad q_1 < -\frac{a_{11}}{b_1},$$

$$\text{при } b_1 < 0: \quad q_1 > -\frac{a_{11}}{b_1}.$$

Во втором случае при условии $a_{11} - \frac{b_1 a_{21}}{b_2} < 0$ коэффициент q_2 будем выбирать так, чтобы $|a_{22} + b_2 q_2| < 1$.

Полученный регулятор обеспечит согласно теореме 1 сильную асимптотическую устойчивость замкнутой системы (3), (4), (5). Таким образом, достаточное условие стабилизируемости можно сформулировать в виде следующей теоремы.

Теорема 2. Для того, чтобы система (3), (4) была стабилизируема (в смысле сильной асимптотической устойчивости) регулятором (5), достаточно, чтобы выполнялось хотя бы одно из условий:

$$1) \left| a_{22} - \frac{b_2 a_{12}}{b_1} \right| < 1; \quad 2) a_{11} - \frac{b_1 a_{21}}{b_2} < 0.$$

Аналогично проводится построение стабилизирующего регулятора для обеспечения слабой асимптотической устойчивости системы и (α, γ) -устойчивости системы.

УДК 519.626.2

И.Ф. Соловьева, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

К ВОПРОСУ ИССЛЕДОВАНИЯ ЗАДАЧ С ПОГРАНСЛОЕМ

Теория пограничного слоя была открыта еще в 1904 году американским ученым, президентом и почетным членом общества ГАММ Людвигом Прандтлем. Он сформулировал и обосновал большую часть ее развития. Пограничный слой играет весьма существенную роль даже в нашем организме. Он является ответственным за правильное функционирование организма, за кровообращение, движение лимфы, дыхание, а также за отсутствие в организме болезней. В технике экономичность прибора и его работа часто связана с «хорошим» пограничным слоем. Большой круг задач, с которыми сталкиваются инженеры, физики и специалисты по прикладной механике, описываются математическими моделями, в основе которых лежат обыкновенные дифференциальные уравнения с пограничными или внутренними переходными слоями.

Несмотря на то, что уже много лет прошло с основания теории пограничного слоя, данная тема не потеряла своей актуальности и в наши дни. Причина трудностей решения таких задач заключается не

только в нелинейности большинства задач с пограничным слоем, хотя в результате этого тоже возникают определенные проблемы, но и в том, что очень маленький параметр ε часто оказывается стоящим возле самых больших производных.

Рассмотрим систему нелинейных о. д. у. первого порядка с малым параметром при производной, приведенную к нормализованному виду:

$$y' = f(t, y, \varepsilon), \quad a \leq t \leq b \quad (1)$$

с присоединенным к ней двухточечным граничным условием

$$g(y(a), y(b)) = 0, \quad (2)$$

где $y: [a, b] \rightarrow R^n$, $y: [a, b] \rightarrow R^n \times R \rightarrow R^n$, $\varepsilon > 0$, $g: R^n \times R^n \rightarrow R$.

Предполагаем, что отображения f и g такие, что задача (1) - (2) имеет единственное решение и обладает необходимой гладкостью.

Функция $f(t, y, \varepsilon)$ зависит от малого параметра ε таким образом, что в граничной задаче возникают пограничные или внутренние переходные слои. Ее численное решение и градиент решения в этом случае начинают расти. Особенно рост решения наблюдается вблизи граничных точек, т. е. вблизи точек $t = a$ и $t = b$. В этом случае возникает пограничный слой.

Для решения такого рода задач предлагается несколько модификаций метода пристрелки. Сравнивая их, останавливаемся на модификации метода множественной двусторонней пристрелки. При использовании метода множественной двусторонней пристрелки к решению задачи вида (1) – (2) улучшаются свойства пристрелочных траекторий; ослабляются условия на локализацию начальных приближений; уменьшается число неизвестных.

Искомое решение $y(t)$ представлено в виде:

$$y(t) = \begin{cases} v(t, y_{2j-1}^*), & t \in J_{2j-1}^{(-)}, \\ u(t, y_{2j-1}^*), & t \in J_{2j-1}^{(+)}, \quad j = \overline{1, m} \end{cases} \quad (3)$$

Функция $u(t, y_{2j-1}^*)$ – решение задачи Коши в прямом направлении, а функция $v(t, y_{2j-1}^*)$ – в обратном направлении. Для решения замыкающей системы

$$\begin{aligned} u(t_{2j}, y_{2j-1}) - v(t_{2j}, y_{2j+1}) &= 0, \quad j = \overline{1, m-1}, \\ g(v(t_0, y_1), u(t_{2m}, y_{2m-1})) &= 0 \end{aligned}$$

использовался метод Ньютона.

В методе множественной двусторонней пристрелки заложена

возможность произвольного выбора точек пристрелки, точек сшива решений, выбора параметров пристрелки и длин положительных $J_{2j-1}^{(+)}$ и отрицательных $J_{2j-1}^{(-)}$ пристрелочных подинтервалов. При решении системы (1) – (2) осуществляется переход от граничной задачи к совокупности трех задач Коши, благоприятных в вычислительном отношении. Для решения задач Коши в наше время существует целый арсенал хорошо работающих методов. К ним можно отнести методы Адамса, Рунге-Кутты или методы, обладающие В или D-устойчивостью. Параметры пристрелки определяются как решения замыкающей системы (3). А, в свою очередь, конструктивную сторону замыкающей системы удобно характеризовать матрицей Якоби. Рассмотрены свойства матрицы Якоби. Это создает необходимые условия для качественного численного моделирования траектории искомого решения.

Простота реализации и иллюстрация свойств предложенной модификации были подтверждены численным решением конкретной граничной задачи с малым параметром при производной с различными коэффициентами.

УДК 517.948

С.В. Пономарева, доц., канд. физ.-мат. наук (БГУ, г. Минск);
 О.Н. Пыжкова, доц., канд. физ.-мат. наук (БГУ, г. Минск);
 Н.Б. Яблонская, доц., канд. физ.-мат. наук (БГУ, г. Минск)

ПОЛУГРУППОВЫЕ СВОЙСТВА ОПЕРАТОРОВ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДРОБНОГО ПОРЯДКА РИМАНА-ЛИУВИЛЛЯ

Известно [1], что операторы дробного интегрирования в форме Римана-Лиувилля $(I_{a+}^{\alpha} \varphi)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{\varphi(t) dt}{(x-t)^{1-\alpha}}$, $x > a$, $\alpha > 0$ образуют однопараметрическую полугруппу линейных ограниченных операторов (в пространствах непрерывных на отрезке $[a, b]$ или интегрируемых функций). Более того [2], эта полугруппа непрерывна в сильной операторной топологии, т. е., C_0 – полугруппа.

Дробное дифференцирование является операцией, обратной слева для дробного интегрирования $D_{a+}^{\alpha} I_{a+}^{\alpha} f = f$, но не является в общем случае, как и дифференцирование целого порядка, обратной справа операцией. Композиция операторов интегрирования и диф-

ференцирования дробного порядка задается формулой (см. [1]):

$$(I_{a+}^{\alpha} D_{a+}^{\alpha} \varphi)(t) = \varphi(t) - \sum_{i=1}^n \frac{\varphi_{n-\alpha}^{(n-i)}(\alpha)}{\Gamma(\alpha - i + 1)} (t - a)^{\alpha - i}, \quad (1)$$

где $\varphi_{n-\alpha}(t) = (I_{a+}^{n-\alpha} \varphi)(t)$.

Теорема. Пусть $\alpha > 0$ и $n = [\alpha] + 1$.

1) Если $\varphi(t) \in L_1(a, b)$ и $\varphi_{n-\alpha}(t) \in AC^n[a, b]$, то формула (1) выполняется для почти всех точек $t \in [a, b]$.

2) Если $\varphi(t) \in C(a, b)$ и $\varphi_{n-\alpha}(t) \in C^n[a, b]$, то формула (1) выполняется для любых $t \in (a, b)$.

Заметим также, что при $\alpha = 0$, $I_{a+}^0 \varphi = \varphi = D_{a+}^0 \varphi$. Обратным справа дифференцирование дробного порядка является только для функций из класса $I_{a+}^{\alpha, 0}(L_1)$ функций, представимых интегралом порядка $\alpha > 0$ и обращающихся в нуль в точке a вместе со всеми своими производными $(D_{a+}^{\alpha-k} f)(x) = 0$, где $k = 0, 1, \dots, [\alpha]$.

Заметим, что при комплексных значениях параметра оператор I_{a+}^{α} является голоморфной функцией переменной α на полуплоскости $\operatorname{Re} \alpha > 0$. Особый интерес представляет случай чисто комплексного порядка операторов дробного интегрирования и дифференцирования, так как в этом случае (см. [1]) исчезает разница между интегрированием и дифференцированием как «обратными операциями». В самом деле, сравним определения дробной производной и интеграла чисто комплексного порядка:

$$D_{a+}^{i\theta} f = \frac{1}{\Gamma(1 - i\theta)} \frac{d}{dx} \int_a^x (x - t)^{-i\theta} f(t) dt; \quad I_{a+}^{i\theta} f = \frac{1}{\Gamma(1 + i\theta)} \frac{d}{dx} \int_a^x (x - t)^{i\theta} f(t) dt$$

Таким образом, в случае чисто комплексного порядка, с учетом равенства $I_{a+}^0 \varphi = \varphi = D_{a+}^0 \varphi$, операторы дробного интегрирования в форме Римана-Лиувилля образуют абелеву группу с тождественным оператором в качестве единицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. – Минск: Наука и техника, 1987. – 688 с.
2. Хилле Э., Филлипс Р. Функциональный анализ и полугруппы. – Москва: Издательство иностранной литературы, 1962. – 830 с.

**ВЛИЯНИЕ НЕРАВНОМЕРНОГО НАГРЕВА ПОВЕРХНОСТИ
ЗАГРЯЗНЕННЫХ РЕБРИСТЫХ ТРУБ НА ТЕПЛОПЕРЕДАЧУ
АППАРАТОВ ВОЗДУШНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ**

Широкое использование аппаратов воздушного охлаждения (АВО) в нефтегазовой, химической и других отраслях промышленности обусловлено доступностью охлаждающего агента – атмосферного воздуха, позволяющего упростить и удешевить технологический процесс отвода теплоты по сравнению с водяным охлаждением. В то же время АВО подвержены загрязнению из-за содержания в воздухе большого числа взвешенных частиц пыли, пыльцы растений, пуха и др. Вследствие загрязнения с течением времени уменьшается коэффициент теплопередачи АВО и количество отводимой теплоты от горячего теплоносителя, что может приводить к перегреву технологических жидкостей.

