

**ҚАРАҒАНДЫ
УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ
ВЕСТНИК
КАРАГАНДИНСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

ISSN 0142-0843

ФИЗИКА сериясы
№ 3(67)/2012
Серия **ФИЗИКА**

Шілде–тамыз–қыркүйек
1996 жылдан бастап шығады
Жылына 4 рет шығады

Июль–август–сентябрь
Издается с 1996 года
Выходит 4 раза в год

Собственник РГП на ПХВ **Қарагандинский государственный университет
имени Е.А.Букетова**

Бас редакторы — Главный редактор

Е.К.КУБЕЕВ,

академик МАН ВШ, д-р юрид. наук, профессор

Зам. главного редактора Х.Б.Омаров, д-р техн. наук
Ответственный секретарь Г.Ю.Аманбаева, д-р филол. наук

Серияның редакция алқасы — Редакционная коллегия серии

К.К.Кусайынов,	редактор д-р техн. наук;
Т.А.Кокетайтеги,	д-р физ.-мат. наук;
Н.Х.Ибраев,	д-р физ.-мат. наук;
А.О.Саулебеков,	д-р физ.-мат. наук;
Л.М.Ким,	д-р физ.-мат. наук;
К.М.Арынгазин,	д-р пед. наук;
И.В.Брейдо,	д-р техн. наук;
С.Д.Джуманов,	д-р физ.-мат. наук (Узбекистан);
М.М.Кидибаев,	д-р физ.-мат. наук (Кыргызстан);
З.Ж.Жанабаев,	д-р физ.-мат. наук;
Г.В.Климушева,	д-р физ.-мат. наук (Украина);
С.А.Кумеков,	д-р физ.-мат. наук;
В.М.Лисицын,	д-р физ.-мат. наук (Россия);
И.А.Огородников,	д-р физ.-мат. наук (Россия);
Г.И.Пилипенко,	д-р физ.-мат. наук (Россия);
С.В.Плотников,	д-р физ.-мат. наук;
Л.А.Пунг,	д-р физ.-мат. наук (Эстония);
А.Ж.Турмухамбетов,	д-р физ.-мат. наук;
К.Ш.Шункеев,	д-р физ.-мат. наук;
Л.В.Чиркова,	ответственный секретарь канд. техн. наук, доцент

Адрес редакции: 100028, г. Караганда, ул. Университетская, 28

Тел.: (7212) 77-03-69 (внутр. 1026); факс: (7212) 77-03-84.

E-mail: vestnick_kargu@ksu.kz. Сайт: <http://www.ksu.kz>

Редакторы *Ж.Т.Нұрмұханова*
Редактор *И.Д.Рожнова*
Техн. редактор *В.В.Бутяйкин*

Издательство Карагандинского
государственного университета
им. Е.А.Букетова
100012, г. Караганда,
ул. Гоголя, 38,
тел., факс: (7212) 51-38-20
e-mail: izd_kargu@mail.ru

Басуға 26.09.2012 ж. қол қойылды.
Пішімі 60×84 1/8.
Офсеттік қағазы.
Көлемі 9,75 б.т.
Таралымы 300 дана.
Бағасы келісім бойынша.
Тапсырыс № 815.

Подписано в печать 26.09.2012 г.
Формат 60×84 1/8.
Бумага офсетная.
Объем 9,75 п.л. Тираж 300 экз.
Цена договорная. Заказ № 815.

Отпечатано в типографии
издательства КарГУ
им. Е.А.Букетова

© Карагандинский государственный университет, 2012

Зарегистрирован Министерством культуры, информации и общественного согласия Республики Казахстан.
Регистрационное свидетельство № 1131–Ж от 10.03.2000 г.

МАЗМҰНЫ

КОНДЕНСАЦИЯЛАҢҒАН КҮЙДІҢ ФИЗИКАСЫ

<i>Кудусов А.С., Карбозова А.К.</i> Бөлшектердің толқындық функциялары Даламбердің теңдеуінің шешімдері ретінде.....	3
<i>Калытка В.А.</i> Кристаллогидраттар және қабатты силикаттар нанометрлік жіктерінің диэлектрлік өтімділігінің спектрлерін кванттық-механикалық кешенді есептеу.....	9
<i>Калытка В.А.</i> Аса төмен температуралардың аралығындағы протон релаксациясының жанындағы өлшемдік эффектер.....	17
<i>Старостенков М.Д., Маркедонов А.В., Барчук А.А., Дёмина И.А., Попова Г.В.</i> Өзгертілген кристалдағы краудиондық кешендердің қозғалысы.....	23
<i>Юров В.М.</i> Таза металдардағы нанобөлшектердің балқу температурасы.....	27
<i>Юров В.М., Лауринас В.Ч., Завацкая О.Н.</i> Ионды-плазмалық композитті жабулардың трибологиялық қасиеттері.....	36

ТЕХНИКАЛЫҚ ФИЗИКА

<i>Колесников В.А., Байсагов Я.Ж.</i> Ақпараттық-өлшегіш жүйелерді энтропиялық талдау.....	44
<i>Мехтиев А.Д., Эйрих В.И., Югай В.В., Ким Ю.В., Алдошина О.В.</i> Электромеханикалық жабдықтың нақты техникалық қалыбын орнатудағы соққы диагностиканы қолдану жөнінде.....	53
<i>Мехтиев А.Д., Югай В.В., Эйрих В.И., Ким Ю.В., Суиндииков М.Б.</i> Телекоммуникация жүйелерін энергиямен қамтамасыз ету үшін күн модульдерін енгізу.....	59

ФИЗИКАНЫҢ ӘДІСТЕМЕСІ

<i>Ильина Л.Ф., Колесникова А.Н.</i> Интерактивтік технологияларды қолдана отырып, 8-ші және 10-шы сыныптарда электростатика бойынша сабақ өткізу әдісін салыстырмалы түрде талдау.....	66
<i>Кудусов А.С., Мусенова Э.К.</i> Стандартты емес есептерді шығару әдістемесі.....	72
АВТОРЛАР ТУРАЛЫ МӘЛІМЕТТЕР.....	78

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Кудусов А.С., Карбозова А.К.</i> Волновые функции частиц как решения уравнения Даламбера.....	3
<i>Калытка В.А.</i> Квантово-механический расчет спектров комплексной диэлектрической проницаемости нанометровых слоев кристаллогидратов и слоистых силикатов.....	9
<i>Калытка В.А.</i> Размерные эффекты при протонной релаксации в области сверхнизких температур.....	17
<i>Старостенков М.Д., Маркедонов А.В., Барчук А.А., Дёмина И.А., Попова Г.В.</i> Динамика краудионных комплексов в деформированном кристалле.....	23
<i>Юров В.М.</i> Температура плавления наночастиц чистых металлов.....	27
<i>Юров В.М., Лауринас В.Ч., Завацкая О.Н.</i> Трибологические свойства ионно-плазменных композиционных покрытий.....	36

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

<i>Колесников В.А., Байсагов Я.Ж.</i> Энтропийный анализ информационно-измерительных систем.....	44
<i>Мехтиев А.Д., Эйрих В.И., Югай В.В., Ким Ю.В., Алдошина О.В.</i> К вопросу использования вибродиагностики для установления фактического технического состояния электромеханического оборудования.....	53
<i>Мехтиев А.Д., Югай В.В., Эйрих В.И., Ким Ю.В., Суиндииков М.Б.</i> Внедрение солнечных модулей для энергообеспечения систем телекоммуникации.....	59

МЕТОДИКА ФИЗИКИ

<i>Ильина Л.Ф., Колесникова А.Н.</i> Сравнительный анализ методики проведения занятий по электростатике в 8-х и 10-х классах с использованием интерактивных технологий.....	66
<i>Кудусов А.С., Мусенова Э.К.</i> Методика решения нестандартных задач.....	72
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ.....	78

КОНДЕНСАЦИАЛАНҒАН КҮЙДІҢ ФИЗИКАСЫ ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 530.21

А.С.Кудусов, А.К.Карбозова

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: handy_5@mail.ru)

Волновые функции частиц как решения уравнения Даламбера

Статья посвящена исследованию методологических аспектов квантовой теории, а именно вопросу о главных принципах соотношения волновых параметров основным динамическим величинам элементарных частиц. Как может быть показано, масса покоя может рассматриваться как некоторый структурный волновой параметр. Авторами изучена возможность обобщения этого подхода на системы во внешнем силовом поле. Также для модели проверено выполнение принципа неопределенности.

Ключевые слова: волновой параметр, принцип неопределенности, уравнение Даламбера; электростатическое поле; принцип Гейзенберга; отклонение импульса.

Введение

Общепринятая Стандартная Модель является огромным достижением современной теоретической физики. Почти регулярно ее теоретические предсказания подтверждаются все новыми экспериментальными фактами. Однако при всей своей формальной согласованности она имеет существенные проблемы с интерпретацией. К примеру, толкование процесса взаимодействия как обмена бозонами выглядит механически, кроме того, не имеет предположений о природе элементарных частиц. Действительно, Стандартная Модель оперирует волновыми функциями, функциями Грина и т.д., и все эти объекты связаны с поведением частиц, но не с их внутренней структурой. Такая ситуация, вместе с некоторыми противоречиями с экспериментальными данными, стимулирует научно-исследовательскую деятельность в области квантовых основ. Вполне возможно, что корень проблемы находится в Копенгагенском толковании волновой функции.

В статье Дональда Чанга «On the wave nature of matter» предложенная модель [1] показывает, что подход к волновой функции, как к волне некоторого физического поля для свободной частицы, ведет к возможному объяснению массы покоя как нового квантового числа. Его модель основывается на трех концептуальных постулатах.

- Как и фотоны, частицы (например, электроны) не являются точечными объектами, им следует сопоставлять волновые пакеты.
- Как и фотоны, материя волн частиц является возбуждениями реального физического поля.
- Разные виды частиц — это разные моды возбуждения единого поля в вакууме.

Как показано в этой статье, модель Чанга может быть обобщена до включения электрического поля и её цилиндрические решения не нарушают принципа неопределенности.

1. Теория для свободной частицы

Волновое уравнение для электромагнитного поля имеет вид

$$A_{\mu} = 0 .$$

Решение этого уравнения может быть представлено в виде $A_{\mu} = (\varphi\psi, \vec{A}\psi)$, где φ и \vec{A} образуют некоторый четыре-вектор относительно преобразований Лоренца. Таким образом, мы получаем уравнение

$$\psi = 0 .$$

В цилиндрической системе отсчета имеем

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = 0. \quad (1)$$

Выполняем разделение переменных

$$\Psi(r, \varphi, z, t) = \Psi_L(z, t) \Psi_T(r, \varphi),$$

где мы обозначим буквой L продольную составляющую функции Ψ и буквой T — поперечную. Таким образом, наряду с (1) мы будем иметь следующую систему двух независимых уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi_L}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \Psi_L}{\partial z^2} &= -l^2 \Psi_L, \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Psi_T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial \varphi^2} &= -l^2 \Psi_T, \end{aligned} \quad (2)$$

где l^2 — новый параметр разделения переменных.

Очевидно, что первое уравнение можно интерпретировать как уравнение Клейна-Гордона для свободной частицы, движущейся вдоль оси, если мы примем

$$l^2 = m^2 c^2 / \hbar^2.$$

Решением этого уравнения является обычная плоская волна

$$\Psi_L \propto \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_z z - Et)\right).$$

Второе уравнение системы (2), после разделения переменных $\Psi_T(r, \varphi) = \psi_r(r) \psi_\varphi(\varphi)$, приводит нас к следующему выражению для радиальной части:

$$\frac{\partial^2 \psi_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi_r}{\partial r} - \left(l^2 + \frac{k^2}{r^2} \right) \psi_r = 0, \quad (3)$$

где $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Угловая часть имеет очевидное решение в виде

$$\psi_\varphi \propto e^{ik\varphi}.$$

Нетрудно видеть, что решение уравнения (3) должно иметь вид цилиндрических функций

$$\psi_r = C_1 J_n(lr) + C_2 N_n(lr),$$

где C — произвольные постоянные и J_n, N_n — функции Бесселя. Следовательно, полное решение уравнения (1) имеет форму

$$\Psi(r, \varphi, z) = (C_1 J_n(lr) + C_2 N_n(lr)) \exp(ik\varphi) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_z z - Et)\right). \quad (4)$$

Детальный анализ этого решения содержится в [1].

2. Включение внешнего электромагнитного поля

Для включения в рассмотрение электромагнитного поля достаточно заменить обычные производные по координатам согласно стандартной процедуре:

$$D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu, \quad (5)$$

где A_μ образует потенциальный четыре-вектор. Итак, обычный оператор Даламбера может быть заменен конструкцией $g^{\mu\nu} D_\mu D_\nu$, который здесь назван обобщенным оператором Даламбера. В соответствии с предыдущей схемой решения для свободной частицы выберем уравнение для волновой функции в той же форме:

$$g^{\mu\nu} D_\mu D_\nu \Psi = 0.$$

После замены (5) мы будем иметь

$$g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \Psi + ieg^{\mu\nu} (\partial_\mu A_\nu) \Psi + ieg^{\mu\nu} A_\nu \partial_\mu \Psi + g^{\mu\nu} ie A_\mu \partial_\nu \Psi - g^{\mu\nu} e^2 A_\mu A_\nu \Psi = 0. \quad (6)$$

Для простоты рассмотрим однородное электрическое поле, направленное вдоль оси z :

$$A_\mu = (\varphi(z), 0, 0, 0).$$

Включая во внимание уравнение (6) в цилиндрической системе координат $\psi = \psi(r, \alpha, z, t)$, получим:

$$\frac{1}{c^2} \partial_t^2 \psi - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + 2i \frac{e}{c} \phi \partial_t \psi - e^2 \phi^2 \psi = 0.$$

После разделения переменных $\psi = \Psi(z, t) \phi(r, \alpha)$ мы будем иметь следующий набор независимых уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + 2i \frac{e}{c} \phi \frac{\partial \Psi}{\partial t} - e^2 \phi^2 \Psi &= -l^2 \Psi, \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \alpha^2} &= -l^2 \phi. \end{aligned} \quad (7)$$

Последнее уравнение не содержит никакой информации о потенциале, т.е. угловая часть новой волновой функции остается прежней. Примем во внимание, что данная часть в модели Чанга содержит информацию о внутренних свойствах частиц, что является очень важным фактом для модели.

Нетрудно видеть, что первое уравнение из системы (7) имеет тот же вид, как и для плоской волны, распространяющейся вдоль оси, которая также является решением уравнения Клейна-Гордона,

$$D_\mu D^\mu \Psi = -\frac{m^2 c^2}{\hbar} \Psi,$$

где

$$\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = l^2.$$

Таким образом, результат свидетельствует о применимости модели во внешнем электростатическом поле.

3. Проверка принципа неопределенности

Теперь мы намерены проверить выполнение принципа неопределенности для цилиндрической волновой функции вида (4). Для простоты ограничимся случаем $n = 0$ и $C_2 = 0$, тогда

$$\Psi_0 = C_1 J_0(r l) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_z z - E t) \right]. \quad (8)$$

Обычное условие нормировки $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dV = 1$ является условием на коэффициент C_1 :

$$|C_1|^2 \int J_0^2(r l) r dr d\alpha dz = 1.$$

Нетрудно видеть, что это выражение стремится к бесконечности в связи с характерной зависимостью (8) от переменной z . Но интеграл по радиальной переменной также расходится. Действительно, в силу свойства цилиндрических функций [2]

$$\int x [z_p(\alpha x)]^2 dx = \frac{x^2}{2} \{ [z_p(\alpha x)]^2 - z_{p-1}(\alpha x) z_{p+1}(\alpha x) \},$$

мы получаем

$$\int r [J_0(lr)]^2 dr = \frac{r^2}{2} \{ [J_0(lr)]^2 - J_{-1}(lr) J_1(lr) \} + const,$$

где

$$J_{-n} = (-1)^n J_n \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Таким образом, для определенного интеграла получим выражение

$$\int_0^\infty r [J_0(lr)]^2 dr = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r^2}{2} \{ J_0^2(lr) \} + J_1^2(lr) - \lim_{r \rightarrow 0} \frac{r^2}{2} \{ J_0^2(lr) + J_1^2(lr) \}.$$

В асимптотическом приближении, как известно, может быть записано:

$$J_0(x) \Big|_{x \rightarrow 0} \approx 1 - \frac{x^2}{n}, \quad J_n(x) \Big|_{x \rightarrow 0} \approx \frac{x^n}{2^n n!} \Rightarrow J_1(x) \Big|_{x \rightarrow 0} \approx \frac{x}{2}.$$

Это значит, что

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{r^2}{2} \{J_0^2(lr) + J_1^2(lr)\} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{r^2}{2} \left\{ \left(1 - \frac{(lr)^2}{n} \right) + \left(\frac{lr}{2} \right)^2 \right\} = 0.$$

И для другого предела $|x| \gg 1$ мы имеем

$$J_p(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos \left(x - \frac{p\pi}{2} - \frac{\pi}{n} \right).$$

Итак,

$$J_0(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos \left(x - \frac{\pi}{n} \right) \text{ и } J_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos \left(x - \frac{3\pi}{n} \right) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin \left(x - \frac{\pi}{n} \right).$$

Тогда

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r^2}{2} \{J_0^2(lr) + J_1^2(lr)\} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r^2}{2} \left\{ \frac{2}{\pi lr} \cos^2 \left(lr - \frac{\pi}{n} \right) + \frac{2}{\pi lr} \sin^2 \left(lr - \frac{\pi}{n} \right) \right\} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r}{\pi l}.$$

Следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} J_0^2(r) r dr d\varphi = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{2r}{l}, \quad (9)$$

т.е. нормировочный множитель стремится к бесконечности.

Давайте теперь проверим выполнение принципа Гейзенберга вдоль оси y :

$$\langle \Delta p_y^2 \rangle \langle \Delta y^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Для среднеквадратичного отклонения координаты имеем выражение вида

$$\langle \Delta y^2 \rangle = \int \psi^* (y - \langle y \rangle)^2 \psi dV.$$

В связи с осевой симметрией системы $\langle y \rangle = 0$ и принимая во внимание $y = r \sin \varphi$, мы получаем:

$$\langle \Delta y^2 \rangle = \int \psi^* \psi r^2 \sin^2 \varphi dV.$$

После замены

$$\Psi_0 = C_1 J_0(r) e^{\frac{i}{\hbar}(p_z z - Et)}$$

мы получаем, что

$$\begin{aligned} \langle \Delta y^2 \rangle &= \int |C_1|^2 J_0^2(r) r^2 \sin^2 \varphi r dr d\varphi dz = \int_{-\infty}^{\infty} |C_1|^2 dz \int_0^{\infty} r^3 J_0^2(r) dr \int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi d\varphi = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |C_1|^2 dz \int_0^{\infty} r^3 J_0^2(r) dr. \end{aligned}$$

Это выражение, очевидно, стремится к бесконечности быстрее, чем интеграл (9). Теперь давайте рассмотрим среднеквадратичное отклонение импульса:

$$\langle \Delta p_y^2 \rangle = \int \psi^* (\hat{p}_y - \langle p_y \rangle)^2 \psi dV.$$

Также вследствие цилиндрической симметрии $\langle p_y \rangle = 0$.

Следовательно,

$$\langle \Delta p_y^2 \rangle = \int \psi^* \hat{p}_y^2 \psi dV = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} dV.$$

Давайте рассмотрим отдельно вторую производную:

$$\frac{\partial^2 J_0(r)}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{dJ_0(r)}{dr} \frac{\partial(r)}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial J_0(r)}{\partial(r)} l \frac{\partial \sqrt{x^2 + y^2}}{\partial y} \right) =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial J_0(rl)}{\partial(rl)} \frac{1}{2} \frac{2y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial J_0(lr)}{\partial r} \right) \frac{y}{r} + \frac{\partial J_0(lr)}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{y}{r} \right) = \\
 &\quad \frac{\partial^2 J_0(lr)}{\partial r^2} \frac{1}{2} \frac{2y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \frac{y}{r} + \frac{\partial J_0(lr)}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{\sqrt{x^2 + y^2}} \frac{r - y^2}{r^2} = \\
 &= \frac{\partial^2 J_0(rl)}{\partial r^2} \frac{y^2}{r^2} + \frac{\partial J_0(lr)}{\partial r} \frac{r^2 - y^2}{r^3} = \frac{\partial^2 J_0(lr)}{\partial r^2} \frac{y^2}{r^2} + \frac{\partial J_0(lr)}{\partial r} \frac{x^2}{r^3}.
 \end{aligned}$$

Вследствие связи между декартовыми и цилиндрическими координатами ($x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$) получаем

$$\frac{\partial^2 J_0(lr)}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 J_0(lr)}{\partial r^2} \cos^2 \varphi + \frac{\partial J_0(lr)}{\partial r} \frac{\sin^2 \varphi}{r^2}.$$

Так как

$$\frac{dJ_0(z)}{dz} = J_{-1}(z) = -J_1(z),$$

мы получим

$$\frac{\partial J_0(z)}{\partial r} = -lJ_1(lr).$$

И вследствие уже известного выражения

$$\frac{d}{dz} z^n J_n(z) = z^n J_{n-1}(z)$$

окончательно получим

$$\frac{\partial J_1(lr)}{\partial r} = l \frac{\partial}{\partial lr} \left(\frac{J_1(lr)}{lr} lr \right) = l \frac{\partial}{\partial lr} \frac{(J_1(lr)lr) - J_1(lr)lr}{(lr)^2} = lJ_0(lr) - \frac{1}{r} J_1(lr)$$

и

$$\frac{\partial^2 J_0(rl)}{\partial r^2} = -l \frac{\partial}{\partial r} J_1(lr) = \frac{l}{r} J_1(lr) - l^2 J_0(lr).$$

Поэтому для второй производной вдоль оси y будем иметь

$$\frac{\partial^2 J_0(rl)}{\partial y^2} = \left\{ \frac{l}{r} J_1(lr) - l^2 J_0(lr) \right\} \cos^2 \varphi - \frac{l}{r} J_1(lr) \sin^2 \varphi = \frac{l}{r} J_1(lr) \cos 2\varphi - l^2 J_0(lr) \cos^2 \varphi.$$

И в итоге для среднего квадратичного отклонения импульса мы получаем выражение

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta P_y^2 \rangle &= -\hbar^2 \int |C_1|^2 J_0(lr) \frac{\partial^2 J_0(lr)}{\partial y^2} r dr d\varphi dz = \\
 &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} |C_1|^2 dz \int \left\{ J_0(lr) \frac{l}{r} J_1(lr) \cos 2\varphi - l^2 J_0(lr) \cos^2 \varphi \right\} d\varphi.
 \end{aligned}$$

После интегрирования по φ будем иметь

$$\langle \Delta P_y^2 \rangle = \hbar^2 l^2 \frac{1}{2} \int |C_1|^2 dz J_0^2(lr) r dr.$$

Принимая во внимание условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^* \Psi_0 dV = |C_1|^2 \int J_0^2(lr) r dr d\varphi dz = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |C_1|^2 dz \int_0^{\infty} J_0^2(lr) r dr = 1,$$

мы, наконец, можем записать:

$$\langle \Delta p_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2 l^2}{4\pi}.$$

Ненулевой результат означает, что принцип Гейзенберга не нарушается в исследуемой модели. Действительно, поскольку среднеквадратичное отклонение вдоль координаты стремится к бесконечности, то выражение $\langle \Delta p_y^2 \rangle \langle \Delta y^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$ также стремится к бесконечности.

References

- 1 *Chang D.C.* On the wave nature of matter // arXiv: physics/0505010. — 2005. — 18 p.
- 2 *Gradshteyn, Ryzhik I.M.* Tables of integrals, series and derivatives. — Moscow: State publishing of physical and mathematical literature, 1963. — 1100 p.

А.С.Кудусов, А.К.Карбозова

Бөлшектердің толқындық функциялары Даламбердің тендеуінің шешімдері ретінде

Мақала кванттық теорияның әдіснамалық аспектілерін зерттеуге арналған. Нақтырақ айтсақ, элементар бөлшектердің негізгі динамикалық өлшемдерінің толқындық параметрлерінің арақатынасы принциптері мәселелері зерттелді. Тыныштық массасы кейбір құрылымдық толқындық параметр болып қарастырылуы мүмкін. Сондай-ақ бұл амалдың сыртқы күштер өрісімен жалпылау мүмкіндігі қарастырылып, модель үшін анықталмағандық принципінің орындалуы тексерілді.

A.S.Kudusov

Particle wave functions as solutions of the D'Alembert equation

This work is devoted to research of methodological aspects of the quantum theory. Namely, the question about the main principles of a correlation between the common dynamical quantities of elementary particles with the corresponding wave parameters is investigated in the paper. It can be shown that the particle rest mass can be regarded as some structural wave parameter. In the present work the possibility of generalization this approach on systems in external field is investigated. Also the implementation of uncertainty principle to the model is verified.

В.А.Калытка

Международная бизнес-академия, Караганда (E-mail: kalytka@mail.ru)

Квантово-механический расчет спектров комплексной диэлектрической проницаемости нанометровых слоев кристаллогидратов и слоистых силикатов

Построена квантовая теория миграционной поляризации в конденсированных средах в переменном электрическом поле в области низких и сверхнизких температур при блокирующих электродах. На основании совместного решения уравнения Лиувилля, стационарного уравнения Шредингера и операторного уравнения Пуассона, без учета протон-протонного и протон-фононного взаимодействия, с помощью квантовой статистики Больцмана вычислен нестационарный статистический оператор для ансамбля невзаимодействующих протонов, двигающихся в одномерном поле многоямного потенциального рельефа прямоугольной формы. С помощью матрицы плотности рассчитаны частотные спектры комплексной диэлектрической проницаемости слоистых кристаллов при температурах жидкого гелия.

Ключевые слова: квантовая теория миграционной поляризации, низкие и сверхнизкие температуры, протон-протонное взаимодействие, протон-фононное взаимодействие, блокирующие электроды, многоямный потенциальный рельеф, нестационарный статистический оператор, квантовая статистика Больцмана, стационарное уравнение Шредингера, комплексная диэлектрическая проницаемость, нанометровые слои кристаллогидратов и слоистых силикатов.

Введение

Миграционная поляризация в кристаллогидратах и слоистых кристаллах (слоды, тальк), обусловленная прыжковой диффузией протонов по водородным связям, в направлении внешнего электрического поля, в области низких температур (вблизи азотной) определяется в основном туннелированием протонов внутри и между ионами анионной подрешетки [1–3]. Кинетическая теория протонной релаксации позволила на основании совместного решения уравнения Фоккера-Планка в квадратичном и уравнения Пуассона в линейном приближении по внешнему полю построить нелинейную теорию токов термостимулированной деполяризации и на этой основе вычислить параметры релаксаторов в кристаллах халькантита и флогопита [1, 2]. Исследование механизма диэлектрической релаксации на основании строгого решения уравнения Лиувилля для протонной подсистемы следует из выявленных квантово теорией миграционной поляризации размерных эффектов в нанометровых слоях сложных кристаллов с водородными связями [2].

1. Статистический оператор ансамбля невзаимодействующих протонов при миграционной поляризации в конденсированных средах

В области низких температур из-за значительной прозрачности потенциального барьера увеличивается ширина расщепления уровней энергии изолированной потенциальной ямы, энергетический спектр протонов становится квазидискретным, и исследование миграционной поляризации должно строиться в соответствии с квантовой статистикой Больцмана для протонов распределенных по уровням энергии квазидискретного спектра в поле многоямного кристаллического потенциального рельефа прямоугольной формы [1, 3].

Ранее нами были рассчитаны спектры токов термодеполяризации с помощью стационарной матрицы плотности для невзаимодействующих протонов, мигрирующих в поле кристаллического потенциального рельефа, возмущенного электрическим полем [3] разрушающего электростатического заряда, что позволило выявить в кристаллических слоях нанометровой крупности аномальные эффекты, обусловленные смещением максимума плотности ТСТД в область низких температур с уменьшением толщины слоя [3]. Расчет нестационарной составляющей статистического оператора производился в квазиклассическом приближении на основании совместного решения операторного уравнения Фоккера-Планка и уравнения Пуассона для модели блокирующих электродов [6].

В области сверхнизких температур, при толщинах слоя $4 \div 10$ нм из-за значительной проницаемости потенциального барьера на фоне малой концентрации релаксирующих протонов роль квантовых эффектов настолько велика, что квазиклассического подхода к оценке неравновесной компонен-

ты матрицы плотности недостаточно, и исследование протонной релаксации вблизи абсолютного нуля температур должно строиться путём строгого решения уравнения Лиувилля совместно с уравнением Шредингера и операторным уравнением Пуассона для модели многоямного кристаллического потенциального рельефа возмущенного электрическим полем разрушающего электретоного заряда.

Статистический оператор протонной подсистемы в поле кристаллического потенциального рельефа с барьерами прямоугольной формы с учетом электрического поля электретоного заряда будем строить без учета протон-протонного и протон-фононного взаимодействия, на основании нестационарного уравнения Лиувилля [3]:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{np}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{np}; \hat{H}_{np}] = 0, \quad (1)$$

где $\hat{H}_{np} = \hat{H}_{np}^{(0)} + \delta \hat{W}_{эл}$ — возмущенный полем электретоного заряда гамильтониан протонов; $\hat{H}_{np}^{(0)}$ — невозмущенный гамильтониан протонов; $\delta \hat{W}_{эл}$ — возмущённая поправка; $\hat{\rho}_{np} = \hat{\rho}_{np}^{(0)} + \delta \hat{\rho}_{np}$ — неравновесный статистический оператор протонов; $\delta \hat{\rho}_{np}$ — неравновесная поправка к невозмущенному статистическому оператору [3]:

$$\hat{\rho}_{np}^{(0)} = N_{II} \left\{ \sum_{n=0}^{N_{max}} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) \right\}^{-1} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right). \quad (2)$$

Воздействуем операторами $\frac{\partial \hat{\rho}_{np}}{\partial t}$ и $\frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{np}; \hat{H}_{np}]$ на волновую функцию протона в n -м стационарном состоянии, из (1) получим

$$\frac{\partial (\hat{\rho}_{np} \psi_n)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{np}; \hat{H}_{np}] \psi_n = 0, \quad (3)$$

откуда

$$\frac{\partial (\hat{\rho}_{np} \psi_n)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \hat{\rho}_{np} (\hat{H}_{np} \psi_n) - \hat{H}_{np} (\hat{\rho}_{np} \psi_n) \right\} \psi_n = 0. \quad (4)$$

Методами теории возмущений

$$\hat{H}_{np} = \hat{H}_{np}^{(0)} + \delta \hat{W}, \quad (5)$$

$$\hat{\rho}_{np} = \hat{\rho}_{np}^{(0)} + \delta \hat{\rho}_{np}, \quad (6)$$

с учетом стационарного уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{np}^{(0)}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{np}^{(0)}; \hat{H}_{np}^{(0)}] = 0, \quad (7)$$

исключая члены $\delta \hat{\rho}_{np} (\delta \hat{W}_{эл} \psi_n)$, $\delta \hat{W}_{эл} (\delta \hat{\rho}_{np} \psi_n)$, из (4) имеем:

$$\frac{\partial (\delta \hat{\rho}_{np} \psi_n)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \delta \hat{\rho}_{np} (\hat{H}_{np}^{(0)} \psi_n) - \hat{H}_{np}^{(0)} (\delta \hat{\rho}_{np} \psi_n) + \hat{\rho}_{np}^{(0)} (\delta \hat{W}_{эл} \psi_n) - \delta \hat{W}_{эл} (\hat{\rho}_{np}^{(0)} \psi_n) \right\} = 0. \quad (8)$$

На основании (8)

$$\frac{\partial (\psi_n^* \delta \hat{\rho}_{np} \psi_n)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \psi_n^* \delta \hat{\rho}_{np} (\hat{H}_{np}^{(0)} \psi_n) - \psi_n^* \hat{H}_{np}^{(0)} (\delta \hat{\rho}_{np} \psi_n) + \psi_n^* \hat{\rho}_{np}^{(0)} (\delta \hat{W}_{эл} \psi_n) - \psi_n^* \delta \hat{W}_{эл} (\hat{\rho}_{np}^{(0)} \psi_n) \right\} = 0, \quad (9)$$

замечая, что

$$\hat{H}_{np}^{(0)} \psi_n = E_n \psi_n, \quad (10)$$

$$\hat{\rho}_{np}^{(0)} (\delta \hat{W}_{эл} \psi_n) - \delta \hat{W}_{эл} (\hat{\rho}_{np}^{(0)} \psi_n) = [\hat{\rho}_{np}^{(0)}; \delta \hat{W}_{эл}] \psi_n, \quad (11)$$

получим:

$$\frac{\partial (\psi_n^* \delta \hat{\rho}_{np} \psi_n)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \psi_n^* \delta \hat{\rho}_{np} (E_n \psi_n) - \psi_n^* \hat{H}_{np}^{(0)} (\delta \hat{\rho}_{np} \psi_n) + \psi_n^* [\hat{\rho}_{np}^{(0)}; \delta \hat{W}_{эл}] \psi_n \right\} = 0. \quad (12)$$

Вводя в (12) оператор

$$\hat{u}_n(x, t) = \delta \hat{\rho}_{np} \psi_n(x, t), \quad (13)$$

приходим к уравнению:

$$\frac{\partial \hat{u}_n}{\partial t} + \frac{E_n}{i\hbar} \hat{u}_n - \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_{np}^{(0)} \hat{u}_n + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{np}^{(0)}; \delta \hat{W}_{эл}] \psi_n = 0. \quad (14)$$

Невозмущенный Гамильтониан протона [3]

$$\hat{H}_{np}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{W}(x) \quad (15)$$

для модели прямоугольного рельефа в области потенциальной ямы

$$\hat{H}_{np}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (16)$$

и в области барьера

$$\hat{H}_{np}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0, \quad (17)$$

где U_0 — высота потенциального барьера.

Согласно (14) с учетом (16), (17) запишем:

$$\frac{\partial \hat{u}_{ns}}{\partial t} + \frac{E_n}{i\hbar} \hat{u}_{ns} + \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial^2 (\hat{u}_{ns})}{\partial x^2} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{np}^{(0)}; \delta \hat{W}_{эл,s}] \tilde{\psi}_{ns} = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \hat{u}_{ns}}{\partial t} + \frac{E_n - U_0}{i\hbar} \hat{u}_{ns} + \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial^2 (\hat{u}_{ns})}{\partial x^2} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{np}^{(0)}; \delta \hat{W}_{эл,s}] \hat{\psi}_{ns} = 0, \quad (19)$$

а затем, подставляя (11) в (18), (19), имеем:

$$\frac{\partial^2 \hat{u}_{ns}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}}{\partial t} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \hat{u}_{ns} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_{эл,s} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_{эл,s} \tilde{\psi}_{ns} \right) \right\}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 \hat{u}_{ns}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}}{\partial t} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \hat{u}_{ns} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_{эл,s} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \hat{\psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_{эл,s} \hat{\psi}_{ns} \right) \right\} + \frac{2mU_0}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}. \quad (21)$$

Согласно (12), суммируя по уровням энергии невозмущенного спектра

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^* \delta \hat{\rho}_{np} \psi_n \right) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ E_n (\psi_n^* \delta \hat{\rho}_{np} \psi_n) - \psi_n^* \hat{H}_{np}^{(0)} (\delta \hat{\rho}_{np} \psi_n) + \psi_n^* [\hat{\rho}_{np}^{(0)}; \delta \hat{W}_{эл}] \psi_n \right\} = 0, \quad (22)$$

с учетом оператора избыточной концентрации протонов

$$\delta \hat{N}_{np} = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^* \delta \hat{\rho}_{np} \psi_n, \quad (23)$$

приходим к уравнению неразрывности:

$$q \frac{\partial (\delta \hat{N}_{np})}{\partial t} + \text{div} \hat{j}_{np} = 0, \quad (24)$$

а для одномерной модели:

$$q \frac{\partial (\delta \hat{N}_{np})}{\partial t} + \frac{\partial \hat{j}_{np}}{\partial x} = 0, \quad (25)$$

откуда находим плотность тока при электропереносе протонов

$$\hat{j}_{np}(x;t) = -q \frac{\partial}{\partial t} \int \delta \hat{N}_{np}(x;t) dx + \hat{j}_{np,0}(t). \quad (26)$$

В (26) под $\int \delta \hat{N}_{np}(x;t) dx$ имеем в виду первообразную функции $\delta \hat{N}_{np}(x;t)$.

