

БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ЦЕНТР
ПРИВОЛЖСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ОКРУГА
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ С ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМ ЦЕНТРОМ УФИЦ РАН
ИНСТИТУТ МЕХАНИКИ ИМ. Р.Р. МАВЛЮТОВА УФИЦ РАН
ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМ. М. АКМУЛЛЫ

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ:
спутник Международной научной конференции
«Уфимская осенняя математическая школа-2021»**

Тезисы докладов

*XII Международной школы-конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых,
посвященной 100-летию профессора БашГУ
Фарзтдинова Миркашира Минигалиевича
(г. Уфа, 6 – 9 октября 2021 г.)*

Уфа
РИЦ БашГУ
2021

УДК 51+53
ББК 22.1+22.3
Ф94

*Печатается по решению кафедры высшей алгебры и геометрии
факультета математики и информационных технологий БашГУ.
Протокол № 1 от 01.09.2021 г.*

*Сборник составлен в рамках Программы развития
Научно-образовательного математического центра
Приволжского федерального округа, соглашение № 075-02-2021-1393*

Редакционная коллегия:

д-р физ.-мат. наук, профессор **Б.Н. Хабибуллин**
(научный редактор по направлению «Математика»);
д-р физ.-мат. наук, профессор **Е.Г. Екомасов**
(научный редактор по направлению «Физика»);
канд. физ.-мат. наук, доцент **Л.А. Габдрахманова** (отв. редактор);
канд. физ.-мат. наук, доцент **Ф.К. Закирьянов**;
аспирант ФМиИТ БашГУ **А.С. Белова**

Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании:
Ф94 **спутник Международной научной конференции «Уфимская осен-
няя математическая школа-2021»:** тезисы докладов XII
Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых
ученых, посвященной 100-летию профессора БашГУ Фарзтдинова
Миркашира Минигалиевича (г. Уфа, 6 – 9 октября 2021 г.) / отв. ред. Л.А.
Габдрахманова. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2021. – 284 с.

ISBN 978-5-7477-5342-6

В представленных материалах конференции детально обсуждаются
новейшие результаты и открытые проблемы комплексного анализа и теории
функций, спектральной теории операторов, механики, теоретической
физики и радиофизики, электроники и нанofизики, материаловедения и
наноматериалов, геофизики и прикладной физики, также проблемы
современной методики преподавания.

Материалы сборника предназначены для студентов, аспирантов и
научных работников, интересующихся указанными проблемами.

Тезисы докладов воспроизводятся с представленных авторами
оригиналов.

УДК 51+53
ББК 22.1+22.3

ISBN 978-5-7477-5342-6

© БашГУ, 2021

**РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕОРЕМЫ МАЛЬЯВЕНА-РУБЕЛА
НА КОМПЛЕКСНЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ С iR -
УСЛОВИЕМ ЛИНДЕЛЁФА**

Салимова А.Е.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Теорема. При применении iR -условия Линделёфа [см. 3.3], каждое утверждение из основной теоремы [2] эквивалентно существованию пары обращающихся, на данной последовательности, в нуль функций, пространства ненулевых функций, экспоненциального типа.

Этот результат упрощает условия основной теоремы и имеет многочисленные приложения к вопросам полноты экспоненциальных систем в функциональных пространствах, представлению мероморфных функций, исследованию аналитических функционалов и их свёрток, аналитическому продолжению голоморфных функций и проч. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ, проект № 20-31-90074 “Аспиранты”.

Литература

1. P. Malliavin, L.A. Rubel *On small entire functions of exponential type with given zeros* // Bull. Soc. Math. France, 1961, **89**:2, 175–201.
2. Салимова А.Е., Хабибуллин Б.Н. *Распределение нулей целых функций экспоненциального типа с ограничениями на рост вдоль прямой* // Математические заметки, 2020, **108**:4, 588–600.
3. Салимова А.Е., Хабибуллин Б. Н. *Рост целых функций экспоненциального типа и характеристики распределений точек вдоль прямой на комплексной плоскости* // Математические заметки, 2021, 13:3, 116-128.

© Салимова А.Е., 2021 г.

О БИОРТОГОНАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ФУНКЦИОНАЛОВ К СИСТЕМЕ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ МОНОМОВ

Кужаев А.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Пусть $\Lambda = \{\lambda_k, n_k\}_{k=1}^{\infty}$ – последовательность различных положительных чисел λ_k и их кратностей n_k . Считаем, что $\lambda_k < \lambda_{k+1}$ и $\lambda_k \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$. Положим $m(\Lambda) = \overline{\lim}_{k \rightarrow \infty} n_k / \lambda_k$.