В данной работе рассматривается задача теплопроводности для круглых ребристых труб АВО с неравномерным слоем загрязнения. Загрязнение представляет собой кольцевой слой конечной толщины, прилегающий к основанию трубы в межреберном пространстве и тонкий слой, прилегающий к реберной поверхности, включая торцы ребер. В граничных условиях учитывается линейное уменьшение температуры от основания ребра к его торцу, постоянство температуры теплоносителя внутри ребристой трубы и ненулевой тепловой поток с торца ребер. Тепловые потоки от основания ребристой трубы, боковой и торцевой поверхности ребер считаются независимыми.

Для заданных граничных условий задача о температурном распределении внутри кольцевого слоя загрязнения может быть решена аналитически путем разложения в ряд Фурье по гармоникам с периодом, кратным межреберному расстоянию, и коэффициентами, представимыми в виде комбинаций модифицированных функций Бесселя и Ломмеля. Также в работе проводилось сравнение найденного температурного распределения с температурным распределением в случае бесконечной теплопроводности материала ребер (предполагается постоянство температуры вдоль всей реберной поверхности). Оказалось, что учет снижения температуры вдоль поверхности ребра приводит также к снижению температуры в слое загрязнения конечной толщины.

ЭЛЕМЕНТЫ ЭКОНОМИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ФИНАНСОВОГО РЫНКА

Финансовая математика имеет сугубо практическое назначение. Она предназначена для решения задач явно или неявно присутствующих в любой банковской операции. Целью представленной работы является демонстрация применения аппарата дифференциального исчисления функции двух переменных для анализа поведения коэффициентов наращивания в случае начисления простых и сложных процентов.

Если рассматривать T (период начисления) и i (процентную ставку) как изменяющиеся независимые неотрицательные величины (другими словами не фиксировать одну из них, как в методе сечений), то анализ поведения коэффициентов наращивания сведется к анализу поведения функции двух переменных. Для графического изучения поведения функций двух переменных можно изучать линии уровня этой функции (то есть линии, в каждой точке которой функция принимает одно и тоже постоянное значение). Удобство использования линий уровня заключается в том, что есть возможность в любой точке такой линии построить вектор градиент, который и дает направление наибольшего возрастания функции двух переменных. Что удобно для клиента финансовой организации. Для финансовой организации более заманчивым является направление, противоположное градиенту. В экономике линии уровня имеют достаточно много названий (линии равного выпуска, изоквантили, изокванты и т. д.), но используются в основном описательно, без привлечения математического аппарата для их исследования.

Проанализируем первоначально случай начисления простых процентов. Коэффициент наращивания представляет собой функцию $\varphi(i, T) = 1 + iT$. Линии уровня этой функции задаются уравнением $1 + iT = C$, где C - произвольная постоянная, большая единицы. Если изображать линии уровня в координатах (T, i) , уравнением этих линий будет семейство гипербол $i = \frac{C-1}{T}$, точнее их положительных ветвей (так как $C > 1$). Каждой линии уровня для коэффициента наращивания соответствуют вполне определенные значения переменных T и i . Другими словами, имея график линии уровня можно определить комбинацию переменных (соответствующую процентную ставку и пери-

од времени) необходимую для получения заданного уровня коэффициента наращивания. Если формально продифференцировать уравнение линии уровня $i = \frac{C-1}{T}$ по переменной T (то есть предположить $i = i(T)$), то получим выражение $\frac{di}{dT} = -\frac{C-1}{T^2}$, которое является отрицательной величиной для всех значений $C > 1$. О скорости убывания функции можно судить по ее второй производной $\frac{d^2i}{dT^2} = \frac{2(C-1)}{T^3}$, которая является положительной величиной для всех положительных значений аргумента T . Следовательно, график функции вогнут, то есть с возрастанием аргумента скорость убывания увеличивается.

В случае начисления сложных процентов, график линий уровня будет иметь вид $(1+i)^T = e^C$, или, так как $C > 0$, $i = e^{\frac{C}{T}} - 1$. Анализ полученной функции средствами дифференциального исчисления показывает, что убывать она будет значительно скорее, чем функция в случае простых процентов.

При экономико-математическом анализе, наряду с предельными значениями функции $z = f(x, y)$ (определяются через частные производные первого порядка) рассматриваются предельные нормы замещения аргумента x аргументом y (или наоборот), которые представляют собой отношение частных производных $R_{xy} = \frac{\partial f}{\partial y} : \frac{\partial f}{\partial x}$ и выражают прирост y , замещающий единицу переменной x . В случае начисления простых процентов предельная норма замещения $R_{Ti}^{np} = \frac{T}{i}$ численно равна отношению $\frac{T}{i}$. Для случая сложных процентов

$R_{Ti}^{cn} = \frac{T}{(1+i)\ln(1+i)}$. Сравнение этих норм замещения сводится к анализу знаменателей в выражениях, то есть к тому знаменатель какой из них больше. Так как производная разности $\frac{d}{di}(i - (1+i)\ln(1+i)) = -\ln(1+i)$ является отрицательной величиной для всех $i > 0$. то эта разность является строго убывающей функцией для положительных значений аргумента, из чего заключаем, что норма замещения аргумента T аргументом i для случая начисления сложных процентов всегда меньше, чем она для случая начисления простых процентов.

А. А. Якименко, канд. физ.-мат. наук, доц. (БГТУ, г. Минск)

СТАБИЛИЗАЦИЯ ТРЕХМЕРНОЙ СИСТЕМЫ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ НЕЙТРАЛЬНОГО ТИПА

Рассмотрим линейную систему нейтрального типа

$$\dot{x}(t) = A_0 x(t) + A_1 x(t-h) + A_2 \dot{x}(t-h) + bu(t), \quad t > 0, \quad (1)$$

где $A_i, i=0,1,2$ - постоянные (3×3) -матрицы, b - ненулевой 3-вектор, $h > 0$ - постоянное запаздывание. Не ограничивая общности, считаем $b' = [0, 0, 1]$.

Присоединим к системе (1) регулятор вида

$$u(t) = q'_{00} x(t) + \sum_{i=0}^L \sum_{j=1}^M q'_{ij} x^{(i)}(t-jh) + \int_{-h}^0 g'(s) x(t+s) ds, \quad (2)$$

где $q_{00}, q_{ij} (i=0, \dots, L, j=0, \dots, M)$ - 2-векторы;

$g(s), s \in [-h, 0]$ - непрерывная 2-вектор-функция, $x^{(i)}(t) \stackrel{def}{=} \frac{d^i}{dt^i} x(t)$,

$x^{(0)}(t) \equiv x(t)$.

Определение. Система (1) стабилизируема регулятором вида (2), если нулевое решение замкнутой этим регулятором системы (1), (2) устойчиво по Ляпунову или асимптотически устойчиво.

Известно, что для асимптотической стабилизации системы (1) достаточно, чтобы корни характеристического уравнения замкнутой системы (1), (2) имели отрицательные действительные части.

Введем (3×3) -матрицу:

$$A(\lambda) = A_0 + A_1 e^{-\lambda h} + A_2 \lambda e^{-\lambda h}.$$

Пусть матрица $A(\lambda)$ имеет вид:

$$A(\lambda) = \begin{pmatrix} a_{110} + a_{111} e^{-\lambda h} + a_{112} \lambda e^{-\lambda h} & 0 & 0 \\ a_{210} + a_{211} e^{-\lambda h} + a_{212} \lambda e^{-\lambda h} & a_{220} + a_{221} e^{-\lambda h} + a_{222} \lambda e^{-\lambda h} & a_{230} + a_{231} e^{-\lambda h} + a_{232} \lambda e^{-\lambda h} \\ a_{310} + a_{311} e^{-\lambda h} + a_{312} \lambda e^{-\lambda h} & a_{320} + a_{321} e^{-\lambda h} + a_{322} \lambda e^{-\lambda h} & a_{330} + a_{331} e^{-\lambda h} + a_{332} \lambda e^{-\lambda h} \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим уравнение

$$\lambda - a_{110} - a_{111} e^{-\lambda h} - a_{112} \lambda e^{-\lambda h} = 0. \quad (3)$$

В работе [1] показано, что точка $(a_{110}, a_{111}, a_{112}, h)$, $h > 0$ в пространстве коэффициентов квазиполинома (3) принадлежит области устойчивости в том, и только в том случае, когда выполнено одно из условий:

$$\begin{aligned} \text{i)} & -a_{110} > |a_{111}|, |a_{112}| \leq 1, \\ \text{ii)} & a_{111} > |a_{110}|, |a_{112}| < 1, h < h^*, \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$h^* = \sqrt{\frac{1 - a_{112}^2}{a_{111}^2 - a_{110}^2}} \cdot \arccos\left(\frac{a_{110} - a_{111}a_{112}}{a_{111} - a_{110}a_{112}}\right).$$

Для стабилизации системы (1) регулятором вида (2) в рассматриваемом случае необходимо выполнение одного из условий (4).

Далее для всех возможных случаев коэффициентов квазиполинома $a_{230} + a_{231}e^{-\lambda h} + a_{232}\lambda e^{-\lambda h}$:

1. $a_{230} + a_{231}e^{-\lambda h} + a_{232}\lambda e^{-\lambda h} = 0$,
2. $a_{230} + a_{231}e^{-\lambda h} + a_{232}\lambda e^{-\lambda h} = a_{230} \neq 0$,
3. $a_{230} + a_{231}e^{-\lambda h} + a_{232}\lambda e^{-\lambda h} = a_{230} + a_{231}e^{-\lambda h}, a_{231} \neq 0$,
4. $a_{230} + a_{231}e^{-\lambda h} + a_{232}\lambda e^{-\lambda h} = a_{230} + a_{231}e^{-\lambda h} + a_{232}\lambda e^{-\lambda h}, a_{232} \neq 0$,

указаны достаточные условия стабилизируемости, а также получены в явном виде стабилизирующие систему (1) регуляторы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Якименко А. А. Предельное запаздывание в одном уравнении нейтрального типа// Труды БГТУ. 2014. № 6(170): Физ.-мат. науки и информатика. С. 19–21.