Интегрируя (24) по толщине кристалла и замечая что $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \delta \hat{N}_{np} dV = 0$, приходим к условию:

$$\int_V \text{div} \hat{j}_{np} dV = 0, \quad (27)$$

которое для одномерной модели

$$\int_0^d \frac{\partial \hat{j}_{np}}{\partial x} dx = 0$$

даёт

$$\hat{j}_{np}(d;t) - \hat{j}_{np}(0;t) = 0, \quad (28)$$

а при блокирующих электродах:

$$\hat{j}_{np}(0;t) = 0, \quad (29)$$

$$\hat{j}_{np}(d;t) = 0. \quad (30)$$

Подстановка (26) в (29) даёт

$$\hat{j}_{np,0} = q \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int \delta \hat{N}_{np}(x;t) dx \Big|_{x=0} \right\}. \quad (31)$$

Тогда, в силу (26), (31)

$$\hat{j}_{np}(x;t) = q \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int \delta \hat{N}_{np}(x;t) dx \Big|_{x=0} - \int \delta \hat{N}_{np}(x;t) dx \right\}, \quad (32)$$

с учетом (13), (23) получим

$$\hat{j}_{np}(x;t) = q \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \left[\sum_{n=0}^{\infty} \int \psi_n^* \hat{u}_n(x;t) dx \right] \Big|_{x=0} - \sum_{n=0}^{\infty} \int \psi_n^* \hat{u}_n(x;t) dx \right\}, \quad (33)$$

а из (30) и (33) соответственно

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \left[\sum_{n=0}^{\infty} \int \psi_n^* \hat{u}_n(x;t) dx \right] \Big|_{x=0} - \sum_{n=0}^{\infty} \int \psi_n^* \hat{u}_n(x;t) dx \Big|_{x=d} \right\} = 0. \quad (34)$$

В начальный момент времени поляризация отсутствует:

$$\delta \hat{\rho}_{np}(x;0) = 0, \quad (35)$$

поэтому из (13), (35) приходим к начальному условию, к (14)

$$\hat{u}_n(x;0) = 0 \quad (36)$$

и к (20), (21)

$$\hat{u}_{ns}(x;0) = 0, \quad \hat{u}'_{ns}(x;0) = 0. \quad (37)$$

Вычисление возмущающей поправки к кристаллическому потенциалу выполним по формуле

$$\delta \hat{W}(x;t) = -q \int \hat{E}(x;t) dx + \hat{w}(t), \quad (38)$$

где $\int \hat{E}(x;t) dx$ есть первообразная к напряженности электрического поля, $\hat{w}(t)$ — временной оператор, вычисляемый из условия нормировки

$$\delta \hat{W}(d;t) = 0. \quad (39)$$

Уравнение Пуассона в операторной форме

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial x} = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \delta \hat{N}_{np}(x;t) \quad (40)$$

решаем с учётом граничного условия

$$\int_0^d \hat{E}(x;t) dx = V_0 \exp(i\omega t), \quad (41)$$

где V_0 , ω соответственно амплитуда и частота внешнего поля.

Из (40) имеем

$$\hat{E}(x;t) = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \int \delta \hat{N}_{np}(x;t) dx + \hat{e}(t), \quad (42)$$

где $\hat{e}(t)$ — временной оператор, вычисляемый с помощью (41).

В отличие от квазиклассического метода, когда функция $E(x;t)$ была неразрывной в области $0 \leq x \leq d$, при расчёте оператора напряженности электрического поля нужно учитывать, что функция

$\hat{E}(x;t)$ — кусочно-непрерывная и удовлетворяет условиям сшивки на границах s -й ямы и s -го барьера прямоугольного рельефа

$$\hat{E}_s(\tilde{x}_s^+;t) = \hat{E}_s(\tilde{x}_s^-;t), \quad (43)$$

где $\tilde{x}_s^+ = (s-1)(a+\delta_0) + a$, a — ширина потенциальной ямы; δ_0 — ширина потенциального барьера. На границах s -го барьера и $s+1$ -й ямы

$$\hat{E}_s(\tilde{x}_s^+;t) = \hat{E}_{s+1}(\tilde{x}_s^+;t), \quad (44)$$

в (44) $\tilde{x}_s^+ = s(a+\delta_0)$.

На основании (42) пишем оператор напряженности электрического поля в области s -й ямы

$$\hat{E}_s(x;t) = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx + \hat{e}_s(t) \quad (45)$$

и s -го барьера

$$\hat{E}_s(x;t) = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx + \hat{e}_s(t). \quad (46)$$

Применяя (43)–(46) к случаю $s = 1$, имеем:

$$\begin{aligned} \hat{e}_2(t) = \hat{e}_1(t) + \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \left\{ \int \delta \hat{N}_{np,1}(x;t) dx \Big|_{x=a} + \int \delta \hat{N}_{np,2}(x;t) dx \Big|_{x=a+\delta_0} - \int \delta \hat{N}_{np,1}(x;t) dx \Big|_{x=a} - \right. \\ \left. - \int \delta \hat{N}_{np,1}(x;t) dx \Big|_{x=a+\delta_0} \right\} \quad (47) \end{aligned}$$

и

$$\hat{e}_{s+1}(t) = \hat{e}_s(t) + \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \left\{ \int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx \Big|_{x=\tilde{x}_s^+} + \int \delta \hat{N}_{np,s+1}(x;t) dx \Big|_{x=\tilde{x}_s^+} - \int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx \Big|_{x=\tilde{x}_s^+} - \int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx \Big|_{x=\tilde{x}_s^+} \right\}, \quad (48)$$

$$\hat{e}_{s+1}(t) = \hat{e}_{s+1}(t) + \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \left\{ \int \delta \hat{N}_{np,s+1}(x;t) dx \Big|_{x=\tilde{x}_{s+1}^+} - \int \delta \hat{N}_{np,s+1}(x;t) dx \Big|_{x=\tilde{x}_{s+1}^+} \right\}, \quad (49)$$

где, принимая $s=1, 2, 3, \dots, N_g-1$, строим рекуррентные соотношения между коэффициентами $\hat{e}_s(t)$, $\hat{e}_{s+1}(t)$ и $\hat{e}_1(t)$, определяемым после подстановки (41) в (42) с учетом (48), (49):

$$\begin{aligned} \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \left\{ \sum_{s=1}^{N_g-1} \int_{(s-1)(a+\delta_0)+a}^{s(a+\delta_0)} \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx + \sum_{s=1}^{N_g} \int_{(s-1)(a+\delta_0)}^{(s-1)(a+\delta_0)+a} \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx \right\} + \delta_0 \sum_{s=1}^{N_g-1} \hat{e}_s(t) + a \sum_{s=1}^{N_g} \hat{e}_s(t) = \\ = V_0 \exp(i\omega t), \quad (50) \end{aligned}$$

причем при блокирующих электродах

$$\hat{e}_{N_g}(t) = 0. \quad (51)$$

Вычисление потенциальной энергии протона в электрическом поле проведем с помощью (38), с учетом кусочно-непрерывности оператора $\delta \hat{W}_{эл}$.

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = -q \int \hat{E}_s(x;t) dx + \hat{w}_s(t) \quad (52)$$

и s -го барьера

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = -q \int \hat{E}_s(x;t) dx + \hat{w}_s(t). \quad (53)$$

Воспользовавшись условиями сшивки операторов потенциальной энергии на границах s -й ямы, s -го барьера и s -го барьера, $s+1$ -й ямы

$$\delta \hat{W}_s(\tilde{x}_s^+;t) = \delta \hat{W}_s(\tilde{x}_s^-;t), \quad (54)$$

$$\delta \hat{W}_s(\tilde{x}_s^+;t) = \delta \hat{W}_{s+1}(\tilde{x}_s^+;t), \quad (55)$$

согласно (52), (53)

$$\hat{w}_2(t) = \hat{w}_1(t) - q \left\{ \int \hat{E}_1(x;t) dx \Big|_{x=a} + \int \hat{E}_2(x;t) dx \Big|_{x=a+\delta_0} - \int \hat{E}_1(x;t) dx \Big|_{x=a} - \int \hat{E}_1(x;t) dx \Big|_{x=a+\delta_0} \right\}, \quad (56)$$

$$\hat{w}_{s+1}(t) = \hat{w}_s(t) - q \left\{ \int \hat{E}_s(x;t) dx \Big|_{x=\bar{x}_s^+} + \int \hat{E}_{s+1}(x;t) dx \Big|_{x=\bar{x}_s^+} - \int \hat{E}_s(x;t) dx \Big|_{x=\bar{x}_s^+} - \int \hat{E}_s(x;t) dx \Big|_{x=\bar{x}_s^+} \right\}, \quad (57)$$

$$\hat{w}_{s+1}(t) = \hat{w}_{s+1}(t) - q \left\{ \int \hat{E}_{s+1}(x;t) dx \Big|_{x=\bar{x}_{s+1}^+} - \int \hat{E}_{s+1}(x;t) dx \Big|_{x=\bar{x}_{s+1}^+} \right\}. \quad (58)$$

После подстановки (45), (46) в (52), (53) получим

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = -\frac{q^2}{\varepsilon_0 \varepsilon} \int \left(\int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx \right) dx - q \hat{e}_s(t) \hat{x} + \hat{w}_s(t), \quad (59)$$

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = -\frac{q^2}{\varepsilon_0 \varepsilon} \int \left(\int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx \right) dx - q \hat{e}_s(t) \hat{x} + \hat{w}_s(t). \quad (60)$$

Согласно (39)

$$\delta \hat{W}_1(0;t) = 0. \quad (61)$$

С учетом (38)

$$\delta \hat{W}_1(x;t) = -q \int \hat{E}_1(x;t) dx + \hat{w}_1(t) \quad (62)$$

и (45) имеем

$$\hat{w}_1(t) = \frac{q^2}{\varepsilon_0 \varepsilon} \left(\int \left(\int \delta \hat{N}_{np,s}(x;t) dx \right) dx \right) \Big|_{x=0}. \quad (63)$$

На основании (45), (46), (59), (60) с учетом (13), (23)

$$\delta \hat{E}_s(x;t) = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\int \hat{\Psi}_{n,s}^* \hat{u}_{n,s}(x;t) dx \right) + \hat{e}_s(t), \quad (64)$$

$$\delta \hat{E}_s(x;t) = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\int \hat{\Psi}_{n,s}^* \hat{u}_{n,s}(x;t) dx \right) + \hat{e}_s(t), \quad (65)$$

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = -\frac{q^2}{\varepsilon_0 \varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \int \left(\int \hat{\Psi}_{n,s}^* \hat{u}_{n,s}(x;t) dx \right) dx - q \hat{e}_s(t) \hat{x} + \hat{w}_s(t), \quad (66)$$

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = -\frac{q^2}{\varepsilon_0 \varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \int \left(\int \hat{\Psi}_{n,s}^* \hat{u}_{n,s}(x;t) dx \right) dx - q \hat{e}_s(t) \hat{x} + \hat{w}_s(t), \quad (67)$$

Разлагая неравновесную поправку к статистическому оператору в ряд по степеням поля, с точностью до квадратичного члена

$$\delta \hat{\rho}_{np} = \delta \hat{\rho}_{np}^{(0)} + \delta \hat{\rho}_{np}^{(1)} + \delta \hat{\rho}_{np}^{(2)}, \quad (68)$$

а затем, подставляя (68) в (13)

$$\hat{u}(x;t) = \hat{u}^{(0)}(x;t) + \hat{u}^{(1)}(x;t) + \hat{u}^{(2)}(x;t) \quad (69)$$

и (69) в (64)–(67), окончательно имеем:

$$\hat{E}_s(x;t) = \hat{E}_s^{(0)} + \hat{E}_s^{(1)} + \hat{E}_s^{(2)}, \quad (70)$$

$$\hat{E}_s(x;t) = \hat{E}_s^{(0)} + \hat{E}_s^{(1)} + \hat{E}_s^{(2)}, \quad (71)$$

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = \delta \hat{W}_s^{(0)} + \delta \hat{W}_s^{(1)} + \delta \hat{W}_s^{(2)}, \quad (72)$$

$$\delta \hat{W}_s(x;t) = \delta \hat{W}_s^{(0)} + \delta \hat{W}_s^{(1)} + \delta \hat{W}_s^{(2)}. \quad (73)$$

Комбинируем (20), (21) и (72), (73) в области s -й ямы

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(0)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(0)}}{\partial t} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(0)} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_s^{(0)} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_s^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\}, \quad (74)$$

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial t} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_s^{(1)} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_s^{(1)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\}, \quad (75)$$

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(2)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(2)}}{\partial t} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(2)} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_s^{(2)} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_s^{(2)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\} \quad (76)$$

и s -го барьера

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(0)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(0)}}{\partial t} + \frac{2m(E_n - U_0)}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(0)} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_s^{(0)} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_s^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\}, \quad (77)$$

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial t} + \frac{2m(E_n - U_0)}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_s^{(1)} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_s^{(1)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\}, \quad (78)$$

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(2)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(2)}}{\partial t} + \frac{2m(E_n - U_0)}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(2)} = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \delta \hat{W}_s^{(2)} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\delta \hat{W}_s^{(2)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\}. \quad (79)$$

Рассмотрим процесс поляризации кристалла в переменном поле

$$E = E_0 \exp(i\omega t) \quad (80)$$

при постоянной температуре T_n . Электроды полагаем блокирующими [3]

$$\tilde{\Psi}_1(0) = 0, \quad \tilde{\Psi}_{N_s}(0) = 0. \quad (81)$$

На основании (75), (78) получим операторные статистические уравнения

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial t} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(1)} = \frac{2mqE_0}{\hbar^2} \exp(i\omega t) \left\{ \hat{x} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\hat{x} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\}, \quad (82)$$

$$\frac{\hat{\partial}^2 \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial x^2} + \frac{2mi}{\hbar} \frac{\partial \hat{u}_{ns}^{(1)}}{\partial t} + \frac{2m(E_n - U_0)}{\hbar^2} \hat{u}_{ns}^{(1)} = \frac{2mqE_0}{\hbar^2} \exp(i\omega t) \left\{ \hat{x} \left(\hat{\rho}_{np}^{(0)} \tilde{\Psi}_{ns} \right) - \hat{\rho}_{np}^{(0)} \left(\hat{x} \tilde{\Psi}_{ns} \right) \right\}. \quad (83)$$

В начальный момент времени поляризация отсутствует:

$$\hat{u}_{n,s}^{(1)}(x; 0) = 0, \quad (84)$$

$$\hat{u}_{n,s}^{(1)}(x; 0) = 0. \quad (85)$$

2. Расчет теоретических спектров комплексной диэлектрической проницаемости слоистых кристаллов

Оператор поляризации [3]

$$\hat{P} = q \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n^* \hat{x} \delta \hat{\rho}_{np} \Psi_n, \quad (86)$$

усредненный по координатам и энергиям

$$\langle \hat{P} \rangle = \int_0^d \Psi^* \hat{P}(x, t) \Psi dx, \quad (87)$$

совместно с формулой

$$\langle \hat{P} \rangle = \epsilon_0 (\epsilon^* - \epsilon_\infty) E_0 \exp(i\omega t) \quad (88)$$

позволяет вычислить комплексную диэлектрическую проницаемость

$$\epsilon^*(\omega, T) = \epsilon_\infty + \frac{1}{\epsilon_0 E_0} \exp(-i\omega t) \int_0^d \Psi^* \hat{P}(x, t) \Psi dx. \quad (89)$$

Выводы

1. Построено операторное статистическое уравнение миграционной поляризации в конденсированных средах в переменном электрическом поле на примере модели многоямного потенциального рельефа прямоугольной формы.

2. Методом конечных разностей при блокирующих электродах вычислены теоретические спектры комплексной диэлектрической проницаемости нанометровых слоев твердых диэлектриков при низких и сверхнизких температурах.

3. Расчет комплексной диэлектрической проницаемости методом матрицы плотности выявил аномалии, связанные со смещением теоретического максимума $\text{tg}\delta(T)$ в область сверхнизких температур при уменьшении толщины диэлектрика от 30 мкм до 3 нм.

References

- 1 *Tonkonogov M.P., Kuketaev T.A. et al.* Quantum effects during the thermodepolarization in difficult crystals with hydrogen bonds // The news of Higher education institutions. Physics. — 2004. — № 6. — P. 8–15.
- 2 *Tonkonogov M.P., Kuketaev T.A. et al.* Dimensional effects in layers of a nanometer size at polarization establishment in crystals with hydrogen bonds // The news of Higher education institutions. Physics. — 2005 — № 11.
- 3 *Tonkonogov M.P., Fazylov K.K., Kalytko V.A.* The mechanism of tunneling of protons in crystals with hydrogen bonds // Physics of dielectrics (Dielectrics – 2004): Materials of the X-th International conference. — St. Petersburg, 2004. — P. 49–50.

В.А.Калытка

Кристаллогидраттар және қабатты силикаттар нанометрлік жіктерінің диэлектрлік өтімділігінің спектрлерін кванттық-механикалық кешенді есептеу

Мақалада конденсацияланған орталардың төмен және аса төмен температуралар төңірегіндегі электродтар арқылы тежеуленген айнымалы электр өрісіндегі миграциялы поляризацияның кванттық теориясы құрылады. Лиувилль, Шредингердің стационарлық және Пуассонның операторлық тендеуінің бірлескен шешімі негізінде протон-протонды және протон-фононды өзара әрекеттесуін есепке алусыз Больцманның кванттық статистикасы көмегімен тік төртбұрышты пішіндегі потенциалдық бір өлшемді көп ойысты өріс бедерінде қимылдайтын әрекеттеспейтін протондардың ансамблінің тұрақты емес статистикалық операторы есептелді. Қабатты кристалдардың кешенді диэлектрикалық өтімділігінің жиілік спектрлері сұйық гелий температурасындағы тығыздық матрица арқылы дәлелденген.

V.A.Kalytko

The quantum mechanical calculation of the spectra of the complex dielectric permeability of nanometre layers of crystal hydrates and stratified silicates

The quantum theory of migrational polarization in condensed mediums in an alternating electric field in the area of low and superlow temperature in the presences of the blocking electrodes is being created. On the base of the joint answer of Liouville's equation. The stationary Schrödinger's equation and operation Poisson, s equation. Without according of the proton-protonic and proton-phononic interaction with the help of Boltsmann's quantum statistics a nonstationary statistical operator for the ansampler of the interacting protons, moving in single demantion field of a multihole potential modulator surface with a rectangle shape is being calculated. With the help of matryx the density the brecent spectra of the complex dielectric permeability of stratified crystals at the temperatures of liquid helium are calculated.

В.А.Калытка

Международная бизнес-академия, Караганда (E-mail: kalytka@mail.ru)

Размерные эффекты при протонной релаксации в области сверхнизких температур

С помощью квантово-механического выражения для плотности тока термостимулированной деполяризации (ТСТД) исследованы размерные эффекты при протонной релаксации в нанометровых слоях кристаллогидратов (халькантит) и слоистых силикатов. Установлено, что сокращение кристаллического слоя от 30 мкм до 3 нм приводит к смещению теоретического максимума плотности ТСТД низкотемпературных релаксаторов (протонов) в сторону гелиевых температур с возрастанием амплитуды максимума на 3–4 порядка.

Ключевые слова: размерные эффекты, протонная релаксация, термостимулированный ток деполяризации (ТСТД), кристаллогидраты, слоистые силикаты, флогопит, халькантит, релаксатор, гелиевые температуры, возрастание амплитуды максимума ТСТД.

Введение

Исследования последнего десятилетия прошлого века значительно расширили представления об эффектах, связанных с размером кристаллитов в твердых телах. Особое внимание привлекают нанокластеры, свойства которых являются промежуточными между свойствами изолированных атомов и поликристаллического твердого тела [1, 2]. Важную роль при изучении свойств наноматериалов может играть не только размер зерна, но и структура и состояние границ зёрен [3].

Уменьшение размера кристаллитов ниже некоторой пороговой величины приводит к значительному изменению свойств твердого тела. Эти эффекты возникают при условии, что средний размер кристаллических зёрен не больше 100 нм. Наиболее ярко они выражены при размерах зёрен меньше 10 нм [3].

1. Аномальные эффекты при электропереносе протонов в кристаллических слоях нанометровых размеров (10–100 нм)

Возможность аномалий протонной релаксации в кристаллических слоях нанометровой крупности заложена в выражении, определяющем время релаксации и вытекающем из решения кинетического уравнения [4, 5]

$$1/\tau_n = 1/\tau_m + 1/\tau_{no},$$

так как диффузионное время релаксации, соответствующее n -й пространственной гармонике, уже в линейном приближении зависит от толщины d образца

$$\tau_{no} = d^2/\pi^2 D n^2.$$

Максвелловское время релаксации от d не зависит

$$\tau_m = \varepsilon_0 \varepsilon / N_0 q \mu.$$

Поскольку диффузионная релаксация доминирует при низких температурах, когда основной вклад в миграционную поляризацию вносят туннельные переходы, исходя из зависимости диффузионного времени релаксации от толщины кристалла можно предположить, что размерные эффекты в кристаллах с водородными связями обусловлены квантовыми свойствами протонной подсистемы, проявляющимися в материалах данного класса при температурах ниже критической (вблизи азотной).

2. Применение аппарата матрицы плотности к исследованию размерных эффектов в нанометровых слоях (1–10 нм) кристаллов флогопита и халькантита при сверхнизких (гелиевых) температурах

В [6] численный расчет квазидискретного спектра протонов в кристаллах с водородными связями указал на существенную зависимость заселенностей уровней энергии квазидискретного спектра при блокирующих электродах от параметров потенциального рельефа (энергия активации, ширина потенциального барьера).

На фоне выявленных в [6] закономерностей можно предположить, что в области низких, тем более сверхнизких температур квантовый характер статистического распределения протонов по уровням энергии повлияет на механизм размерных эффектов.

Из классического курса квантовой механики известно, что изменение размеров области локализации микрочастицы заметно сказывается на структуре ее энергетического спектра в заданном силовом поле. Например, у частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками спектр энергий существенно зависит от ширины ямы [7]:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (1)$$

В этом случае расстояние между соседними уровнями энергии возрастает с уменьшением ширины ямы [7]

$$E_{n,n+1} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (2n+1)}{2ma^2}. \quad (2)$$

Для модели двойной симметричной потенциальной ямы прямоугольной формы при блокирующих контактах на ее границах [5], полагая $N_{\text{я}} = 2$, приходим к выражению:

$$E_{n,n+1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4ma^2} (n+1), \quad (3)$$

откуда следует, что уменьшение количества ям вдвое приводит к уменьшению расстояния между двумя первыми уровнями энергии вдвое:

$$\frac{E_{0,1}^{1-\text{ям}}}{E_{0,1}^{2-\text{ям}}} = 2.$$

То есть уже на элементарном примере видно, что сокращение размеров модели сопровождается увеличением среднего расстояния между соседними уровнями энергии.

Для модели многоямного потенциального рельефа прямоугольной формы при омических контактах на границах кристалла размерные эффекты прослеживаются аналитически при произвольном количестве потенциальных ям ($N_{\text{я}} > 1$). Поскольку расстояние между потолком k -й и дном n -й энергетической зоны, при $n > k$ [8],

$$E_{k,n}^{(-)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n^2 - k^2 + n - k)}{2ma^2} - \frac{\hbar\omega}{\pi} (\exp(-\eta_k) + \exp(-\eta_n)) \cos\left(\frac{\pi}{N_{\text{я}} + 1}\right), \quad (4)$$

тогда из (4) для модели двух потенциальных ям ($N_{\text{я}} = 2$)

$$E_{k,n}^{(-)}(2) = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n^2 - k^2 + n - k)}{2ma^2} - \frac{\hbar\omega}{2\pi} (\exp(-\eta_k) + \exp(-\eta_n)), \quad (5)$$

а при бесконечно большом количестве потенциальных ям ($N_{\text{я}} \gg 1$)

$$E_{k,n}^{(-)}(\infty) = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n^2 - k^2 + n - k)}{2ma^2} - \frac{\hbar\omega}{\pi} (\exp(-\eta_k) + \exp(-\eta_n)). \quad (6)$$

Согласно формулам (4)–(6) многоямная симметричная модель ($N_{\text{я}} \rightarrow \infty$) дает минимальное расстояние между потолком k -й и дном n -й энергетических зон, а 2-ямная модель отвечает максимуму этого расстояния, откуда следует, что при омических контактах уменьшение количества потенциальных ям приводит к сужению энергетических зон. При этом расстояние между соседними энергетическими зонами увеличивается.

Численное исследование энергетического спектра протонов в поле многоямного потенциального рельефа прямоугольной формы при блокирующих электродах согласно трансцендентному спектральному уравнению [5]

$$\sin\left(\frac{\sqrt{8mE_n}}{\hbar} a\right) = \frac{\left(\cos\left(\frac{\sqrt{8mE_n}}{\hbar} a\right) + \sin\left(\frac{\sqrt{8mE_n}}{\hbar} a\right)\right) (y_{N_{\text{я}}} - y_{N_{\text{я}}-2}) y_{N_{\text{я}}-1}}{(1 + y_{N_{\text{я}}-1}^2)} \exp(-\eta_n) \quad (7)$$

позволяет установить зависимость максимального количества уровней энергии в потенциальной яме от теоретического положения максимума плотности ТСТД при различных толщинах кристаллическо-

го слоя в халькантите (табл. 1) и во флогопите (табл. 2). Диапазон толщин слоев выбран в пределах от 30 мкм до 3 нм. В таблицах 1, 2 в скобках указаны соответствующие температуры теоретических максимумов плотности тока термодеполяризации.

Т а б л и ц а 1

Максимальное число рассчитанных уровней энергии дефектов Бьеррума в потенциальных ямах в кристаллах халькантита при температурах экспериментальных максимумов термостимулированного тока деполяризации при различных толщинах кристаллических слоёв

Толщина слоя, нм	Максимальное количество уровней энергии в потенциальных ямах N_{\max}					
30000	$2 \cdot 10^3$ (94)	$3,5 \cdot 10^4$ (138)	$2,5 \cdot 10^5$ (170)	$5 \cdot 10^5$ (206)	$7,5 \cdot 10^5$ (230)	$0,9 \cdot 10^6$ (246)
3000	10^3 (90)	$5 \cdot 10^3$ (130)	10^5 (167)	$4,9 \cdot 10^5$ (205)	$7,5 \cdot 10^5$ (230)	$0,9 \cdot 10^6$ (246)
300	$3 \cdot 10^2$ (60)	10^3 (115)	$0,5 \cdot 10^5$ (165)	$4,5 \cdot 10^5$ (204,5)	$7,5 \cdot 10^5$ (230)	$0,9 \cdot 10^6$ (246)
30	100 (50)	900 (95)	10^4 (165)	$4,4 \cdot 10^5$ (202)	$7,49 \cdot 10^5$ (229)	$0,9 \cdot 10^6$ (246)
3	30 (25)	700 (85)	$0,9 \cdot 10^4$ (159)	$4,3 \cdot 10^5$ (200)	$7,48 \cdot 10^5$ (228)	$0,89 \cdot 10^6$ (245)

Т а б л и ц а 2

Максимальное число рассчитанных уровней энергии дефектов Бьеррума в потенциальных ямах в кристаллах флогопита при температурах экспериментальных максимумов термостимулированного тока деполяризации при различных толщинах кристаллических слоёв

Толщина слоя, нм	Максимальное количество уровней энергии в потенциальных ямах N_{\max}					
30000	$3,5 \cdot 10^3$ (100)	$5,3 \cdot 10^4$ (130)	$1,5 \cdot 10^5$ (178)	$4,3 \cdot 10^5$ (206)	$5,5 \cdot 10^5$ (235)	$1,3 \cdot 10^6$ (257)
3000	$1,7 \cdot 10^3$ (88)	$7,3 \cdot 10^3$ (122)	$0,5 \cdot 10^5$ (174)	$4,2 \cdot 10^5$ (206)	$5,5 \cdot 10^5$ (235)	$1,3 \cdot 10^6$ (257)
300	$0,55 \cdot 10^3$ (57)	$2,45 \cdot 10^3$ (108)	$1,5 \cdot 10^4$ (172)	$4,25 \cdot 10^5$ (206)	$5,5 \cdot 10^5$ (235)	$1,3 \cdot 10^6$ (257)
30	185 (48)	1990 (89)	10^4 (169)	$4 \cdot 10^5$ (204)	$5,5 \cdot 10^5$ (233)	$1,3 \cdot 10^6$ (257)
3	63 (29)	1500 (80)	$0,9 \cdot 10^3$ (168)	$3,8 \cdot 10^5$ (200)	$5,4 \cdot 10^5$ (232)	$1,29 \cdot 10^6$ (256,9)

Согласно таблицам 1, 2 сокращение толщины кристаллического слоя до нанометровых размеров (3–30 нм) сопровождается существенным уменьшением максимального количества уровней энергии в потенциальных ямах низкотемпературных релаксаторов, что успешно согласуется с закономерностью, установленной по формулам (4)–(6) для омических электродов.

Так, в халькантите измеренный при температуре 94 К и толщине кристалла 30 мкм теоретический максимум термостимулированного тока по результатам прямого квантово-квантово-механического расчета сдвигается к 50 К при толщине 30 нм и к 25 К при 3 нм (табл. 1).

Полное смещение соответствующего максимума во флогопите (100 К) составило 71 К (табл. 2). Второй максимум в халькантите (138 К) сдвигается на 53 К (табл. 1), а во флогопите на 50 К (табл. 2).

В области релаксации высокотемпературных дефектов Бьеррума заметного сдвига теоретического графика плотности ТСТД с уменьшением толщины кристалла до нанометрового диапазона не выявлено.

На примере как халькантита (табл. 1), так и флогопита (табл. 2) видно, что по мере возрастания температуры экспериментального максимума термостимулированного тока (толщина кристалла 30 мкм) максимальное количество уровней энергии в потенциальных ямах увеличивается. Например,

в халькантите это число возрастает от 2000 при 94 К до 900000 при 246 К, во флогопите — от 3500 при 100 К до 1300000 при 257 К. Эту закономерность можно объяснить влиянием параметров потенциального рельефа (энергии активации, ширины потенциального барьера, постоянной решетки) на структуру энергетического спектра релаксаторов при блокирующих электродах. В области низких температур (70–100 К), когда механизм миграционной поляризации реализуется за счет туннелирования протонов в протонированных анионах, параметры потенциального барьера таковы, что вероятность подбарьерного перехода велика, и протон движется туннельно, а релаксация носит диффузионный характер. При таких условиях коэффициент прозрачности на 10–12 порядков выше, чем при высоких температурах, что и обеспечивает большую ширину энергетической зоны низкотемпературных релаксаторов. При блокирующих контактах обусловленный туннелированием эффект уширения спектральных линий квазидискретного спектра протонов проявляется в большей степени, что и приводит к заметному уменьшению количества связанных стационарных состояний при температурах вблизи азотной (70–100 К).

Размерные эффекты, связанные с существенным снижением количества уровней в потенциальных ямах низкотемпературных релаксаторов при нанометровых толщинах слоев, при омических электродах объясняются, согласно (4)–(6), влиянием размеров кристалла на расстояние между соседними зонами энергии. При блокирующих электродах численное исследование трансцендентного спектрального уравнения (7) приводит к понижению количества связанных уровней в халькантите от 2000 при 94 К до 30 при 25 К (табл. 1) и во флогопите от 3500 при 100 К до 63 при 29 К (табл. 2). При релаксации ионизационных дефектов Бьеррума $\text{H}_3\text{O}^+ \text{H}_3\text{O}^+$, как видно из таблиц 1, 2, также проявляются размерные эффекты, что указывает на значительную роль туннелирования и при температурах выше азотной. В халькантите для L -дефектов при температуре измеренного максимума термостимулированного тока (246 К, 30 мкм) в потенциальной яме локализовано 900000, а при толщине кристалла 3 нм, когда теоретическое температурное положение максимума сместилось влево на 1 К, в яме остается 890000 уровней энергии (табл. 1). Аналогичная ситуация проявляется во флогопите, в котором измеренный при толщине кристалла 30000 нм максимум плотности ТСТД с температурой 257 К при количестве связанных уровней энергии 130000 с уменьшением толщины кристалла до 3 нм смещается к низким температурам на 3,1 К, а максимальное число уровней энергии N_{\max} в потенциальной снижается до 1290000 (табл. 2). Получается, что у низкотемпературных релаксаторов сокращение размеров кристалла от 30000 до 3 нм приводит к уменьшению числа N_{\max} примерно на 99 %, а для L -дефектов только 1 %. То есть высокотемпературная релаксация, протекающая преимущественно за счет термически активируемых переходов протонов, к величине толщины кристалла практически не чувствительна.

Компьютерная обработка квантово-механического выражения для плотности тока термостимулированной деполяризации [5]

$$\langle \bar{J} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \rho_{np,dpol}(E_n, t) \times \int_0^d \psi_n^* \hat{J}(x, t) \psi_n dx \quad (8)$$

в сочетании с неравновесной матрицей плотности для протонов [5]

$$\rho_{np,dpol}(E_n, t) = \rho_0(E_n, t) + E_0 \rho_1(E_n, t) + E_0^2 \rho_2(E_n, t) \quad (9)$$

позволила рассчитать теоретические амплитудные значения и температурные положения максимумов плотности тока термостимулированной деполяризации для каждого типа дефектов Бьеррума в халькантите (табл. 3) и во флогопите (табл. 4). Теоретические значения параметров релаксаторов были приняты согласно результатам квантово-механического расчета плотности тока термодеполяризации [5]. Как было отмечено выше, у L -дефектов во флогопите при толщине кристалла 30 мкм, когда температура максимума 257 К, в яме 1300000, а при 3 нм остается 1290000 уровней. На фоне такого огромного количества возможных энергетических состояний протона изменение этого количества на 10000–20000 уровней практически не сказывается на картине энергетического спектра релаксаторов, заселенности уровней энергии не меняются и максимум плотности ТСТД отклоняется от измеренного всего на 0,5–1 К, а его амплитуда возрастает на $(0,3 \div 0,35) \cdot 10^{-9}$ К (табл. 4).

При понижении температуры кристалла до сверхнизкой у L -дефектов хотя и растут заселенности уровней вблизи дна потенциальной ямы, но из-за малой прозрачности потенциального барьера переход протона может произойти только за счет теплового движения, что вблизи температуры абсолютного нуля невозможно.