Пусть $\rho > 0$. Символом Ω_{ρ} обозначим множество неотрицательных выпуклых функций на оси \mathbb{R} таких, что $\omega(0) = 0, \omega(t) \leq \rho|t|, t \leq 0$, и $\lim_{t \rightarrow +\infty} \omega(t)/t = +\infty$. При этих условиях $\omega(t), t > 0$, – неубывающая функция. Подмножество $\Omega_{\Lambda, \rho}$, для которого выполнено неравенство

$$\int_1^{+\infty} \frac{\omega(2\sigma_{\Lambda}(t))}{t^2} dt < \infty$$

обозначим $\Omega_{\Lambda, \rho}$.

Пусть $\omega \in \Omega_{\rho}$. Символом ω^* обозначим выпуклую функцию, сопряженную к функции ω , т.е. $\omega^*(x) = \sup_{t \in \mathbb{R}} (xt - \omega(t))$.

Индексом конденсации называется величина

$$S_{\Lambda} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda_m} \ln \left| \prod_{\lambda_k \in B(\lambda_m, \delta \lambda_m), k \neq m} \left(\frac{\lambda_m - \lambda_k}{3\delta \lambda_k} \right)^{n_k} \right|.$$

Имеет место следующее

Утверждение. Пусть $\rho > 0$, последовательность $\Lambda = \{\lambda_k, n_k\}$ такая, что $S_{\Lambda} > -\infty, m(\Lambda) < \infty$, и $\omega \in \Omega_{\Lambda, \rho}$. Тогда существуют аналитические в полуплоскости $C_{3\rho} = \{z: x = \operatorname{Re} z > -3\rho\}$ функции $G_{\omega, k, j}$ такие, что имеют место равенства

$$\begin{aligned} G_{\omega, k, j}^{(j-1)}(\lambda_k) &= 1, \quad j = \overline{1, n_k}, \quad k \geq 1, \\ G_{\omega, k, j}^{(l)}(\lambda_k) &= 0, \quad l = \overline{0, n_k - 1}, \quad l \neq j - 1, \quad k \geq 1, \\ G_{\omega, k, j}^{(l)}(\lambda_p) &= 0, \quad l = \overline{0, n_p - 1}, \quad p \geq 1, \quad p \neq k. \end{aligned}$$

Более развёрнутое изложение данного вопроса содержится в [1].

Литература

1. Krivosheev A.S., Krivosheeva O.A., Kuzhaev A.F. The Representation by Series of Exponential Monomials of Functions from Weight Subspaces on a Line // Lobachevskii Journal of Mathematics. - 2021.- Vol. 42, No. 6, P. 1183--1200.

© Кужаев А.Ф., 2021 г.

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОПЕРАТОРОВ»

УДК 517.5

DOI: 10.33184/fmpve-2021-10-06.3

ГАМИЛЬТОНОВость ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ЗАДАЧ НЕБЕСНОЙ МЕХАНИКИ

Ахмадуллина Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В теории динамических систем важное место занимают гамильтоновы системы.

Гамильтоновыми системами называют системы дифференциальных уравнений вида

$$u_j' = \frac{\partial H}{\partial v_j}, \quad v_j' = -\frac{\partial H}{\partial u_j} \quad (j = 1, \dots, N). \quad (1)$$

При этом функция $H(u, v, t)$ называется *функцией Гамильтона* или *гамильтонианом системы* (1).

При изучении конкретных динамических систем часто возникает необходимость выяснения вопроса, является ли эта система гамильтоновой.

В моем докладе этот вопрос изучается применительно к уравнениям некоторых задач небесной механики. В частности, рассматривается плоская ограниченная эллиптическая задача трех тел, которая описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \xi'' - 2\eta' = \rho(t, \varepsilon) \frac{\partial \Omega}{\partial \xi} \\ \eta'' + 2\xi' = \rho(t, \varepsilon) \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \end{cases} \quad (2)$$

Предлагается следующая схема изучения вопроса о гамильтоновости системы (2). На первом этапе осуществляется переход к новым переменным по формулам:

$$x_1 = \xi, x_2 = \eta, x_3 = \xi' - \eta, x_4 = \eta' + \xi, \quad (3)$$

Тогда система (2) примет вид:

$$\begin{cases} x_1' = x_2 + x_3 \\ x_2' = -x_1 + x_4 \\ x_3' = -x_1 + x_4 + \rho(t, \varepsilon) \frac{\partial \Omega}{\partial x_1} \\ x_4' = -x_2 - x_3 + \rho(t, \varepsilon) \frac{\partial \Omega}{\partial x_2} \end{cases} \quad (4)$$

На втором этапе строится функция

$$H(x_1, x_2, x_3, x_4, t; \varepsilon, \mu) = \frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2}{2} + x_2 x_3 - x_1 x_4 - \rho(t, \varepsilon) \Omega(x_1, x_2; \mu) \quad (5)$$

Наконец, на заключительном этапе доказывается, что функция (5) является гамильтонианом системы (4).