УДК 517.444

Л. Д. Яроцкая, доц., канд. физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

ОБ ИНТЕГРАЛЬНОМ ПРЕОБРАЗОВАНИИ, СВЯЗАННОМ С ПРЕОБРАЗОВАНИЕМ КОНТОРОВИЧА–ЛЕБЕДЕВА, В ВЕСОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ L_2 .

В настоящей работе рассматривается интегральное преобразование вида

$$(Cf)(x) = 4 \int_0^{\infty} \frac{\tau}{\operatorname{sh} \pi \tau} C(2x, 2\tau) f(\tau) d\tau, \quad x > 0, \quad (1)$$

где $C(2x, 2\tau)$ – специальная функция, определенная интегралом

$$C(x, \tau) = \int_0^{\infty} \cos(x \operatorname{sh} u) \sin(\tau u) du. \quad (2)$$

Установлено, что в силу универсальной структуры ядра (2),

относящегося к функциям гипергеометрического типа, преобразование (1) композиционно связано преобразованием Конторовича – Лебедева [1]

$$[KLf](x) = 4 \int_0^{\infty} \tau K_{2i\tau}(2x) f(\tau) d\tau, \quad (3)$$

где $K_{i\tau}(x)$ – функция Макдональда, для которой справедливо представление [2] $K_{i\tau}(x) \operatorname{sh}\left(\frac{\pi\tau}{2}\right) = \int_0^{\infty} \sin(x \operatorname{sh} u) \sin(\tau u) du$.

Из теории преобразования Меллина [3] $f^*(s) = \int_0^{\infty} f(x) x^{s-1} dx$,

$s > \mathbb{C}$, известно: если $x^\gamma f(x) \in L_2(\mathbb{R}_+; x^{-1})$, тогда

$f^*(s) \in L_2(\gamma + i\infty, \gamma - i\infty)$ и наоборот. Более того, справедливо равенство Парсеваля

$$\int_0^{\infty} |f(x)|^2 x^{2\gamma-1} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |f^*(\gamma + it)|^2 dt. \quad (4)$$

Через L_2 обозначено пространство суммируемых с квадратом функций с весом $\omega(x)$, норма которого определяется формулой

$\|f\| = \left(\int_0^{\infty} |f(x)|^2 \omega(x) dx \right)^{1/2}$. Равенство (4) позволяет изучать преобразования (1), (3) в пространствах L_2 со степенно-экспоненциальным весом и получать формулы обращения. Так как для ядер гипергеометрического типа справедливо свойство иметь своим преобразованием Меллина отношение произведений гамма-функций Эйлера, асимптотика которых в соответствии с формулой Стирлинга имеет степенно-экспоненциальный характер.

В частности, получено представление функции (2) в виде интеграла Меллина – Барнса

$$C(x, \tau) = \frac{\operatorname{sh}(\pi\tau/2)}{4\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\Gamma(s+i\tau/2)\Gamma(s-i\tau/2)\Gamma(s)\Gamma(1-s)}{\Gamma(1/2-s)\Gamma(s+1/2)} \left(\frac{x^2}{4}\right)^{-s} ds,$$

если $0 < \gamma < 1/2$. Что, в свою очередь, позволяет выразить (2) через преобразование типа Гильберта [3] функции Макдональда

$$C(x, \tau) = \frac{2}{\pi} \operatorname{sh}\left(\frac{\pi\tau}{2}\right) \int_0^{\infty} \frac{t K_{i\tau}(t)}{t^2 - x^2} dt.$$

Теорема 1. Пусть $f \in L_2(\mathbb{R}_+)$. Тогда преобразования (1) и (3) существуют, справедливо равенство Парсеваля

$$\int_0^{\infty} |(Cf)(x)|^2 dx = \int_0^{\infty} |(KLf)(x)|^2 dx$$

и двойственные формулы со сходимостью в среднем квадратичном

$$(Cf)(x) = \frac{2}{\pi} \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{1/N}^N \frac{[KLf](t^{-1}) t^{-1}}{1 - (xt)^2} dt,$$

$$x^{-1} [KLf](x^{-1}) = \frac{2}{\pi} \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{1/N}^N \frac{(Cf)(t)}{1 - (xt)^2} dt.$$

Формулу обращения преобразования (1) получена на основании теоремы типа Планшереля для преобразования Конторовича – Лебедева (3) [1].

Теорема 2. Произвольная функция $f \in L_2(\mathbb{R}_+)$, удовлетворяющая условию $f(\tau) = O(\tau^\alpha)$, $\alpha > 1/2$ при $\tau \rightarrow 0$, почти для всех $\tau > 0$ может быть получена при помощи интеграла

$$f(\tau) = -\frac{4 \operatorname{ch}(\pi\tau)}{\sqrt{\tau\pi^2}} \frac{d}{d\tau} \int_0^{\infty} \int_0^{\tau} \sqrt{y} \operatorname{th}(\pi y) S(2x, 2y) (Cf)(x) \frac{dy dx}{y},$$

как обращение преобразования (1), где

$$S(x, \tau) = \int_0^{\infty} \sin(x \operatorname{sh} u) \cos(\tau u) du.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Yakubovich, S. B. Index transforms / S. B. Yakubovich. Singapore: World Scientific Publishing Company, 1996.
2. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены / Г. Бейтмен. М.: Наука, 1974.
3. Титчмарш Е. Введение в теорию интеграла Фурье / Е. Титчмарш. М.; Л.: Гостехиздат, 1948.

РОЛЬ ДИСКРЕТНЫХ ОРТОГОНАЛЬНЫХ ПОЛИНОМОВ В ПОСТРОЕНИИ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДИНАМИКИ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ В ПОЛЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В настоящее время все больший интерес вызывает создание квантовых когерентных состояний сред (атомов, молекул, центров в кристаллах) с целью применения их для квантовых вычислений, лазерного управления химическими реакциями, создания квантовых линий связи. Изучение когерентных свойств сред, управление ими предполагает, в частности, решение и анализ квантовых уравнений когерентной динамики, как численное, так и аналитическое.

В работе представлен и реализован алгоритм построения аналитического решения соответствующих дифференциальных уравнений, в котором использованы преобразование Фурье и ортогональные полиномы дискретной переменной в пространстве Фурье. С использованием как известных, так и специально построенных полиномов приводятся полученные решения уравнений когерентной динамики некоторых квантовых систем, возбуждаемых лазерным излучением.

Модель квантовой системы, взаимодействующей с излучением, представляет собой набор уровней энергии E_0, E_1, \dots, E_N . Излучение вызывает переходы между соседними уровнями, система возбуждается, заселяются более высокие уровни. Энергия кванта $\hbar\omega_\ell$ излучения может не вполне совпадать с энергией $E_n - E_{n-1}$ перехода, что учитывается введением частотной отстройки ε_n для каждого n -го перехода $n-1 \leftrightarrow n$, характеризуемого матричным элементом $\mu_{n-1,n} = \mu_{0,1} f_n$, ($f_1 = 1$), который учитывает количественно взаимодействие излучения на n -м переходе квантовой системы. Таким образом, эта система описывается величинами f_n, ε_n , а также числом N переходов, взаимодействующих с излучением, имеющим амплитуду E_ℓ и несущую частоту ω_ℓ .

В безразмерных переменных система $N+1$ дифференциальных уравнений имеет вид

$$-i \frac{da_n(t)}{dt} = f_{n+1} e^{-i\varepsilon_{n+1}t} a_{n+1}(t) + f_n e^{+i\varepsilon_n t} a_{n-1}(t); \quad a_n(t=0) = \delta_{n,0}; \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (3)$$

Здесь $a_n(t)$ – искомые функции безразмерного времени, дающие полное описание динамики. Измеряемые величины $\rho_n(t) = a_n(t)a_n^*(t)$ – населенности уровней. Решение уравнений (1) ищем в виде дискретного преобразования Фурье:

$$a_n(t) = e^{is_n t} \sum_{\omega=0}^N F_n(\omega) e^{ir\omega t}; \quad F_n(\omega) = \sigma(\omega) \hat{p}_0 \hat{p}_n(\omega); \quad \omega = 0, 1, \dots, N \quad (4)$$

Спектры Фурье $F_n(\omega)$, т. е. Фурье-образы амплитуд вероятности $a_n(t)$ квантовой системы выражаются, как показано в (2), через некоторую последовательность ортонормированных полиномов $\{\hat{p}_n(\omega)\}_{n=0}^N$ дискретного аргумента ω и их весовую функцию $\sigma(\omega)$. Дискретность пространства Фурье искомым функций времени продиктована физическими соображениями, а полиномы в этом пространстве в качестве своего аргумента имеют эквидистантно расположенный набор частот. Сказанное выше доказано подстановкой (2) в уравнения (1).

Учитывая, что любая последовательность ортогональных полиномов удовлетворяет трехчленному рекуррентному соотношению, которое мы записываем в нетрадиционном, но удобном для задачи виде

$$\bar{f}_{n+1} \hat{p}_{n+1}(\omega) + \bar{f}_n \hat{p}_{n-1}(\omega) = \{r\omega + s_n\} \hat{p}_n(\omega); \quad n, \omega = 0, 1, \dots, N; \quad \bar{f}_0 = 0, \quad \bar{f}_1 = 1, \quad (5)$$

где коэффициенты \bar{f}_n, r, s_n предполагаются известными. Подстановка приводит к заключению, что (2) является решением системы уравнений (1) при условиях

$$f_n = \bar{f}_n, \quad \varepsilon_n = s_n - s_{n-1}. \quad (6)$$

Это выражение устанавливает взаимно-однозначную связь характеристик полиномов с коэффициентами динамических уравнений (1), т. е. со свойствами соответствующей им квантовой системы: расположением уровней энергии, матричными элементами радиационных переходов, отстройками собственных частот переходов от несущей частоты излучения.

Выполнение обратного преобразования Фурье (2) дает искомое решение $\{a_n(t)\}_{n=0}^N$ и позволяет найти населенности уровней $\rho_n(t)$, т. е. дискретную функцию распределения квантовых систем по уровням энергии в зависимости от времени, характеристик системы и от частоты излучения.

Рассмотрено три примера, где на основе каждой из выбранных весовых функций $\sigma(\omega)$ и построенных ортогональных полиномов получены аналитические решения уравнений (1) и найдены населенности уровней $\rho_n(t)$, т. е. функция распределения квантовых частиц по уровням в любой момент времени в процессе возбуждения квантовых систем когерентным излучением.