Т а б л и ц а 3

Амплитуды и температурные положения теоретических максимумов плотности термостимулированного тока деполяризации халькантита, вычисленные методом матрицы плотности при различных толщинах кристаллического слоя

Толщина слоя, нм	Амплитуды и температурные положения теоретических максимумов термостимулированного тока					
	30000	$8 \cdot 10^{-10}$ (94)	$9 \cdot 10^{-10}$ (138)	$2 \cdot 10^{-9}$ (170)	$2 \cdot 10^{-10}$ (206)	$3 \cdot 10^{-10}$ (230)
3000	$9 \cdot 10^{-9}$ (90)	$9 \cdot 10^{-9}$ (130)	$2,5 \cdot 10^{-9}$ (167)	$2 \cdot 10^{-10}$ (205)	$3 \cdot 10^{-10}$ (230)	10^{-9} (246)
300	$5 \cdot 10^{-8}$ (60)	$8,5 \cdot 10^{-8}$ (115)	$7,5 \cdot 10^{-8}$ (165)	$3 \cdot 10^{-10}$ (204,5)	$3 \cdot 10^{-10}$ (230)	10^{-9} (246)
30	$9 \cdot 10^{-7}$ (50)	10^{-6} (95)	10^{-7} (165)	$3,5 \cdot 10^{-10}$ (202)	$4,5 \cdot 10^{-10}$ (229)	10^{-9} (246)
3	10^{-5} (25)	$3 \cdot 10^{-6}$ (85)	$9 \cdot 10^{-5}$ (159)	$5,2 \cdot 10^{-10}$ (200)	$5 \cdot 10^{-10}$ (228)	$1,35 \cdot 10^{-9}$ (245)

Т а б л и ц а 4

Амплитуды и температурные положения теоретических максимумов плотности термостимулированного тока деполяризации во флогопите, вычисленные методом матрицы плотности при различных толщинах кристаллического слоя

Толщина слоя, нм	Амплитуды и температурные положения теоретических максимумов термостимулированного тока					
	30000	$7 \cdot 10^{-9}$ (100)	$8 \cdot 10^{-9}$ (130)	$3 \cdot 10^{-8}$ (178)	$2 \cdot 10^{-8}$ (206)	$8,5 \cdot 10^{-9}$ (235)
3000	$8 \cdot 10^{-8}$ (88)	$9 \cdot 10^{-8}$ (122)	$3,8 \cdot 10^{-8}$ (174)	$2 \cdot 10^{-8}$ (206)	$8,5 \cdot 10^{-9}$ (235)	10^{-9} (257)
300	$3 \cdot 10^{-7}$ (57)	$3,5 \cdot 10^{-7}$ (108)	$8,5 \cdot 10^{-7}$ (172)	$2 \cdot 10^{-8}$ (206)	$9 \cdot 10^{-9}$ (235)	10^{-9} (257)
30	$5 \cdot 10^{-6}$ (48)	$8,3 \cdot 10^{-6}$ (89)	10^{-6} (169)	$7 \cdot 10^{-8}$ (204)	$9,5 \cdot 10^{-9}$ (233)	10^{-9} (257)
3	$3,5 \cdot 10^{-5}$ (29)	$7,5 \cdot 10^{-5}$ (80)	$9,4 \cdot 10^{-5}$ (168)	$9,2 \cdot 10^{-8}$ (200)	$1,2 \cdot 10^{-8}$ (232)	$1,3 \cdot 10^{-9}$ (256,9)

Сопоставление таблиц 1, 2 и 3, 4 показывает, что для низкотемпературных релаксаторов обусловленное размерными эффектами смещение теоретического максимума тока термодеполяризации в область сверхнизких температур сопровождается возрастанием амплитуды плотности ТСТД на четыре порядка в сравнении с вычисленными при температуре экспериментального максимума.

В халькантите уменьшение толщины кристаллического слоя от 30 мкм до 3 нм приводит к смещению низкотемпературного максимума от 94 к 25 К, а амплитуда при этом увеличивается от $8 \cdot 10^{-10}$ А/м² до 10^{-5} А/м² (табл. 3). Во флогопите амплитуда теоретического максимума растет от $7 \cdot 10^{-9}$ А/м² при толщине кристалла 30 мкм до $3,5 \cdot 10^{-5}$ А/м² при 3 нм (табл. 4).

Смещение теоретического максимума термостимулированного тока к сверхнизким температурам (в халькантите от 94 К при 30 мкм до 25 К при 3 нм (табл. 3); во флогопите от 100 К при 30 мкм до 29 К при 3 нм (табл. 4)) обусловлено существенным занижением количества связанных уровней энергии от 2000 до 30 у халькантита (табл. 1) и от 3500 до 63 у флогопита (табл. 2).

В кристаллических слоях нанометровых размеров (3–30 нм) из-за малого количества стационарных энергетических состояний среднее расстояние между соседними уровнями внутри потенциальной ямы растет, прозрачность потенциального барьера также возрастает, вследствие чего существенно увеличивается скорость вероятности туннельных переходов протонов по водородным связям, и максимум тока термодеполяризации реализуется при температуре ниже, чем измеренная при 30 мкм. При этом для низкотемпературных релаксаторов заселенности расположенных вблизи дна потенциальной ямы связанных уровней энергии в слоях нанометровой крупности возрастают, обеспечивая

на фоне высокой вероятности подбарьерных переходов значительную концентрацию релаксирующих протонов. При таких условиях миграционная поляризация протекает за счет огромного количества протонов, и плотность термостимулированного тока возрастает на 3–4 порядка.

Выводы

1. Из численного решения трансцендентного спектрального уравнения выявлена зависимость максимального количества уровней энергии в потенциальных ямах (связанные состояния) от температуры монорелаксационного максимума термостимулированного тока деполяризации при вариации толщины кристаллического слоя в халькантите и во флогопите в диапазоне толщин от 3 нм до 30 мкм.

2. Установлено, что при блокирующих контактах на границе кристалла в нанометровых слоях (3 нм), по сравнению с кристаллами толщиной 30 мкм, максимальное количество связанных уровней энергии низкотемпературных релаксаторов уменьшается на 99 % со смещением теоретического максимума тока термодеполяризации в сторону низких температур на 65–75 К с возрастанием амплитуды плотности ТСТД на 3–4 порядка, а у высокотемпературных дефектов Бьеррума всего на 1 % при смещении по температуре на 0,1–1 К при неизменной амплитуде, в связи с чем можно утверждать, что в нанометровых кристаллах с водородными связями поляризация при сверхнизких температурах (4–25 К) обусловлена нанокластерами.

References

- 1 Gusev A.I. Effects of a nanocrystalline state // Successes of physical sciences. — 1998. — № 1. — Vol. 168. — P. 55–83.
- 2 Panin V. E., Panin V.A. Problems of mesomechanics of durability and plasticity of nanostructural materials // News of higher education institutions. Physics. — 2004. — № 3. — P. 5–17.
- 3 Drobyshev A., Aldiarov A. et al. Features of libration fluctuations in waters // Modern achievements of physics and fundamental physical education: Materials of the 3rd internat. conf. — Almaty, 2003. — P. 14.
- 4 Tonkonogov M.P., Ismailov Zh.T. et al. The nonlinear theory of ranges of thermostimulated currents in difficult crystals with hydrogen bonds // The news of higher education institutions. Physics. — 2002. — № 10. — P. 76–84.
- 5 Tonkonogov M.P., Kuketaev T.A. et al. Quantum effects during the thermodepolarization in difficult crystals with hydrogen bonds // The news of higher education institutions. Physics. — 2004. — № 6. — P. 8–15.
- 6 Tonkonogov M.P., Kuketaev T.A. et al. Dimensional effects in layers of a nanometer size at polarization establishment in crystals with hydrogen bonds // The news of higher education institutions. Physics. — 2005. — № 11.
- 7 Landau L.D., Lifshits E.M. Quantum mechanics. — Moscow: Science, 1974. — Vol. 3.
- 8 Tolmachov A.N. Quasiclassical approach in quantum mechanics. — Moscow: Science, 1974. — P. 206.

В.А.Калытка

Аса төмен температуралардың аралығындағы протон релаксациясының жанындағы өлшемдік эффектер

Кванттық-механикалық өрнек көмегімен термостимулденген деполяризациялардағы (ТСТД) токтың тығыздығы нанометрлік кристалгидраттар қабаттағы (халькантит) және қабатты силикаттардың жағдай протон релаксациясының жанында өлшемдік эффектілері зерттелді. Кристалды қабатты 30 мкм 3 нм дейін қысқарту теориялық максимум амплитудасының тығыздығының алып келетіні анықталған.

V.A.Kalytko

The size effects during the proton relaxation in the area of superlow temperatures

With the help of the quantum-mechanical expression for the density of the current of thermostimulated depolarization (TSCD) the size effects during the proton relaxation in nanometre layers of crystal hydrates (halcantifer) and stratified silicates (phlogopiter) are being researched. It is found, that contraction of a crystal layer from 30 mcm to 3 nm results in dislongement of the theoretical maximum of the density of TSCD of low temperature relaxetors (protons) towards the helium temperatures with increasing of the amplitude of the maximum by 3–4 orders.

М.Д.Старостенков¹, А.В.Маркедонов², А.А.Барчук³, И.А.Дёмина⁴, Г.В.Попова⁴

¹Алтайский государственный технический университет им. И.Ползунова, Барнаул, Россия;

²Филиал Кузбасского государственного технического университета, Новокузнецк, Россия;

³Кузбасская государственная педагогическая академия, Новокузнецк, Россия;

⁴Восточно-Казахстанский государственный университет им. С.Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан
(E-mail: irdyomina@mail.ru, genphys@mail.ru)

Динамика краудионных комплексов в деформированном кристалле

Настоящая работа посвящена изучению динамики краудионов и их комплексов в ГЦК-кристалле, подвергнутому упругому деформированию методом молекулярной динамики. В работе показано, что в наибольшей степени на динамику как отдельных краудионов, так и их комплексов, оказывает влияние деформация решётки именно вдоль направления их движения. Деформации же по другим направлениям оказывают гораздо меньшее значение на фокусировку атомных столкновений при движении краудионов. При сверхскоростном режиме движения влияние упругой деформации решётки фактически исчезает. При этом скорость краудионов стремится к некоторому своему предельному значению.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, упругая деформация, смещение атомов, кристаллическая решетка, кристалл, точечные дефекты.

Точечные дефекты играют важнейшую роль в структурно-энергетических изменениях, происходящих в материалах при внешних высокоэнергетических воздействиях. К простейшим точечным дефектам относятся вакансии и межузельные атомы. Данные дефекты могут возникать в кристаллической решётке в результате внешнего высокоинтенсивного воздействия, например, при ионной имплантации.

При образовании вакансий и межузельных атомов структура кристаллической решётки вблизи них искажается за счёт смещений атомов в упругих полях дефектов, что вызывает локальное нарушение плотности. В процессе структурной релаксации большая часть точечных дефектов аннигилирует, и при этом «идеальная» плотность кристалла восстанавливается. Актуальность данной темы исследования обусловлена тем, что большинство современных конструктивных узлов эксплуатируются в условиях значительных силовых нагрузок.

В настоящей работе изучается динамика краудионов и их комплексов в ГЦК кристалле, подвергнутому упругому деформированию. Кристаллическая решётка Ni-Al моделировалась методом молекулярной динамики, атомы которой взаимодействовали посредством потенциала Морзе. Эксперименты проводились с использованием программы [1]. Способ создания начальной конфигурации расчётной ячейки, как предложено в [2], включал три стадии: построение, первичную релаксацию и охлаждение.

Граница в биметалле Ni-Al проходила через середину ячейки, содержащей 3200 частиц (40×80 частиц). Ячейка представляла собой плоскость {111}. Выбор данной плоскости для исследования обусловлен тем, что диффузионные процессы, как правило, развиваются в плотноупакованных направлениях, которым соответствуют плоскости {111} в обычном ГЦК кристалле [2]. Граничные условия для расчётной ячейки задавались следующим образом: по оси x — периодические, по оси y — свободные. Начальная температура ячеек задавалась равной 0 К.

Рассмотрим одиночный краудион, представляющий собой локализованную область деформации, вызванной введением в плотноупакованном направлении дополнительного межузельного атома. Прежде чем приступить к эксперименту, введём систему координат. Пусть ось Ox совпадает с кристаллографическим направлением $\langle 110 \rangle$, вдоль которого смещается краудион. Тогда оси Oy и Oz совпадают с направлениями $\langle 112 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ соответственно.

Ранее уже отмечалось [3–5], что после того, как скорость смещающегося краудиона уменьшится настолько, что его кинетической энергии будет недостаточно для преодоления потенциальных барьеров, происходит трансформация краудиона в гантельную конфигурацию межузельного атома. Поэтому во избежание подобных ситуаций будем фиксировать время прохождения краудионом некоторого расстояния, равного, например, двенадцати межатомным расстояниям, и определим, как повлияет на его скорость деформация кристалла. Исследования проводились со случая, когда краудиону присваивается начальная скорость, по величине совпадающая со скоростью продольных звуковых волн в алюминии (см. рис. 1).

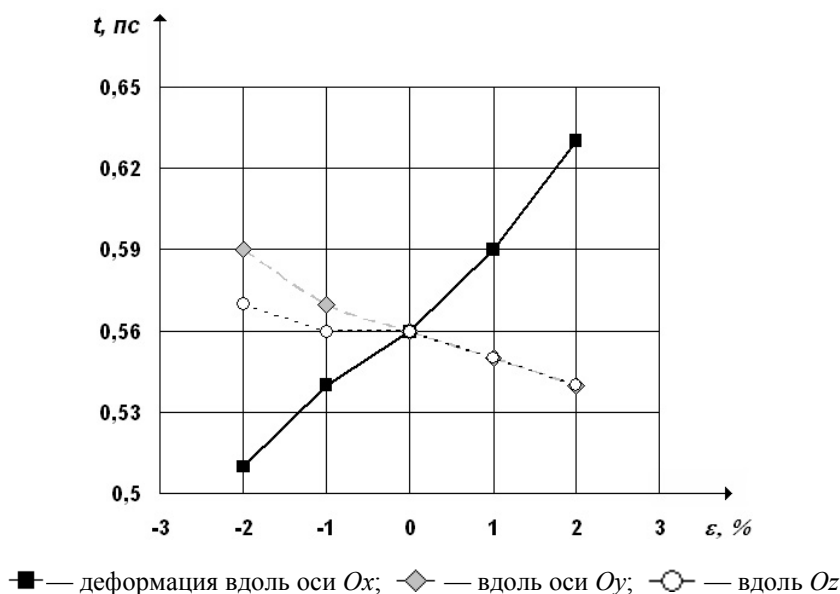


Рисунок 1. Зависимость времени прохождения краудионом заданного расстояния от величины одноосной деформации кристалла

Кристалл в компьютерных экспериментах деформируется в пределах упругой деформации. Как видно из рисунка 1, деформация вдоль разных направлений оказывает различное влияние на скорость краудиона, при этом в наибольшей степени оказывает влияние деформация вдоль направления его движения. Деформация вдоль оставшихся направлений оказывает влияние в гораздо меньшей степени и влияет за счёт увеличения или уменьшения плотности атомной упаковки.

В работе были рассмотрены другие скоростные режимы. Так, при начальной скорости, в два раза меньшей, чем в первом случае, деформация $\epsilon = 2\%$ вдоль оси Ox приводит к увеличению затрачиваемого на прохождение заданного расстояния времени на 0,11 пс, в то время как в предыдущем эксперименте эта разница составляет 0,07 пс. Ещё одной особенностью данного скоростного режима является наблюдение в отдельных экспериментах расфокусировки атомных столкновений, и, как следствие, образование гантельных конфигураций. В случае если начальная скорость краудиона в два раза больше звуковой скорости, то на рассматриваемом расстоянии заданные деформации кристаллической решетки приводят к увеличению или уменьшению скорости краудиона лишь на 0,01 пс, т.е. в пределах одной итерации компьютерного эксперимента. Таким образом, деформация кристалла приводит к изменению динамики краудионов.

Рассмотрим теперь не одиночные краудионы, а их комплексы. Будем рассматривать комплексы, состоящие из четырех краудионов. Исследование влияния деформации кристаллической решетки на динамику краудионных комплексов проводилось в диапазоне начальных скоростей от 0,4 с до 2 с, где с — скорость продольных звуковых волн в алюминии.

Эксперимент показал, что упругая деформация влияет на динамику комплексов в том же ключе, как было описано выше, при исследовании одиночного краудиона. На рисунках 2 и 3 представлены зависимости времени прохождения плоским и объёмным комплексом соответственно двенадцати межатомных расстояний при деформации кристаллической решетки вдоль направления Ox . Из рисунков видно, что объёмный комплекс, при равных значениях начальной скорости, быстрее преодолевает заданное расстояние. При этом деформация решетки оказывает на него меньшее влияние.

Между смещениями комплексов разных типов существует и другое кардинальное различие. Так, плоский комплекс оказывается более чувствительным к деформации вдоль направления Oz , нежели объёмный. Очевидно, что это связано именно с расположением комплекса в плоскости $\langle 111 \rangle$. Например, увеличение времени, затрачиваемого на преодоление заданного расстояния, при деформации $\epsilon = -2\%$ вдоль направления Oz составляет 0,33 пс, по сравнению с 0,09 пс в случае объёмного комплекса. В то же время скорость плоского комплекса в меньшей степени зависит от деформации вдоль направления Oy , нежели у объёмного. При деформации $\epsilon = -2\%$ увеличение затрачиваемого времени составляет 0,05 и 0,09 пс для плоского и объёмного комплекса соответственно.

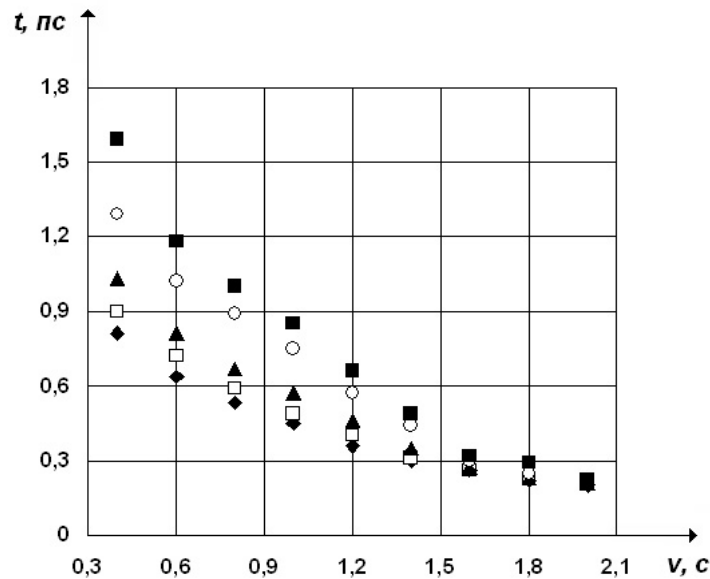


Рисунок 2. Зависимость времени прохождения плоским краудионным комплексом заданного расстояния в зависимости от начальной скорости комплекса при деформации кристаллической решётки, равной -2% (\blacklozenge), -1% (\square), 0% (\blacktriangle), 1% (\circ) и 2% (\blacksquare) вдоль направления Ox

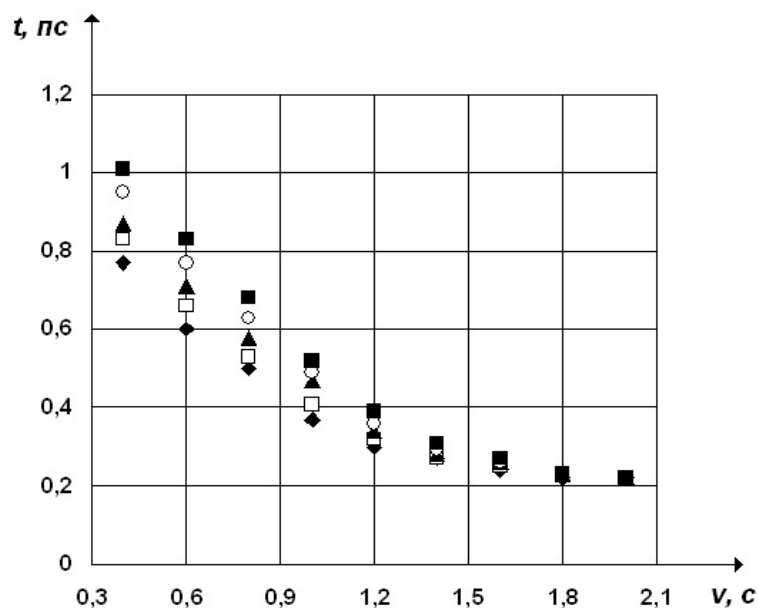


Рисунок 3. Зависимость времени прохождения объёмным краудионным комплексом заданного расстояния в зависимости от начальной скорости комплекса при деформации кристаллической решётки, равной -2% (\blacklozenge), -1% (\square), 0% (\blacktriangle), 1% (\circ) и 2% (\blacksquare) вдоль направления Ox

Общим фактом для деформаций по любым направлениям является снижение их влияния при увеличении начальной скорости краудионных комплексов. Из рисунков 2 и 3 видно, что при начальных скоростях выше скорости звука различие во времени прохождения отрезка заданного пути при различных величинах деформации практически исчезает. Закономерности движения краудионных комплексов можно разбить на две области с дозвуковой и сверхзвуковой скоростью. В работе показано, что при начальных скоростях комплексов выше скорости звука различие между скоростью движения комплексов при различных температурных режимах исчезает.

В качестве дополнительного исследования был проведён эксперимент, при котором плоский краудионный комплекс располагался под углом $\pi/3$ к оси Ox . В данном случае наблюдается уменьшение влияния деформации вдоль направления Ox на скорость краудионов, но при этом увеличивается влияние деформации по оси Oy . Но даже в этом случае при начальной скорости комплекса, в два раза большей скорости звука, различие во времени прохождения заданного расстояния исчезает.

Проведенное исследование показало, что в наибольшей степени на динамику как отдельных краудионов, так и их комплексов оказывает влияние деформация решётки именно вдоль направления их движения. Деформации же по другим направлениям оказывают гораздо меньшее влияние на фокусировку атомных столкновений при движении краудионов. При сверхскоростном режиме движения влияние упругой деформации решётки фактически исчезает. При этом скорость краудионов стремится к некоторому своему предельному значению.

Таким образом, можно сделать вывод, что динамика краудионных комплексов различна при скоростях ниже и выше скорости звука.

References

- 1 Poletaev G.M. Modeling by a method of molecular dynamics of structurally-power transformations in two-dimensional metals and alloys (MD2) / The certificate about State Computer program registration № 2008610486 from 25.01.2008.
- 2 Poletaev G.M. Research of processes of mutual diffusion in two-dimensional system Ni-Al: Dissertation ... candidate of physical and mathematical sciences. — Barnaul, 2002. — P. 186.
- 3 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Mechanism of transformation of crowdion complexes when passing a longitudinal wave // The Nonlinear world. — 2011. — Vol. 9. — № 12. — P. 826–835.
- 4 Markidonov A.V., Starostenkov M. D., Barchuk A.A. Interaction of moving crowdion complexes with dot defects in GTsK a crystal // Fundamental problems of modern materials science. — 2012. — Vol. 9. — № 1. — P. 108–113.
- 5 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Dynamic braking of crowdion complexes // Letters on materials. — 2011. — Vol. 1. Iss. 2. — P. 102–106.
- 6 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. The behavior of crowdions and their complexes in weakly stable states of materials // Russian Physics Journal. — 2012. — Vol. 54. — № 11. — P. 1241–1246.
- 7 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Dissipatsy of energy moving crowdions on low-angular borders of grains of an inclination in aluminum // Fundamental problems of modern materials science. — 2011. — Vol. 8. — № 4. — P. 99–103.
- 8 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Features of dynamics of crowdion and their complexes in deformed GTsK crystal // Fundamental problems of modern materials science. — 2011. — Vol. 8. — № 3. — P. 83–88.
- 9 Markidonov A.V., Starostenkov M.D. et al. Features of dynamics of crowdion in crystals with GTsK lattice at various power influences // Chemical physics and a mezoskopiya. — 2012. — Vol. 14. — № 1. — P. 46–54.

М.Д.Старостенков, А.В.Маркедонов, А.А.Барчук, И.А.Дёмина, Г.В.Попова

Өзгертілген кристалдағы краудиондық кешендердің қозғалысы

Мақала краудиондар және олардың кешендерінің молекулярлық әдісімен иілгіш өзгерулеріне салынған қырлары центрленген тетраэдр кристалындағы қозғалысты зерттеуге арналған. Бөлек краудиондардың, олардың кешендерінің де қозғалысына ең жоғары дәрежеде олардың дәл қозғалу бағыты бойынша тордың өзгеруі әсер етеді. Басқа бағыттағы өзгерістер атомдық соғылыстарының анықталуына әлдеқайда аз мәнде әсер етеді. Жоғары жылдамдықпен жылжу режимінде тордың иілгіш өзгеру әсері жоғалады. Бұл жағдайда краудиондардың жылдамдығы өзінің шектік мәніне ұмтылады.

M.D.Starostenkov, A.V.Markidonov, A.A.Barchuk, I.A.Dyomina, G.V.Popova

Dynamics of crowdion complexes in the deformed crystal

The work is devoted to loudspeaker studying of crowdion and their complexes in GTsK crystal, to the subjected elastic deformation by a method of molecular dynamics. In work it is shown that most on dynamics both separate crowdion, and their complexes, lattice deformation exactly along the direction of their movement influences. Deformations in other directions render smaller value is ready for focusing of nuclear collisions at movement of crowdion. At a superfast mode of movement influence of elastic deformation of a lattice actually disappears. Thus speed of crowdion aspires to some limiting value.

В.М.Юров

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: exciton@list.ru)

Температура плавления наночастиц чистых металлов

В работе для 48 металлов периодической системы рассчитаны температуры плавления наночастиц. Для наночастиц золота размером 1 нм получено экспериментальное значение температуры плавления 305÷310 К, что практически совпадает с полученным нами значением. Это говорит в пользу предложенной в настоящей работе методики расчета температуры плавления наночастиц. Из полученных результатов следует, что большинство наночастиц металлов размером 1 нм нестабильны при комнатной температуре. Стабильными оказываются наночастицы бериллия, подгрупп меди, хрома, марганца и железа. Большинство наночастиц металлов размером 10 нм стабильны при обычных условиях, за исключением калия, рубидия, цезия и галлия.

Ключевые слова: температура плавления, наночастицы, металл, поверхностное натяжение, размерный эффект, стабильность частиц, конструкционные материалы.

Введение

Особенностью наночастиц является размерная зависимость их физических свойств: электрических, магнитных, тепловых, оптических и др. Это позволяет получать новые материалы с широким спектром физических свойств, изменяя технологически размеры и структуру наночастиц и наноструктурных материалов.

Возможное понижение температуры плавления малых частиц с уменьшением их размера была высказана Дж.Томсоном еще в конце XIX в. и затем теоретически рассмотрена П.Павловым [1]. В дальнейшем появилось большое число теоретических и экспериментальных работ, обзор которых приведен в [2–8].

Макроскопическое вещество имеет четко определенную температуру плавления при данном давлении, что проявляется в изменении формы образца, которое можно легко наблюдать экспериментально. В отличие от этого кластеры и наночастицы не имеют четко фиксированной температуры плавления. С уменьшением размера частиц определение температуры плавления становится принципиально сложной проблемой [8].

В то же время температура плавления наночастиц является одним из наиболее важных физических параметров, представляющих большой практический интерес, поскольку температурой плавления определяется порог разрушения наноструктурных элементов, систем и тонких пленок.

В настоящей работе предложен новый подход как экспериментального определения, так и теоретической оценки температуры плавления наночастиц чистых металлов.

Нанотермодинамика и классическая термодинамика

Наночастицы занимают промежуточное положение между фазами и атомами, которые рассматриваются в термодинамике с противоположных позиций. Для фаз, представляющих собой макроскопические образования, учитывается только внутренняя энергия, а для атомов — только внешняя (внутренняя энергия считается постоянной и ее можно отбросить). Для наночастиц обе энергии играют важную роль, и потому возникает принципиальное отличие нанотермодинамики от классической термодинамики.

Об истории возникновения нанотермодинамики рассказано Т.Хиллом [9] и А.И.Русановым [10]. Ранее наночастицы назывались коллоидными частицами и были предметом изучения коллоидной химии, которая давно имеет классификацию малых объектов. Первая монография по нанотермодинамике принадлежит Т.Хиллу [11]. Анализ ее основных положений проведен, например, в работе [12].

Т.Хилл рассмотрел ансамбль из N_A одинаковых наносистем и предположил, что энергия взаимодействия между системами в таком ансамбле пренебрежимо мала по сравнению с внутренней энергией отдельной наносистемы. Число наносистем в ансамбле N_A предполагается макроскопическим, поэтому Т.Хилл [11] применяет к ансамблю уравнение макроскопической термодинамики

$$dE_t = TdS_t - pdV_t + \mu dN_t + WdN_A, \quad (1)$$

где индекс «*t*» означает, что речь идет о суммарных характеристиках всего ансамбля.

Специфика ансамбля наночастиц заключается в том, что имеется дополнительный параметр N_A , от которого зависит степень гетерогенности. У каждой наносистемы имеется средняя энергия E , средний объем V и среднее число молекул (атомов) N . Поскольку все наносистемы в ансамбле предполагаются одинаковыми, то имеют место соотношения

$$E_t = N_A E, \quad V_t = N_A V, \quad N_t = N_A N, \quad S_t = N_A S, \quad (2)$$

которые определяют полный набор термодинамических характеристик у отдельной наносистемы.

Применяя к уравнению (1) принцип макроскопической однородности, по теореме Эйлера об однородных функциях Т.Хилл [11] получает:

$$E_t = TS_t - pV_t + \mu N_t + WN_A. \quad (3)$$

В силу соотношений (2) у отдельной наносистемы

$$E = TS - pV + \mu N + W. \quad (4)$$

Подставляя (2) в (1) и используя (4), Т.Хилл получает [11]:

$$dE = TdS - pdV + \mu dN. \quad (5)$$

Тем самым Т.Хилл доказывает, что основное термодинамическое тождество для любой наносистемы имеет тот же вид, что и в макроскопической термодинамике.

Появление величины W в правой части уравнения (4) приводит к увеличению общего числа термодинамических параметров. Наряду с «дифференциальным» химическим потенциалом μ , определенным по уравнению (5), вводится «интегральный» химический потенциал χ как удельная свободная энергия Гиббса:

$$F + pV = \chi N. \quad (6)$$

Здесь $F = E - TS$ — свободная энергия Гельмгольца. Из (4) и (6) следует

$$(\chi - \mu)N = W. \quad (7)$$

В классической термодинамике правая часть уравнения (7) равна нулю.

Однако при рассмотрении поверхностных явлений [13, 14] в уравнении (4) $W \neq 0$, а имеет вид $W = f\sigma S$, где f — коэффициент, зависящий от формы поверхности; σ — поверхностное натяжение конденсированной фазы; S — площадь ее поверхности. Это означает, что поверхностный слой конденсированной фазы представляет собой нанопленку и ее термодинамические характеристики должны определяться на основе уравнений нанотермодинамики.

Температура наночастицы

Температура наночастицы определяется энергией случайного движения составляющих ее атомов или молекул относительно ее центра масс. Если вращательными и поступательными степенями свободы пренебречь, то внутренняя температура наночастицы определяется соотношением

$$\frac{3N_A}{2} kT_A = \left\langle \sum_{i=1}^{N_A} \frac{m_i (v_c - v_i)^2}{2} \right\rangle, \quad (8)$$

где m_i и v_i — масса и скорость составляющих наночастицу атомов (молекул); v_c — скорость центра масс; N_A — число атомов в наночастице и k — постоянная Больцмана.

Соотношение (8) представляет собой кинетическое определение температуры наночастицы. Ее можно определить и как термодинамическую величину

$$T_A = \frac{dE_t}{dS_t}, \quad (9)$$

где энергия E_t и энтропия S_t определены соотношением (2).

Температуры наночастицы, определяемые соотношениями (8) и (9), — это разные величины, и их различие приводит к принципиальным последствиям [15].

При термодинамическом рассмотрении наночастицы учитывается не только энергия теплового движения, но и потенциальная энергия взаимодействия, в том числе и энергия конфигурационного возбуждения, поэтому это определение более строго и корректно.

Температура плавления наночастицы

Физическая природа уменьшения температуры плавления частицы с уменьшением ее размера заключается в следующем: с уменьшением размера частицы возрастает доля поверхностных атомов, энергия связи которых меньше, чем для атомов в объеме, так что необходима меньшая энергия теплового движения для осуществления фазового перехода твердое тело – жидкость.

Однако найти количественную связь между температурой плавления наночастицы и ее размером оказалось непросто. Томсон впервые получил формулу, которая описывала зависимость температуры плавления частицы, находящейся в равновесии со своим расплавом, в зависимости от ее радиуса [16]:

$$T_m(r) = T_0 [1 - (\nu/L)(2\sigma/r)], \quad (10)$$

где $T_m(r)$ — температура плавления частицы радиуса r ; T_m — температура плавления макрочастицы; ν — удельный объем; L — удельная теплота плавления макрочастицы.

Формула Томсона содержит внутреннее противоречие, так как, согласно этой формуле, малая частица должна расплавиться при температуре меньшей, чем температура расплава, в равновесии с которым она находится.

В последующих работах различных авторов при выводе зависимости $T_m(r)$ были сделаны более реалистические предположения [14].

Приведем некоторые из них, следуя [16]:

$$T_m(r) = T_0 \left[1 - 2 / (\rho_S L r) (\sigma_S - \sigma_\ell (\rho_S / \rho_\ell)^{2/3}) \right],$$

$$T_m(r) = T_0 \left[1 - 3 / (\rho_S L r) (\sigma_S - \sigma_\ell (\rho_S / \rho_\ell)^{2/3}) \right],$$

$$T_m(r) = T_0 \left[1 - 2 / (\rho_S L r) (\sigma_{S\ell} / (r - \delta) - \sigma_\ell / r (1 - \rho_S / \rho_\ell)) \right], \quad (11)$$

где σ_S и σ_ℓ — поверхностные натяжения твердой и жидкой фаз; $\sigma_{S\ell}$ — поверхностное натяжение на границе раздела твердой и жидкой фаз; ρ_S и ρ_ℓ — плотности твердой и жидкой частиц; δ — толщина слоя расплава на твердой частице.

Здесь также существует трудность, так как в формулу (11) входит поверхностное натяжение твердой фазы, определить которое в рамках традиционных методов невозможно.

В рамках термодинамического подхода, развитого нами в ряде работ, для зависимости температуры плавления наночастиц от их размера мы получили следующее выражение [17]:

$$T_m(r) = T_0 \left(1 - \frac{d}{r} \right), \quad (12)$$

где T_0 — температура плавления массивного образца; $d = 2\sigma\nu/RT$; σ — поверхностное натяжение; ν — молярный объем; R — универсальная газовая постоянная.

При $r < d$ формула (1) теряет физический смысл ($A(r) \rightarrow \infty$), поэтому доопределим функцию $A(r)$ в этой области так, чтобы в точке $r = 0$ функция $A(r)$ обращалась в ноль. Это условие выполняется, когда функцию (1) перепишем в виде

$$T_m(r) = T_0 \left(1 - \frac{d}{d+r} \right). \quad (13)$$

Формула (13) с большой точностью описывает экспериментальные кривые для наночастиц (рис.).

То, что формулы (12) и (13) действительно описывают размерные эффекты в плавлении наночастиц, показано нами в работе [18], где определено поверхностное натяжение 55 металлов из периодической таблицы Менделеева.

В этой же работе приведены значения параметра d для 55 металлов, которыми мы воспользуемся в настоящей работе.