Литература

1. Юмагулов, М.Г., Ибрагимова, Л.С. Линейные гамильтоновы системы: введение в теорию и приложения / М.Г. Юмагулов. – М.: Башкирский гос. ун-т, 2020. – 21-38 с.
2. Морозов, А.Д. Введение в математические методы нелинейной динамики/ А.Д. Морозов. – Электронное учебно-методическое пособие, 2012. – 90с.

© Ахмадуллина Р.Р., 2021 г.

УСТОЙЧИВОСТЬ СИСТЕМЫ ДВУХ СВЯЗАННЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Белова А.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассматривается зависящая от малого параметра ε систему двух связанных осцилляторов, описываемых уравнениями (см., например, [1]):

$$\begin{cases} x'' + v_1x + c_1y = f_1(x) + \varepsilon(\mu_{11}x + \mu_{12}y) \sin(t) \\ y'' + v_2y + c_2x = f_2(y) + \varepsilon(\mu_{21}x + \mu_{22}y) \cos(t) \end{cases} \quad (1)$$

Здесь v_j, c_j, μ_{ij} -- некоторые постоянные коэффициенты, а нелинейности $f_1(x)$ и $f_2(y)$ удовлетворяют соотношениям: $|f_1(x)| = O(x^2)$, $|f_2(x)| = O(x^2)$, при $x \rightarrow 0$.

Предлагаются новые формулы первого приближения в задаче о возмущении дефинитных и индефинитных мультипликаторов линеаризованной системы (1). Полученные результаты сформулированы в терминах исходного уравнения и доведены до эффективных формул и алгоритмов. Рассматривается вопрос об устойчивости уравнения (1) при малых значениях ε .

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2020-0027).

Литература

1. Леонов Г.А. Теория управления. СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2006.

© Белова А.С., 2021 г.

**АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЯДРА ОПЕРАТОРА
ПРОЕКТИРОВАНИЯ НА СОБСТВЕННОЕ ПОДПРОСТРАНСТВО,
СООТВЕТСТВУЮЩЕЕ СОБСТВЕННЫМ ЗНАЧЕНИЯМ
ДВУМЕРНОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА В ПОЛОСЕ**

Яндыбаева И.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассмотрим оператор L_0 в пространстве $L^2(\Pi)$, где

$$\Pi = \{x = (x_1, x_2), x_1 \in \mathbb{R}, 0 \leq x_2 \leq \pi\},$$

порожденный дифференциальным выражением

$$lu = -\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + x_1^2 u$$

и граничными условиями Дирихле:

$$u \in L_2(\Pi), u(x_1, 0) = u(x_1, \pi) = 0, x_1 \in \mathbb{R}.$$

То есть оператор L_0 имеет область определения

$$D(L_0) = \{u(x_1, x_2) : u \in W_2^2(\Pi), u(x_1, 0) = u(x_1, \pi) = 0\}.$$

Рассмотрим оператор $L = L_0 + V$, где V оператор умножения на ограниченную, измеримую, финитную, вещественнозначную функцию $V(x), x \in \Pi$.

Справедлива [1]

Теорема 1. *Спектр оператора L_0 состоит из собственных чисел $\lambda_n = n, n \in \mathbb{N} \setminus \{1, 3\}$ с кратностями*

$$v_n = \begin{cases} \left[\frac{\sqrt{n}}{2} \right], \lambda_n \in \left[\left(2 \left[\frac{\sqrt{n}}{2} \right] \right)^2 ; \left(2 \left[\frac{\sqrt{n}}{2} \right] + 1 \right)^2 \right] \\ \left[\frac{\sqrt{n}}{2} \right] + \frac{(-1)^n + 1}{2}, \lambda_n \in \left[\left(2 \left[\frac{\sqrt{n}}{2} \right] + 1 \right)^2 ; \left(2 \left[\frac{\sqrt{n}}{2} \right] + 2 \right)^2 \right]. \end{cases}$$

Пусть P_k – проектор на собственное подпространство, соответствующее $\lambda_k = k, k \in \mathbb{N} \setminus \{1, 3\}$, $\mathcal{P}_k(x, y)$ – ядро оператора P_k .