Изложенный алгоритм позволяет, используя разнообразные весовые функции дискретного аргумента и соответствующие им структуры ортонормированных полиномов, строить аналитическое описание когерентной динамики разнообразных квантовых систем в лазерных полях.

ПОСТРОЕНИЕ ПРАВОСТОРОННЕЙ РЕЗОЛЬВЕНТЫ ДЛЯ ДИСКРЕТНОГО ОПЕРАТОРА ВЗВЕШЕННОГО СДВИГА

В работе для дискретного оператора взвешенного сдвига строятся правосторонние резольвенты, удовлетворяющие дополнительному условию, что образы всех этих операторов есть заданное замкнутое векторное подпространство L . Получены необходимые и достаточные условия существования правосторонней резольвенты, определенной в окрестности единичной окружности, для таких резольвент получено представление в виде операторного ряда Лорана и построен соответствующий оператор P .

Рассматриваются подпространства вида

$$L_\eta = \{u \in l_2(\mathbb{Z}) : \eta_0 u(0) + \eta_1 u(1) + \dots + \eta_m u(m) = 0, m \geq 0\}.$$

По этому подпространству и оператору B строится полином

$$P_{m\eta}(\lambda) = \sum_{k=0}^m \frac{\eta_k \lambda^k}{\prod_{j=0}^{k-1} a(j)}.$$

Теорема 1. Если $|a(-\infty)| < |\lambda| < |a(+\infty)|$, то необходимые и достаточные условия для того, чтобы существовал правый обратный оператор к $B - \lambda I$, образ которого принадлежит подпространству L_η , имеют вид $P_{m\eta}(\lambda) \neq 0$.

Пусть оператор P_0 действует в пространстве $l_2(\mathbb{Z})$ по формуле $(P_0 u)(k) = u(k), k \geq 0$ и $(P_0 u)(k) = 0, k < 0$. Пусть $\omega(k)$ есть решение однородного уравнения $(B - \lambda I)\omega = 0, \omega(0) = 1$. Это решение задается формулой

$$\omega(k) = \frac{\lambda^k}{\prod_{j=0}^{k-1} a(j)}, k \geq 0, \omega(k) = \frac{\prod_{j=k}^{-1} a(j)}{\lambda^k}, k < 0.$$

Теорема 2. Семейство правых обратных к $B - \lambda I$, образы которых принадлежат подпространству L_η , однозначно определено в тех точках, где $P_{m\eta}(\lambda) \neq 0$. и аналитически зависит от λ , т.е. является правосторонней резольвентой. Эта правосторонняя резольвента имеет вид

$$R_\eta(B; \lambda) f = \left[\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{\lambda^{k-1}} B^k P_0 f + \sum_{k=-1}^{-\infty} \frac{1}{\lambda^{k-1}} B^k (I - P_0) f \right] + \frac{\Phi_\lambda(f)}{P_{m\eta}(\lambda)} \omega,$$

$$\Phi_\lambda(f) = \sum_{k=0}^{m-1} \left[\sum_{i=0}^{m-k-1} \frac{\lambda^i \eta_{i+1}}{\prod_{j=0}^{i-1} a(j)} \right] f(k).$$

Согласно сказанному выше, если $P_{m\eta}(\lambda) \neq 0$ при $|\lambda|=1$, то в окрестности единичной окружности правосторонняя резольвента задается в виде операторного ряда Лорана

$$R_\eta(B; \lambda) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{\lambda^k} B^{k+1} P + \sum_{k=-1}^{-\infty} \frac{1}{\lambda^{k+1}} B^{k+1} (I - P).$$

Явный вид оператора P найден для некоторых конкретных примеров подпространств L_η , в этих примерах оператор P имеет вид $P = P_0 + \psi$, где ψ есть некоторый оператор ранга 1.

УДК 517.9

М.Х. Мазель, канд. физ.-мат.наук; О.И. Пиндрик, канд. физ.-мат.наук
(БГУ, г. Минск)

НЕКОТОРЫЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛГЕБРЫ ОБОБЩЕННЫХ ОПЕРАТОРОВ

Исследование свойств линейных операторов является одной из важнейших задач функционального анализа. Как известно, многие хорошо изученные свойства линейных ограниченных операторов нельзя обобщить на множество всех линейных отображений из одного нормированного пространства в другое. Это относится, в частности, к теореме о равномерной непрерывности и о непустоте спектра. В связи с этим возникают трудности при решении задач, которые могут быть описаны с помощью неограниченных операторов. Эти проблемы так же, как проблема введения ассоциативного умножения на множестве распределений, привели к возникновению новых теорий. В частности, была построена алгебра обобщенных операторов, свойства которой аналогичны свойствам алгебр линейных ограниченных операторов.

Алгебра обобщенных операторов определяется как множество классов эквивалентности последовательностей линейных ограниченных операторов. Для задания такой алгебры необходимо введение понятия обобщенного числа, а также обобщенного нормированного пространства. (Аккуратное определение обобщенного оператора, множества обобщенных комплексных чисел и обобщенного норми-

рованного пространства вводится в работе [4]). При определении такой алгебры возникает вопрос о вложении неограниченных операторов в новую алгебру обобщенных операторов.

Если для некоторого неограниченного оператора A существует последовательность (A_n) , сильно сходящаяся к A и являющаяся элементом алгебры $G_m(A)$, оператор A вкладывается в алгебру обобщенных операторов как класс эквивалентности сходящейся к ней последовательности. При этом каждому такому оператору соответствует множество обобщенных операторов.

Топологии на введенных алгебрах обобщенных чисел и обобщенных операторов вводятся с помощью систем открытых шаров (которые, в свою очередь, определяются с помощью положительных обобщенных чисел). Заданные таким образом топологии обладают свойствами, аналогичными свойствам топологии в классических пространствах. При этом оказываются справедливыми следующие теоремы:

Теорема 1. Алгебраическая структура на пространстве обобщенных операторов над кольцом обобщенных чисел согласована с топологией на нем.

Теорема 2. Если X – банахово пространство, то обобщенное пространство X_* является полным пространством в топологии, заданной системой открытых множеств.

Теорема 3. Если X – нормированное пространство, а Y – банахово, то множество обобщенных операторов $L_*(X, Y)$ является полным в топологии, заданной с помощью $*$ -нормы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Антоневиц А.Б., Радыно Я.В. Функциональный анализ и интегральные уравнения - Минск: БГУ, 2003. - 430 с.
2. Антоневиц А.Б., Радыно Я.В. Об общем методе построения алгебр обобщенных функций. - ДАН СССР. - 1991, т. 318, №2. - с. 267-270.
3. Ахиезер Н.И., Глазман И.М. Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. - М.: Наука, 1966. – 544 с.
4. Гулецкая О.И., Радыно Я.В. К теории обобщенных функций от операторов. – Весці АН Беларусі. -1995, № 2.
5. Данфорд Н., Шварц Дж. Линейные операторы. Общая теория. - М., ИЛ, 1962. – 896 с.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЦИАНОБИФЕНИЛОВ

Исследуемые нами соединения относятся к жидким кристаллам, являющимся сегодня наиболее распространенной технологической разновидностью, существенный прогресс которой выразился в разработке ЖК-дисплеев, термостойких ЖК-панелей и др. Наиболее важные компоненты для разработки жидкокристаллических материалов - это цианопроизводные различных химических классов [1].

Пространственное расположение фенильных колец в молекулах цианобифенилов определяется их электронным строением. Введение в пара-положение по отношению к цианогруппе электронодонорных групп вносит искажение в пространственное распределение электронной плотности, а, следовательно, и в структуру молекулярной системы и отражается на физических характеристиках молекул. Ниже приведены полные электронные энергии молекул, рассчитанные методами B3LYP и Меллера-Плессета MP2 с различными базисными наборами, включающими поляризационные и диффузные функции (табл.) [2].

Таблица – Полные электронные энергии (а. е.) молекул цианобифенилов на различных уровнях теории

Молекула	MP2/ 6-31G(d,p)	MP2/ 6-31++G(d,p)	B3LYP/ 6-31G(d)	B3LYP/ 6-31G(d, p)	B3LYP/ 6- 31++G(d,p)
БФ-5 4-н-пентил-4'- цианобифенил	-747.192231 (HF) -749.770813	-747.207709 (HF) -749.811620	-752.123556	-752.151422	-752.175289
ОБФ-5 4-пентокси-4'- цианобифенил	-822.039920 (HF) -824.791389	-822.057585 (HF) -824.836959	-827.333906	-827.361706	-827.388740

Электронная энергия молекул, вычисленная с учетом электронной корреляции методами MP2 и B3LYP, становится все более отрицательной в пределах одного метода с расширением базисного набора и в пределах одного базиса при переходе от метода MP2 к методу теории функционала плотности.

Функция распределения электронной плотности нормирована

так, что $\int \rho(r)dV = N$, где N – полное число электронов в молекуле. Поскольку электрон имеет единичный отрицательный заряд, плотность распределения заряда эквивалентна распределению электронной плотности. На рисунке представлены двумерные карты распределения плотности заряда в молекулах БФ-5 (а) и ОБФ-5 (б). В молекуле БФ-5 наибольшая электронная плотность («сгусток» плотности) сосредоточена вблизи атомов цианогруппы - заместителя с отрицательным мезомерным эффектом.