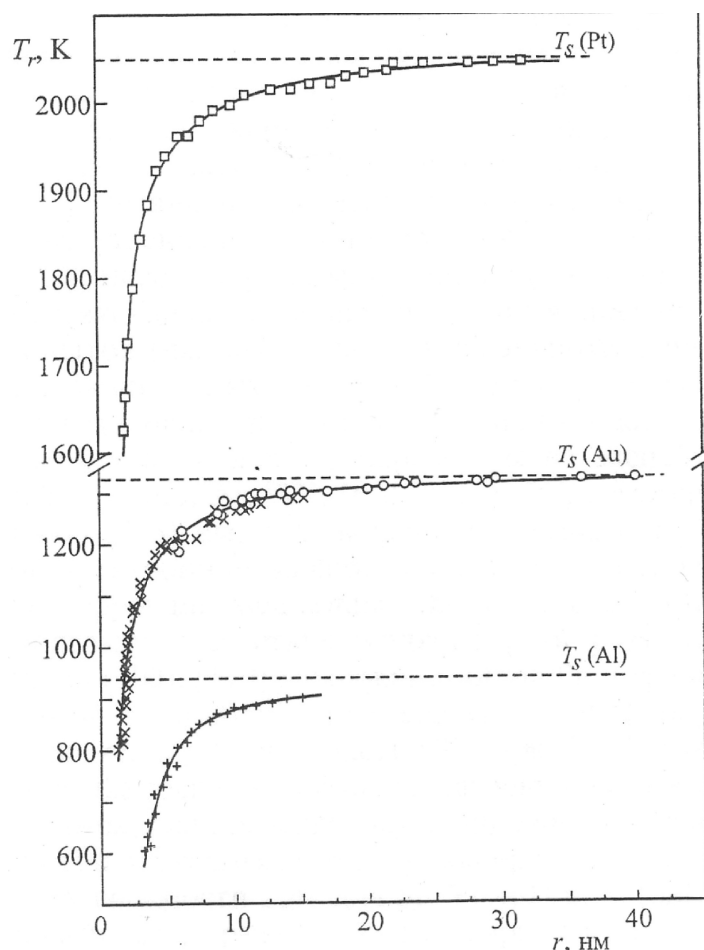


Рисунок. Зависимость температуры плавления от радиуса наночастиц платины, золота и алюминия [6]

Щелочные металлы

В периодической системе щелочные металлы следуют сразу за инертными газами и имеют электронную конфигурацию ns^1 . Очевидно, что валентные электроны легко могут быть удалены, потому что энергетически выгодно отдать электрон и приобрести конфигурацию инертного газа. Поэтому для щелочных металлов характерны восстановительные свойства, низкие потенциалы ионизации и электроотрицательности. В таблице 1 приведены значения температур плавления наночастиц щелочных металлов различного радиуса.

Т а б л и ц а 1

Температура плавления наночастиц щелочных металлов

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Li	452	1,4	188,3	396,5	440,1	267,3
Na	371	2,1	119,7	306,6	356,1	251,3
K	337	3,7	71,7	246,1	314,1	265,3
Rb	312	4,2	60,0	219,7	287,7	252,0
Cs	302	5,2	48,7	198,7	273,6	253,3

Из таблицы 1 видно, что для наночастиц щелочных металлов радиусом 1 нм температура плавления понижается примерно на одинаковую величину — $\Delta T \approx (250-260)$ К. Радиус наночастицы, содержащей N атомов, определяется как $R_N = R_0 \cdot N^{1/3}$, где R_0 — радиус атома щелочного металла. В ряду $Li \rightarrow Cs$ R_0 изменяется от 0,152 нм до 0,265 нм. Полагая $R_N = d$, мы получим, что в наночастице радиусом d содержится примерно одинаковое количество атомов щелочного металла — $N \approx 10^3$ — тысяча

атомов щелочного металла. Кластеры с числом атомов в диапазоне $50 \leq N \leq 10^7$ и наночастицы представляют собой одни и те же агрегаты, поэтому различий между ними не проводят [8].

Из таблицы 1 также следует, что наночастицы щелочных металлов размером 1–5 нм плавятся при отрицательных по Цельсию температурах, поэтому получение таких частиц в обычных условиях весьма проблематично. Однако возможно образование стабильных наночастиц щелочного металла размером 1–5 нм в галоидных соединениях щелочных металлов при облучении большими дозами радиации [19].

Щелочноземельные металлы

Внешняя электронная оболочка атомов щелочноземельных металлов содержит $2s$ -электрона, ей предшествует оболочка из $2s$ - и $6p$ -электронов. Щелочноземельные металлы проявляют в соединениях степень окисления +2. Химически щелочноземельные металлы активны, активность их возрастает от Ca к Ra. В таблице 2 приведены значения температур плавления наночастиц щелочноземельных металлов различного радиуса.

Т а б л и ц а 2

Температура плавления наночастиц щелочноземельных металлов

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Be	1558	1,8	556,3	1320,4	1558	1001,7
Mg	923	3,1	225,1	704,6	869,1	697,9
Ca	1118	7,0	139,8	657,6	980,7	978,2
Sr	1030	8,3	110,8	562,8	883,6	919,2
Ba	983	8,9	99,3	520,1	834,5	883,7

В отличие от щелочных металлов наночастицы щелочноземельных металлов могут быть стабильны при размерах в 10 нм, а наночастицы бериллия — и при 1 нм. Температура плавления понижается на большую величину, чем в случае щелочных металлов — $\Delta T \approx (700-1000)$ К.

Число атомов в наночастице радиусом d в 5–7 раз больше, чем в случае щелочных металлов.

Подгруппа бора

Подгруппа бора — химические элементы 3-й группы периодической таблицы химических элементов. Все элементы данной подгруппы, за исключением бора, — металлы. В таблице 3 приведены значения температур плавления наночастиц металлов подгруппы бора различного радиуса.

Т а б л и ц а 3

Температура плавления наночастиц металлов подгруппы бора

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Al	933	2,2	291,6	764,8	933	641,4
Ga	302,8	0,9	159,3	277,6	297,3	143,3
In	429	1,6	165,0	369,8	415,7	264,0
Tl	576	2,4	169,4	464,5	549,6	406,5

Из таблицы 3 следует, что при комнатной температуре стабильны наночастицы алюминия и таллия размером 10 нм. Наночастицы галлия нестабильны, вплоть до размеров в 100 нм. Понижение температуры плавления для наночастиц подгруппы бора изменяется в пределах от 140 до 640 К.

Подгруппа углерода

В подгруппу углерода входят углерод, кремний, германий, олово и свинец. Это p -элементы IV группы периодической системы Д.И. Менделеева. Их атомы на внешнем уровне содержат по четыре электрона ns^2np^2 , чем объясняется сходство их химических свойств. В таблице 4 приведены значения температур плавления наночастиц металлов подгруппы углерода различного радиуса.

Температура плавления наночастиц металлов подгруппы углерода

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Si	1686	4,9	285,8	1131,5	1535,9	1400,2
Ge	1231	4,0	246,2	879,3	1140,0	984,8
Sn	505	2,0	168,3	420,8	485,6	336,7
Pb	600	2,6	166,7	600,0	600,0	433,3

Здесь различия в подгруппе значительны. Кремний и германий — полупроводники и имеют близкие значения ΔT . То же самое наблюдается и для типичных металлов — олова и свинца.

Наночастицы размером 10 нм в обоих случаях стабильны при обычных условиях. Температура плавления наночастиц свинца размером 10 нм уже совпадает с температурой массивного вещества. Можно ожидать, что это свойство наночастиц свинца найдет практические приложения.

Халькогены

В группу входят кислород O, сера S, селен Se, теллур Te, полоний Po и искусственно полученный унунгексий Uuh. Мы остановимся на металлах — селене и теллуре (табл. 5).

Температура плавления наночастиц металлов халькогенов

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Se	493	1,9	170,0	414,3	475,0	323,0
Te	725	3,5	161,1	537,0	676,7	563,9

В случае халькогенов также наночастицы размером 10 нм в обоих случаях стабильны при обычных условиях.

Подгруппа меди

В группу входят переходные металлы медь Cu, серебро Ag и золото Au. В таблице 6 приведены значения температур плавления наночастиц металлов подгруппы меди различного радиуса.

Температура плавления наночастиц металлов подгруппы меди

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Cu	1356	2,3	411,0	1102,4	1296,4	945,0
Ag	1234	3,1	301,0	942,0	1162,0	933,0
Au	1336	3,3	310,7	1004,5	1253,3	1025,3

Для металлов подгруппы меди стабильными при комнатной температуре оказываются наночастицы размером 1 нм! В широко известной и часто цитируемой работе [20] для наночастиц золота размером 1 нм получено экспериментальное значение температуры плавления 305÷310 К, что практически совпадает с полученным нами значением. Это говорит в пользу предложенной в настоящей работе методики расчета температуры плавления наночастиц.

Подгруппа цинка

Подгруппа цинка — химические элементы 2-й группы периодической таблицы химических элементов. В группу входят цинк Zn, кадмий Cd и ртуть Hg. В таблице 7 приведены значения температур плавления наночастиц металлов подгруппы цинка различного радиуса.

Т а б л и ц а 7

Температура плавления наночастиц металлов подгруппы цинка

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Zn	693	1,5	277,2	602,6	672,8	415,8
Cd	594	1,9	204,8	499,2	572,3	389,2
Hg	234	0,83	127,7	216,1	230,2	106,3

Наночастицы цинка и кадмия размером 10 нм, как и большинство рассмотренных выше наночастиц металлов, стабильны при комнатной температуре и выше. Ртуть всегда занимала особое положение среди металлов.

Подгруппа хрома

В группу входят хром Cr, молибден Mo и вольфрам W. По физическим и химическим свойствам молибден и вольфрам сходны, но отличаются от хрома.

Т а б л и ц а 8

Температура плавления наночастиц металлов подгруппы хрома

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Cr	2173	3,8	452,7	1574,6	2019,5	1720,3
Mo	2873	6,5	383,1	1741,2	2542,5	2490,0
W	3673	8,4	390,7	1996,2	3144,7	3282,3

Наночастицы подгруппы хрома размером 1 нм стабильны при комнатной температуре и выше. Изменения температуры плавления здесь очень значительны.

Подгруппа марганца

Подгруппа марганца — химические элементы 7-й группы периодической таблицы химических элементов. В группу входят переходные металлы марганец Mn, технеций Tc и рений Re.

Т а б л и ц а 9

Температура плавления наночастиц металлов подгруппы марганца

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Mn	1517	2,8	399,2	1185,2	1436,6	1116,0
Tc	2473	5,1	405,4	1637,7	2244,1	2067,6
Re	3423	7,1	422,6	2001,8	2997,4	3000,4

Здесь закономерности полностью совпадают с подгруппой хрома.

Подгруппа железа

Т а б л и ц а 10

Температура плавления наночастиц металлов подгруппы железа

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Fe	1808	3,1	441,0	1380,2	1702,5	1367,0
Co	1763	2,8	464,0	1377,3	1670,0	1299,0
Ni	1726	2,7	466,5	1359,1	1637,6	1260,0

И в этом случае имеют место закономерности, как и для металлов подгрупп марганца и хрома.

Лантаноиды

Лантаноиды — семейство из 14 химических элементов III группы 6-го периода периодической таблицы. Лантан часто рассматривается вместе с этими элементами для удобства сравнения, хотя к лантаноидам он не относится.

Т а б л и ц а 1 1

Температура плавления наночастиц лантаноидов

Металл	T_0 , К	d , нм	T_m , К $r = 1$ нм	T_m , К $r = 10$ нм	T_m , К $r = 50$ нм	$\Delta T = (T_0 - T_m)$, К $r = 1$ нм
Ce	1077	5,4	168,3	699,4	972,0	908,7
Pr	1208	6,0	172,6	755,0	1078,6	1035,4
Nd	1298	6,4	175,4	791,5	1150,7	1125,4
Sm	1325	6,3	181,5	812,9	1176,7	1143,5
Eu	1175	8,3	126,3	642,1	1007,7	1048,7
Gd	1585	7,6	184,3	900,6	1376,0	1400,7
Tb	1631	7,5	191,9	932,0	1418,3	1439,1
Dy	1680	7,6	195,3	954,5	1458,3	1484,7
Ho	1734	7,8	197,1	974,2	1500,0	1534,0
Er	1770	7,8	201,1	994,4	1531,4	1569,0
Tm	1818	7,4	216,4	1044,8	1583,6	1602,0
Yb	1097	6,5	146,3	664,8	970,8	950,7
Lu	1925	8,2	209,2	1057,7	1653,8	1715,8

Заключение

Из полученных результатов следует, что большинство наночастиц металлов размером 1 нм неустойчивы при комнатной температуре. Стабильными оказываются наночастицы бериллия, подгрупп меди, хрома, марганца и железа. Большинство наночастиц металлов размером 10 нм стабильны при обычных условиях, за исключением калия, рубидия, цезия и галлия.

Полученные в настоящей работе результаты будут полезны всем, кто занимается синтезом новых наноструктурных материалов.

Работа выполнена по программе МОН РК 055 «Научная и/или научно-техническая деятельность», подпрограмма 101 «Грантовое финансирование научных исследований». Контракт № 58.

References

- 1 Pawlow P. Uber die Abhangigkaeit des Schmelzpunktes von der Oberflachentnergie eines festen Korpers // Z. Phys. Chem. — 1909. — B. 65. — № 1. — S. 1–65.
- 2 Petrov Ju.K. Physics of small particles. — Moscow: Nauka, 1982. — 360 p.
- 3 Skripov V.P., Kaverda V.P. Spontaneous crystallization of the overcooled liquids. — Moscow: Nauka, 1984. — 230 p.
- 4 Nepijuko S.A. Physical properties of small metal particles. — Kiev: Naukova dumka, 1985. — 240 p.
- 5 Gusev A.N., Rempel A.A. Nanocrystal materials. — Moscow: Physmathlit, 2001. — 224 p.
- 6 Gladkih N.T., Dukarev S.V. et al. The superficial phenomena and phase transformations in thin films. — Kharkov: KhNU, 2004. — 276 p.
- 7 Pavlov V.A. Use of thermodynamics of small systems in the theory of fusion of nanoparticles // Vestnik of the St.-Petersburg University. A series 4 (physics, chemistry). — 2007. — № 3. — P. 70–74.
- 8 Makarov G.N. Experimental methods of definition of temperature and warmth of fusion of clusters and nanoparticles // Successes of Physical Sciences. — 2010. — Vol. 180. — № 2. — P. 185–207.
- 9 Hill T.L. Perspective: nanothermodynamics // Nano Letters. — 2001. — Vol. 1. — № 3. — P. 111–112.
- 10 Rusanov A.I. Nanothermodynamics: the chemical approach // The Russian chemical magazine. — 2006. — Vol. 50. — № 2. — P. 145–151.
- 11 Hill T.L. Thermodynamics of small systems. — New York: Benjamin, 1963. — Part 1. — 171 p.
- 12 Pavlov V.A. Thermodynamics of small systems, modelling of liquid clusters and balance of phases in nanosystem: Dissertation ... candidate of physical and mathematical sciences. — St.-Petersburg, 2008. — 125 p.
- 13 Ono S., Kondo S. The molecular theory of a superficial tension. — Moscow: IL, 1963. — 292 p.
- 14 Rusanov A.I. Phase of balance and the superficial phenomena. — Leningrad: Chemistry, 1967. — 346 p.

- 15 *Berry P.S., Smirnov B.M.* Phase transitions and the accompanying phenomena in simple systems of the connected atoms // *Successes of Physical Sciences.* — 2005. — Vol. 175. — P. 367–411.
- 16 *Almjasheva O.V., Hussarov V.V., Lebedev O.V.* The superficial phenomena. — St.-Petersburg: Publishing house SpbGETU «LETI», 2004 — 128 p.
- 17 *Jurov V.M., Ibraev N.H., Guchenko S.A.* Experimental definition of a superficial tension of nanoparticles and nanofilms // *News of High schools. Physics.* — 2011. — Vol. 54. — № 1/3. — P. 335–340.
- 18 *Jurov V.M.* Superficial tension and Tolmen's constant of metals // *Vestnik KarGU. Physics Ser.* — 2012. — № 1(65). — P. 23–29.
- 19 *Shvarts K.K., Ecmans Ju.A.* Dielectric materials: radiating processes and radiating firmness. — Riga: Zinatne, 1989. — 187 p.
- 20 *Buffat Ph., Borel J.-P.* Size effect on the melting temperature of gold particles // *Phys. Rev. A.* — 1976. — Vol. 13. — № 6. — P. 2287–2298.

В.М.Юров

Таза металдардағы нанобөлшектердің балқу температурасы

Мақалада периодтық жүйедегі 48 металл үшін нанобөлшектердің балқу температурасы өлшенген. Өлшемі 1 нм тең алтын нанобөлшегі үшін балқу температурасының эксперименттік шамасы — 305÷310 К, бұл шама біздің өлшеп алған шамаға сәйкес болды. Осыдан нанобөлшектердің балқу температурасын есептеуге ұсынатын әдісіміз дұрыс екені анықталды. Алынған нәтижелер бойынша, металдардың басым көпшілігі үшін өлшемдері 1 нм нанобөлшектер бөлме температурасында тұрақсыз екені шығады. Ал тұрақтылардың қатарына бериллий, мыс, хром, марганец және темір топтарының нанобөлшектері жатады. Өлшемдері 10 нм металл нанобөлшектерінің көбісі қалыпты жағдайларда тұрақты екен, бірақ олардың қатарына калий, рубидий, цезий және галлий нанобөлшектері жатпайды.

V.M.Jurov

Temperature of fusion of nanoparticles of pure metals

In work for 48 metals of periodic system temperatures of fusion of nanoparticles are calculated. For nanoparticles of gold in the size of 1 nanometers experimental value of temperature of fusion — 305÷310 K is received, that practically coincides with the value received by us. It speaks well for the design procedure of temperature of fusion of nanoparticles offered in the present work. From the received results follows, that the majority of nanoparticles of metals in the size of 1 nanometers are stable at a room temperature. Stable there are nanoparticles of beryllium, subgroups of copper, chrome, manganese and iron. The majority of nanoparticles of metals in the size of 10 nanometers are stable under usual conditions, behind an exception of potassium, rubidium, cesium and gallium.

В.М.Юров, В.Ч.Лауринас, О.Н.Завацкая

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: exciton@list.ru)

Трибологические свойства ионно-плазменных композиционных покрытий

Измерены коэффициенты трения скольжения покрытий, полученных ионно-плазменным методом. В первом случае при осаждении покрытий использовались многофазные катоды. Во втором случае осуществлялась генерация многокомпонентных плазменных потоков при одновременном распылении многофазных и титановых катодов. Нанесение покрытий осуществлялось в атмосфере аргона и азота. Во всех случаях величина коэффициента сухого трения лежит в пределах 0,1–0,3. Это значительно меньше коэффициентов сухого трения одноименных пар большинства металлов. Учитывая, что исследованные покрытия обладают значительной твердостью и износостойкостью, можно рекомендовать их в качестве пар трения в вакуумных устройствах.

Ключевые слова: сухое трение, композиты, покрытия, микротвердость, коэффициенты трения, ток дуги, давление, температура.

Введение

Интенсивное развитие приборостроения в космонавтике, ракетной технике и ряде других областей выдвигают задачу обеспечения надёжной работы подвижных узлов исполнительных механизмов приборов в экстремальных условиях (вакуум, высокая температура, интенсивное излучение, высокие контактные нагрузки и т.д.).

Проблема повышения надёжности исполнительных механизмов приборов в таких условиях тесно связана с вопросами триботехники, с исследованиями контактного взаимодействия взаимно перемещающихся твёрдых тел, в результате которого в зоне контакта возникают силы трения.

По данным исследований, проведенных КБ «Салют», ГКНПЦ им. М.В.Хруничева, ФГУП «Всероссийский институт авиационных материалов», Институтом металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова РАН, фирмой Glaciet (Англия) и др., более высокие антифрикционные свойства покрытий поверхностей космических элементов достигаются при использовании ионно-плазменного метода нанесения покрытий.

Антифрикционные характеристики узлов трения определяются свойствами поверхностного слоя деталей. Поэтому экономически и технически оправданным является подход к выбору материала катодов, при котором их механическая прочность определяется свойствами конструкционного материала, а специальные свойства поверхности обеспечиваются формированием на ней тонких слоёв покрытий толщиной, близкой к величине максимально допустимого износа. Нанесение износостойких антифрикционных многослойных покрытий не только увеличивает надёжность и долговечность узлов, но и снижает затраты на дефицитные и дорогостоящие материалы, уменьшает расходы на обслуживание и ремонт оборудования.

Использование обычных смазок в узлах трения, работающих в условиях космического вакуума, неприемлемо. Вследствие высокой упругости паров большинство жидкостей и смазок в вакууме испаряется и теряет свои смазывающие свойства. Действие температуры еще более усугубляет этот процесс. Работу узлов трения без смазки в вакууме следует рассматривать как взаимодействие поверхностей при сухом трении. В этом случае, в отличие от узлов жидкостного трения, контактирующие поверхности не разделены искусственно созданной масляной пленкой, частично или полностью устраняющей контакт между ними. Однако нельзя считать, что не смазанные маслом поверхности вступают в непосредственный контакт друг с другом. В реальных условиях поверхность узлов трения может быть покрыта окисной пленкой, которая возникает при их изготовлении, примесью чужеродных металлов, структурными дефектами и т.д. В космосе начинает играть роль модификация поверхности за счет облучения частицами высокой энергии.

Боуден с сотрудниками измерили коэффициенты для чистых металлов. С их поверхности атомы воздуха и окисные пленки были удалены нагреванием в вакууме [1]. Полученные коэффициенты трения колебались от 1 до 5, а для некоторых пар достигали 10 и выше, тогда как в обычных условиях они составляли менее 1.

Это указывает на то, что для уменьшения коэффициента трения в вакууме необходимо модифицировать поверхность узлов трения и, в частности, использовать специальные покрытия, полученные также в условиях вакуума. Процесс модификации поверхности должен заканчиваться образованием на поверхностях трения тонких слоев вторичных структур, предохраняющих материал от схватывания и задигов, а также равновесной шероховатости, необходимой для обеспечения стабильного значения коэффициента трения. В этой области наукой еще не вполне раскрыты механизмы самоорганизации в зоне контакта и пути воздействия на способность пар трения к самоорганизации, когда система сама формирует оптимальную микрогеометрию поверхностей, защитные пленки, перестраивает структуру поверхностных слоев металла, меняет твердость в целях сохранения нормального функционирования [2].

Объекты и методика эксперимента

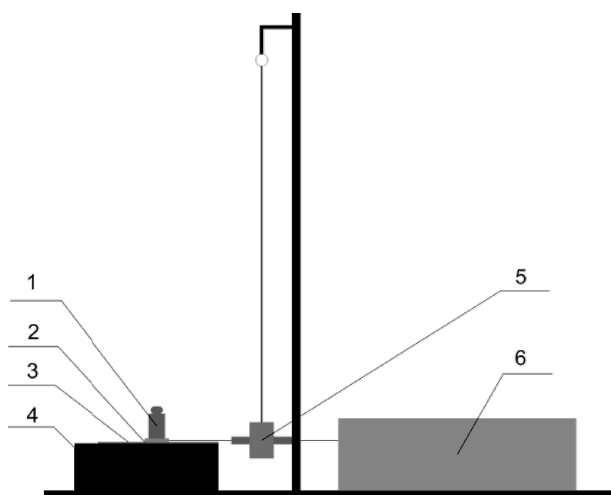
В настоящей работе использовались композиционные катоды Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al, Zn–Cu–Al и Mn–Fe–Cu–Al. С помощью этих катодов наносились покрытия на установке ННВ-6.6И1 на стальную подложку при различных технологических режимах. Количественный анализ элементного состава покрытий проводился на электронном микроскопе JEOL JSM-5910. Исследование микротвердости композиционных покрытий проводилось на микротвердомере ISOSCAN OD. Для исследования поверхности покрытий в наномасштабе нами использовался атомно-силовой микроскоп NT-206. Контроль качества покрытий производился на установке ПККП-1К методом анодно-поляризационного инициирования дефектов (АПИД).

Нами использовалось осаждение многофазных покрытий в условиях ионного ассистирования. Перед нанесением покрытий в вакуумной камере производилась очистка подложек сначала тлеющим разрядом, для этого на подложку подавалось напряжение 1–3 кВ в течение 5–10 мин, затем — ионная очистка.

Информационно-измерительная система для трибологических исследований предложена в [3] и состоит из двух основных компонентов: экспериментальной установки и программного обеспечения верхнего информационного уровня. Экспериментальная установка для определения коэффициентов трения построена по принципу модульности. Общая схема установки для определения коэффициентов трения представлена на рисунке 1.

Блок-схема устройства для определения коэффициентов трения изображена на рисунке 2.

Как видно из блок-схемы, устройство для определения коэффициентов трения состоит из следующих основных модулей: блока питания, датчика усилия и аналого-цифрового преобразователя, двигателя и схемы управления им, датчика тока двигателя, датчика угловой скорости, основного контроллера и интерфейса связи с программным обеспечением верхнего информационного уровня.



1 — известный прижимной вес; 2 — образец; 3 — поверхность скольжения; 4 — измерительный стол; 5 — датчик силы; 6 — блок электроники и привод

Рисунок 1. Общая схема установки для определения коэффициентов трения

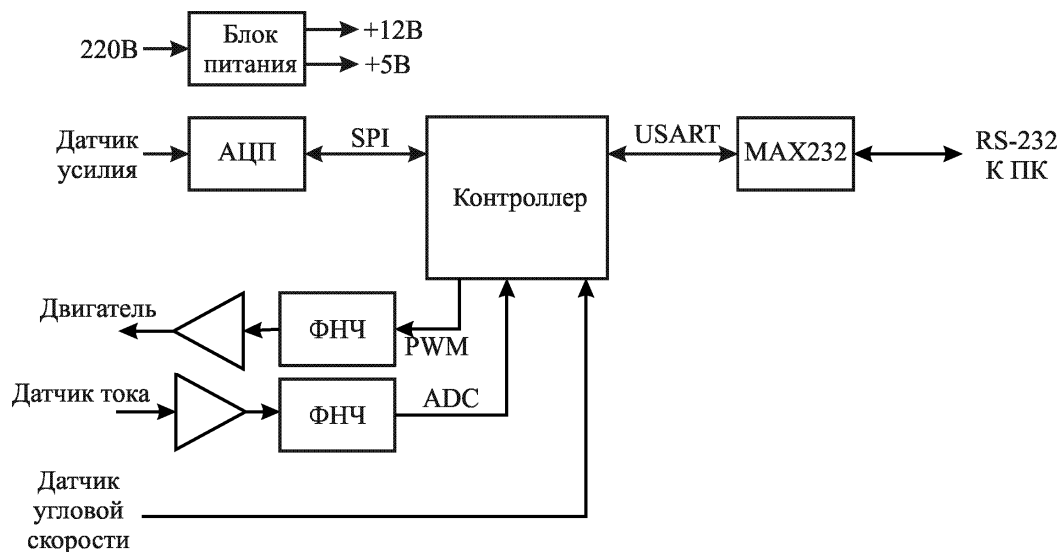


Рисунок 2. Блок-схема установки для определения коэффициентов трения

Основной принцип работы установки для определения коэффициентов трения покоя и скольжения заключается в измерении силы трения покоя и скольжения небольшого исследуемого образца материала, при перемещении его по поверхности подложки из другого материала с известным коэффициентом трения. Полученные мгновенные значения силы трения передаются программному обеспечению верхнего информационного уровня для их обработки.

Измерение производится в два этапа. На первом этапе производится постепенное натяжение нити и соответственно увеличение силы трения. Данный этап продолжается до начала движения образца. После начала движения образца стабилизируется скорость движения и производится измерение силы трения скольжения. Результаты второго этапа измерений усредняются, и рассчитывается коэффициент трения.

По команде оператора программного обеспечения начинается измерение силы трения.

На первом этапе производится измерение силы трения покоя, для чего через двигатель пропускается линейно возрастающий ток. При этом непрерывно производится измерение силы трения.



Рис. 3. Внешний вид графического представления результатов исследования с помощью системы

Когда датчик угловой скорости обнаруживает начало движения исследуемого образца, начинается второй этап, на котором производится измерение силы трения скольжения. Для этого ток через двигатель увеличивается до тех пор, пока не будет достигнута заданная скорость вращения. После этого запускается алгоритм фазовой автоподстройки частоты, в процессе которого происходит синхронизация фазы сигнала фотодатчика и внутреннего образцового генератора, в результате чего час-

тоты этих сигналов становятся точно равными. Это обеспечивает строго равномерное движения исследуемого образца и исключает погрешности измерения, связанные с ускорением или наличием вязкого трения. Результаты измерения выводятся в специализированной графической форме программного обеспечения системы. Выводится усредненное значение силы трения скольжения, среднеквадратическое отклонение, коэффициент трения, сила трения покоя. Внешний вид формы представлен на рисунке 3.

Программное обеспечение позволяет также выполнять такие команды, как перемещение образца, медленное равномерное движение образца, измерение текущей силы на датчике силы, автоматизированное проведение измерения с выводом результатов в графическом виде, а также производить интерпретацию и усреднение измеренных значений и вывод результатов измерений.

Многофазные покрытия Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al

Результаты РФЭС-анализа исследованных покрытий приведены в таблице 1, а АСМ-изображение и фрактальная структура — на рисунках 4, 5.

Т а б л и ц а 1

Результаты расчета стехиометрии компонентов

Покрытие	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	Химическая формула по данным анализа
Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al	1	4,32	4,64	5,26	18,39	67,85	$\text{CrMn}_{4,32}\text{Si}_{4,64}\text{Cu}_{5,26}\text{Fe}_{18,39}\text{Al}_{67,85}$

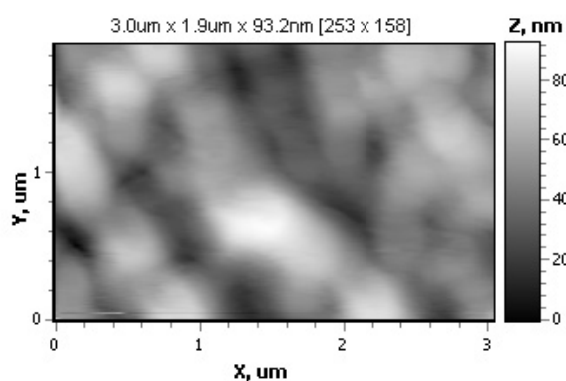


Рисунок 4. АСМ-изображение покрытия Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al

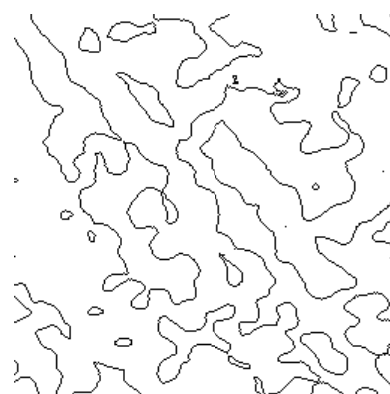


Рисунок 5. Фрактальная структура покрытия Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al

Мы исследовали также покрытия, возникающие при одновременном распылении катода Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al и титанового катода в атмосфере аргона и азота. В процессе одновременного распыления различных катодов ионы металлов перемешиваются в плазме и после осаждения формируют покрытие. Такой подход является «вынужденным», поскольку получение многофазных композиционных катодов с заданным числом компонент представляет собой сложную задачу, связанную с получением многокомпонентных сплавов, термодинамические свойства компонент которых могут значительно различаться.

На рисунке 6 показано электронно-микроскопическое изображение покрытия Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al + Ti в среде аргона. Отчетливо видны зерна титана с размером от 1 до 10 мкм в диаметре. Материалы с таким размером зерен принято называть крупнокристаллическими [4].

Результаты количественного РФЭС-анализа показали, что содержание Mn, Si, Cu и Al менее 1 масс. %. В среде азота структура покрытия резко изменяется (рис. 7) благодаря образованию нитрида титана. В этом случае средний размер зерен составляет 100–150 нм. Такие покрытия называют субмикрокристаллическими [4].

В таблицах 2 и 3 приведены результаты трибологических исследований указанных выше покрытий.

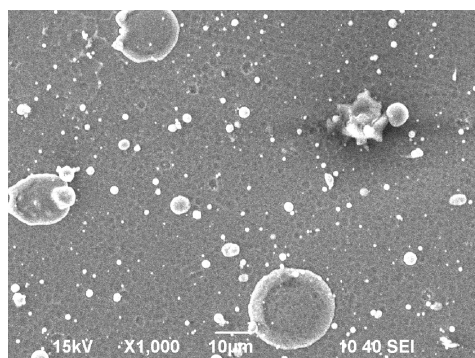


Рисунок 6. Электронно-микроскопическое изображение покрытия Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al + Ti в среде аргона

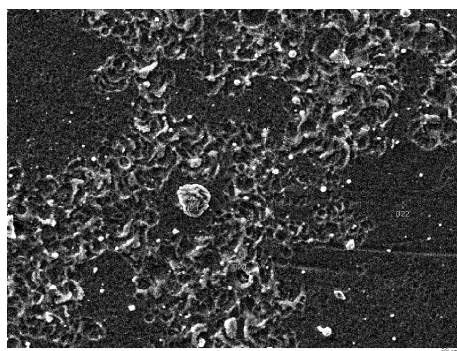


Рисунок 7. Электронно-микроскопическое изображение покрытия Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al + Ti в среде азота

Т а б л и ц а 2

Коэффициенты трения покрытий (Эл. № 2 — Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al) при нагрузке 100 г

Наименование образцов	Коэффициент трения	
	Алюминиевая пластина	Медная пластина
Эл. № 2, обр. 2, (25 мин)	0,153	0,242
Эл. № 2 + Ti в газ. среде аргона, обр. 2, (30 мин)	0,387	0,374
Эл. № 2 + Ti в газ. среде азота, обр. 2, (30 мин)	0,453	0,259
Эл. № 2 + Ti в газ. среде аргона, обр. 1, (15 мин)	0,235	0,236
Эл. № 2 + Ti в газ. среде азота, обр. 1, (15 мин)	0,250	0,265

Т а б л и ц а 3

Коэффициенты трения покрытий (Эл. № 2 — Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al) при нагрузке 50 г

Наименование образцов	Коэффициент трения	
	Алюминиевая пластина	Медная пластина
Эл. № 2, обр. 2, (25 мин)	0,219	0,256
Эл. № 2 + Ti в газ. среде аргона, обр. 2, (30 мин)	0,365	0,426
Эл. № 2 + Ti в газ. среде азота, обр. 2, (30 мин)	0,273	0,269
Эл. № 2 + Ti в газ. среде аргона, обр. 1, (15 мин)	0,265	0,349
Эл. № 2 + Ti в газ. среде азота, обр. 1, (15 мин)	0,268	0,234
Эл. № 2, обр. 1, $I_{н} = 30$ А	0,227	0,215
Эл. № 2, обр. 2, $I_{н} = 50$ А	0,171	0,224
Эл. № 2, обр. 3, $I_{н} = 70$ А	0,173	0,179

Бинарные катоды Fe–Al и Zn–Al

Результаты РФЭС-анализа исследованных покрытий приведены в таблице 4.

Т а б л и ц а 4

Результаты расчета стехиометрии компонентов

Покрытие	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	Химическая формула по данным анализа
Zn–Al	1	65,45					$ZnAl_{65,45}$
Al–Fe	1	43,04					$AlFe_{43,04}$

На рисунках 8 и 9 показаны АСМ-изображения поверхности покрытий Zn–Al и Al–Fe, полученных в режиме латерально-силовой микроскопии (одновременно с контактной статической АСМ). В таблицах 5 и 6 показаны результаты трибологических измерений.

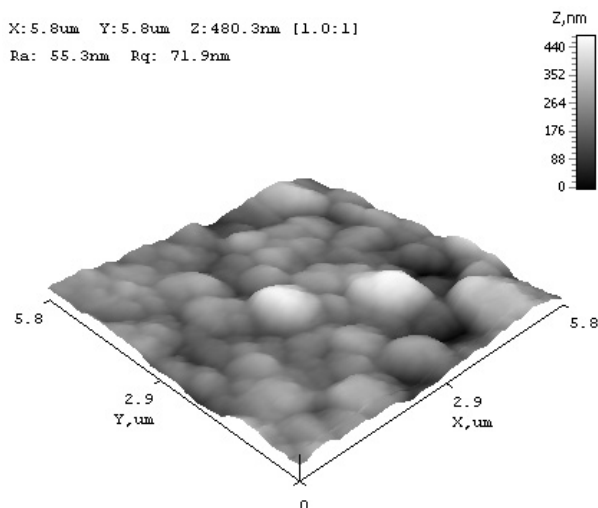


Рисунок 8. АСМ-изображение поверхности покрытия Zn–Al

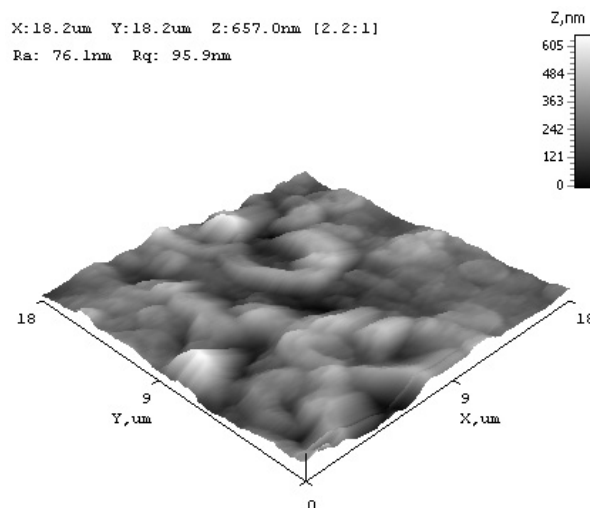


Рисунок 9. АСМ-изображение поверхности покрытия Fe–Al

Из рисунка 8 видно, что покрытие Zn–Al формируется в виде «глобулярной» структуры, имеющей определенное упорядочивание. Структура покрытия Fe–Al (рис. 9) резко отличается от структуры покрытия Zn–Al. В этом случае мы наблюдаем незамкнутые наноструктуры. Подобные наноструктуры были обнаружены и описаны в работе [5]. Причина таких отличий обсуждалась нами в работе [6].

Т а б л и ц а 5

Коэффициенты трения покрытий (Эл. А–Fe–Al) при нагрузке 50 г

Наименование образцов	Коэффициент трения	
	Алюминиевая пластина	Медная пластина
Эл. А + Ti в газ. среде аргона, обр. 1, (15 мин)	0,344	0,255
Эл. А + Ti в газ. среде аргона, обр. 2, (30 мин)	0,276	0,326
Эл. А + Ti в газ. среде азота, обр. 1, (15 мин)	0,317	0,350
Эл. А + Ti в газ. среде азота, обр. 2, (30 мин)	0,374	0,461

Т а б л и ц а 6

Коэффициенты трения покрытий (Эл. № 3–Zn–Al) при нагрузке 50 г

Наименование образцов	Коэффициент трения	
	Алюминиевая пластина	Медная пластина
Эл. № 3 Zn–Al + Ti в газ. среде аргона, обр. 1, (15 мин)	0,349	0,256
Эл. № 3 Zn–Al + Ti в газ. среде аргона, обр. 2, (30 мин)	0,321	0,432
Эл. № 3 Zn–Al + Ti в газ. среде азота, обр. 1, (15 мин)	0,249	0,274
Эл. № 3 Zn–Al + Ti в газ. среде азота, обр. 2, (30 мин)	0,366	0,450

На структуру покрытия Fe–Al значительное влияние оказывает величина тока дуги. Увеличение тока разряда дуги приводит к увеличению толщины покрытия, однако при возрастании тока свыше 130 А снижается совершенство структуры и резко повышается количество капельной фазы, которая является причиной снижения прочности сцепления подложки с покрытием.

При малой мощности разряда (ток дуги < 20–30 А) из-за уменьшения коэффициента ионизации плазмы в пленку «замуровываются» нейтральные частицы реакционного газа и катода, что способствует повышению концентрации дефектов покрытия. Экспериментально нами определен оптимальный ток — 90 А.

В случае бинарных катодов при распылении различных катодов ситуация несколько иная. Средний размер титановой фазы в покрытии Fe–Al + Ti в среде аргона меньше, чем в покрытии Cr–Mn–

Si–Cu–Fe–Al + Ti. В среде азота также наблюдаются меньшие размеры кристаллитов нитрида титана. Покрытие Fe–Al без титана соответствует основной массе покрытия Fe–Al + Ti. В целом закономерность формирования сферических кристаллитов титана такая же, как и в случае Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al + Ti.

Обсуждение результатов эксперимента

Чтобы проанализировать полученные результаты, рассмотрим коэффициенты трения одноименных и разноименных пар металлов (табл. 7 и 8). Сравнение таблиц 2, 3 и 5, 6 показывает, что коэффициенты трения полученных нами покрытий значительно меньше, чем для одноименных пар трения наиболее распространенных материалов и в 2 раза меньше, чем для разноименных пар трения. Наименьшим коэффициентом трения обладает покрытие Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al (табл. 2). При одновременном распылении катодов коэффициенты трения покрытий увеличиваются, но при этом возрастает их микротвердость.

Т а б л и ц а 7

Коэффициенты сухого трения для одноименных пар наиболее распространенных материалов [7]

Комбинации материалов		Коэффициент сухого трения
Алюминий	Алюминий	1,05–1,35
Медь	Медь	1,0
Сталь	Сталь	0,8
Железо	Железо	1,0
Кадмий	Кадмий	0,5
Хром	Хром	0,41
Графит	Графит (в вакууме)	0,5–0,8
Магний	Магний	0,6
Никель	Никель	0,7–1,1
Платина	Платина	1,2
Серебро	Серебро	1,4
Цинк	Цинк	0,6

Т а б л и ц а 8

Коэффициенты сухого трения для разнородных пар наиболее распространенных материалов [7]

Комбинации материалов		Коэффициент сухого трения
Алюминий	Низкоуглеродистая сталь	0,61
Латунь	Сталь	0,35
Кадмий	Хром	0,41
Медь	Низкоуглеродистая сталь	0,53
Никель	Низкоуглеродистая сталь	0,64

Физические свойства металлического покрытия в значительной мере определяются средним размером зерен. Наилучшим механическим свойствам почти всегда соответствует мелкозернистая структура, как, например, на рисунке 7. Действительно, проведенные нами предварительные измерения микротвердости покрытия Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al + Ti показали значение микротвердости около 70 ГПа. Это значительно превышает значение микротвердости традиционных нитрид-титановых покрытий (около 40 ГПа) и не так сильно отличается от микротвердости алмаза (100 ГПа). Таким образом, полученное нами покрытие можно отнести к сверхтвердым. Практическое использование полученного результата обусловлено необходимостью упрочнения инструментальных сталей режущего инструмента, сверл, вырубных штампов и т.д., качество которых в последние годы заметно снизилось. Производственные испытания покрытий Cr–Mn–Si–Cu–Fe–Al + Ti начаты на Карагандинском турбомеханическом заводе. В сочетании с низким коэффициентом сухого трения эти покрытия перспективны для использования в авиационной и космической технике.

Покрытия на основе бинарных сплавов алюминия обладают неплохой коррозионной стойкостью и могут быть использованы при изготовлении пар трения, работающих в агрессивных средах.

Заклучение

Меня технологические параметры нанесения ионно-плазменных покрытий (ток дуги, давление реакционного газа, температура детали и т.д.), можно довольно в широких пределах изменять их механические свойства [8].

Другим направлением изменения свойств покрытий (в том числе и трибологических) является формирование покрытий сложного элементного состава, реализуемых путем послойного или одно-временного осаждения на подложку в атмосфере реакционных газов потоков от двух источников: ионных [9], магнетронных [10], вакуумно-дуговых [11] и их комбинации [12].

Работа выполнена по программе МОН РК 055 «Научная и/или научно-техническая деятельность», подпрограмма 101 «Грантовое финансирование научных исследований». Контракт № 58.

References

- 1 Bouden F.P., Teybor D. Friction and greasing of firm bodies. — Moscow: Mechanical engineering, 1968. — 543 p.
- 2 Frolov K.V. Modern tribology: Results and prospects. — Moscow: Nauka, 2008. — 480 p.
- 3 Kolesnikov V.A., Bajsgov J.Z., Jurov V.M. The information-measuring device for definition of factor of a sliding friction // Basic researches. — 2011. — № 12. — Part 1. — P. 121–124.
- 4 Reshetnjak E.N., Strelitsky V.E. Synthesis of strengthening nanostructural coverings // Questions of a nuclear science and techniques. — 2008. — № 2. — P. 119–130.
- 5 Psachye S.G., Zolnikov K.P., Konovalenko I.S. Synthesis and properties of nanocrystals and substructural materials. — Tomsk, 2007. — 264 p.
- 6 Jurov V.M., Vertjagina E.N., Guchenko S.A. Influence of an ionic irradiation on properties of nanostructural coverings Zn–Al and Fe–Al // Modern high technologies. — 2011. — № 5. — P. 63–68.
- 7 Kragelskij I.V., Vinogradova I.E. The factor of a friction. — Moscow: Mechanical engineering, 1962. — 220 p.
- 8 Jurov V.M., Vertjagina E.N. et al. Influence of technological parameters on properties of composite coverings Mn–Fe–Cu–Al // The Bulletin of development of science and education. — 2011. — № 2. — P. 18–23.
- 9 Watanabe H., Sato Y. et al. The mechanical properties and microstructure of Ti–Si–N nanocomposite films by ion plating // Surf. and Coat. Technol. — 2003. — Vol. 169–170. — P. 452–455.
- 10 Carvalho S., Ribeiro E. et al. Effect of morphology and structure on the elastic behavior of (Ti, Si, Al)N nanocomposites // Surf. and Coat. Technol. — 2003. — Vol. 174–175. — P. 984–991.
- 11 Flink A., Larson T. et al. Influence of Si on the microstructure of are evaporated (Ti, Si)N thin films; evidence for cubic solid solutions and their thermal stability // Surf. and Coat. Technol. — 2005. — Vol. 200. — P. 1535–1542.
- 12 Li Z.G., Mori M. et al. Structure and properties of Ti–Si–N films prepared by ISP assisted magnetron sputtering // Surf. and Coat. Technol. — 2005. — Vol. 193. — P. 345–349.

В.М.Юров, В.Ч.Лауринас, О.Н.Завацкая

Ионды-плазмалық композитті жабулардың трибологиялық қасиеттері

Ионды-плазмалық әдіспен алынған жабулардың сырғанау кезіндегі үйкеліс коэффициенті өлшенді. Бірінші жағдайда жабуларды жасау кезінде көпфазалы катодтар қолданылды. Екінші жағдайда көпфазалы және титандық катодтарды бір мезгілде балкыту кезінде көп компонентті плазмалық ағындар генерациясы жүзеге асырылды. Жабылулар аргон және азот атмосфераларында жасалды. Әрбір жағдайда құрғақ үйкеліс коэффициентінің шамасы 0,1–0,3 аралықтарына сәйкес келеді. Бұл шама металдардың басым көбі үшін сәйкес келетін құрғақ үйкеліс коэффициенттерінің шамаларынан төмен. Зерттелінген жабулардың қатандығы мен тозу төзімділігінің жоғарылығын ескеріп, оларды вакуумдық құрылғыларда үйкелесетін қос жұп ретінде ұсынуға болады.

V.M.Jurov, V.Ch.Laurinas, O.N.Zavatskaya

The tribological properties of ionic-plasma composite coverings

Factors of a sliding friction of the coverings received by an ionic-plasma method are measured. In the first case at sedimentation of coverings multiphase cathodes were used. In the second case generation of multi-component plasma streams was carried out at simultaneous dispersion of multiphase and titanic cathodes. Drawing of coverings was carried out in argon and nitrogen atmosphere. In all cases the size of factor of a dry friction lays within 0,1–0,3. It is much less factors of a dry friction of the pairs the majority of metals with the same name. Considering, that the investigated coverings possess considerable hardness and wear resistance, it is possible to recommend them in quality of pairs a friction in vacuum devices.

В.А.Колесников, Я.Ж.Байсагов

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: kolesnikov.vladimir@gmail.com)

Энтропийный анализ информационно-измерительных систем

В работе предложен метод энтропийного анализа информационно-измерительных систем. Показано, что точность информационно-измерительной системы можно повысить путем увеличения емкости ее каналов. Получено условие оптимальной структуры информационно-измерительной системы в сравнении с уровнем помех. Полученные результаты иллюстрируются на примере разработанных авторами информационно-измерительных систем. Наилучший результат получается в одноканальной системе с датчиком, который имеет особые свойства. Предложенный в работе анализ позволяет качественно, а иногда и количественно определить основное направление проектирования информационно-измерительных систем в зависимости от решаемых задач.

Ключевые слова: энтропия, информация, измерительная система, управляющая система, эффективность, термодинамика, системный анализ.

Введение

Информационно-измерительная система (ИИС) — это комплекс измерительных устройств, обеспечивающий получение оператором или ЭВМ информации о состоянии объекта [1, 2]. Объекты измерения часто имеют сложную природу, в них могут происходить разнообразные процессы и явления. Задача, решаемая ИИС, — это объединение совокупности параметров объекта и создание достаточно полного его описания.

Создание ИИС связано не только с решением чисто «системных» вопросов: метрологическая унификация средств измерений (датчиков, преобразователей) независимо от вида измеряемых величин; оптимизация распределения погрешностей между различными средствами измерений, входящими в ИИС, и т.д. Часто оно связано и с созданием самих датчиков и измерительных устройств, иногда на новых физических эффектах или на новых материалах и технологиях.

Становление теории информации в середине XX в. связано с работами В.А.Котельникова и К.Шеннона и было вызвано потребностями практики — техники связи. Дальнейшее развитие информационных систем — измерительных, вычислительных, автоматических систем управления — расширило область интереса к информационным процессам далеко за пределы одного процесса передачи информации [3].

На начальном этапе развития кибернетики и теории информации существовало мнение, что малая энергоемкость информационных процессов существенно отличает их от энергетических. С развитием и усложнением информационных систем встал вопрос и об определении энергетической сложности различных информационных процессов, выяснении предельных соотношений при получении, хранении и обработке информации. Это послужило толчком к применению основных положений термодинамики к теории информации [3].

Однако существенного внимания со стороны исследователей вопросы термодинамики информационных процессов не получили. Исключение составляют основополагающие работы Р.П.Поплавского [4]. Им было подчеркнuto, что термодинамика информационных процессов, в отличие от равновесной термодинамики и термодинамики открытых систем, является термодинамикой переходных

процессов. Им были также установлены предельные соотношения между информационными характеристиками (точность, количество информации) и термодинамическими (энергия, энтропия).

Предложенный в работе [5] подход отличается от подхода Р.П.Поплавского только в части тематической формулировки задачи, но не выходит за рамки идеологии переходных процессов, связанных с наличием термостата. Такой подход оправдал себя применительно к процессам совершенно различной природы [6–8].

В настоящей работе применительно к информационно-измерительным системам мы воспользуемся подходом, развитым в работах [5–8]. Но в отличие от этих работ, где основное внимание уделено функции отклика системы, мы будем анализировать поведение ее энтропии в различных информационных процессах.

Энтропия и информация

Всякая (искусственная или естественная) система взаимодействующих объектов может рассматриваться как информационная система. Любая часть совокупности взаимодействующих объектов (в частности, и один из объектов) может изучаться с целью извлечения информации о другой части этой совокупности (в частности, о другом отдельном объекте), так как взаимодействие обеспечивает соответствие состояний, т.е. отражение, содержание информации. Объекты, образующие информационную систему, могут иметь совершенно произвольную природу.

Из этого, конечно, не следует, что теория информации призвана заменить или объять другие науки, изучающие специфические взаимодействия между объектами определенного класса. Но из этого следует, что среди бесконечного множества свойств, которые присущи любой системе взаимодействующих объектов, неотъемлемым является свойство объектов отражать друг друга, содержать информацию друг о друге. В некоторых явлениях информационные отношения не играют существенной роли или замаскированы. Тогда наука, изучающая эти явления, может достичь определенных успехов без привлечения теории информации; в других случаях информационный подход неизбежен.

Понятие энтропии возникло в связи с необходимостью ввести численную характеристику неопределенности случайного объекта на некотором этапе его рассмотрения. Все, что мы можем сказать априори о поведении случайного объекта, — это указать множество его состояний и распределение вероятностей по элементам этого множества.

В качестве меры неопределенности случайного объекта с конечным множеством возможных состояний A_1, A_2, \dots, A_n соответствующими вероятностями p_1, p_2, \dots, p_n разумно взять функционал

$$S(A) = S(p_1, p_2, \dots, p_n) = -\sum_{k=1}^n p_k \log p_k,$$

где логарифмы берутся при произвольном основании. Величину $S(A)$ называют энтропией случайного объекта A . В последующем было показано, что при некоторых весьма общих требованиях к мере неопределенности вид функционала $S(A)$ является единственно возможным (с точностью до постоянного множителя) [9].

В основе всей теории информации лежит открытие, заключающееся в том, что информация допускает количественную оценку. Наиболее четко, вплоть до введения количественной меры информации, эта мысль, по-видимому, впервые была высказана Хартли в 1928 г., а затем, уже на более высоком уровне, развита и обобщена Шэнноном, Винером, фон Нейманом, Фишером, Колмогоровым и другими [10].

В силу статистической независимости символов вероятность сигнала длиной в n символов равна

$$p = \prod_{j=1}^n p_j,$$

где p_j — вероятность j -го символа, $j = 1, 2, \dots, n$ — порядковый номер символа в сигнале. Если j -й символ повторяется в данном сигнале n_i раз, то

$$p = \prod_{i=1}^m p_i^{n_i}.$$

При достаточно больших n — $n_i \approx np_i$, поэтому

$$p = \prod_{i=1}^m p_i^{np_i}.$$

Отсюда окончательно получим:

$$I = -\log p = -n \sum_{i=1}^m p_i \log p_i.$$

Это соотношение носит название формулы Шэннона [11].

Обращает на себя внимание тот факт, что формула Шэннона для количества информации совпадает с формулой для величины энтропии множества возможных сигналов.

Подробное обсуждение понятий энтропии и информации изложено в огромном количестве исследований и не является предметом настоящей работы. При необходимости возможно с ними ознакомиться [12–14]. Отметим лишь, что изменение энтропии объекта обратно пропорционально количеству ΔI информации о нем, т.е.

$$\Delta S = \frac{k \ln 2}{\Delta I}, \quad (1)$$

где $k \ln 2$ — энергетический эквивалент информации.

Энтропия диссипативных процессов

Всякий процесс измерения связан с взаимодействием тех или иных объектов (или поля и объектов) и всякий процесс взаимодействия сопровождается диссипативными процессами, приводящими к потере части информации и возникновению погрешности измерения. Для вероятности диссипативных процессов в работе [5] получено выражение

$$P = \frac{2\Delta S}{k\tau} \exp\left\{-\frac{E_m - G^0/N}{kT}\right\}, \quad (2)$$

где ΔS — изменение энтропии в диссипативном процессе; E_m — среднее значение энергии основного состояния системы; τ — время релаксации; G^0 — энергия Гиббса термостата, в который погружена система; N — число структурных элементов системы; k — постоянная Больцмана; T — температура.

Большинство диссипативных процессов в природе описывается уравнением Аррениуса:

$$P = \nu \exp(-E_a / kT), \quad (3)$$

где E_a — энергия активации; ν — частотный фактор.

Сравнивая это выражение с (2), находим:

$$\Delta S = \frac{\nu k \tau}{2} \exp\left(-\frac{E_m + E_a - G^0 / N}{kT}\right). \quad (4)$$

Частотный фактор в большинстве практически важных случаях $\nu = 1/\tau$ и выражение (4) переписывается в виде:

$$\frac{2\Delta S}{k} = \exp\left\{-\frac{E_m + E_a - G^0 / N}{kT}\right\}. \quad (5)$$

Используя (1) и (5), для количества информации получим выражение:

$$\Delta I = \frac{1}{2 \ln 2} \exp\left\{\frac{Q - G^0 / N}{kT}\right\}. \quad (6)$$

Здесь $Q = E_m + E_a$ — энергетическая емкость системы. В случае ИИС под Q следует понимать канальную емкость.

Точность информационно-измерительных систем

Основной характеристикой ИИС является точность. Точность работы ИИС определяется динамическими характеристиками: быстродействием, помехоустойчивостью, разрешающей способностью. Она определяется как внутренними факторами (структура системы, алгоритм функционирования и обработки сигналов и т.п.), так и внешними условиями (условия измерений, наличие естественных помех и т.п.).

Техническую эффективность ИИС по показателю точности количественно оценивают ошибкой [15]:

$$\mathcal{E}_T = \Delta = \mathbf{y} - \mathbf{y}^*, \quad (7)$$

где \mathbf{y} — вектор фактической реакции системы; \mathbf{y}^* — вектор желаемой реакции системы.

В общем случае количественной мерой точности служит функция от ошибки Δ , называемая функцией потерь $R(y_i, y_i^*)$. Эта функция определяет потери, соответствующие комбинации y_i и y_i^* в каждой отдельной (i -той) реализации.

Оценка точности системы по показателю точности оказывается довольно сложной. В общем случае ошибка Δ является случайной функцией времени

$$\Delta(t, \alpha) = y(t, \alpha) - y^*(t), \quad (8)$$

где $\alpha = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_l$ — вектор параметров системы.

Полное описание случайного процесса $\Delta(t)$ дается многомерной плотностью вероятностей $W(\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_l)$ для любого сколь угодно большого t внутри интервала наблюдения $[0, T]$. Однако такая характеристика для оценки точности системы практически непригодна, так как ее сложно получить как аналитически, так и моделированием на ЭВМ. Поэтому обычно ограничиваются одномерной или двумерной плотностью вероятностей ошибок.

На каждом этапе элементарного информационного взаимодействия рост энтропии термостата ΔS лежит в пределах [4]

$$1/\Delta^2 \geq \Delta S \geq \Delta S_{\min} = 2/\Delta. \quad (9)$$

Левая граница соответствует предельно необратимой реализации переходного процесса, а правая — оптимальному замедлению его.

С другой стороны, неэнтропийный эффект (эффект упорядочивания в системе, $\Delta K = -\Delta S$), согласно [16, 17]:

$$\Delta K \approx \ln(1/\Delta) \approx \ln \sqrt{U/T} \approx \Delta I, \quad (10)$$

где ΔI — полученное в процессе измерения количество информации.

В этом случае энтропийная эффективность информационно-измерительного процесса:

$$\eta \leq \eta_{\max} = \frac{1}{2} \frac{\Delta K}{\Delta S_{\min}} \ll 1, \quad \Delta \ll 1. \quad (11)$$

Минимальное значение энтропии реализуется при условии максимума количества информации:

$$\Delta I \rightarrow \max, \quad Q - G^0 / N \gg 1, \quad Q \gg G^0 / N. \quad (12)$$

Таким образом, точность информационно-измерительной системы можно повысить путем увеличения канальной емкости. Это возможно при использовании многомерных информационно-измерительных систем [18].

Необходимо отметить следующее: в реальных системах и канальная емкость Q , и число каналов N ограничены. Первое связано с архитектурой ИИС и используемой системой кодирования информации, второе — с числом параметров (датчиков), определяющих состояние системы с наибольшей степенью полноты.

Энергия Гиббса термостата G^0 характеризует влияние среды на точность ИИС, т.е. средний уровень помех. Очевидным условием подавления помех является условие

$$Q \cdot N \gg G^0. \quad (13)$$

Однако следует заметить, что величины G^0 и N взаимозависимы. С увеличением числа датчиков и других вспомогательных систем возрастает средний уровень помех, так что оптимальным условием является

$$Q \rightarrow \max, \quad \text{при } N \rightarrow 1. \quad (14)$$

Ниже мы рассмотрим примеры применения соотношения (14) к разработанным нами ИИС.

Бортовой комплекс для систем сбора данных о состоянии подвижных объектов

Известны устройства сопровождения и управления транспортными средствами [19], которые содержат: навигационную антенну; навигационный приемник с процессором; радиоантенну; приемопередатчик с процессором; энергонезависимую память; бортовые подсистемы и бортовой контроллер; связанный соответствующим образом с перечисленными блоками и содержащий микропроцессорный элемент с входными и выходными буферами. При этом бортовой контроллер подключен к одному из выходов микропроцессорного элемента, а выход связан с входом СБРОС микропроцессорного элемента. Блок контроля функционирования бортового контроллера включает генератор импульсов,

счетчик и формирователь коротких импульсов. Вход последнего является входом блока контроля функционирования бортового контроллера, а выход связан с R-входом счетчика. С-вход контроллера связан с выходом генератора, а выход счетчика является выходом блока контроля функционирования бортового контроллера. Устройство способно передавать данные от установленных на транспортных средствах датчиков на центральный диспетчерский пункт и может быть использовано в системе автоматического управления.

Недостатком данного устройства является то, что комплекс усложнен энергонезависимой памятью и радиоприемником, информация с которого обрабатывается на микропроцессоре, что ведет к дополнительной нагрузке процессора. Иными словами, данное техническое решение приводит к возрастанию G^0 и, соответственно, уровня помех. В данном устройстве $N \geq 10$ и поэтому должно быть $Q \gg 0,1G^0$. Нижний предел величины G^0 можно оценить по характеристикам используемых элементов описанной выше ИИС. Оценка показала, что $Q \approx 0,01G^0$, что, в общем-то, недостаточно.

Чтобы условие $Q \gg 0,1G^0$ выполнялось, нами разработан бортовой комплекс, способный работать автономно и полностью исключаящий одновременную передачу информации от двух бортовых комплексов. При этом исключаются взаимные помехи работы комплексов.

Поставленная задача решена таким образом, что в известном бортовом комплексе введены трехпроцессорный контроллер с подключенными соответственно к первому, второму, третьему, четвертому и пятому входам-выходам трехпроцессорного контроллера блока согласования для сбора информации от системы RFID, памяти энергонезависимой, модуля индикации режимов работы, модуля согласования с системами верхнего уровня и стабилизированного источника питания. При этом шестой, седьмой и восьмой входы-выходы трехпроцессорного контроллера соединены соответственно с входами-выходами датчиков технологического состояния транспортного средства, навигационной антенны с GPS-приемником и приемопередающим устройством с радиоантенной.

На рисунке 1 изображена блок-схема бортового комплекса для системы сбора данных о состоянии подвижных объектов, который содержит навигационную антенну, GPS-приемник, радиоантенну, приемопередающее устройство, плату центрального процессора с пакетным модемом, блок согласования для сбора информации от системы RFID.

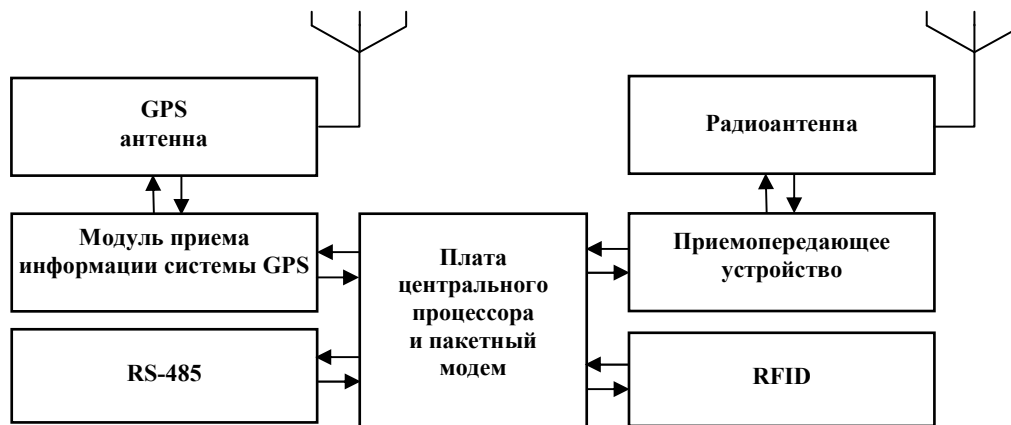


Рисунок 1. Блок-схема бортового комплекса для системы сбора данных о состоянии подвижных объектов

Трехпроцессорный контроллер состоит из трех однокристальных микропроцессоров. Структурная схема трехпроцессорного контроллера представлена на рисунке 2. Трехпроцессорный контроллер состоит из процессора пакетного модема, центрального процессора и процессора обработки подсистемы RFID. Представленное техническое решение позволяет разгрузить центральный процессор, полностью исключить взаимное влияние микропроцессоров и значительно повысить быстродействие контроллера. Достигается расширение функциональных возможностей и повышение помехоустойчивости бортового комплекса для системы сбора данных о состоянии подвижных объектов.



Рисунок 2. Структурная схема трехпроцессорного контроллера

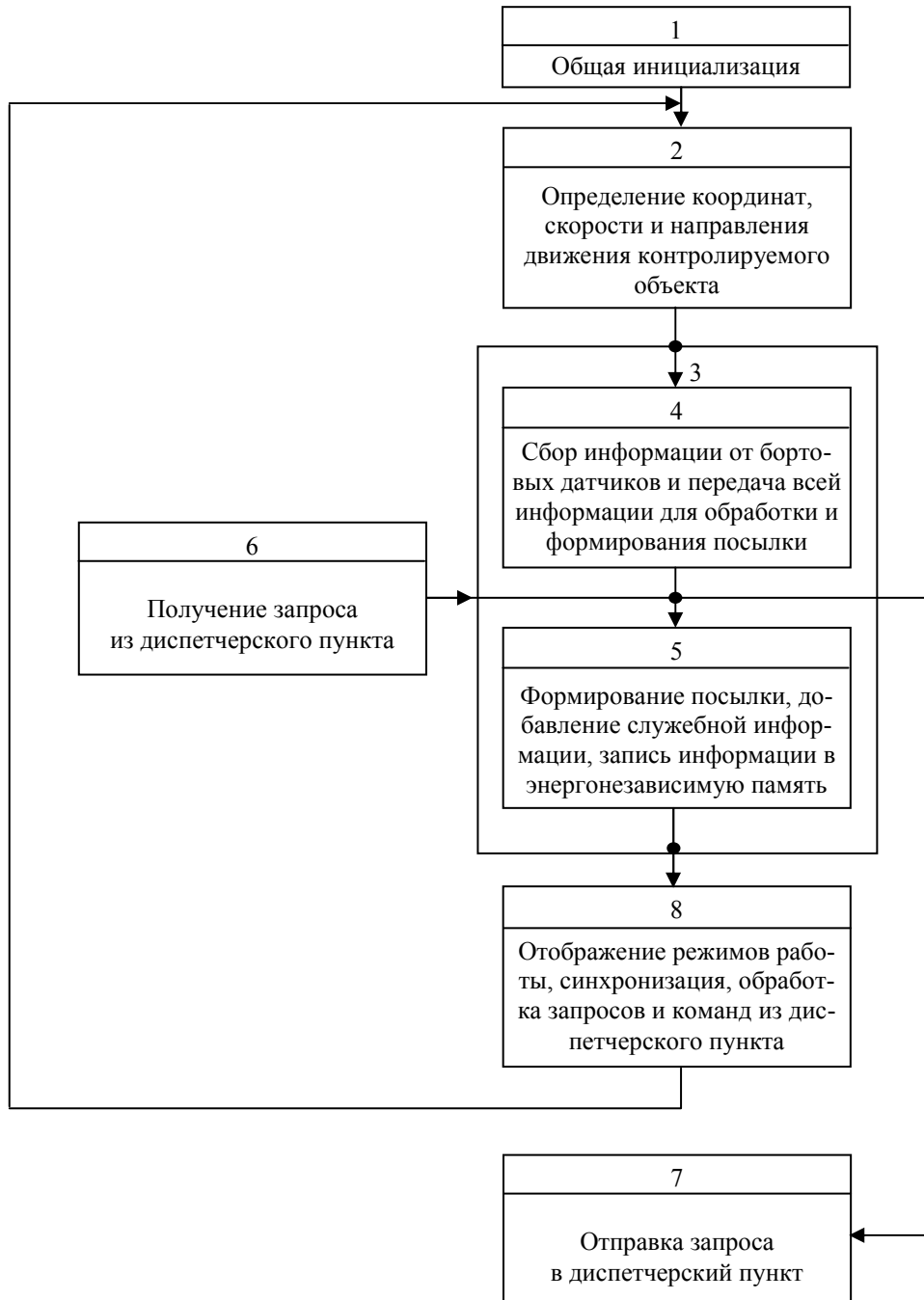


Рисунок 3. Алгоритм работы бортового комплекса для системы сбора данных о состоянии подвижных объектов

Бортовой комплекс для системы сбора данных о состоянии подвижных объектов работает по алгоритму, представленному на рисунке 3. После общей инициализации GPS-приемник определяет ме-

стоположение, скорость и направление движения контролируемого объекта. Затем происходит сбор информации от бортовых датчиков и передача полученной информации для обработки и формирования посылки. После этого идут формирование посылки, добавление служебной информации и запись информации в энергонезависимую память. В конце происходит отображение режимов работы, синхронизация, обработка запросов и команд из диспетчерского пункта. В любой момент времени может поступить запрос из диспетчерского пункта, на который происходит мгновенная отправка информации в диспетчерский пункт.

После завершения очередного цикла обработки информации программное обеспечение трехпроцессорного контроллера переходит в исходное состояние и начинает выполнение очередной итерации цикла обработки и подготовки информации.

Произведенная оценка показала, что в нашем случае $Q \approx 10^{-3} G^0$, т.е. точность работы нашей ИИС на порядок больше, чем в рассмотренных выше аналогах.

Информационно-измерительная система для определения влажности зерна

Случай выполнения условия (14) реализован нами при создании ИИС для измерения влажности зерна [20]. Структурная схема ИИС для определения влажности на основе твердоэлектrolитного датчика представлена на рисунке 4.

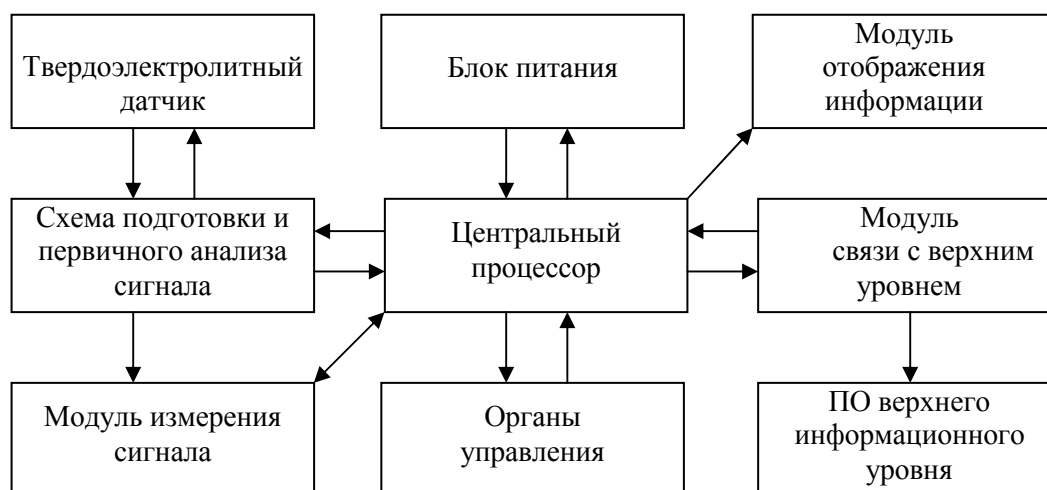


Рисунок 4. Структурная схема ИИС для определения влажности на основе твердоэлектrolитного датчика

Как видно из рисунка, комплекс состоит из твердоэлектrolитного датчика, схемы первичной подготовки и анализа сигнала, модуля измерения сигнала, модуля центрального процессора, органов управления и отображения информации, а также порта связи с верхним информационным уровнем и программное обеспечение.