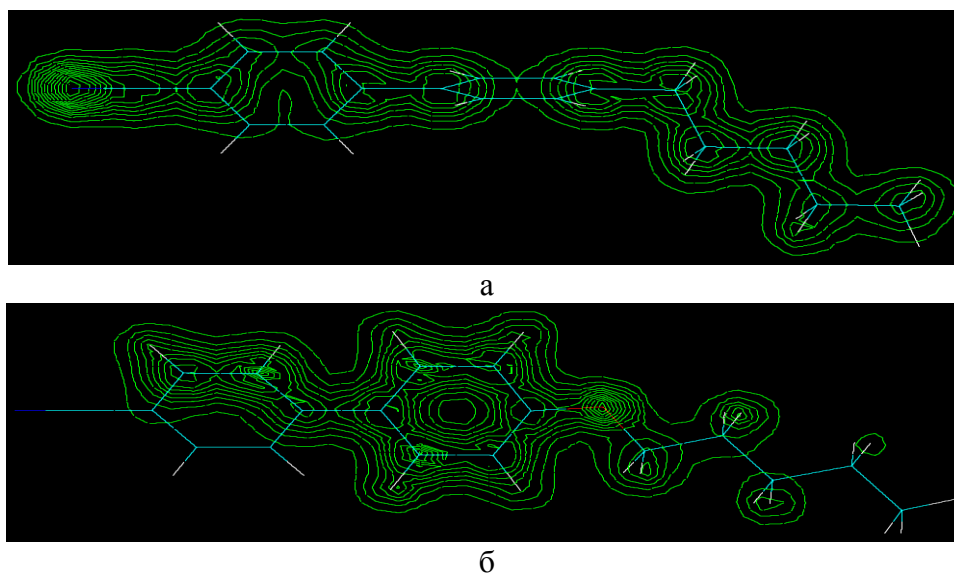


Рисунок - Графики контурных кривых распределения заряда в молекулах БФ-5 (а), ОБФ-5 (б) согласно методу V3LYP/6-31G(d, p)

Расчеты методом теории функционала плотности в расширенном базисе V3LYP/6-31G(d,p) показали улучшенные результаты по сравнению с методом Хартри-Фока в среднем базисе: получено адекватное зарядовое распределение.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Гребенкин М.Ф., Иващенко А.В. Жидкокристаллические материалы. – М.: Химия, 1989.
- 2 Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., et al. Gaussian 09, Revision A.02, Wallingford CT, 2009.

А.У. Бимендина, доц., канд. физ.-мат. наук
(Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова, г. Караганда)

УСЛОВИЯ ВЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ПРОСТРАНСТВ ЛОРЕНЦА И БЕСОВА

Теория функциональных пространств является мощным методом решения основных задач теории приближений, теории рядов Фурье и других задач функционального анализа. Многие свойства функций изучаются с использованием функций разложение в ряды Фурье по различным ортогональным системам.

В настоящей работерассматриваются ряды Фурье-Прайса в пространстве Лоренца $L_{q\tau}[0,1]$, $1 < p < +\infty$, $1 < \tau < +\infty$ и в пространстве Бесова $B_{p\theta}^r[0,1]$, $1 < p < +\infty$, $1 < \theta < +\infty$, $r > 0$ с базисом Прайса. Обсуждаются условия вложения для различных метрик классов функций пространств Лоренца и Бесова.

Пусть $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{+\infty}$, $x \in [0,1]$ – мультипликативная система Прайса [1] и $L_p[0,1]$, $1 < p < +\infty$ пространство Лебега [2].

Рядом Фурье-Прайса функции $f \in L[0,1]$ назовем ряд $\sum_{k=0}^{+\infty} a_k \varphi_k(x)$, где $a_k = \int_0^1 f(x) \varphi_k(x) dx$ – называется коэффициентом Фурье-Прайса функции $f(x)$ на базе системы Прайса. Через $T_n(x) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k \varphi_k(x)$ обозначим линейный агрегат по мультипликативной системе Прайса порядка не выше, чем $(k-1)$.

Наилучшее приближение функции $f \in L[0,1]$ по линейным агрегатом мультипликативной системы Прайса определяется следующим образом:

$$E_n(f)_p = \inf \{ \|f - T_l\|_p : \{T_l(x)\}, l \leq n \}.$$

Определение пространства Лоренца[3]: Пусть $1 \leq p \leq +\infty, 1 \leq \theta \leq +\infty$.

Будем говорить, что функция $f(x)$ принадлежит пространству Лоренца $L_{p\theta}([0,1])$, если $\|f\|_{p\theta} = \left\{ \int_0^1 t^{\frac{\theta}{p}-1} [f^*(t)]^\theta dt \right\}^{\frac{1}{\theta}} < +\infty$, при

$1 \leq p < +\infty, 1 \leq \theta < +\infty$ и $\|f\|_{p\infty} = \sup_{t>0} t^{\frac{1}{p}} f^*(t) < +\infty$ при $1 \leq p < +\infty, \theta = +\infty$.

В случае $\theta = p$ пространство Лоренца $L_{p\theta}([0,1])$ совпадает с пространством Лебега $L_p([0,1])$.

Определение пространства Бесова [4]: Пусть $1 \leq p \leq +\infty, 1 \leq \theta \leq +\infty$ и $r > 0$. Будем говорить, что $f \in B_{p\theta}^r[0,1]$,

а) если $f \in L_p[0,1]$

$$\text{б) } \|f; B_{p\theta}^r[0,1]\| = \|f\|_p + \left\{ \sum_{k=0}^{+\infty} 2^{k\theta r} \cdot E_{2^k}^\theta(f)_p \right\}^{\frac{1}{\theta}} < +\infty,$$

где $\|f; B_{p\theta}^r[0,1]\|$ является нормой пространства Бесова.

Основным результатом настоящей работы является следующее:

Теорема. Пусть $1 < p < q < +\infty, 1 < \tau < +\infty, 1 < \theta < +\infty$ и $f \in B_{p\theta}^r[0,1]$. $f \sim \sum_{k=0}^{+\infty} a_k \varphi_k(x)$ – ряд Фурье-Прайса функции f и

$$\Delta_{2^k}(f; x) = T_{2^k}(f) - T_{2^{k-1}}(f) = \sum_{\nu=2^{k-1}}^{2^k-1} a_\nu \varphi_\nu(x), k \in \mathbb{Z}^+.$$

Если при $r > \frac{1}{p} - \frac{1}{q} > 0$ ряд $\sum_{k=0}^{+\infty} 2^{kr\theta} \|\Delta_{2^k}(f)\|_p^\theta$ сходится, то $f \in L_{q\tau}[0,1]$, где $1 < p < q < +\infty, 1 < \tau < +\infty, 1 < \theta < +\infty$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Голубов Б.И., Ефимов А.В., Скворцов В.А. Ряды и преобразования Уолша.- М: Наука, 1987. - 344 с.
2. Бари Н.К. Тригонометрические ряды. –М. 1961. -937 с.
3. Стейн И., Вейс Г. Введение в гармонический анализ на Евклидовых пространствах, Мир, М., 1974.
4. Бесов О. В. Исследование одного семейства функциональных пространств в связи с теоремами вложения и продолжения// Труды матем. ин-та. им. В.А. Стеклова. Сб. ст. – Москва., 1961. – Т. 60. – С. 42-81.

Ж.К. Смагулов, проф., канд. физ.-мат. наук;
Н.К. Келесбек, магистрант
(КарГУ им. Е.А. Букетова, г. Караганда)

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК СРЕДСТВО РЕАЛИЗАЦИИ УРОВНЕВОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЦИИ ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКЕ В КОЛЛЕДЖЕ

В последние два десятилетия образование претерпело серьезные изменения, связанные, прежде всего, с внедрением в учебно-воспитательный процесс идей личностно-ориентированного образования. Это в свою очередь обуславливает необходимость создания максимально благоприятных условий для успешного обучения, воспитания и развития учащихся путём учета их индивидуальных особенностей в учебном процессе, что достигается применением разнообразных технологий дифференцированного обучения.

Одной из форм осуществления дифференцированного обучения физике является уровневая дифференциация - технология обучения, основанная на максимальном учёте наиболее значимых в обучении индивидуальных особенностей обучающихся в одной группе. При этом учащиеся изучают физику по одной программе и по одному учебнику, но на различных, заранее запланированных уровнях обучения, соответствующих их познавательным возможностям и потребностям, вследствие чего достигают различных результатов.

В качестве средства реализации уровневой дифференциации мы предлагаем использовать ЭОР как составляющую ИТ. ЭОР является весьма эффективным средством реализации уровневого обучения. Однако, как показывают результаты констатирующего эксперимента и данные других исследований, эти ресурсы учителями практически не используются.

Цель исследования: обосновать и разработать методику использования ЭОР для реализации уровневой дифференциации в процессе обучения физике в колледже.

В основу исследования положена следующая рабочая гипотеза: реализация уровневой дифференциации обучения физике в колледже будет эффективной, если учебный процесс будет организован с использованием электронных образовательных ресурсов, которые будут способствовать выбору учащимися индивидуальной образовательной траектории.

Для решения поставленных задач и проверки гипотезы исследования использовались следующие методы исследования: организа-

ция и проведение опытно-экспериментальной работы, направленной на проверку правильности гипотезы исследования; опытное преподавание с целью выявления эффективности разработанной методики; статистические методы обработки результатов педагогического эксперимента.

Научная новизна исследования состоит в следующем: обосновано положение о целесообразности и эффективности использования ЭОР при организации уровневой дифференциации на уроках физики в колледже; определены теоретические основы и разработана модель методики использования электронных образовательных ресурсов в уровневом обучении физике;

Апробация результатов исследования осуществлялась в процессе экспериментальной работы в Карагандинском техникум-строительном колледже.

**Таблица – Результаты эксперимента по итогам
1 семестра 2017-2018 уч. года**

Общий контингент	Контрольный класс		Экспериментальный класс	
	20 учащихся		20 учащихся	
0-5 баллов	6	30%	4	20%
6-8 баллов	8	40%	5	25%
9-10 баллов	4	20%	6	30%
11-12 баллов	2	10%	5	25%

Как видно, ученики экспериментального класса показали несколько лучший результат, хотя изначально в качестве контрольной группы выбирался класс с чуть более высоким средним уровнем успеваемости по физике. Результаты этой и других проверочных работ и контрольных срезов позволили нам предположить, что систематическое применение на практике разработанной нами методики даст хороший результат.

Л. В. Михайловская, доц., канд. физ.-мат. наук;
Е. В. Валаханович, магистр техн. наук (ВА РБ, г. Минск)

О НЕОБХОДИМОСТИ ПРЕПОДАВАНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ОПЕРАЦИЙ ПРИ ПОДГОТОВКЕ СПЕЦИАЛИСТОВ В СФЕРЕ ВОЕННОГО УПРАВЛЕНИЯ

Исследование операций – относительно новая наука, появившаяся в середине двадцатого века. Она возникла в годы второй мировой войны, исходя из необходимости решения военных задач. В военном деле в практическом смысле исследование операций является прикладной научной задачей, занимающейся вопросами наилучшего использования вооружения или оборудования и наилучшей организации военных действий. Данный постулат актуален тем, что главной особенностью, отличающей процесс военного дела, является ярко выраженное искусство военачальников, то есть лиц, принимающих решения.

В настоящее время перед военной наукой и практикой встают широкомасштабные задачи, решение которых требуют привлечения методов исследования операций.