Основными элементами комплекса являются твердоэлектrolитный датчик, схема подготовки и измерения сигнала и центральный процессор, под управлением которого осуществляется измерение и производится обработка сигнала от датчика.

Выполнение условия (14) достигается за счет синтеза твердого электролита, ионная проводимость которого изменяется на 4 порядка при изменении влажности от 5 до 90 %. Это приводит к тому, что в ИИС необходим только один канал ($N = 1$), связанный с измерением проводимости чувствительного к влаге сенсора. Произведенная оценка показала, что в нашем случае $Q \approx 10^{-4} G^0$, т.е. точность работы нашей ИИС на 3 порядка больше, чем зарубежных аналогов.

Заключение

В настоящее время при проектировании современных ИИС используются методы структурного и системного анализа. Это позволяет проектировать ИИС с помощью средств компьютерной техники, что создает предпосылки для разработки автоматизированных комплексов управления проектами, широкого внедрения многомерных средств преобразования и передачи информации в информационно-измерительных системах.

В настоящее время за рубежом, в частности в США, стоимость работ по автоматизации проектирования ИИС составляет более 1/3 стоимости разработки больших проектов, что свидетельствует о сложности и дороговизне автоматизированного проектирования [21].

Предложенный в настоящей работе энтропийный анализ ИИС позволяет качественно, а иногда и количественно определить основное направление проектирования ИИС в зависимости от решаемых ею задач.

References

- 1 *Kalashnikov V.I., Nefedov S.V. et al.* The information-measuring techniques and technologies. — Moscow: The High School, 2002. — 587 p.
- 2 *Raneev G.G., Surotina V.A., Kalashnikov V.I.* The information-measuring techniques and electronics. — Moscow: Publishing centre «Academy», 2006. — 512 p.
- 3 *Brjullien L.* Science and the information theory. — Moscow: Physmathgiz, 1960. — 340 p.
- 4 *Poplavsky R.P.* Thermodynamics of information processes. — Moscow: Nauka, 1981. — 255 p.
- 5 *Yavorsky V.V., Jurov V.M.* Applied problems of the thermodynamic analysis of nonequilibrium systems. — Moscow: Energiatomizdat, 2008. — 338 p.
- 6 *Jurov V.M.* Thermodynamics of luminescent systems // *Vestnik KarGU. Physics Ser.* — 2005. — № 2. — P. 13–19.
- 7 *Portnov V.S., Jurov V.M.* Communication of a magnetic susceptibility of magnetic ores with thermodynamic parameters and the iron maintenance // *News of High Schools. Mountain magazine.* — 2004. — № 6. — P. 122–126.
- 8 *Jurov V.M., Eschanov A.N., Sidorenja Ju.S.* Nonequilibrium thermodynamics and radiating decomposition in solid states // *Vestnik KarGU. Physics Ser.* — 2005. — № 1. — P. 4–10.
- 9 *Brjullien L.* Scientific uncertainty and information. — Moscow: Mir, 1966. — 340 p.
- 10 *Mitjugov V.V.* Physical bases of the theory of the information. — Moscow: Soviet Radio, 1976. — 264 p.
- 11 *Schannon K.* Works under the theory of the information and cybernetics. — Moscow: IL, 1963. — 829 p.
- 12 *Kolmogorov A.N.* Three approaches to definition of concept of quantity of the information // *Information transfer Problems*, 1965. — Vol. 1. — № 1. — P. 3–34.
- 13 *Hasen A.M.* Introduction of a measure of the information in axiomatic base of mechanics. — Moscow: RAUB, 1998 — 312 p.
- 14 *Chernavsky D.S.* Synergetic and the information. — Moscow: Editornaja URSS, 2004. — 288 p.
- 15 *Borisov Ju.P.* Mathematical modeling of radio systems. — Moscow: Soviet radio, 1976. — 296 p.
- 16 *Poplavsky R.P.* About thermodynamic limits of accuracy of physical measurement // *Reports of Academy of sciences of the USSR.* — 1972. — Vol. 202. — P. 562–565.
- 17 *Poplavsky R.P.* Thermodynamic models of information processes // *Successes of Physical Sciences.* — 1975. — Vol. 115. — № 3. — P. 465–501.
- 18 *Ten T.L., Yavorsky V.V., Jurov V.M.* Multidimensional distributors of impulses and thermodynamics of information processes // *Vestnik KarGU. Physics Ser.* — 2006. — № 1(41). — P. 26–30.
- 19 *Semkin A.N., Cheremushkin V.I. et al.* On-board system for system maintenance and management of ground vehicles // *A utility model patent № 35677 (Russia).* It is published 10.06.1998. *Bulletin № 16.*
- 20 *Halenov O. S., Kolesnikov V. A., Jurov V.M.* Humidity gauges on a basis of nanoporous ceramics // *Perspective technologies, the equipment and analytical systems for materials technology and nanomaterials: Works of VIII internat. scient. conf.* — Almaty, 2011. — Part 1. — P. 487–494.
- 21 *Kolesnikov V.A., Halenov O.S. et al.* Information-measuring system for the analysis of harmful gases // *Proceedings of the 8th Internat. scient. conf. dedicated to 40th anniversary of the academician Y.A.Buketov KSU.* — Karaganda: KSU Publ., 2012. — P. 468–472.
- 22 *Grekul V.I., Denishchenko G.N., Korovkina N.L.* Designing of information systems. — Moscow: The Internet university, 2005. — 345 p.

В.А.Колесников, Я.Ж.Байсагов

Ақпараттық-өлшегіш жүйелерді энтропиялық талдау

Мақалада ақпараттық-өлшегіш жүйелерді энтропиялық талдау әдісі ұсынылды. Ақпараттық-өлшегіш жүйелердің каналдарының сыйымдылықтарын ұлғайту арқылы өлшеу дәлдігін арттыруға болатыны көрсетілген. Қолайсыз бөгеттер деңгейімен салыстырғанда ақпараттық-өлшегіш жүйенің тиімді құрылымының шарты анықталған. Алынған нәтижелер авторлардың өңдеген ақпараттық-өлшегіш жүйелерінде келтірілген. Ең жоғары нәтиже бір каналды жүйеде ерекше қасиеттерге ие датчикті қолдану арқылы алынған. Осы ұсынылған талдау ақпараттық-өлшегіш жүйелерді жобалаудың негізгі бағытын сапалы түрде, ал кей жағдайларда атқаратын жұмысына байланысты сандық түрде де анықтауға мүмкіндік береді.

V.A.Kolesnikov, J.Z.Bajsagov

The entropy analysis of information-measuring systems

In work the method the entropy analysis of information-measuring systems is offered. It is shown, that accuracy of information-measuring system can be raised by increase in capacity of its channels. The condition of optimum structure of information-measuring system in comparison with level of hindrances is received. The received results are illustrated on an example of the information-measuring systems developed by authors. The best result turns out in single-channel system with the gauge which has special properties. The analysis offered in work allows qualitatively, and sometimes and quantitatively, to define the basic direction of designing of information-measuring systems depending on problems solved by it.

А.Д.Мехтиев, В.И.Эйрих, В.В.Югай, Ю.В.Ким, О.В.Алдошина

Карагандинский государственный технический университет (E-mail: barton.kz@mail.ru)

К вопросу использования вибродиагностики для установления фактического технического состояния электромеханического оборудования

Мониторинг фактического технического состояния оборудования, основанный на вибродиагностике, позволяет своевременно установить изменения параметров надежности, фактического износа, усталостного разрушения механических и конструктивных частей горнодобывающего оборудования. В статье произведен анализ данных, полученных на предприятиях Карагандинской и Павлодарской областей. Рассмотрены пути решения повышения надежности механической части горнодобывающего оборудования. Произведена оценка состояния по огибающей спектра вибрации, а также установлены основные причины вывода из строя подвижных частей горнодобывающего оборудования. Приведенная методика позволяет существенно повысить технический уровень диагностики неисправностей и определить реальную потребность в ремонте механического оборудования горнодобывающих предприятий.

Ключевые слова: вибродиагностика, электромеханическое оборудование, техническое состояние, фактическое состояние, вибрация.

Совершенствование технологии производственных процессов и повышение технического уровня оборудования горно-металлургической отрасли соответствуют приоритетам научно-технического и социально-экономического развития Республики Казахстан. Экономический эффект может быть усилен благодаря разработке и внедрению научных разработок и методов, которые позволят существенно повысить технический уровень диагностики неисправностей и реальную потребность в ремонте механического оборудования горнодобывающих предприятий. Важным звеном в эффективной работе всех элементов технологической цепочки горного предприятия, ведущего открытые разработки и добычу угля, является горнодобывающее оборудование. Соответственно решение проблемы своевременного установления изменения параметров надежности, фактического износа, усталостного разрушения, позволит эксплуатационно-ремонтному персоналу предотвратить серьезные последствия от простоя вследствие преждевременного отказа и создания аварийных ситуаций, при разрушении механических и конструктивных частей горнодобывающего оборудования [1]. На сегодняшний день требуется решение важной прикладной задачи по использованию средств неразрушающего контроля и диагностики для разработки научных методов установления фактического технического состояния механической части и его потребности в конкретном виде ремонта. Это направление соответствует одному из основных приоритетов развития науки Республики Казахстан и направлено на развитие технологии углеводородного и горно-металлургического секторов.

На основании анализа данных, полученных при эксплуатации большого количества горнодобывающих комплексов открытых разработок, задействованных на предприятиях Карагандинской и Павлодарской областях, можно сделать вывод, о том, что отказ механизмов экскаваторов обусловлен износом его подвижных и вращающихся частей, подверженных динамическому воздействию, в частности, опор-подшипников качения и скольжения валов и осей, а также пальцев шарнирных соединений. Повышение параметров вибрации и биения, заедание и заклинивание, в конечном итоге, приводят к нарушению рабочих параметров работы механизма в целом, а также могут привести к разрушению отдельных конструктивных элементов. Снижение параметров надежности и расчетного ресурса опор-подшипников качения и скольжения валов и осей, а также пальцев шарнирных соединений экскаваторов может происходить в результате конструктивных особенностей исполнения, их качества, технологии изготовления, свойств материала, конструкторской недоработки, условий эксплуатации, режимов работы и прочих условий. Для предотвращения преждевременных отказов в работе механической части на стадии проектирования необходимо наиболее полно учитывать все факторы, оказывающие влияние на износ и сокращение долговечности опор-подшипников и шарниров.

Одним из путей решения данной научной и прикладной проблемы является внедрение методов мониторинга технического состояния горнодобывающего оборудования, основанного на вибродиагностике. На данный момент времени используются многочисленные стандарты, в основе которых лежит нормирование вибрации в зависимости от мощности агрегата, массы и определенных частот

вращения вала или ротора агрегата, а также высоты оси вращения ротора и др. Поскольку методы ведения вибромониторинга постоянно совершенствуются, происходит периодическое изменение этих стандартов и их приложений. В общем случае оценка состояния агрегата должна проводиться путем совместного учета всех вредных последствий, вызываемых вибрацией. Однако в силу недостаточной изученности многих вопросов динамики машин теоретически строгий вывод общего критерия оценки вибрации и сложность его использования для практического применения делают задачу труднореализуемой. Нами разрабатываются нормативные требования контроля вибрации горнодобывающего оборудования. В качестве критерия используют один из кинематических параметров (виброускорение, виброскорость или виброперемещение), по которому оценивают техническое состояние агрегата.

Основная цель эксплуатационных работ — установление параметров вибрации оборудования. Это контроль его технического состояния в процессе эксплуатации и создание методов, при которых была бы создана возможность своевременного обнаружения любых, даже незначительных повреждений или ненормальностей с возможностью установления характера повреждений на начальной стадии их возникновения (развивающихся дефектов) в любых условиях эксплуатации горнодобывающего оборудования. Решение этой задачи требует обеспечения минимального уровня вибрации агрегата. Проблема нормирования вибрации включает решение четырех взаимосвязанных задач нормирования вибрации:

- опор подшипников;
- роторов;
- корпусов и фундаментов;
- трубопроводных обвязок.

Анализ известных методов дал результаты, подтверждающие разнообразие методов и критериев оценки состояния оборудования. Это затрудняет сравнение различных отраслевых Руководящих документов и Стандартов, что весьма характерно. Даже на родственных горнорудных предприятиях специалисты по вибродиагностике нередко применяют для однотипных агрегатов различные критерии контроля вибрации, не говоря уже об отсутствии близких по величине норм. В некоторых случаях это свидетельствует о том, что существующие отраслевые Руководящие документы и Стандарты не отвечают требованиям специалистов по вибродиагностике промышленных предприятий и последние вынуждены самостоятельно, исходя из накопленного опыта, устанавливать критерии и нормы, соответствующие требованиям конкретного оборудования, и оптимизировать их по мере накопления опыта.

В подтверждение сказанного выше и на основании сделанных нами выводов при анализе материалов исследований, охватывающих некоторые типы валов механизмов добычного и транспортного оборудования центробежных компрессорных и насосных агрегатов, вентиляторов, применяемых на предприятиях горнорудной промышленности Казахстана, не существует также единственного набора критериев оценки технического состояния, подходящего не только для класса оборудования (например, для класса центробежных агрегатов: для центробежных компрессоров или для центробежных насосов, или центробежных вентиляторов со сходными мощностными характеристиками и сходной частотой вращения), но даже для типа и типоразмера. Другими словами, из-за различий в конструкции, в системе ТО и условиях эксплуатации каждый агрегат имеет свои собственные, несколько отличные от других критерии и нормы оценки технического состояния.

Успех любой системы вибромониторинга в основном зависит от методов оценки состояния агрегата и способов определения допустимых значений вибрации и параметров анализа вибрации, интегрированных в анализирующее программное обеспечение пользователя. Главные алгоритмы оценки состояния оборудования, продаваемого на рынке программного обеспечения обеспечивают распознавание состояния по общему уровню вибрации в сравнительно узкой полосе частот или по огибающей спектра.

Оценка состояния по огибающей спектра вибрации использована нами для определения состояния агрегата по диаметрально противоположному способу сравнения текущих параметров вибросигнала с допустимыми значениями: уровень вибрации на каждой частотной составляющей текущего спектра вибрации сравнивается с уровнем соответствующей составляющей «опорного» («эталонного») спектра. В качестве опорного (эталонного) спектра обычно выбирается огибающая, совпадающая, например, с линиями 400-линейного частотного спектра. Опорный (эталонный) спектр можно построить двумя способами: подвергнуть статистической обработке ряд измерений или принять в качестве эталона послеремонтный «хороший» спектр (или предыдущий текущему спектр).

Учет рекомендаций при формировании эталонного спектра для конкретного случая в продаваемых на рынке готовых программных пакетах во многих случаях весьма ограничен. По этой причине при оценке состояния оборудования с применением анализа изменения огибающей спектра иногда появляются необоснованные «срабатывания» тревоги, преимущественно потому, что вибрация оборудования с вращающимся ротором обычно немного флуктуирует по частоте и амплитуде относительно определенной линии спектра с четкой границей.

Флуктуация по частоте: совершенно постоянная частота вращения ротора агрегата труднодоступна. Небольшие ее флуктуации, вызываемые изменением нагрузки, частоты сети и др. (2...8 % у асинхронных и до 1 % у синхронных электрических машин), часто приводят к ощутимому сдвигу первой и высших гармоник частоты вращения ротора в текущем спектре (частот спектральных линий) относительно эталонного. Например, при уменьшении частоты вращения зубчатой передачи с 47 зубьями на ведущем колесе — на 23,5 Гц. Это может привести к превышению допустимых значений опорного спектра и ложному появлению сигнала об изменении состояния оборудования.

Флуктуация по амплитуде: это явление означает практически постоянное присутствие аperiodических скачкообразных изменений амплитуд вибрации. Значения, как общего уровня, так и отдельных частотных составляющих вибрации, часто демонстрируют небольшую флуктуацию во времени вокруг некоторой величины, затем без явной причины происходит резкий переход к новым величинам с новыми флуктуациями. Эти изменения легко наблюдать при мониторинге вибрации в высокочастотной области спектра, особенно они характерны для «промежуточных» частот. Хотя амплитудные флуктуации во многих случаях могут быть небольшие, их аperiodический и «неслучайный» характер приводит к ложному «срабатыванию» тревоги.

К самым существенным недостаткам мониторинга по огибающей спектра вибрации можно также отнести отсутствие исходных данных на начальном этапе мониторинга при организации обследований новых и модифицированных агрегатов или при отклонении эксплуатационных режимов.

По этим причинам оценка состояния по огибающим спектра считается, в лучшем случае, относительно надежным и достоверным методом анализа. Этот метод распознавания состояния оборудования является компромиссным между оценкой состояния оборудования по общему уровню вибрации и по огибающей спектра, а точнее, частным случаем оценки состояния по огибающей спектра, поскольку дает возможность произвольно устанавливать положение, ширину частотной полосы и допустимое значение параметра (критерия), который сравнивается с текущими значениями и далее строить тренды параметра в этой полосе, давая возможность пользователю оценивать и прогнозировать состояние оборудования. Количество частотных полос обычно составляет 6... 18. Ряд методов вибродиагностики основан на том, что определенные механические дефекты по мере развития генерируют вибрацию в определенных частотных полосах с определенным соотношением величин параметров. Например, рассматривая амплитуды определенных гармоник спектра, полученного в определенном частотном диапазоне спектра, можно легко установить глубину модуляции высокочастотной вибрации, которая определяется степенью износа ряда деталей и узлов агрегата. Другой пример — достаточно интенсивная вибрация на лопаточной частоте насоса говорит о нарушении гидродинамики потока, на дробных гармониках частоты вращения ротора — о нарушениях жесткости и т.д. Таким образом, производя разбиение частотного диапазона измерений на сравнительно узкие, возможно, перекрывающиеся частотные полосы и применяя индивидуальные для каждой полосы допустимые значения и критерии, можно распознавать появление ряда зарождающихся дефектов.

Опорные подшипники воспринимают радиальные усилия на вал и фиксируют его радиальное положение относительно корпуса. Основные причины выхода из строя опорных подшипников механического оборудования горнодобывающих предприятий следующие:

- повышенное давление в радиальном направлении из-за нарушений технологических или расчетных режимов;
- нарушение подачи масла и качества масла;
- дефекты сборки и подгонки;
- эксплуатационный износ и загрязнение подшипников.

Повышенное давление в радиальном направлении из-за нарушений технологических или расчетных режимов, нарушения подачи и качества масла. Повышенное давление и нарушение подачи и качества масла во многих случаях мало влияют на характер вибрации агрегатов, но в большинстве случаев приводят к повышению температуры или давления в клине наиболее нагруженных подшипников. Это явление обычно сопровождается ускоренным износом и повреждением баббитового слоя

вкладыша подшипника, наволакиванием материала подшипника на шейку вала и может приводить к внезапному скоротечному выходу подшипника из строя.

Нарушение подгонки и последующая приработка (и свойственные ей диагностические признаки) — явление временное, обычно возникающее при выводе агрегата из ремонта и пуске его в эксплуатацию. Маловероятно сохранение диагностических признаков небольших нарушений подгонки и приработки у агрегата после нескольких месяцев эксплуатации.

Приработка подшипника обычно сопровождается повышенной виброактивностью в области средних и высоких частот.

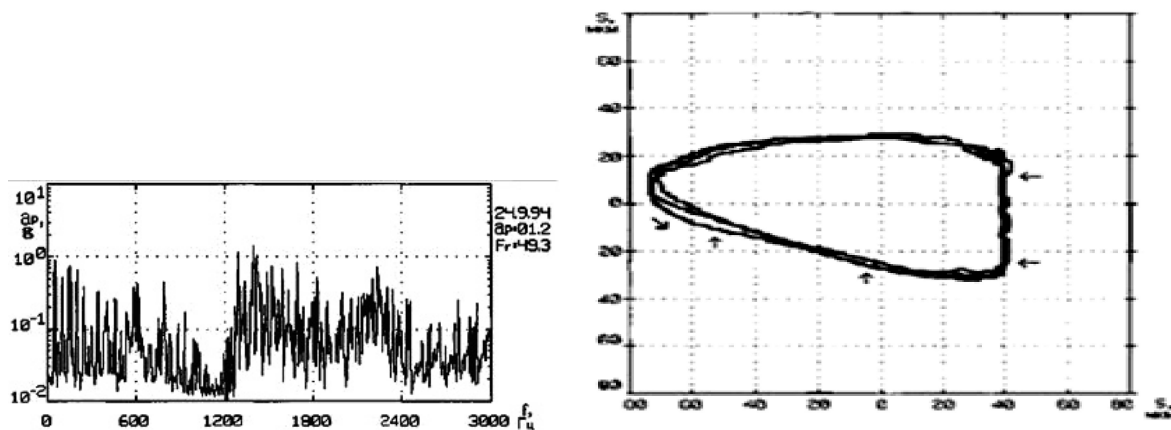


Рисунок 1. Траектория движения вала в подшипнике скольжения в процессе приработки

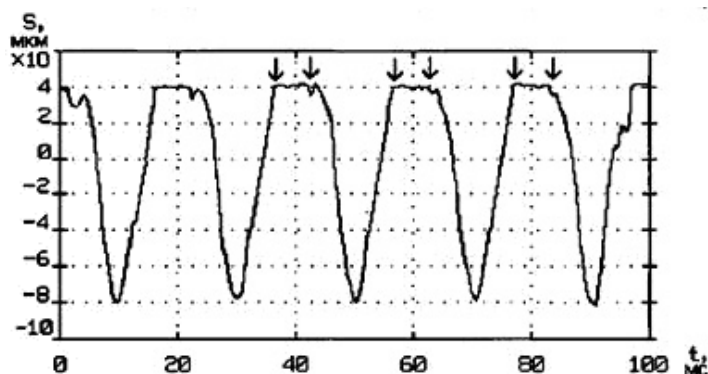


Рисунок 2. Форма и сектор вибрации опор подшипников при нарушении подгонки

Следует помнить, что подобные симптомы, зафиксированные с помощью датчиков относительной вибрации, могут говорить о наличии царапин или других дефектов поверхности вала. Наиболее надежными диагностическими признаками нарушений подгонки и приработки являются достаточно характерные изменения формы кривой сигнала виброперемещения и траектории движения вала в подшипнике (рис. 1, 2). На рисунке 1 приведена траектория движения вала в подшипнике скольжения, наблюдавшаяся в процессе приработки подшипника вала редуктора после проведенного ремонта. Весьма характерно в этом случае наличие участков с прямолинейным движением вала в подшипнике, помеченных вертикальными и горизонтальными стрелками.

Наклонной стрелкой указано направление вращения ротора. Форма сигнала виброскорости и спектр сигнала виброперемещения подшипниковой опоры редуктора получены с помощью датчика абсолютной вибрации. На кривой вибросигнала имеется «площадка», как и на кривой орбиты. В спектре виброускорения наблюдается высокая активность в области высоких и средних частот. Нарушения подгонки и сопровождающая их приработка могут приводить к последствиям, делающим невозможной дальнейшую эксплуатацию оборудования, например, таким, как изгиб и деформация (возможно, остаточная) вала (рис. 2). Повышенный зазор в подшипнике, неравномерные зазоры по радиальной плоскости (нарушение цилиндричности формы вкладыша), нарушение постоянства вели-

чины верхнего зазора и боковых зазоров вдоль оси. Повышенный радиальный зазор и его неравномерность в подшипнике вследствие дефектов изготовления или эксплуатации приводят к сложной зависимости жесткости смазочного слоя от угла поворота, что практически всегда вызывает увеличение вибрации на частоте вращения ротора и особенно ее высших гармониках.

В качестве примера на рисунке 3 приведен спектр виброскорости подшипников вала, имевшего неуравновешенность ротора. Стрелками помечены гармоники частоты вращения вала, с индексом m вибросоставляющей, возбуждаемой подшипником качения, которую не следует принимать во внимание.

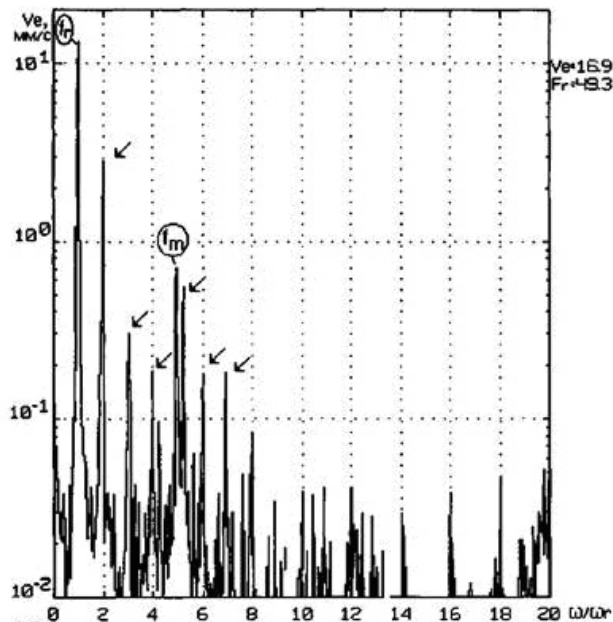


Рисунок 3. Форма и спектр вибраций подшипников вала редуктора, имеющего неуравновешенность

Необходимо добавить, что виброактивность на высших гармониках частоты вращения вала при дисбалансе во многом определяется нелинейностью, весьма индивидуальной для каждого подшипника, и уменьшается с ростом порядкового номера гармоники.

При механическом дисбалансе параметры вибрации зависят от частоты вращения вала и практически не зависят от режима работы агрегата, внешних условий работы агрегата и температуры. Вибрация может проявляться как в поперечном, так и осевом направлениях, однако в силу ее зависимости от жесткости подшипника — пространственно анизотропной; обычно горизонтально-поперечная вибрация преобладает над вертикальной. При этом чаще наблюдаются более интенсивные колебания опор ротора с дисбалансом, и влияние последнего на колебания опор сопряженных валов агрегата, особенно в случае применения гибких муфт, обычно относительно невелико.

References

1 Mehtiev A.D., Lihachev V.V., Bulatbaev F.N. Methodology improving the reliability of the brake beam hoisting machine: University works. Coll. scient. works. — Karaganda: KarSTU Publ., 2008. — № 3. — P. 72–74.

А.Д.Мехтиев, В.И.Эйрих, В.В.Югай, Ю.В.Ким, О.В.Алдошина

Электромеханикалық жабдықтың нақты техникалық қалыбын орнатудағы соққы диагностиканы қолдану жөнінде

Соққы диагностикаға негізделген жабдықтың нақты техникалық жағдайының мониторингі беріктілік параметрлерінің, нақты тозуын, тау-кен өндірісі жабдыктарының механикалық және конструктивті

бөліктерінің бұзылуының өзгерісін уақытылы анықтауға мүмкіндік береді. Мақалада Қарағанды және Павлодар облыстарындағы өнеркәсіптердегі алынған талдау мәліметтері келтірілген. Тау-кен өндіретін қондырғылардың механикалық бөлігінің сенімділігін арттыру үшін шешімдердің жолдары қарастырылады. Вибрация спектрінің қисығы бойынша жағдайды бағалау жасалған. Сонымен қатар тау-кен өндіретін қондырғылардың жылжымалы бөлігінің істен шығуының негізгі себептері анықталған. Көрсетілген әдіс істен шыққандардың диагностикасының техникалық деңгейін біршама көтеруге және тау-кен өндіретін өнеркәсіптердің механикалық қондырғыларын жөндеудің нағыз қажеттілігін арттыруға мүмкіндік береді.

A.D.Mekhtiyev, V.I.Eirikh, V.V.Yugai, Y.V.Kim, O.V.Aldoshina

The question of establishing actual technical condition electromechanical equipment for vibrodiagnostics

Monitoring of the actual technical condition of equipment based on vibration diagnostics, allows a timely to set change of parameters of reliability, the actual wear, fatigue failure of mechanical and structural parts of mining equipment. The article analyzed the data obtained on enterprises in Karaganda and Pavlodar regions. We consider solutions to improve the reliability of the mechanical part of the mining equipment. Produced assessment of the envelope of the vibration spectrum, as well as the main causes of withdrawal from system of mobile mining equipment parts. The above technique allows significantly improve the technical level of fault diagnosis and real the need for repair of mechanical mining equipment.

А.Д.Мехтиев, В.В.Югай, В.И.Эйрих, Ю.В.Ким, М.Б.Суиндигов

Карагандинский государственный технический университет (E-mail: barton.kz@mail.ru)

Внедрение солнечных модулей для энергообеспечения систем телекоммуникации

На сегодняшний день стоят острые проблемы экономичного и экологически чистого получения энергии без истощения энергетических ресурсов. В данной статье рассмотрены способы получения энергоресурсов из неисчерпаемого источника (Солнца) путем преобразования светового потока в электрическую энергию. Показана возможность питания удаленных базовых станций устройств связи без привязи их к сети энергоснабжения. Также были рассмотрены различные устройства солнечных батарей, технические характеристики. Авторы предложили методику установки солнечных модулей с учетом климатических условий Республики Казахстан.

Ключевые слова: солнечная энергетика, телекоммуникация, энергообеспечение, солнечный модуль, повышение надежности.

Каждый день на земную поверхность поступает огромное количество энергии, неисчерпаемым источником которой является солнце. Природа научилась использовать солнечную энергию. Энергия Солнца является источником жизни на нашей планете. Солнце нагревает атмосферу и поверхность Земли. Благодаря солнечной энергии дуют ветры, осуществляется круговорот воды в природе, нагреваются моря и океаны, развиваются растения, имеют корм животные. Именно благодаря солнечному излучению на Земле существуют ископаемые виды топлива. Выработка электроэнергии при помощи электростанций на солнечных элементах применяется сегодня практически во всем мире. Объемы использования солнечных батарей постоянно растут. Этому способствует множество факторов, основные из которых — использование альтернативных источников энергии, в последнее время приобретающих все большую актуальность. Получение энергии посредством традиционных источников сегодня становится всё более дорогим удовольствием и серьёзно бьёт как по карману простых потребителей, так и по бюджетам многих государств. Солнечная энергия доступна и бесплатна, ее использование послужит надежной защитой от постоянного роста цен на электроэнергию. Запасы нефти, угля и газа очень скоро закончатся, а Солнце, как уверяют учёные, будет светить ещё очень долго.

Преимуществом солнечных батарей является отсутствие в них подвижных частей, их большая надежность и стабильность. Срок эксплуатации современных солнечных батарей приближается к отметке 25–30 лет. Модульность компонентов позволяет создавать солнечные установки любой мощности и делает их весьма перспективными. Фотоэлектричество сможет составить конкуренцию традиционным видам производства электроэнергии уже в следующем десятилетии, при соответствующей общественной и финансовой поддержке. До недавнего времени солнечные батареи использовались в основном в космосе, но всё чаще в последние годы они проникают в нашу жизнь. То тут, то там услышишь новость из области фотоэлектричества — ученые провели испытания солнечного автомобиля, повысили КПД фотоэлементов, получены новые технологии переработки «солнечного» кремния, построена крупнейшая солнечная электростанция, снижена стоимость производства солнечных элементов, на орбитальном комплексе произведена замена солнечных батарей, городские власти оснащают солнечными батареями автобусные остановки, дачник Сиабучев с успехом использует солнечные батареи на своем приусадебном участке и т.д., и т.п. Интерес к этому источнику энергии растет ежегодно. Солнечные батареи обеспечивают большую автономность и независимость от линий электропередач. Солнечное электричество имеет много преимуществ — это чистый, тихий и надежный источник энергии, особенно в удаленных районах, где нет централизованного электроснабжения. Количество солнечной энергии, достигающей поверхности Земли, изменяется из-за движения Земли вокруг своей оси и Солнца. Эти изменения зависят от времени суток и времени года. Обычно в полдень на Землю попадает наибольшее количество солнечной радиации, чем рано утром или поздно вечером. В полдень Солнце находится в зените, и длина пути прохождения лучей Солнца через атмосферу Земли сокращается. Вследствие этого меньшее количество солнечных лучей преломляется и отражается, а значит, больше солнечной радиации достигает поверхности земли. Количество энергии, падающей на единицу площади в единицу времени, зависит от ряда факторов:

– широты;

- местного климата;
- сезона года;
- угла наклона поверхности по отношению к Солнцу.

Количество солнечной энергии, достигающей поверхности Земли, отличается от среднегодового значения: в зимнее время — менее чем на $0,8 \text{ кВт}\cdot\text{ч}/\text{м}^2$ в день на Севере Европы и более чем на $4 \text{ кВт}\cdot\text{ч}/\text{м}^2$ в день в летнее время в этом же регионе. Различие уменьшается по мере приближения к экватору. Количество солнечной энергии зависит и от географического месторасположения объекта: чем ближе к экватору, тем оно больше. Например, среднегодовое суммарное солнечное излучение, падающее на горизонтальную поверхность, составляет: в Центральной Европе, Средней Азии и Центральном регионе России приблизительно $1000 \text{ кВт}\cdot\text{ч}/\text{м}^2$; в Средиземноморье — приблизительно $1500 \text{ кВт}\cdot\text{ч}/\text{м}^2$; в большинстве пустынных регионов Африки, Ближнего Востока и Австралии — приблизительно $2200 \text{ кВт}\cdot\text{ч}/\text{м}^2$. Таким образом, количество солнечной радиации существенно различается в зависимости от времени года и географического положения. Этот фактор играет важнейшую роль при расчете эффективности использования электростанций, в которых используются солнечные батареи.

На основании исследований, проведенных мировыми учеными, и полученных ими данных установлено распределение солнечной радиации на поверхности земли, что наглядно показано на рисунке 1 [1].

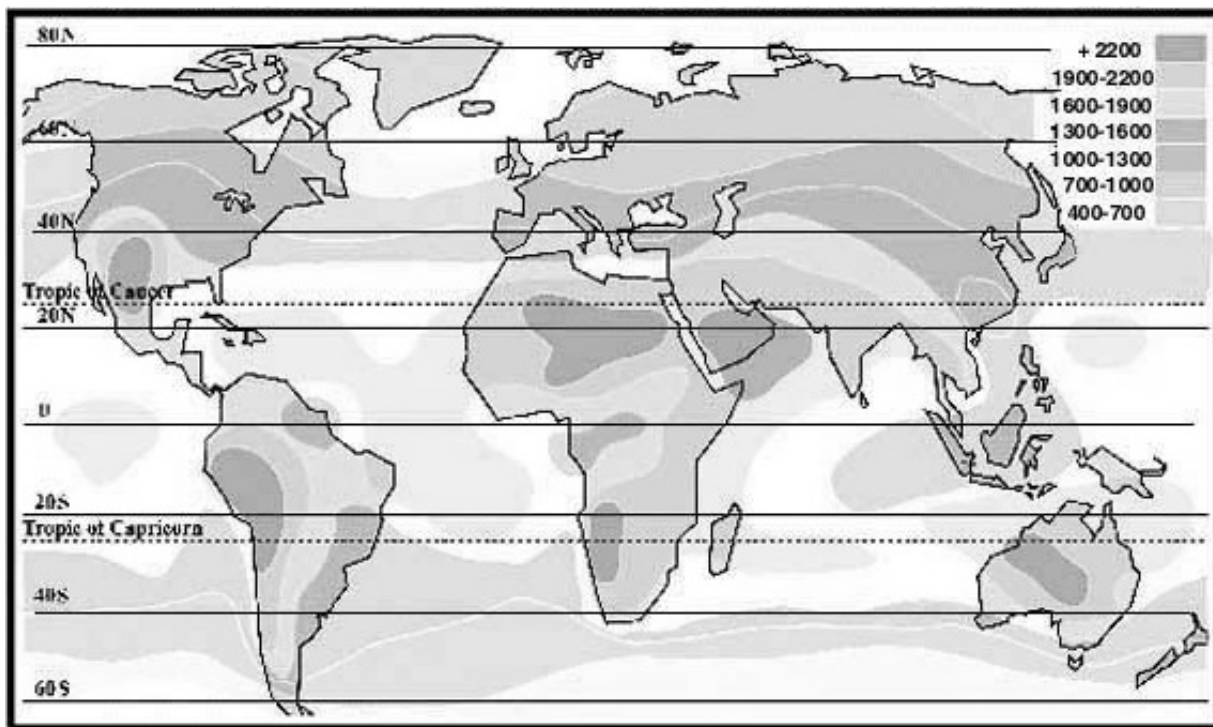


Рисунок 1. Распределение солнечной радиации на поверхности земли ($\text{кВт}\cdot\text{ч}/\text{м}^2/\text{год}$)

Поток солнечного излучения, проходящий через площадку в 1 м^2 , расположенную перпендикулярно потоку излучения на расстоянии одной астрономической единицы от центра Солнца (т.е. вне атмосферы Земли), равен $1367 \text{ Вт}/\text{м}^2$ (солнечная постоянная). Из-за поглощения атмосферой Земли максимальный поток солнечного излучения на уровне моря $1020 \text{ Вт}/\text{м}^2$. Однако следует учесть, что среднесуточное значение потока солнечного излучения через единичную площадку, как минимум, в три раза меньше (из-за смены дня и ночи и изменения угла солнца над горизонтом). Зимой в умеренных широтах это значение в два раза меньше. Это количество энергии с единицы площади определяет возможности солнечной энергетики. Существует несколько используемых способов эффективного получения электроэнергии путем преобразования солнечного излучения:

- 1) с помощью фотоэлементов;
- 2) гелиотермальная энергетика.

Получение электроэнергии с помощью фотоэлементов (солнечные батареи). Фотоэлемент представляет собой полупроводниковый прибор, который преобразует энергию солнечного света (фотонов) в электрическую энергию. Принцип работы солнечных фотоэлементов в том, что когда на солнечный элемент попадает солнечный свет, материал солнечного элемента поглощает часть фотонов. Каждый фотон имеет малое количество энергии. Когда фотон поглощается, он инициирует процесс освобождения электронов в солнечном элементе. Вследствие того, что обе стороны фотоэлектрического элемента имеют токоотводы, в цепи возникает ток, когда фотон поглощается. Солнечный элемент генерирует электричество, которое может быть использовано сразу или сохранено в аккумуляторной батарее. Солнечный фотоэлемент изготавливается на основе пластины, выполненной из полупроводникового материала. Основным материалом для получения солнечных элементов является кремний [1].

Существует такое понятие, как «Фотоэлементы первого поколения», т.е. фотоэлементы на основе кристаллического кремния. Наиболее распространенными из них являются фотоэлементы на основе монокристаллического кремния. Это самый эффективный и распространенный вид элемента. Их получают литьем кристаллов кремния высокой частоты. В процессе охлаждения кремний постепенно застывает в форме цилиндрической отливки монокристалла диаметром 13–20 см, а длина достигает 200 см. Получаемый слиток нарезается тонким слоем (250–300 мкм), выглядит как однотонная поверхность темно-синего или почти черного цвета. Такие элементы имеют более высокую эффективность, высокий уровень КПД (до 19 %), а также очень долгий срок службы — 40–50 лет. Основным недостатком подобных фотоэлементов является цена. Кроме того, влияют еще и погодные условия: при облачности или затмении КПД значительно уменьшается [1].

Основная идея данной работы заключается в использовании солнечных батарей для электропитания удаленных базовых станций сотовой связи. В качестве источника электрической энергии используется солнечный модуль, накопитель, инвертор, интегрированное устройство оптимизации рабочих режимов ФЭК, обеспечивающее стабильную зарядку аккумуляторов при наименьшей интенсивности солнечного излучения, а также стабилизации генерируемого напряжения. Это позволит, в конечном итоге, повысить технический уровень установки и продлить срок эксплуатации аккумуляторных батарей, обеспечить возможность бесперебойного электроснабжения удаленных базовых станций устройств связи и телекоммуникации без их привязки к электроподстанциям, разработать конструкторско-техническую документацию и технологию производства ФЭК.

Новизна данной идеи состоит в том, что:

- ранее она не была адаптирована для питания удаленных телекоммуникационных устройств;
- применяется принципиально новая система стабилизации генерируемого напряжения и зарядки аккумуляторных батарей, позволяющей значительно улучшить технические параметры модулей и продлить срок эксплуатации данных батарей;
- используются направляющие отражательные устройства с интеллектуальной системой управления для преломления и концентрации солнечной энергии на модуле, что позволяет повысить КПД установки;
- система имеет высокие технико-экономические показатели при низкой себестоимости по сравнению с существующими аналогами;
- система будет адаптирована к климатическим условиям Республики Казахстан и иметь оригинальную систему самоочистки, что значительно сократит эксплуатационные расходы.

Нами поставлены следующие задачи научного и прикладного характера:

- 1) выполнить исследования для установления оптимальных параметров работы ФЭК с целью достижения наивысших технических показателей и наибольшей экономической эффективности;
- 2) разработать схемные решения по конфигурации ФЭК (отдельных элементов и устройства в целом);
- 3) разработать рекомендации по использованию ФЭК для электроснабжения удаленных устройств связи и телекоммуникаций.

В попытке решения этих проблем были созданы поликристаллические фотоэлементы. Здесь используется менее чистый и более дешевый кремний. Внешне это уже не однотонная поверхность, а узор из границ множества кристаллов. Такие элементы характеризуются более низким КПД, порядка 11 %, и меньшим сроком службы, до 10 лет. Однако они имеют меньшую стоимость и меньше зависят от затмения.

Как уже было отмечено, фотоэлементы на основе кремния достаточно дороги. Чтобы решить эту проблему, многие фирмы и исследовательские команды принялись искать альтернативу и нашли ее в виде тонкопленочной технологии. Отличие от предыдущих видов фотоэлементов — тонкопленочные элементы могут вырабатывать энергию в пасмурную погоду и даже во время дождя. Особенностью элементов такого рода является минимальный процент кристаллического кремния, что значительно снижает стоимость продукта. Основным материалом тонкопленочных элементов является аморфный кремний. Такие элементы — это различного рода пленки, на которые нанесен слой рабочего кремния толщиной 0,5–1,0 мкм (в противовес 300 мкм в кристаллических, разница — в 300 раз). Кроме этого, аморфный кремний, в отличие от кристаллического, можно наносить на самые разные поверхности, которые, ко всему прочему, можно гнуть (аморфный материал, в отличие от кристаллического, не ломается). Но нельзя не отметить недостатки аморфных фотоэлементов:

- значительно низкий КПД 6–7 %;
- долговечность гораздо ниже, чем у кристаллических элементов до 7 лет.

Из указанных выше данных можно построить сравнительный график различных видов фотоэлементов (рис. 2).

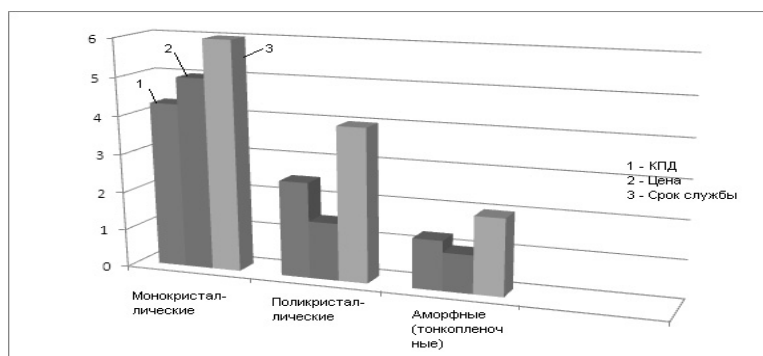


Рисунок 2. Сравнительные характеристики различных типов фотоэлементов

Еще один наиболее распространенный способ получения энергии из солнечного излучения — гелиотермальная энергетика — нагревание поверхности, поглощающей солнечные лучи и последующее распределение и использование тепла (фокусирование солнечного излучения на сосуде с водой для последующего использования нагретой воды в отоплении или в паровых электрогенераторах). В гелиотермальной энергетике основным элементом отопления и горячего водоснабжения в системе, построенной по такому принципу, является солнечный коллектор. Солнечный коллектор — устройство, предназначенное для поглощения солнечной энергии, которая переносится видимым и ближним инфракрасным излучением для последующего ее превращения в тепловую энергию. Обычно солнечные коллекторы устанавливаются неподвижно, а угол наклона выбирают в зависимости от основного назначения устройства. При установке коллектор стараются расположить в сторону юга, но обязательно ориентируясь на рельеф местности. Рекомендуется отклоняться от ориентации на юг не более чем на тридцать градусов, тогда и тепло будет вырабатываться в пределах нормы. Они бывают плоские и трубчатые (вакуумные) и различаются эффективностью и стоимостью (плоские значительно дешевле, но менее эффективны). Однако поступающая на землю солнечная энергия нестабильна и зависит от многих факторов, таких как время года и время суток, высота солнца над горизонтом и степень ясности дня, температура воздуха и влажность, плотность облачности и глобальное затемнение атмосферы. Учитывая климатические условия нашей страны (резко континентальный климат) и дорогую стоимость солнечных коллекторов, эксплуатация солнечных коллекторов в Казахстане не так актуальна, как солнечных батарей.

Казахстан, а именно Карагандинская область, тоже обладает достаточным потенциалом в развитии солнечной электроэнергетики. Примером является Карагандинский государственный технический университет, где был разработан и собран экспериментальный солнечный модуль, представленный на рисунке 3.



Рисунок 3. Солнечный модуль

Данная модель является действующим образцом солнечного фотоэлектропитающего комплекса, где наглядно показано, из каких элементов она должна состоять и как они должны быть подключены.

Основными элементами солнечного модуля являются:

- 1) закаленное стекло, предотвращающее повреждение солнечных элементов в процессе транспортировки, монтажа и эксплуатации солнечного модуля;
- 2) монокристаллические/поликристаллические солнечные элементы, преобразующие солнечный свет в электрическую энергию;
- 3) ламинирующая пленка герметизирует солнечный модуль и обеспечивает долгий срок службы;
- 4) тыльная пленка защищает тыльную сторону от повреждений и обеспечивает дополнительную герметизацию солнечного модуля;
- 5) распределительная коробка с диодами обеспечивает выход контактов и минимизирует потери мощности при затенении солнечных элементов модуля;
- 6) анодированный профиль создает дополнительные прочностные характеристики и имеет посадочные места для удобства монтажа солнечного модуля.

Основные необратимые потери энергии в ФЭК связаны с:

- отражением солнечного излучения от поверхности преобразователя;
- прохождением части излучения через ФЭК без поглощения в нём;
- рассеянием на тепловых колебаниях решётки избыточной энергии фотонов;
- рекомбинацией образовавшихся фотопар на поверхностях и в объёме ФЭК;
- внутренним сопротивлением преобразователя;
- некоторыми другими физическими процессами.

На основании проведенных прикладных исследований данного модуля были получены экспериментальные данные по установлению зависимости выходного тока от освещенности фотоэлемента, результаты представлены графиком на рисунке 4.

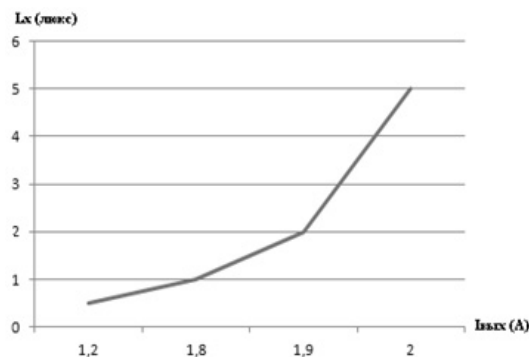


Рисунок 4. Зависимость выходного тока от освещенности

Нельзя не отметить экономическую эффективность солнечных элементов. Расчет эффективности дает возможность понять, во сколько раз выгоднее использовать альтернативные источники питания

по сравнению с традиционными (нефть, уголь, газ), также позволяет выявлять видимые достоинства и недостатки, к которым можно отнести:

- достоинства альтернативных источников питания:
 - относительно невысокая стоимость;
 - возможность модернизации системы без существенной замены основных компонентов;
 - не требует топлива и расходных материалов, для генерации энергии используется только солнечный свет;
 - система работает в режиме полной автономии, не требуется контроль за процессами генерации и накопления;
 - ток с сигналом «чистая синусоида» позволит подключать любые электроприборы;
 - высокая эффективность использования сгенерированной энергии;
 - надежные и долговечные компоненты системы;
 - экологически чистый и высокотехнологичный источник энергии;
 - не создает дискомфорта;
 - не требует регулярного сервисного обслуживания (раз в 5–7 лет);
- недостатки:
 - требуется квалифицированный персонал для проведения монтажа;
 - в зависимости от ситуации могут потребоваться дополнительные меры против вандалов и воров;
 - прямая зависимость от погодных условий и времени года (в зависимости от географического положения).

Но, в данном проекте мы предлагаем меры по борьбе с такими проблемами, как:

- замена персонала на техническое обслуживание;
- охрана территории, на которой используется данная установка;
- дополнительные устройства — очистители, — которые дадут возможность регулировать вред, нанесенный природными условиями.

На рисунке 5 представлен график, отображающий сравнение эксплуатационных затрат в период времени 10 лет.

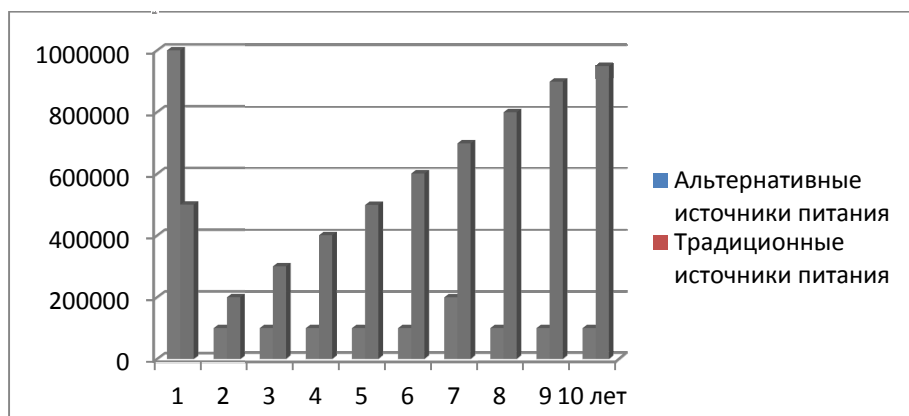


Рисунок 5. Сравнение годовых эксплуатационных затрат

На основании изложенного выше приходим к выводу, что при использовании в Казахстане солнечных батарей, учитывая географическое положение и климат, целесообразно будет разместить солнечные электростанции в открытых местностях, где нет возможности протянуть высоковольтные линии по следующим причинам:

- место расположения не позволяет провести высоковольтные линии (ВЛ), так как есть риск их быстрого выхода из строя (плохие климатические условия, постоянное выветривание поверхности земли, где закреплено основание ВЛ);
- слишком затратный процесс, если стоимость длины линий и количества планируемых ВЛ не соизмеримо с получаемой прибылью. При расчете суммарного количества потребляемой энергии необходимо учесть, что часть электрического тока уходит на нагревание проводов и потери иного рода.

При оценке возможности использования солнечных батарей в Казахстане можно прийти к выводу, что солнечные электростанции значительно сократят затраты на добычу других энергетических ресурсов, с экологической точки зрения уменьшат выброс в атмосферу вредных веществ. Уменьшение выбросов вредных веществ положительно отразится на флоре и фауне близлежащих районов, сократится количество заболеваний среди населения. С экономической точки зрения можно с уверенностью сказать, что размещение солнечных электростанций приведет к увеличению рабочих мест, так как для размещения таких электростанций потребуется немалый объем территории, также есть возможность экономить истощаемые ресурсы. Учитывая большую незаселенную территорию страны и сравнительно небольшой объем населения, свободную территорию необходимо использовать для размещения солнечных электростанций. Если сравнить с другими электростанциями, то данный вид добычи можно считать наиболее безопасным и более экономным по следующим причинам:

- преимущество солнечных электростанций перед тепловыми в том, что они не зависят от оборудования по добыче и транспортировке. Нет необходимости тратить дополнительные средства для их заправки и технического обслуживания в случае их неисправности. Не стоит также забывать, что энергия, получаемая от угля, нефти и природного газа, зависит от химических процессов, происходящих в недрах Земли под действием солнечных лучей. Рациональней будет использование солнечной энергии напрямую, нежели использование «вторичного» источника энергии. Для подачи электроэнергии в отдаленные районы, где нет доступа к электросетям, нет необходимости постройки высоковольтных линий, достаточно лишь поставить поблизости солнечную электростанцию, что уменьшит затраты на постройку высоковольтных линий и подводящих проводов;

- преимущество перед гидроэлектростанциями — нет необходимости постройки дамб, увеличивающих риск затопления;

- преимущество перед атомными электростанциями — нет риска заражения радиацией, как на Чернобыльской АЭС и АЭС Фукусима-1, также нет проблем с утилизацией радиоактивных отходов;

- как на примере с теплоэлектростанцией, энергия, получаемая от ветра, также зависит от солнечных лучей. Как известно, ветер — процесс столкновения потоков воздуха с различным уровнем температур, а разность температур — результат воздействия солнечных лучей.

References

- 1 *Kashkarov A.P.* Wind turbines, solar panels and other useful design. — Moscow: DMK Press, 2010.

А.Д.Мехтиев, В.В.Югай, В.И.Эйрих, Ю.В.Ким, М.Б.Суиндиков

Телекоммуникация жүйелерін энергиямен қамтамасыз ету үшін күн модульдерін енгізу

Бүгінгі таңда энергетикалық ресурстардың сарқылуынсыз экономикалық және экологиялық таза энергияны алудың қиын мәселелері бар. Мақалада жарық ағынының электрлік энергияға алмастыру жолымен, сарқылмайтын көзден («Күн») энергоресурстарды алу әдістерін құрастырады және сипаттайды. Энергия қамтамасыздандыру жүйесіне қосылуынсыз байланыс құрылғысының жойылған базалық станцияларын қоректендіру мүмкіндігі қарастырылып жатыр. Сонымен қатар басқа да түрлі күн батареялары, олардың құрылымы және де техникалық сипаттамалары қарастырылады. Сондай-ақ Қазақстан Республикасының климаттық жағдайын есепке ала отырып, күн модульдерін орналастыру әдістері зерттелуде.

A.D.Mekhtiyev, V.V.Yugai, V.I.Eirikh, Y.V.Kim, M.B.Suindikov

The introduction of solar modules for power supply telecommunications systems

Nowadays there are many important problems of economy and green way of energy production without depleting the energy resources. This article is devoted the way of energy production from never-ending resource («The Sun») by means of transformation of light flow to electrical power. The possibility of power remote base station communication devices without the tether them to the network supply. It is also considered a variety of solar devices, their design and technical characteristics. The paper also considers methods of installation of solar modules, taking into account climatic conditions of the Republic of Kazakhstan.

УДК 378.147:372.853

Л.Ф.Ильина, А.Н.Колесникова

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (E-mail: l_191137@mail.ru)

Сравнительный анализ методики проведения занятий по электростатике в 8-х и 10-х классах с использованием интерактивных технологий

В статье рассмотрена методика преподавания электростатики на первом и втором этапах обучения учащихся физике в общеобразовательной средней школе с использованием современных интерактивных технологий. Для улучшения качества образования предложено использование в комплексе приемов и средств, активизирующих познавательную деятельность школьников и развивающих их познавательный интерес. Для более лучшего и качественного усвоения темы даны задачи, виртуальные лабораторные работы. Использование интерактивного оборудования усиливает наглядность изложенного материала, делает урок живым и увлекательным, повышает заинтересованность учащихся, позволяет улучшить запоминание учебного материала.

Ключевые слова: электростатика, сравнительный анализ, интерактивные технологии, педагогический эксперимент, виртуальные лабораторные работы.

Социально-экономические изменения в Казахстане привели к необходимости реформирования многих социальных институтов, и в первую очередь системы образования, которая напрямую связана с экономическими процессами через подготовку производительных сил. Совершенствование системы образования играет также важную роль в решении задачи, поставленной Президентом Казахстана Н.А.Назарбаевым о вхождении республики в число 50-ти наиболее конкурентоспособных стран мира. С 2002 г. казахстанская школа готовится к переходу на 12-летнее образование, и этот шаг является важным для вхождения в мировое образовательное пространство.

В своем Послании народу Казахстана Президент Н.А.Назарбаев отмечает: «Реформа образования — это один из важнейших инструментов, позволяющих обеспечить реальную конкурентоспособность Казахстана. Нам нужна современная система образования, соответствующая потребностям экономической и общественной модернизации. Необходимо создать условия для получения образования на протяжении всей жизни человека».

На современном этапе развития школы выдвигается задача преобразования традиционной системы обучения в качественно новую систему образования — задача воспитания грамотного, продуктивно мыслящего человека, адаптированного к новым условиям жизни в обществе. Начиная с 90-х годов XX в. приоритетными являются интерактивные методы обучения, где основное внимание уделяется практической отработке передаваемых знаний, умений и навыков.

Внедрение интерактивных форм обучения — одно из важнейших направлений совершенствования подготовки учащихся в современном учебном заведении. Основные методические инновации связаны сегодня с применением именно интерактивных методов обучения.

Учебный процесс, опирающийся на использование интерактивных методов обучения, организуется с учетом включенности в процесс познания всех обучающихся микрогруппы или класса в целом. Совместная деятельность означает, что каждый вносит свой особый индивидуальный вклад, в ходе работы идет обмен знаниями, идеями, способами деятельности [1].

Важный фактор успешного формирования прочных знаний по физике — развитие учебно-познавательного энтузиазма учащихся на уроках, который достигается интеллектуальной и эмоциональной

подготовкой школьников к восприятию нового учебного материала. Последнее предполагает широкое применение системы средств обучения в условиях комплектно оборудованного кабинета физики, позволяющего учителю с наименьшей затратой времени и усилий использовать любые средства обучения в комплексе, в системе.

Таким образом, можно предположить, что работа учителя по активизации познавательной деятельности учащихся будет наиболее эффективной, а качество знаний учащихся выше, если при проведении уроков используются приемы и средства, активизирующие познавательную деятельность школьников и развивающие их познавательный интерес.

Раздел «Электростатика» в школьном курсе физики — это один из непростых разделов.

Проведя подробный анализ темы «Электростатика» в базовом курсе физики, мы отобрали и систематизировали соответствующий теме теоретический материал, изучаемый на первой ступени обучения учащихся в общеобразовательных средних школах. Рассмотрены понятия электродинамики, электрического заряда и его основных характеристик (рис. 1), виды зарядов и их взаимодействие; понятие электризации, способы электризации (рис. 2).

Электрический заряд

Электрический заряд - физическая величина, определяющая силу электромагнитного взаимодействия

- Единица измерения- кулон (Кл)
- Обозначение- q, Q
- Элементарный электрический заряд $e=1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$
- Электрический заряд дискретен (квантован) $Q=ne$, где n - целое число.

Существуют два вида электрических зарядов- положительные и отрицательные.



Рисунок 1. Электрический заряд

Электризация- процесс

получения электрически заряженных тел из электронейтральных.

- Электризация трением:
 - а) участвуют два тела;
 - б) оба заряжаются: одно- положительно; другое- отрицательно.
 - в) заряды обоих тел одинаковы по величине.
- Электризация соприкосновением с заряженным телом.
- Электризация через влияние (электростатическая индукция).



Рисунок 2. Электризация и способы электризации

Рассмотрен один из основных законов электростатики — закон сохранения электрического заряда, а также закон Кулона (рис. 3), введены понятие электростатического поля и его основных характеристик — напряженности и потенциала, связь между силовой и энергетической характеристиками электростатического поля (рис. 4, 5), графическое представление электростатического поля (рис. 6). Завершается изучение электростатики на первом этапе знакомством с понятием конденсатора, его видами и основными характеристиками.

Закон Кулона

Сила взаимодействия между двумя неподвижными точечными зарядами, находящимися в вакууме, прямо пропорциональна произведению модулей зарядов, обратно пропорциональна квадрату расстояния между ними.

$$F_{12} = k \frac{|Q_1| |Q_2|}{r^2}$$



Рисунок 3. Закон Кулона

Электростатическое поле - вид материи, существующий вокруг неподвижных заряженных тел.

- Свойства электростатического поля:
 - а) порождается электрическими зарядами;
 - б) обнаруживается по действию на заряд;
 - в) действует на заряды с некоторой силой.
- Силовой характеристикой электростатического поля является напряженность.
- **Напряженность электростатического поля** в данной точке численно равна отношению силы, действующей на пробный заряд, помещенный в эту точку, к величине пробного заряда



Рисунок 4. Электростатическое поле и его характеристики

- **Напряженность** $\vec{E} = \frac{\vec{F}}{q_{пр}}$
- **Единица измерения** $\frac{Н}{Кл}, \frac{В}{м}$
- **Напряженность поля точечного заряда.** $E = \frac{k \cdot |q|}{r^2}$
- **Принцип суперпозиции(наложения) полей.**

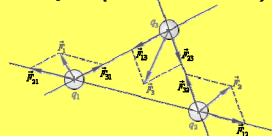
$$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$$


Рисунок 5. Напряженность электростатического поля

Силовые линии электростатического поля

- **Линии напряженности электростатического поля** - линии, касательные к которым в каждой точке поля совпадают по направлению с вектором напряженности поля.
- Направление линий соответствует направлению силы, действующей на положительный заряд



В случае точечного заряда, линии напряженности исходят из положительного заряда и уходят в бесконечность, и из бесконечности входят в отрицательный заряд.



Рисунок 6. Графическое представление электростатического поля

Отобран и систематизирован соответствующий теме теоретический материал, изучаемый на второй ступени обучения учащихся в общеобразовательных средних школах. Вводится понятие потока напряженности (рис. 7), теорема Остроградского-Гаусса (рис. 8), изучается её применение. Рассматриваются электростатическое поле при наличии проводников и диэлектриков, виды соединения конденсаторов и энергия заряженного конденсатора.

Поток вектора напряженности

- Полное число силовых линий, проходящих через поверхность S называется **поток вектора напряженности Φ** через эту поверхность $\Phi_E = (\vec{E}, \vec{S})$
- В векторной форме можно записать – скалярное произведение двух векторов, где вектор $\vec{S} = \vec{n}S$
 Таким образом, поток вектора есть скаляр, который в зависимости от величины угла α может быть как положительным, так и отрицательным

Рисунок 7. Поток вектора напряженности

Теорема Остроградского-Гаусса

поток вектора напряженности электрического поля равен числу линий напряженности, пересекающих поверхность S.

- Таким образом, для точечного заряда q, полный поток через любую замкнутую поверхность S будет равен:

$$\Phi_E = \frac{q}{\epsilon_0}$$

– если заряд расположен внутри замкнутой поверхности;

$$\Phi_E = 0$$

– если заряд расположен вне замкнутой поверхности;

этот результат не зависит от формы поверхности, и знак потока совпадает со знаком заряда.

Рисунок 8. Теорема Остроградского-Гаусса

Задача повышенной сложности

Точечный заряд q = 2,00 мкКл находится между двумя проводящими взаимно перпендикулярными плоскостями. Расстояние от заряда до каждой полуплоскости l = 5,0 см. Найти модуль силы действующей на заряд.

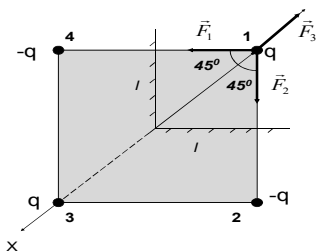


Рисунок 9. Графическое представление задачи

Дано: q = 2 мкКл l = 5см ε₀ =	СИ: 2·10 ⁻⁶ Кл 5·10 ⁻² м	Решение:
F = ?		Заряд в двух «зеркала» дает три изображения. По закону Кулона:
		$F_1 = F_2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0(2l)^2}$ $F_3 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 8l^2}$
		Ось x направляем по результирующей силе. В проекции на эту ось имеем:
		$F_x = 2F_1 \cos 45^\circ - F_3 = 2 \cdot \frac{q^2}{16\pi\epsilon_0 l^2} \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{q^2}{32\pi\epsilon_0 l^2} = \frac{q^2}{32\pi\epsilon_0 l^2} (2\sqrt{2} - 1) =$
		$= \frac{4 \cdot 10^{-12} \cdot 1,8 \cdot 4\pi \cdot 9 \cdot 10^9}{32\pi \cdot 25 \cdot 10^{-4}} = 3,3Н$
		Ответ: F=3,3 Н.

Рисунок 10. Решение задачи

Подобраны по теме и апробированы на уроках качественные экспериментальные задачи, а также задачи повышенной сложности, которые можно использовать для подготовки учащихся к различным физическим конкурсам и олимпиадам. Для примера выбрана одна из таких задач (рис. 9, 10). Задача решается на основе метода электрических (зеркальных) отображений.

В преподавании школьного курса физики важное место занимает экспериментальный метод. Школьный физический эксперимент можно разделить на пять видов: демонстрационный эксперимент, фронтальные лабораторные работы, внеклассные экспериментальные работы учащихся, физический практикум, виртуальные лабораторные работы.

Кроме общих задач, разрешаемых всеми видами школьного эксперимента, каждый вид имеет свою особенность, свое более узкое целевое назначение.

Все эти виды школьного физического эксперимента содействует более глубокому изучению законов физики, а также приобретению учащимися практических навыков в области физического эксперимента [2].

При изучении раздела «Электростатика» в средней школе необходимо рассмотреть следующие демонстрации: электризация диэлектриков и проводников, взаимодействие наэлектризованных тел, устройство и действие электрометра, одноименное получение разноименных и равных зарядов при электризации, распределение зарядов на поверхности проводника, закон Кулона, силовые линии электрического поля, эквипотенциальные поверхности, понятие об емкости, емкость плоского конденсатора, устройство и действие конденсаторов постоянной и переменной емкости, определение емкости конденсаторов, соединение конденсаторов, энергия заряженного конденсатора.

Предложенные демонстрации в условиях современной школы можно показать учащимся в виде видеофрагментов с применением компьютера и проектора или интерактивной доски [3].

Наряду с классическими лабораторными работами в настоящее время часто используют компьютерные лабораторные практикумы [4].

Компьютер позволяет провести эксперименты из любой области физики: механики, электричества, молекулярной, ядерной, атомной физики и т.д. В каждом из этих разделов встречаются опыты, которые имеют большое значение для понимания физики учащимися, но они не включаются в лабораторный практикум в связи с трудностями их постановки.

Важным преимуществом применения компьютера является возможность повышения наглядности физических процессов.

В рамках изучения выбранной темы предложены виртуальные работы для более глубокого и качественного усвоения темы на изучение электростатического поля.

Виртуальные лабораторные практикумы являются удобными тренажерами, облегчающими процесс получения и накопления новых знаний и навыков, но не могут являться полноценной заменой реального лабораторного практикума.

По мере изучения тем раздела проведена проверка уровня усвоения материала учащимися, результаты которой представлены на рисунках 11, 12.

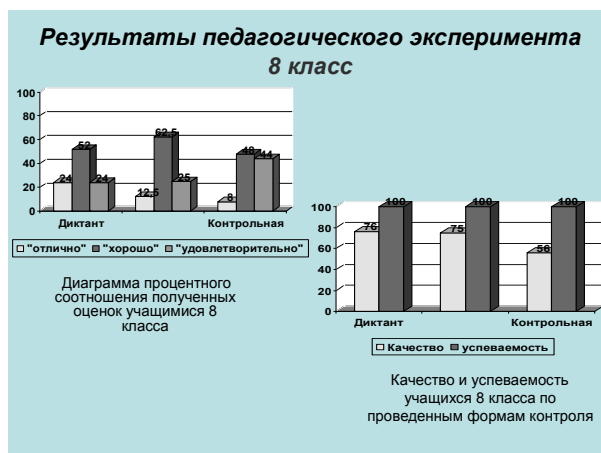


Рисунок 11. Результаты педагогического эксперимента в 8 классе

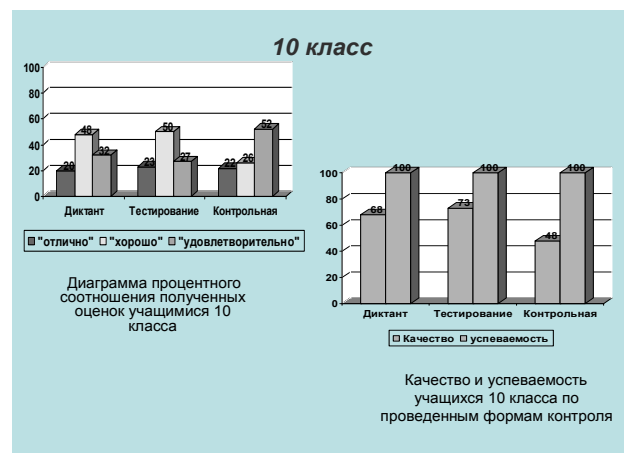


Рисунок 12. Результаты педагогического эксперимента в 10 классе

Формы контроля были следующие: физические диктанты, тестирование, контрольная работа. Тестирование учащихся осуществлялось с использованием программы «Тестер».

Анализ показал: базовый материал усвоен всеми учащимися. Средний уровень знаний наблюдается у большинства учащихся. Это связано с тем, что использование интерактивной доски помогло лучше освоить сложный материал.

Как показала практика работы, физические диктанты можно использовать на всех этапах обучения физики, но при этом необходимо учитывать возрастные особенности: учащиеся 8-х классов легко возбуждаются, но и быстро утомляются, медленнее пишут, чем учащиеся старшей параллели.

Систематическое проведение физических диктантов оказывает на учащихся психологическое и воспитательное воздействие. Они приучаются вдумчиво и серьезно учить материал. Готовясь к уроку, они предполагают, какие вопросы будут проверены учителем фронтально, какие индивидуально, а какие в форме физического диктанта. Учащиеся привыкают к тому, что знания каждого из них будут тщательно проверены и оценены. Это воспитывает дисциплину труда, трудолюбие.

Тестовые задания с выбором ответа позволяют с высокой степенью точности определить показатели усвоения материала как каждым учеником в отдельности, так и классом в целом. Данная возможность обуславливается простотой оформления ответа на вопросы при данной форме проверки. Отсутствие времени, затрачиваемого учащимися на оформление ответа, позволяет увеличить число вопросов, включаемых в каждое задание. Это обстоятельство, в свою очередь, приводит к возможности проверки в каждом варианте задания не только целого комплекса умений и знаний (как в традиционных контрольных работах), но и усвоения итоговых элементов многих знаний в отдельности.

Задания с выбором ответа создают учителю возможность для дифференцированной проверки знаний учащихся при соблюдении единого подхода к ним. Единый подход обеспечивается тем, что все учащиеся получают одно и то же задание или ему равноценные варианты. Вместе с тем задания с выбором ответа обладают и возможностью дифференцированной проверки знаний, ведь в них могут содержаться разные по сложности вопросы.

Но нужно отметить, что тестовый контроль не проверяет умения учащихся строить ответ, грамотно и логично выражать свои мысли на языке науки, рассуждать и обосновывать свои суждения. Задания с выбором ответа (тесты) целесообразно применять в тех случаях, когда эта форма контроля знаний имеет преимущества перед другими. Например, они особенно удобны с применением различного типа контролируемых машин и компьютеров.

Письменная контрольная работа — наиболее распространенная форма в школьной практике — проводилась с целью определения конечного результата в обучении учащихся, умения применять знания для решения задач определенного типа по данной теме или разделу. Задачи, составляющие контрольные работы, разные по сложности, что позволяет проверить, насколько полно учащиеся усвоили изучаемые темы, а если кто-то не справился с заданием целиком, то узнать, обладает ли он необходимым минимумом знаний по этой теме или на каком уровне он усвоил материал темы.