Типичными задачами исследования операций в военном деле являются задачи поиска, распределения и управления запасами, задачи массового обслуживания, выбора оптимального сочетания различных видов боевой техники, упорядочения, замены оборудования и т.д. Использование математического моделирования, являющегося основой исследования операций при решении таких задач, позволяет избежать больших материальных затрат. Моделирование процессов боевых действий, а затем отыскание оптимального решения возможно рассчитать теоретически, без проведения боевых действий с людскими потерями и без масштабных финансовых затрат при проведении дорогостоящих учений.

В настоящее время в Военной академии Республики Беларусь курс исследования операций изучается курсантами следующих специальностей: управление танковыми подразделениями, управление мотострелковыми подразделениями, управление подразделениями ракетных войск и артиллерии, тыловое обеспечение войск, управление воздушным движением, боевое управление авиацией, управление подразделениями войск разведки и другими.

В ВА РБ изучается раздел «Математические основы исследования операций», он содержит элементы теории линейного программирования, теории игр и сетевого планирования [1].

При изучении темы «Основы линейного программирования»

решаются задачи управления запасами и моделирования процессов передвижения войск.

Тема «Элементы теории игр» дает инструмент для решения задач о выборе оптимального сочетания различных видов боевой техники, задач моделирования процессов разведки (наземной, воздушной, радиотехнической), а также моделирования процесса нанесения огневого удара по различного типа целям как без учета надежности оружия и противодействия противника, так и с их учетом.

Тема «Транспортная задача» используется при решении задач моделирования процессов управления и обеспечения и задач управления запасами.

Тема «Элементы сетевого планирования» помогает решать задачи упорядочения. В дополнительных задачах вероятностные сетевые модели применяются, когда операции имеют неопределенное время выполнения. В этом случае наиболее распространены метод оценки пересмотра планов и метод Монте-Карло. Изучаемые методы математической поддержки принимаемых решений позволяют рассматривать и проводить анализ широкого круга проблемных ситуаций в различных сферах деятельности.

В процессе изучения курса исследования операций в ВА РБ также предусмотрено выполнение будущими офицерами курсовой работы [2], цель которой – научить применять полученные в процессе изучения курса навыки в военном деле с учетом специфики военной специальности.

Из всего вышесказанного следует, что более широкое применение методов исследования операций в военном деле в наше время является настоящей необходимостью и с учетом специфики военного дела способствует формированию профессионально мыслящих должностных лиц, способных адекватно оценивать обстановку и принимать верные решения.

ЛИТЕРАТУРА

1 Михайловская, Л. В. Основы высшей математики. Математические основы исследования операций: учеб.-метод. пособие / Л. В. Михайловская, Г. А. Шунина, Е. В. Валаханович – Минск: ВА РБ, 2018.

2 Михайловская, Л. В. Основы высшей математики. Курсовая работа по исследованию операций. Задания и методические рекомендации: Учеб.-метод. пособие / Л. В. Михайловская, Г. А. Шунина, Е. В. Валаханович – Минск: ВА РБ, 2019.

ИННОВАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОБУЧЕНИЯ

Анализируя внедрение инновационных технологий обучения по физике в ВУЗах, можно выделить следующее: применение учебных материалов в виде электронных учебников (ЭУ); использование их как средства обучения и контроля в учебном процессе. При этом студентам предлагаются ЭУ, дублирующие учебную информацию с бумажных носителей, не используя при этом широких возможностей современных технологий. ЭУ представляет собой обучающую программную систему комплексного назначения, обеспечивающую непрерывность и полноту дидактического цикла: предоставление теоретического материала, организацию учебной и информационно-поисковой деятельности, контроль уровня знаний, осуществление интерактивной обратной связи. Можно выделить следующие технологии разработки ЭУ: технология, базирующаяся на концепции типовых экранов: заставка, регистрация, информационный экран, экран вопросов, экран упражнений; технология, основанная на применении метода теоретических образов, как наглядно-образного представления семантики вербализованных форм научных знаний: понятий, законов, теорий. Наряду с воспроизводящими полный дидактический цикл, применяются электронные книги охватывающие отдельные фрагменты дидактического цикла: информационные, энциклопедические и экзаменуемые. Энциклопедические - содержат большой объем информации, расположенных по тематическому принципу. В информационных ЭУ материал носит более целенаправленный характер, используемый в учебном процессе в качестве справочного пособия. Экзаменуемые ЭУ содержат блок вопросов-задач, модуль тестирования и экспертную систему для анализа и оценки ответов. Необходимо совершенствование ЭУ и оно должно основываться на использовании современных технологий, как мультимедиа, многовариантная среда, «виртуальная реальность» и др., которые с успехом могут применяться при выполнении СРС по физике и в аудитории. Мультимедиа—это технология, обеспечивающая работу с видеоизображением, анимацией, текстом и звуком. Информация, полученная с помощью цифровых фотоаппаратов, сканеров, видеокамер и других внешних источников, после соответствующей обработки с добавлением текста, анимации и спецэффектов записывается в мультимедийный файл. В сочетании с гипертекстом она образует гипермедиа-сверхсреда. В учебном процессе успешно

применяется технология-«виртуальная реальность», создающая иллюзию непосредственного присутствия в стереоскопически представленном «экранном мире». Она позволяет моделировать различные виды деятельности будущего специалиста, особенно если необходимо отработать систему действий в реальных и аварийных производственных ситуациях. Успешно применяются по физике «виртуальные лабораторные работы», которые в сочетании со стендовыми работами имеют большое познавательное значение и позволяют студентам выполнять измерения, записывать данные с приборов, выполнять математическую обработку результатов, строить графики, выполнить самопроверку, ответить на контролирующие тесты и вопросы. Повсеместно внедряются технологии позволяющие организовать исследовательскую деятельность студентов на основе компьютерного моделирования. Она включает в себя всю необходимую информацию; видеоролики; аудиосопровождение; электронные таблицы; системы для управления работой стендов, агрегатов при помощи специальных датчиков, сопряженных с ПК. Полученные данные обрабатываются и представляется в виде таблиц, диаграмм, графиков. Положительный эффект инновационных технологий сложно переоценить, хотя они не могут быть альтернативой человеческому общению педагога со студентом. Естественно, нужно избегать «геймизации» обучения. Внедрение новых технологий должно быть научно обоснованным, программы и ЭУ должны проходить экспертизу. Все это подразумевает техническое оснащение ВУЗов современными средствами обучения, широким доступом Интернет и эффективное использование электронного ресурса. При разработке инновационных интерактивных ЭУ нового поколения и формата нужен творческий коллектив: предметник - разработчик общей структуры и содержания курса, специалист в области дидактики, специалист по психологии познавательных процессов, программист, специалист в области эргономики и дизайна. Инновационные технологии позволяют студентам – эффективно использовать учебный материал; развивать проблемно-поисковое мышление; активизировать НИР; расширить возможности самоконтроля, а преподавателям – оперативно обновлять материал и расширить возможности контроля знаний. Применение инновационных технологии обеспечивают повышение качества обучения и подготовки специалистов, конкурентоспособности ВУЗа в целом на рынке образовательных услуг.

А.А. Тенгаева, ассоц. проф., канд. физ.- мат. наук
(КазНАУ, г. Алматы, Казахстан)

БЕЗУСЛОВНАЯ БАЗИСНОСТЬ ОДНОЙ НЕСАМОСОПРЯЖЕННОЙ ЗАДАЧИ

В случае самосопряженной спектральной задачи с точечным спектром система ее собственных функций образует полную ортонормированную систему в L_2 , т.е. базис пространства L_2 . В случае несамосопряженных задач система собственных функций может оказаться неполной. Тогда приходится их дополнять, так называемыми, присоединенными функциями (при их наличии).

Если рассмотреть оператор Шредингера на некотором конечном интервале G числовой оси $Lu = -u''(x) + q(x)u$ с комплекснозначным потенциалом $q(x) \in L_1(G)$, то цепочки присоединенных функции, соответствующих собственной функции $u_{k_0}(x)$ и собственному значению λ_k , можно построить [1] по формуле

$$Lu_{ki} = \lambda_k u_{ki} - u_{k,i-1}, i = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

В работах [2-5] используются формулы

$$Lu_{ki} = \lambda_k u_{ki} - \sqrt{\lambda_k} u_{k,i-1}, i = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

В работе [2] предлагают для построения цепочек присоединенных функций пользоваться формулой

$$Lu_{ki} = \lambda_k (u_{ki} - u_{k,i-1}), i = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

Проблема способа построения присоединенных функций возникает в случае несамосопряженных задач, когда они обладают бесконечным числом присоединенных функций. Рассмотрим следующую спектральную задачу

$$-u''(x) = \lambda u(x), \quad u'(0) = 0, \quad u(0) = u(1), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (4)$$

которая является несамосопряженной за счет краевых условий. Собственными значениями этой задачи являются числа $\lambda_k = (2k\pi)^2, k = 0, 1, 2, \dots$. Соответствующими собственными функциями являются функции $u_0 = 1, u_{k_0} = \sqrt{2} \cos 2k\pi x, k = 1, 2, 3, \dots$

Полученная система собственных функций не является полной в $L_2(0,1)$, поэтому дополним их присоединенными функциями.

1. Построение цепочек присоединенных функций по формуле (1). Нам необходимо найти решение неоднородного уравнения

$$-u_{ki}''(x) + \lambda_k u_{ki} = u_{k,i-1}$$

удовлетворяющее краевым условиям (4). Присоединенных функций, отвечающих собственной функции $u_0(x) = 1$ нет. Собственным функциям $u_{k0}(x)$ отвечают присоединенные функции, удовлетворяющие уравнению $-u_{k1}''(x) = \lambda_k u_{k1}(x) - u_{k0}(x)$

Число $(2k\pi)^2$ является двукратным корнем соответствующего характеристического уравнения, то стандартным приемом решения неоднородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами, находим $u_{k1} = \frac{\sqrt{2}x}{4k\pi} \sin 2k\pi x$

Система собственных и присоединенных функций задачи (4)

$$\{u_{k0} = 1, u_{k0} = \sqrt{2} \cos 2k\pi x, u_{k1} = \frac{\sqrt{2}x}{4k\pi} \sin 2k\pi x\}. \quad (5)$$

Биортогонально сопряженная система

$$\{v_0 = 2(1-x), v_{k1} = \frac{16k\pi}{\sqrt{2}} \sin 2k\pi x, v_{k0} = \frac{4(1-x)}{\sqrt{2}} \cos 2k\pi x\} \quad (6)$$

состоит из собственных $\{v_0, v_{k1}\}$ и присоединенных $\{v_{k0}\}$ функций сопряженной задачи $-v'' = \bar{\lambda}v, v(1) = 0, v'(0) = v'(1)$.

Теорема 1. Каждая из систем (5), (6) образует безусловный базис пространства $L_2(0,1)$.

Доказательство теоремы мгновенно следует из результатов работы [3] и $|u_{ki}| |v_{ki}| \leq \text{const.}, i = 0,1, \forall k$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Келдыш М.В. О полноте собственных функций некоторых классов несамосопряженных линейных операторов / Успехи матем.наук, 1971. Т. 26, Вып. 4 (160). С. 15-41.

2. Садыбеков М.А., Сарсенби А.М. Об одном подходе к определению присоединенных функции дифференциальных операторов / Труды международной научной практической конференции, 2006.

3. Сарсенби А.М. Критерий базисности Рисса корневых функций дифференциального оператора второго порядка / Доклады НАН РК. 2006. №1, С.44-48.

4. Ильин В.А. Необходимые и достаточные условия базисности Рисса корневых векторов разрывных операторов второго порядка / Дифференциальные уравнения, 1986. Т.22, №12, С. 2059-2071.

5. Ионкин Н.И. Решение одной краевой задачи теории теплопроводности с неклассическим краевым условиям/ Дифференциальные уравнения, 1977. Т 13, №2. С.294-304.

N.I. Shtefan, Doctor of philosophy, Associate Professor
 (National Technical University of Ukraine
 "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv, Ukraine)
 e-mail: nishtefan@gmail.com

THE INFLUENCE OF THE EXTERNAL LOAD AMPLITUDE ON THE DEGREE OF ROTATIONAL SHELLS DEFORMATION WITH FLUID BETWEEN THEM

One of the questions that were studied in a problem of hydroelasticity [1] on the example of a structure, which consists of two coaxial cylindrical shells interacting with the help of fluid, was the question of the influence of destroying of the fluid and bubbles, which are in fluid, on the deforming of the structure under external impulse loading. Apart from this question, another one has been brought up – about the influence of the amplitude of this loading on shells deformation.

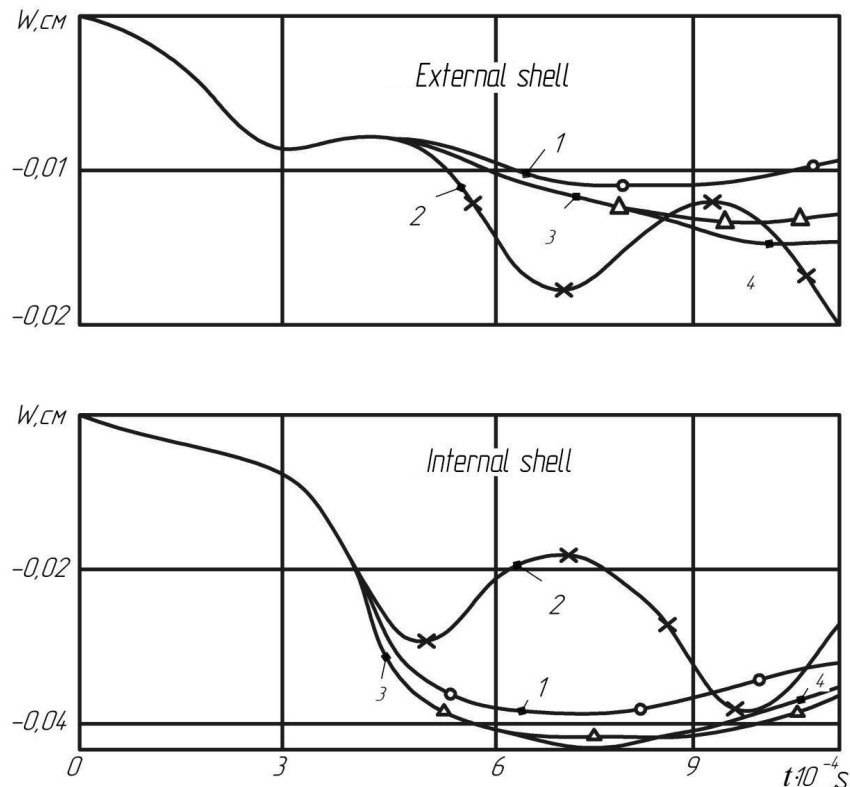


Fig.1 Sags of central points of shells ($A=1\text{MPa}$)

A series of numerical experiments have been conducted. After that, the received results were analyzed. Amplitudes of impulse loading P_n were taken to be equal to 1MPa and 5MPa , the duration of which was $\tau = 2,6 \cdot 10^{-4} \text{s}$. Let us note that calculations were also carried out for amplitudes of impulse external loading with other values. This gave the

opportunity to generalize the received results and to make some conclusions: in quite a wide range of values of functional impulse loading amplitude, the influence of cavitation, which appears, on the shells deformation is substantial. This shows that in such cases calculations should be carried out with a model, which includes the cavitation phenomenon.

In fig. 1 and fig. 2 curves, received for values $A=1\text{MPa}$ and $A=5\text{MPa}$ are analogous. This also gives the opportunity to make a conclusion: with the increase of external load amplitude, the influence of cavitation on the value of the maximum shell sag rises. So, at $A = 1\text{MPa}$ for an external shell it is 20%, and for internal – 30%, and at $A = 5\text{MPa}$ for an external shell – 32%, and for internal – 45%.

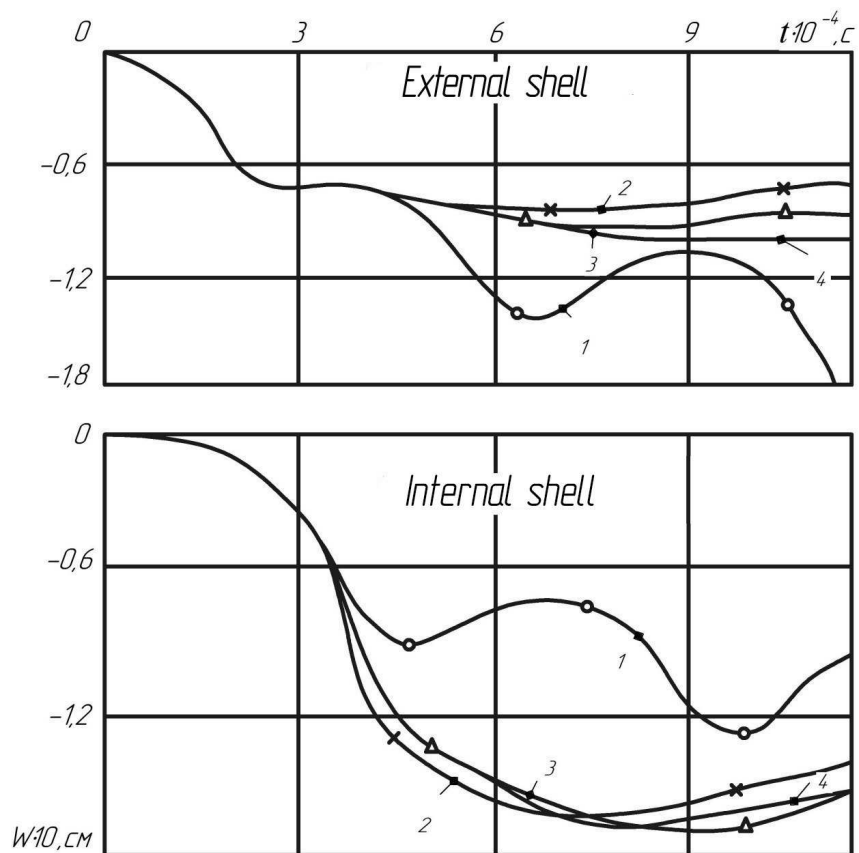


Fig 2 - Change of sags of central points of shells ($A=5\text{MPa}$)

List of references

1. Штефан Н.І., Телестакова В.В. // Динаміка співвісних циліндричних оболонок, заповнених бульбашковою рідиною / "Молодий вчений", 2018, №1(53), с.578-580; Url - <http://molodyvcheny.in.ua/files/journal/2018/1/136.pdf>

N.I. Shtefan, Doctor of philosophy, Associate Professor
(National Technical University of Ukraine
"Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv, Ukraine)
e-mail: nishtefan@gmail.com

DEFORMATION OF THE FLUID-FILLED ELASTIC STRUCTURE UNDER IMPULSE LOADING

This paper is a follow up of the article [1] in which the problem of the influence of destroying of the fluid and bubbles, which are in fluid (bubble fluid), on the deforming of the structure under external impulse loading is brought up. As an example used for the article, it is a structure, which consists of two coaxial cylindrical shells interacting with the help of fluid.

The mathematical statement of the hydroelasticity problem is given in [1]. Let us recall, that the behavior of the fluid medium was considered within three models: ideally elastic, the destructive (cavitating) and bubble fluid. The paper [2] is devoted to dynamics of a gas bubble.

A series of numerical experiments have been conducted for a hydroelasticity boundary problem, formulated in [1]. After that, the received results were analyzed. Calculations for coaxial cylindrical shells were conducted for the outer shell 0,3cm in thickness and with a radius of 100cm, for internal – 0,5cm in thickness and with a radius of 50cm, made from steel. Amplitude of an impulse loading P_n was taken to be equal to 1MPa, the duration of which was $\tau = 2,6 \cdot 10^{-4}$ s. The influence of the possible destroying of fluid on deforming of coaxial cylindrical shells using all fluid models mentioned above for calculation has been studied.

So, the change of sags of central points of external and internal shells in time with due account for a body displacement as absolutely rigid, significantly differs when using different fluid models. In fig. 1 it is shown that the curve 1, received when using model of the cavitating fluid, significantly differs from the curve 2, received from a model of ideal and elastic fluid. The curve 3 corresponds to a case of a bubble fluid. This applies to both external and internal shells. Numerous experimental studies, that were made, show that calculating of hydroelastic systems under impulse loading needs the consideration of cavitation possibility.