Из всего изложенного выше вытекает, что использование какой-то одной формы не заменяет другие формы контроля знаний, поэтому для получения полной картины об усвоении знаний учащимися необходимо применять различные формы контроля знаний по изучаемым темам.

В заключение сделаем основные выводы.

1. Различия в методике изложения электростатики на первом и втором этапах ее изучения определяются, прежде всего, отбором материала по содержанию.

2. На первом этапе обучения в 8 классе ребята знакомятся с основными и достаточно простыми понятиями по теме, такими, как электризация, виды зарядов, их свойства, электростатическое поле, его основные свойства и характеристики: напряженность, потенциал, конденсатор. Некоторые темы носят ознакомительный характер. В ряде же тем изучаются не только сами понятия, но и отрабатываются навыки применения изученного материала на практике при решении задач, например, на закон Кулона, электроемкость конденсаторов, напряженность электростатического поля, работа и др.

3. На втором этапе изучения этой темы в 10 классе сначала проводилось повторение ранее изученного материала в 8 классе, а затем повторение тем, требующих более углубленного подхода. Рассматривались задачи повышенного уровня сложности, ряд тем изучался впервые. Одной из таких тем явилась, например, теорема Остроградского-Гаусса. Это достаточно трудный материал, который требует тщательного изучения и времени, но, несмотря на это, рассмотрение теоремы в средней школе просто необходимо, так как это во многом упрощает понимание физики и облегчает решение задач.

4. Использование интерактивной доски, персонального компьютера и проектора не только усилило наглядность изложенного материала, сделало урок живым и увлекательным, но и повысило заинтересованность учащихся, позволило улучшить запоминание учебного материала.

5. Использование интерактивной доски привлекло обучающихся к активному участию в занятиях, предоставило больше возможностей для взаимодействия и обсуждения в классе, помогло сэкономить время примерно на 20 %, благодаря чему появилось время для изучения дополнительного материала по теме, для анализа и решения практических задач. Благодаря подаче материала с помощью интерактивной доски обучающиеся лучше и быстрее усвоили новый материал, так как все сказанное сразу подтверждалось наглядно: с помощью видео, анимации, компьютерных моделей, которые имитировали физические процессы и явления. Все это говорит о том, что процесс обучения с применением интерактивной доски гораздо эффективнее, чем процесс обучения с помощью традиционных форм проведения занятий.

6. Применение компьютера и компьютерных программ для осуществления одной из форм контроля — тестирования — не только заинтересовало учеников, но и существенно облегчило работу по проверке работ учащихся, так как ее осуществляла машина.

Результаты работы внедрены в учебный процесс общеобразовательной средней школы № 27 г. Темиртау. Оформлен акт внедрения.

References

- 1 *Belyuzev G.V.* Professional competence: aspects of formation. — Moscow: Moscow Psychological and Social institute, 2005. — 326 p.
- 2 *Margolis A.A., Parfertieva N.E., Sokolov I.I.* Workshop on the school physical experiment. — Moscow: Education, 1968. — 390 p.
- 3 *Nikolaeva F.A.* Workshop on physics. Electricity and magnetism. — Moscow: High school, 1991. — 142 p.
- 4 *Tolstik A.M.* Virtual physics laboratory. — Tomsk: Tomsk State University, 2007. — 272 p.

Л.Ф.Ильина, А.Н.Колесникова

Интерактивтік технологияларды қолдана отырып, 8-ші және 10-шы сыныптарда электростатика бойынша сабақ өткізу әдісін салыстырмалы түрде талдау

Мақалада электростатиктерді оқыту әдістемесінің бірінші және екінші кезеңі оқушыларға физиканы оқытудың жалпы білім беретін орта мектебінде қазіргі заманғы интерактивтік технологияларды пайдаланып оқытылатын әдістемесі қарастырылған. Білім берудегі сапаның жақсаруы үшін тәсілдер және кешендік қабылдауларды пайдалану, оқушылардың танымдық қызметтерін жандандыру және олардың танымдық қызығушылықтарын дамыту қажет. Тақырыпты жақсы және сапалы қабылдау үшін есептер және виртуалдық зертханалық жұмыстар ұсынылады. Интерактивтік жабдықты пайдалану берілген материалдың көрнекілігін арттырып, сабақты жанды және қызықты етіп өткізуге көмектеседі, оқушылардың қызығушылығын жоғарлатып, оқу материалының жақсы есте қалуына мүмкіндік жасайды.

L.F.Ilyina, A.N.Kolesnikova

Comparative analysis of methods of conducting studies on electrostatics in the eighth and tenth grades, using interactive technologies

The article deals with methods of teaching electrostatics on the first and second stages of student learning physics in a secondary high school with the use of advanced interactive technologies. To improve the quality of education offered in the use of complex techniques and tools that activate the cognitive activities of students and develop their cognitive interest. For better quality and learning themes proposed tasks, virtual labs. The use of interactive equipment increases the visibility of the material, making lesson lively and entertaining, increases the interest of students, can improve the memorizing of educational material.

А.С.Кудусов, Э.К.Мусенова

Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті (E-mail: emusenova@mail.ru)

Стандартты емес есептерді шығару әдістемесі

Есептерді шартты түрде шығару тәсілін субъектіге жақсы белгілі стандартты және стандартты емес деп бөлуге болады. Стандартты емес есептерді шешудің негізгі әдісі — оларды бір немесе бірнеше стандартты есептерге түрлендіру. Алайда оған жету аса күрделі әдіс. Стандартты емес есептерді стандартты түрге түрлендірудің ізденіс әрекеттері бойынша ұйымдастырылған ұсыныстар эвристикалар, немесе эвристикалық тәсілдер, деп аталады. Барлық қалған алгоритмдерді алгоритмдік ұйғарымдар деп атаған дұрыс.

Кілтті сөздер: есептерді шешу әдістемесі, физикалық есепті шешудің алгоритмдері, стандартты емес есептер, идеалды шарттар (аспаптар), эвристикалық тәсілдер.

Адамның кез келген әрекетін әр түрлі есептерді дәйекті шығару деп ойлауға болады. Кез келген есепті, сонымен қатар физикадан жаттығу есептерін шығару барысында біз әрекеттің логикалық және практикалық екі түрін жасаймыз: алгоритмдік — үлгі бойынша әрекет, және эвристикалық — осы үлгіні іздестіруге бағытталған әрекет. Сонымен, табылған үлгінің зерттелетін зат пен процестен өзгешелігінің қатты болуы сонша, тіпті тиімді ұқсастықты көру нәтижесінде немесе мұндай мәселелерді шешудегі жақсы дайындықтың арқасында, алайда өзара байланысты да байқауға болады.

Әр жаңа есепті шығару барысында адам үлгі бойынша әрекет етуі үшін, оның өз санасында алдын ала шешілген қарапайым бейнесі — сол жағдайдың үлгісі болу керек және өз санасында ол зерттей бастайтын жайттың үлгісін жасауы тиіс. Модельдеу үдерісінде адам өзінің модельді нысандарына есепті шешудегі тек неғұрлым маңызды, шынайы, сондықтан бірегей және қайталанбайтын кескін қалдырып, зерттелу объектілерінің жеке ерекшеліктерінен дерексіздендіріледі. Есепті шығару кезінде іздестіру қызметінің тиімділігін арттыру үшін ой қызметінің екі түрімен сәйкес шартты екі түрге бөлетін әр түрлі нұсқаулар жасалған: алгоритмдік және эвристикалық.

Есепте қойылған сұраққа жауап алуға әкелетін орындаудағы іс-әрекет жүйелілігі берілген есеп шешімінің алгоритмі деп аталады.

Алгоритмді есте сақтаудың арқасында әр шығарылған есептің шешімінен біз басқа есептерді шығару барысында жүгіне алатын тағы бір үлгі аламыз.

Ұқсас есептер үшін есептердің нақты түрін шығару алгоритмін құрайды. Бірақ біртектес есептерді әр түрлі тәсілмен (әдіспен) немесе, керісінше, әр алуан түрлі есептерді бір тәсілмен шығаруға болады, сондықтан есептерді шығарудың қандай да бір тәсілін қолдану алгоритмдері бар.

Егер алгоритмді анықтауды қатаң сақтаса, онда барлық әрекет нақты көрсетілген есептерді шешу алгоритмін ғана алгоритм деп атауға болады. Барлық басқа алгоритмдерді есеп шығарушының әр кезеңде қандай әрекетті қалай жүзеге асыратынын өз бетінше түсіне алу қабілеттілігін ескере отырып, онда әрекеттің негізгі кезеңі ғана көрсетілгендіктен, алгоритмдік ұйғарым деп атаған дұрыс.

Физикадан әр алуан есептерді шығару барысындағы маңызды айырмашылыққа байланысты кез келген есепті шығарудың жалпы алгоритмін есепті шығарудың негізгі кезеңдерін санамалау түрінде тұжырымдауға болады [1].

Егер есеп стандартты емес болып табылса, онда нақты кезеңде оны шығаруда міндетті түрде проблема туындайды: әрі қарай не істеу керек? Яғни есеп жағдайын таныс түрге әкелу және алгоритмдік әрекетке қайта келу үшін қандай ойлау және практикалық әрекеттерді жасау керек екенін анықтау керек. Бұл мезетте іздестіру эвристикалық әрекетіне тарту іске асады. Эвристикалық қызмет үшін әрекеттің реттелген жүйесінің, байқау мен қателер әдісін қолданудың, интуицияға тірек және басқа есептерді шығаруда өзінде бұрын жүре болған, мүмкін андаусыз болған тәжірибенің болмауы тән. Бұл іздестіру саналы, реттелген және мақсатты болу үшін стандартты емес есептерді стандартты есептерге айналдыруда арнайы ұсыныстар жасалады. Бұл ұсыныстар эвристикалық деп аталады [2]. Ұсынылған әрекеттердің жалпыланған дәрежесіне қарай эвристикалық ұсыныстарды үш деңгейге бөледі. Біріншіден, стандартты емес есептерді бір немесе бірнеше стандартты есепке айналдыру. Екіншіден, екінші деңгейлі эвристикалық ұйғарымдарға келесі кеңестерді жатқызуға болады:

• *Есептің мазмұнын зейін қойып тағы бір талдаңыз және берілген жағдайға неғұрлым қарапайым үлгі жасаңыз.*

● *Жалпы мазмұнға сүйеніп заңдылықты шығарып алыңыз* (симметрия идеясына, сақталу заңына, қарапайымдылық, салыстырмалылық, себептілік қағидалары, суперпозиция, анықталағандық қатынасына сүйене отырып, ұқсастықты қолдану).

● *Есепте қаралатын заттар мен процестердің ерекшеліктеріне көңіл аударыңыз. Есептің өзін немесе онда қаралатын нысандарды бөлімдерге бөліңіз, оларды қайта құрастырыңыз.*

● *Есеп шартының нақтылау дәрежесін уақытша өзгертіңіз.*

● *Өз жұмысыңыз үшін ыңғайлы жағдай жасаңыз.*

● *Өзіңізді қарастырылатын нысан орнына қойып көріңіз.*

Үшіншіден, нақты ұсыныстар эвристикалық тәсіл деп аталады. Эвристикалық тәсілдерді екінші деңгейлі эвристикалық ұсыныстармен жобалау сәйкестігімен алты біріктіру жасауға болады.

1) «Шартты талдау және модель» стандартты емес жағдайдың стандарттыға айналуының бастапқы кезеңінде қолдану пайдалы болатын тәсілдерді біріктіреді. Оған мыналар жатады:

- *талаптан шартқа қарай жүру және артығын алып тастау;*
- *терминдерді анықтау және логикамен құрастыру;*
- *қасиетін дәріптеу;*
- *мәтінді сызбаға орналастыру;*
- *қосымша мәлімет жинау;*
- *қарапайым модель жасау.*

Берілген жағдаяттың бастапқы моделін жасағаннан кейін, *физиканың неғұрлым жалтылама заңдары мен әдіснамалық қағидалары нәтижесінде* жалпы есеп жағдайына қарап, есептің шешімін табуға тырысу керек. Кейде бұл мүмкін, сонда есептің шешуі қысқа да әдемі болады! Егер есепті толық шығара алмаса, онда анықталған заңдылық арақатынасты шешуге қажетті әрі қарай ізденісті біршама жеңілдетеді.

2) «Жалпы тәсілге» эвристикалық тәсілдер кіреді:

- *жағдаятқа жалпы қарау;*
- *ұқсастықты табу;*
- *симметрия іздеу;*
- *сақталатын сипаттамаларды анықтау;*
- *басқа қырынан қарау;*
- *беттесу нәтижесі ретінде көрсету (суперпозиция).*

3) «Ерекшелігін анықтау». Бұл жерде келесіні назарда ұстау қажет:

- *ерекше қасиетін ескеру;*
- *өзгерістердің келістілігін ескеру;*
- *геометриялық бейнесін пайдалану;*
- *графигін зерттеу;*
- *нақтылау-модельді өзгерту.*

4) «Бөлімдерге бөлу және қайта құру»:

- *бөлімдерге бөлу;*
- *дәуірлеуді айқындау;*
- *көмекші элементтерді кіргізу;*
- *өзара орналасуын өзгерту;*
- *ұқсасқа алмастыру;*
- *ізделетін бөлікті өзі арқылы білдіру;*
- *кері есеп шығару.*

5) Жалпылау деңгейін өзгерту немесе есеп шартын нақтылау есеп жағдайын өзгертудің тағы бір тәсілі болып табылады. Егер кейбір белгісіз шамаларға нақты сандық мән берсе, есеп жағдайын біршама нақтылауға болады (олардың қарапайымдылығы мен дұрыс мағына жинау түсінігі арқылы). Бұл мәндерде нақты есептердің бір немесе бірнеше жеке шешімі табылады. Ол шешімдер негізінде алғашқы есепті шешу мүмкіндігі жайында қорытынды жасалады. Кейбір нысандар қасиетін нақтылап қана қоймай, идеалдандыруға да болады. Мысалы, нысанның кейбір сипаттамасының сандық мәні нөлге тең делік. Онда есеп біршама жеңіл болады. Есепке жауап алып, нысан одан қосымша идеалдандыру алынғаннан кейін есеп жағдайына енетін үлеске түзету жасайды және алғашқы есепке шешім табады. Есеп жағдайын нысандардың нақтылығы мен дәріптелуі ғана емес, сонымен қатар есеп шартын уақытша жалпылау жеңілдетеді. Бірақ жалпылау дәрежесі әр шаманың орнына тек оның сан-

дық мәнінің реті (шаманың реттілігі бойынша бағалау әдісі) немесе тек сол шаманың бірлігін (өлшем бірліктер әдісі) алмастырылғанда ғана үлкен бола алады. Өлшем бірліктер әдісін немесе шаманың реттілігі бойынша бағалау әдісін қолдану логикалық түрлендіруге және математикалық есептеуге кететін уақытты біршама қысқарта алады. Сонымен, «Шарттың нақтылау дәрежесін өзгерту» мына тәсілдерге біріктіріледі:

- *біршама идеалдандырылған есепті шығару;*
- *біршама жалтыланған есепті шығару;*
- *біршама нақтыланған есепті шығару.*

Әрине, мұндай есептерді шығарғаннан кейін алғашқы есепті талдауға қайта оралу қажет және оны шығару үшін айқындалған заңдылықты қолдану керек.

б) «Ішкі қорларды жаңғырту» біздің есепті сәтті шығарудағы психологиялық жағдайымызға үлкен әсерін тигізеді. Есеп шығарушы өзінің ізденімпаз ойшыл және практикалық әрекеті үшін неғұрлым қолайлы жағдай жасауға және қарастырылатын процестерді қабылдаудың жеке субъективті тәжірибесін жоғары дәрежеде қолдануға тырысу керек. Ол үшін:

- *өзінің сенімділік деңгейін реттеу;*
- *нысан бейнесіне үйрену, «Кішкентай адамдар әдісін» қолдану;*
- *«мига шабуыл» жасау;*
- *жұмыс жағдайын өзгерту. Басқа іске кірісу керек.*

Бірақ шығармашылық ізденіс үдерісін болжау мүмкін емес. Сіздің бірнеше минутта есеп жағдайын жеңілдететін қажетті тәсілді таңдап алуыңыз немесе ойлап табуыңыз мүмкін, ал бұл үшін бірнеше тәулік отыруыңыз да мүмкін. Егер талаптансаңыз, есепті ерте ме, кеш пе, әйтеуір, шығарасыз. Бірақ емтихандарда бақылау жұмысын шығару барысында, физика пәнінен олимпиадаларда және сайыстарда есеп шығаруға берілетін уақыт шектеулі. Мұндай жағдайларда біздің әр түрлі есептерді шығарып жаттығуымыздың рөлі зор. Өз бетінше есептерді шығара отырып немесе оқу құралымен таныса отырып, сіздер сіз үшін қалыпты болған нақты жағдайда шамалар арасындағы өзара байланысты белгілеудің көптеген жеке алгоритмдік тәсілін есте сақтайсыздар. Керек тәсілді білу есепті шығаруға кететін уақытты біршама азайтады. Физикалық құбылыстардың әралуандылығы физика есептерінің одан да көп түрлі болуына және оларды шығарудың көптеген жеке тәсілдеріне сүйенуге әкеледі. Есепте жиі кездесетін жеке алгоритмдік тәсілдерді есте сақтауды жеңілдету үшін және басқа есептерді шығаруда, сонымен қатар физиканың басқа бөлімдеріне «көшуге» ыңғайлы біршама эвристикалық болу үшін, оларды мұндай білімді неғұрлым көп талап ететіндей тұжырымдауға болады. Мұндай эвристикалық бағытты тұжырымдамасы бар алгоритмдік тәсілдерді эвристикалық-алгоритмдік тәсіл деп атайды.

Кез келген есепті шығару оның тұжырымдамасын (мазмұнын) зерттеуден басталады. Сонымен қатар біз есеп талаптарымен танысамыз, шартын (берілгенін) зерттейміз және есептің негізгі шиеленісін анықтаймыз. Яғни мына сұрақтарға жауап беруге тырысамыз: *Не белгілі? Нені табу керек? Проблемасы неде?* Есептің шартын талдай отырып, әрқайсымыз нысандар мен құбылыстарды абстракциялаймыз, идеалдаймыз (дәріптейміз), басымдық процесті көрсетеміз, қосымша мәліметтер жинаймыз, шарттың артығын алып тастаймыз, сапалы және сандық сипаттама арасындағы өзара байланысты бекітеміз, шартты шешуге қажеттісін және жеткіліктісін айқындаймыз, есепті шығаруға әкелетін есеп жағдаятының моделін жасаймыз [3].

Біріктірілген эвристикалық «Шартын талдау және модель жасау» тәсілі бізге шартты талдау кезеңін және есеп жағдаятының (есеп құрауда) алғашқы моделін жасауды тиімділеу үшін қандай әрекетті қолдануға болатынын ойға салады. Бұл біріктіруге келесі эвристикалық тәсілдер жатады:

- *Талаптан шартқа өту және артығын алып тастау.*

Есеп мәтінін жете түсінуді есеп жағдаяты туралы жалпы түсінікті қалыптастыру және есеп мақсатын айқындау барысында, онымен бірінші жүгірте таныстықтан кейін жүзеге асырған дұрыс. Нені табу керектігі анықталғаннан кейін шартын жете зерттеуді бастауға болады. Әрекеттің мұндай бірізділігі жауапты табуға пайдасын тигізетін, яғни есепте қойылған проблемаларды шешуде жеңіл-желпі болатын шарттарды жылдам айқындауға әкеледі.

- *Терминдерді айқындау және логикалық құрылымдау.*

Есептің мазмұнымен бірінші танысқаннан кейін белгілі шарт пен есеп мақсаты арасындағы логикалық өзара байланысты құру әрдайым бола қоймайды. Мәліметтер мен мақсатты жақындастыру үшін оларды айқындауға әкеліп соғады. Сонымен, кеңістікті фразаларды нақты терминдермен, терминдерді олардың анықтамаларымен алмастырады, құбылыстарды сапалы салғастыру туралы мәселе осы құбылыстарды сипаттайтын физикалық шамаларды сандық салғастыру туралы мәселеге әкеледі.

Кейбір физикалық шаманың сандық мәніне жасырын формада көрсететін есеп мәтіндегі тірек сөздер мазмұнына немесе толық фразаларға ерекше көңіл аудару керек. Бірнеше мысал келтіруге болады:

Егер «дене тыныштық күйінен қозғалса», онда оның бастапқы жылдамдығы нөлге тең.

Егер «газ гелий» (не аргон не басқа инертті газ) болса, онда бұл газды идеалды, бір атомды деп санауға болады және оның ішкі энергиясын $U = \nu RT$ формуламен есептейді.

Егер «газ және оның сұйықтығы жабық ыдыста болса», газ қанық болып табылады.

Егер «жабық ыдыста су және 100 °С-тағы оның буы бар болса», онда бу қанығу жағдайында болады және оның қысымы 10^5 Па-ға тең болады.

Егер «ток көзі идеалды болса», онда оның ішкі кедергісі нөлге тең болады.

Егер «су көлемі» берілген болса және оның жылулық ұлғаюын есепке алмау керек болса, онда судың массасын су тығыздығы 1 г/см^3 -ге тең екенін еске түсіре отырып, табуға болады.

Терминдерді анықтау ақпаратты логикалық құрылымдауға көмектеседі және кейде есеп сұрағына жауап табудың әрекет жоспарын бірден белгілейді.

• *Нысандар қасиетін дәріптеу (идеалдау).*

Физикалық есептерде зерттелетін нақты дене және құбылыс сондай күрделі, басқа денелермен және құбылыстармен өзара байланысты, яғни оларды саналы жеңілдетпей (идеалдамай) нақты бірде-бір есеп шығарылмас еді. Есепті шығара отырып, біз санамызда есепте қаралатын нысандардың ойша бейнесін құраймыз, бізбен жасалған нысан моделі қаншалықты қарапайым болса, сонда олардың арасындағы белгісіз өзара байланысты табу оңай. Идеалдау барысында нысанның берілген жағдайда елеусіз болатын ерекшеліктерін ескермейді. Есеп жағдайының жеңілдетілген моделін жасауда жасалған модель жалған қорытындыға әкелмес үшін, нақты фактілерге қарама-қайшы қарастырылатын дене мен құбылыстың мәнді қасиетін сақтауға тырысу керек.

Кей жағдайда есепті тұжырымдаудан зат пен процестің идеалдау сипаты белгілі болады. Физика есептерінде жиі кездесетін идеал шамаларды мысалға келтіруге болады.

Материалдық нүкте — қарастырылып отырған өлшемін ескермеуге болатын дене.

Абсолютті тегіс бет — дене қозғалыста (немесе қозғалыс жасауда) үйкелмейтін беттік.

Абсолютті серпімді дене — деформацияланғаннан кейін өз формасын толық қалпына келтіретін дене.

Абсолютті серпімсіз дене — өз формасын қалпына келтіруге қабілеті жоқ дене.

Абсолютті қатты дене — деформациясын ескермеуге болатын дене.

Идеал газ — жеке молекуланың көлемі газ құйылған ыдыс көлеміне қарағанда ескерусіз, молекулаларының арасында өзара әсерлесу күші болмайтын, молекулалары бір-бірімен және ыдыс қабырғасымен абсолютті серпімді соқтығысатын дене.

Идеалды электрөлеуші аспап — электр тізбегіне қосқанда электр зарядының қозғалысы процесінде қандай да бір өзгеріске ұшырамайтын аспап (мысалы, идеал амперметр елеусіз аз ғана, ал идеалды вольтметр — шексіз үлкен кедергіге ие).

Шексіз бір қалыпты зарядталған жазықтық — өлшемдері өріс кернеулігі есептелетін нүктеден бетке дейінгі арақашықтықтан біршама үлкен бір қалыпты зарядталған жалпақ бет.

Идеал индуктивтік катушка, идеал ток көзі, идеал өткізгіш сым — электр кедергілерін елемейтін болатын құралдар.

Идеалды блок — оське қатысты үйкеліссіз айнала алатын, массасы елеусіз аз, науашасы бар диск түріндегі күштің түсірілу бағытын өзгертуге арналған қарапайым механизм.

Созылмайтын жіп — созылуды елемейтін жіп.

Инерциалдық санақ жүйесі — дене тыныштық күйін немесе тұзусызықты бір қалыпты қозғалысын сақтайтын санақ жүйесі.

Идеалды процестер ішінен келесіні атап кетуге болады:

– *тұзусызықты бір қалыпты қозғалыс;*

– *бір қалыпты үдемелі қозғалыс;*

– *жылудан оқшауланған процесс;*

– *абсолютті серпімді және серпімсіз соққы.*

Физика есептерін шығаруда қолданатын көптеген басқа да идеалды модельдер бар. Сонымен қатар бізге қандай денелерді немесе процестерді дұрыс деп санауға болатын есеп жағдайын өз бетімізше модельдеуге және шешуге тура келеді. Нысан міндетінде қарастырылатын ең елеулі қасиеттерді көрсететін қарапайымдылық принципіне сүйену және модель құру ұсынылады.

- «*Аз қосылғыштарды елемеу*».

Егер физикалық процесті суреттейтін формулада өте аз шама көбейткіштердің бірі ретіндегі қосылғыштар бар болса, қарастырылатын құбылыстың математикалық біршама қарапайым, бірақ дәл суреттемесін алу үшін бұл қосылғыштарды елемеуге болады.

Квадратталған немесе одан да жоғары дәрежеленген аз қосылғыштарды елемеу ықтималдылығының үлесі көп.

- *Мәтінді сұлбаға айырбастау.*

Берілген жағдаятты талдауда көрнекі бейнені қолданып, біз бейнелі ойымызды қосамыз. Сурет, график, кесте немесе графа түрінде берілген есеп шартын бейнелеу есептің шарты мен талабы арасындағы өзара байланысты жылдам әрі жеңіл құруға көмектеседі.

- *Есеп мазмұнының бейнелік қысқа жазбасы.*

Әдетте бұл операцияны қысқа берілген шарттың бірнеше дәл емес жазбасы деп атайды, шамалар арасындағы сапалы және сандық арақатынасы көрінуі үшін формулаларды қолданады, берілген жағдаят жайлы біртұтас түсінік алуға және зерттелетін нысандарға өзгеше қарауға көмектеседі. Суреттегі бастапқы, соңғы кейде, тіпті, аралық жағдайлар бейнесі болып жатқан өзгерістерді жақсы түсінуге септігін тигізеді.

- *Қосымша мәліметтер жинау.*

Есепті тұжырымдауда есеп шартын шешуге қажеттінің барлығы болмайды. Кейде олар туралы мәлімет айқын көрінбейді, ал кейде есеп шығарылатын болу үшін қосымша мәліметтерді кіргізуге тура келеді. Қосымша мағлұматтар жинауда біз есімізде сақталған мәліметтерге сүйенеміз, анықтама мәліметтерін қолданамыз немесе қарапайымдылық қағидасын және дұрыс мәнді басшылыққа аламыз.

Қосымша мәліметтер айқын берілмеген есепті тұжырымдау үлгісі ретінде «19,6 м биіктіктен түскен сүңгі қанша уақытта жерге түседі?» деген сияқты есептер қызмет етеді. Дұрыс ой қорытындысы сүңгінің бастапқы жылдамдығы нөлге тең десе, сол мезетте сүңгі жылдамдығы үлкейеді, түсуге аз қалады, ал сүңгі өлшемі жер мен төбе арақашықтығынан әлдеқайда кіші, сонымен қатар түсу биіктігі салыстырмалы түрде үлкен емес болғандықтан, кедергі күшінің әсерін елемеуге болады. Жердің бетіне жақындағанда еркін түсу үдеуінің мәні көбінің есінде жақсы сақталған, ал тіпті қажетті жағдайда кез келген физика анықтағышынан оңай табады. Сонымен қатар дұрыс ой қорытындысы дәл осы есепті шығару үшін $g = 9,8 \text{ м/с}^2$ мәнін алған ыңғайлы екенін еске түсіреді, себебі есепте көрсетілген түсу биіктігінің мәні берілген санға еселік. Биіктік қағидасына сәйкес көп басқа жағдайларда $g = 10 \text{ м/с}^2$ ыңғайлы болып саналады.

- *Қарапайым модель жасау.*

Физика есептерінің көбісі қойылмаған болып табылады. Оларды шығару үшін жағдаятты қосымша жеңілдету, заттар мен құбылыстардың кейбір қасиеттерін елемеу, кейбір жағдайларды нақтылау, яғни жеңілдетілген модель жасау керек.

Есепті қою үшін кейбір ұсыныстар:

1. Егер есеп шартын талдауда қарастырылатын процестің әр түрлі мүмкін нұсқалары болса, онда алдымен берілген жағдаяттың біршама қарапайым моделін таңдау керек және оны шығару қажет. Содан соң берілген жағдаяттың басқа модельдері аясында есеп шығарудың басқа да мүмкін нұсқаларын көрсету керек, мүмкіндігінше шешімін табу және алынған жауапты салыстыру қажет.

2. Өзі үшін есеп жағдаятының әр түрлі модельдерінің ұйғарым фактісін қабылдап, есепте қойылған сұраққа әр алуан жауап мүмкіндігіне жол беруге сәйкес, біз ақиқат түсініктеме өзін салыстырмалы санайтын және фактілердің нақты шеңберінің басқа түсініктемелерінің болу құқығын мойындайтын шыдамдылық қағидасына сүйенеміз. Сондықтан есепте зерттелетін нысандар жайлы толық түсінік алу үшін, есеп жағдаяттарының бірнеше әр түрлі модельдерін қарастыру пайдалы. Мысалы: «Электрон электр өрісінде $5 \cdot 10^5 \text{ В/м}$ кернеулікпен үдейді. Электронның 1 нс-тан кейінгі жылдамдығын табу керек» [4].

Мүмкін болатын шешімі. Қосымша мәлімет аламыз. Электронның массасы мен зарядын анықтағыштан алуға немесе еске түсіруге болады: масса $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$ -ға тең, электрон зарядының модулі $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$. Электронның бастапқы жылдамдығы елеусіз аз.

А) Біртекті электр өрісінде электронға модулі $F = eE$ тең тұрақы күш әрекет етеді. Электрон тұрақты үдеумен қозғалады. Ньютонның екінші заңы бойынша ол мынаған тең:

$$a = \frac{eE}{m}.$$

Осыларды ескеріп, электрон жылдамдығын мына формула бойынша табамыз:

$$v = at = \frac{eE}{m}t .$$

Сандық мәліметтерді қоя отырып, $8,8 \cdot 10^7$ м/с аламыз. Алынған жауапты талдай отырып, электрон жылдамдығы Інс-тан кейін вакуумдағы жарық жылдамдығына жақын болып шыққанын байқаймыз. Демек, нақты жауап алу үшін құбылыстың релятивистік әсерін есепке алатын басқа да математикалық модельді пайдалану қажет.

Осылай алынған жылдамдықтың жарық жылдамдығына ($c = 3 \cdot 10^8$ м/с) жақын болуына көңіл бөлмесек, бұл шешімді дұрыс деп санауға болар еді. Үлкен жылдамдықтарда релятивистік әсерді есепке алу керек, сондықтан шешім төмендегідей болады. Дене импульсінің өзгеруі күш импульсына $p - p_0 = Ft$ -ға тең, бастапқы импульс нөлге тең, сондықтан $\bar{p} = Ft$.

Бөлшектің релятивистік импульсін $p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = eEt$ формуласы бойынша есептейді, сонда

электрон жылдамдығы келесі формула бойынша табылады:

$$v = \frac{eEtc}{\sqrt{(mc)^2 + (eEt)^2}} .$$

Сандық мәліметтерді алмастыру мынадай жауап береді: $v = 8,4 \cdot 10^7$ м/с. Нақ осы жауап дұрыс болып саналады.

Есепті шешу үлгісін қосымша мәліметтерді жинауда ғана емес, сонымен қатар есеп жағдаяттары модельдерінің бірнеше мүмкін нұсқалары арасында тандау жасауда қарастырады.

References

- 1 *Arkhipov V.V., Eschanova A.M. et al.* Non-standard physical problems // Vestnik KSU. Physics Ser. — 2009. — № 2(54). — P. 69–77.
- 2 *Krasnov M.S.* Solving of complicated and non-standard physical problems. Heuristic methods of search for solving. — Moscow: ILEKSA, 2009. — 360 p.
- 3 *Kobushkin V.K.* Solving method for physical problems. — Leningrad: LSU, 1966. — 107 p.
- 4 *Krotov S.S.* Problems of Moscow physical Olympiads. — Moscow: Nauka, 2007. — 192 p.

А.С.Кудусов, Э.К.Мусенова

Методика решения нестандартных задач

Все задачи, решаемые человеком, можно условно разделить на стандартные, способ решения которых хорошо известен субъекту решения, и нестандартные. В статье показан основной метод решения нестандартной задачи — сведение ее к одной или нескольким стандартным задачам. Авторами даны рекомендации по организации поисковой деятельности по преобразованию нестандартной задачи в стандартную, которые называются эвристиками, или эвристическими приемами. Все остальные алгоритмы правильнее называть алгоритмическими предписаниями.

A.S.Kudusov, E.K.Musenova

Solving methods for non-standard problems

All problems, which stand before a person, can be conventionally divided on standard ones, with well known solving methods for the individual, and non-standard ones. The basic solving method for non-standard problem is a reduction it to one or several standard ones. To do it can be extremely difficult deal. Recommendations for organization of the search activity devoted to a transformation of the non-standard problem to the standard ones are named as heuristics or heuristic methods. It is more properly to call all other algorithms as algorithmic prescriptions.

АВТОРЛАР ТУРАЛЫ МӘЛІМЕТТЕР СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Aldoshina, O.V.** — Lecturer, Karaganda State Technical University.
- Bajsagov, J.Z.** — Engineer, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Barchuk, A.A.** — Graduate student, Kuzbass State Pedagogical Academy, Novokuznetsk, Russia.
- Dyomina, I.A.** — Associated professor, Candidate of physical and mathematical sciences, S.Amanzholov East Kazakhstan State University, Ust-Kamenogorsk.
- Eirikh, V.I.** — Head teacher, Karaganda State Technical University.
- Ilyina, L.F.** — Professor, Candidate of physical and mathematical sciences, Docent, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Jurov, V.M.** — Senior lecturer, Candidate of physical and mathematical sciences, Docent, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Kalytka, V.A.** — Lecturer, The International Bussiness-Academy, Karaganda.
- Karbozova, A.K.** — Student, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Kim, Y.V.** — Head teacher, Karaganda State Technical University.
- Kolesnikov, V.A.** — Master, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Kolesnikova, A.N.** — Physics teacher, School 27, Temirtau.
- Kudusov, A.S.** — Head of the department, Candidate of physical and mathematical sciences, Docent, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Laurinas, V.Ch.** — Head of the department, Candidate of physical and mathematical sciences, Docent, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Markidonov, A.V.** — Head of the department, Candidate of physical and mathematical sciences, Branch of the Kuzbass State Technical University, Novokuznetsk, Russia.
- Mekhtiyev, A.D.** — Head of the department, Candidate of technical sciences, Docent, Karaganda State Technical University.
- Museno, E.K.** — Associated professor Candidate of physical and mathematical sciences, Y.A.Buketov Karaganda State University.
- Popova, G.V.** — Associated professor, Candidate of physical and mathematical sciences, S.Amanzholov East Kazakhstan State University, Ust-Kamenogorsk.
- Starostenkov, M.D.** — Head of the department, Doctor of physical and mathematical sciences, Professor, I.Polzunov Altay State Technical University, Barnaul, Russia.
- Suindikov, M.B.** — Student, Karaganda State Technical University.
- Yugai, V.V.** — Master, Head teacher, Karaganda State Technical University.
- Zavatskaya, O.N.** — Engineer, Y.A.Buketov Karaganda State University.