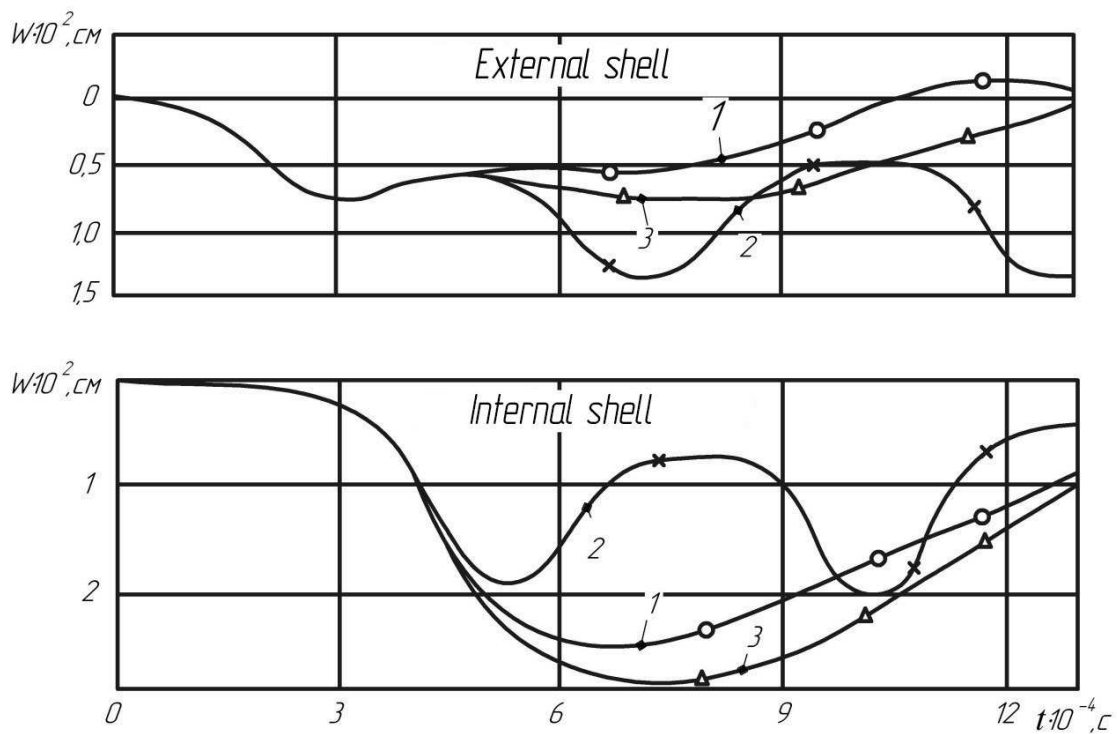


Fig.1. Change of sags of central points of external and internal shells

Omission of fluid destroying leads to considerable mistakes in definition of saga for both external and internal shells with fluid between them.

List of references

1. Штефан Н.І., Телестакова В.В.//Динаміка співвісних циліндричних оболонок, заповнених бульбашковою рідиною / "Молодий вчений", 2018, №1(53), с. 578-580; Url - <http://molodyvcheny.in.ua/files/journal/2018/1/136.pdf>

2. Штефан Н.И. //Исследование динамического поведения пузырька газа, находящегося в жидкости // 82 международная научно-техническая конференция, Беларусь, БГТУ, Минск, 2018.

УДК 51

Ю.В. Седнев, научный консультант (ООО “Грин Кемикалс”, г. Минск)

СОВРЕМЕННАЯ ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА, ЧИСЛА И ПРЕДЕЛЫ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА

Основной задачей современной теории является переход к числовой форме. Основную форму системы элементов и соединений Менделеева можно выразить в виде (Т.1):

Группа	0	1	2	3	4	5	6	7	8	7-0-2	
период1	n0	1	----->(1)							(2)	
2	2	3	4	5	6	7	8	9	(10)		
3	10	11	12	13	14	15	16	17	(18)		
4	18	19	20	21	22	23	24	25	(26)	27-29	
подп.5	(28)	(29)	30	31	32	33	34	35	36		
5	6	(36)	37	38	39	40	41	42	[43]	44	45-47
	7	(46)	(47)	48	49	50	51	52	53	54	
6	8	(54)	55	56	57	58	59	60	[61]	62	63
подпе- риод 9				64	65	66	67	68	69	70	
				71	72	73	74	75	76		77-79
	10	(78)	(79)	80	81	82	83	[84-	85	86]	
7	11	(86)	[87	88	89]	90	[91]	92	[93	94?	95-96
							97	98	99	100	101-2
	12		102	103	104	105	106	107	108		109-1
	13		112	113	114	115	116	117	118		
¹⁴⁺ высшие	(¹¹⁸ R	R ₂ O	R ₂ O ₂ =RO	R ₂ O ₃	R ₂ O ₄ =RO ₂	R ₂ O ₅	R ₂ O ₆ =RO ₃	R ₂ O ₇	R ₂ O ₈ =RO ₄		
Промеж.	In	промежуточные			H ₄ RO ₁₋₄	H ₃ RO ₁₋₄	H ₂ RO ₁₋₄	HRO ₄	RO ₁₋₃		
Предел.-	R	(RH)	(RH ₂)	(RH ₃)	RH ₄ =1 ₄ N	RH ₃ =1 ₃ N	RH ₂ =1 ₂ N	RH=1N	R=In		

Эта форма показывает ошибки рекомендуемой ИЮПАК формы без имени Менделеева, с группами РЗЭ и «актиноидов» Сиборга. Главное этой системы показывает и выбор элементов и соединений жизни. Наука фактически не знает причин выбора 20 биоэлементов и аминокислот и можно обосновать только 20 типов соединений Менделеева (вверху):

O=-2+2k/n	Cn(4n+1)	C5(21)	C4(17)	C3(13)	C2(9 Z)	Тип:	пар=2e	IV	V	VI	VII	
CnH2n+2 -2+2/n	-14/6 гексан	-12/5пентан	-10/4 бутан	-8/3 пропан	-6/2=-3 эт-ан	Мет -ан	o:N- 8=4x2e	RH4- 4	RH3- 3	H2X-2	HR- 1	
-2 CnH2n (RX/OH)	-12/6 цикло- гексан/	-10/5 пентен	-8/4 бутен	-6/3пропен	-4/2 -ен спирт (Алкоголь-	+ол	N-6=3x 2	-2	-1	0	1	
CnH2n-2 2-2/n	-10/6-ол	-8/5 изопрен	-6/4 б-диен	=-CH2Хакрил	-ДеГид- рогеназ Аль- дегид	ди-/аль	N-4=2x	0	+1	+2	+3	
CnH2n-4/2n-6:	-8/6-он	+S-> резины	-4/4=-1	2/3глицерин	0 Ас уксус(НХ	три-оат	N-2=1x	+2	+3	+4	+5	
CnH2n+1NO2 1 1131=	-6/6 бензол L117 + 14	-4/5 V89 +2 14 = 117	-2/4 Амино Масл.К	0/3A89=75+14	2/2=1G75	тетра/ х- оат	0 Nгр.:1	4	+5	+6	+7	
165 F76+89=PhA	PhX M117+32	-2/5 P117-2	-	2/11 W=lnA 204	+2/3C89+32	Общая форму- ла 12n- 1/6/S.N O2	Период 1-2	1 1.01-	6 (2.1.2	7 (...)	8 (2.1.4+-	9
-2/9Y165+ 16	0/4T89+14 +16Тре	+2/3S89+16Сеп	Q14+132	N89+43	CnH2n+N 1-2O3	х.э.3 макро	11 (3.01-	12	15	16	17	
-4/6K131+15	2/6R174	4/6H155	2/5E14+133	4/4D89+44	CnH2n+N1- 3O2-4	4 микро	19	20	25	26	27	
Ген.Код Т	U (У C4N2O2	C (Ц C4N3O	A HCN)5	G (Г =АО->	ксан->урин- моч.	элементы	29	30	42	34	53	

Каждая из 4 сторон далее продолжается в больших таблицах, как верх слева - в нефтехимии, до C30-40, хотя самые массовые продукты, около 20 объемом более 1% всех, в C1-6 (см. <http://e-cambridge.info/промышленность-и-продукты-товары-хим...>). Можно убрать столбцы между C1-2 и все названия (сам Менделеев называл спирты, кислоты 1-30-е). Ниже справа числа Z - № 1, 6 – угле-водородов, ЭО-гетероатомов 8 и 16±1 и переходных (металлов) 26±1, микроэлементов более тяжелы, макро – катионы 1-2 групп № 11+1 и 19+

$\Theta n(4n+1)$	n=6 (25)	5(21)	4(17)	3(13)	2(9 Z)-4	1(5)	V	VI	VII
$6n-2-2/n12n+2$	-14/6	-12/5	-10/4	-8/3	-6/2=-3	-4	-3	-2	-1
-2 12n, +10	-12/6=	-10/5=	-8/4=	-6/3=	-4/2=	-2	-1	0	1
-2-2/π 12n-2	-10/6	-8/5	-6/4	-4/3	-2/2=-1	0	+1	+2	+3
-2-4/n12n-4	-8/6	-6/5	-4/4=-1	-2/3	0/2	+2	+3	+4	+5
-2-6/n1131 -1=	-6/6 L131	-4/5V89 +2 14	-2/4 AMK	0/3A89=75+14	2/2=+1G75	№=4	5	6	7
F76+89= PhA	-4/6M149	-2/5P117-2	-2/11W	+2/3C89 +32	+2 12	6	7	8±	9
-2/9Y165+ 16	-2/6 0/4 T	0+2/3S89+16Cep	Q14+132	N89+43	+3 11	12	15	16±	17
-4/6K131+15	02/6R174	4/6H155	2/5E14+133	4/4D89+44	+4 19	20	25	26±	27
Gen Code DNA T	RNA U	C	A =(167) ₅	G=AO _{1..3}	29	30	34	44	53

См. на русском - сайт <http://e-cambridge.info/теория-чисел-элементов-и-соединений-...>
(тест: напишите соединения с элементами для всех групп для всех клеток из учебника.

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

**Материалы докладов 83-й научно-технической конференции
профессорско-преподавательского состава,
научных сотрудников и аспирантов
(с международным участием)**

Электронный ресурс

В авторской редакции

Компьютерная верстка:
И.К. Асмыкович, Е.О. Черник

Усл. печ. л. 4,36. Уч.-изд. л. 4,5.

Издатель и полиграфическое исполнение:
УО «Белорусский государственный технологический университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,
распространителя печатных изданий
№1/227 от 20.03.2014
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.