Справедлива [1]

Теорема 2. Пусть $(x, y) \in K$ - компакт из $\Pi \times \Pi$. Тогда при $k \gg 1$ ядро $\mathcal{P}_k(x, y)$ оператора P_k имеет следующий вид.

$$\mathcal{P}_k(x, y) = \mathcal{P}_k^1(x, y) + \mathcal{P}_k^2(x, y) + \mathcal{P}_k^3(x, y) + \mathcal{P}_k^4(x, y) + r_k(x, y)$$

Где

$$\mathcal{P}_k^1(x, y) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{s=1}^{v_k} \frac{1}{\sqrt{k-s^2}} \left[\cos(as - b\sqrt{k-s^2}) + \cos(as + b\sqrt{k-s^2}) \right]$$

$$\mathcal{P}_k^2(x, y) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{s=1}^{v_k} \frac{(-1)^{\lfloor \frac{k-s^2+1}{2} \rfloor}}{\sqrt{k-s^2}} \left[\cos(as - \bar{b}\sqrt{k-s^2}) + \cos(as + \bar{b}\sqrt{k-s^2}) \right]$$

$$\mathcal{P}_k^3(x, y) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{s=1}^{v_k} \frac{1}{\sqrt{k-s^2}} \left[\cos(\bar{a}s - b\sqrt{k-s^2}) + \cos(\bar{a}s + b\sqrt{k-s^2}) \right]$$

$$\mathcal{P}_k^4(x, y) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{s=1}^{v_k} \frac{(-1)^{\lfloor \frac{k-s^2+1}{2} \rfloor}}{\sqrt{k-s^2}} \left[\cos(\bar{a}s - \bar{b}\sqrt{k-s^2}) + \cos(\bar{a}s + \bar{b}\sqrt{k-s^2}) \right]$$

$$r_k(x, y) = \frac{2}{\pi^2} \sum_{s=1}^{v_k} (-1)^{\lfloor \frac{k-s^2+1}{2} \rfloor} \sin(\bar{b}\sqrt{k-s^2}) \left\{ \cos(as) - \cos(\bar{a}s) \mathcal{O}\left(\frac{1}{k-s^2}\right) \right\}$$

$$a = x_2 - y_2, \bar{a} = x_2 + y_2, b = x_1 - y_1, \bar{b} = x_1 + y_1.$$

Литература

1. Фазуллин З.Ю., Нугаева И.Г. Спектр и формула следов финитного возмущения двумерного гармонического осциллятора в полосе // Дифф. ур, 2019. Т. 55. №5. С. 691-701.

© Яндыбаева И.Г., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРЦИАЛЬНЫХ ВОЛН С БЫСТРО ОСЦИЛЛИРУЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Садриева Р.Т., Сидельникова Н.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В данной работе рассматривается уравнение для парциальных волн:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) - \frac{l(l+1)}{x^2}\psi(x) - V(x)\psi(x) = 0 \quad (1)$$

Для удобства дальнейшего исследования этого уравнения вместо l введем число $\lambda = l + 1/2$, после чего (2) переписывается в виде:

$$\psi''(x) + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - 1/4}{x^2} - V(x) \right] \psi(x) = 0, \quad (2)$$

четное относительно λ .

При маленьких x будем рассматривать укороченное уравнение:

$$\psi''(x) + \frac{\lambda^2 - 1/4}{x^2} \psi(x) = 0. \quad (3)$$

Затем введем два фундаментальных решения полного уравнения (2), ведущие себя при $x \rightarrow 0$ как $\varphi(\lambda, k, x) = x^{\lambda+1/2}[1+O(x)]$ и $\varphi(-\lambda, k, x) = x^{-\lambda+1/2}[1+O(x)]$.

Далее, мы доказали существование решения уравнения (2) с принятыми граничными условиями (3).

Теорема. Функция $\varphi(\lambda, k, x)$ является целой функцией k^2 в каждой ограниченной области комплексной k^2 -плоскости и аналитической функцией λ в области $Re \lambda = \mu \geq 0$.

Литература

1. Султанаев Я. Т., Асимптотика дискретного спектра одномерных дифференциальных операторов, Дифференциальные уравнения, 10, 1974, № 11, 2010 – 2020.
2. Султанаев Я. Т., Исламова Р. Т., Исследование уравнения для парциальных волн с быстро осциллирующим потенциалом, Матем. заметки, 79, 2006, № 2, 288 – 293.
3. В. де Альфаро, Т. Редже, Потенциальное рассеяние, М.: Мир том III, часть 2, 1966, 268 с.

© Садриева Р.Т., Сидельникова Н.А., 2021 г.

МОДЕЛЬ КОЛМОГОВОРА И КОНСЕРВАТИВНЫЕ МОДЕЛИ В МАТЕМАТИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ

Усманова Д.Р., Шабалина А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В математической биологии одной из самых популярных является модель Лотки-Вольтерра (модель «хищник-жертва»), описываемая системой дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} x' = x(a - by) \\ y' = y(-c + dx) \end{cases} \quad (1)$$

в которой x и y – это численность жертв и хищников соответственно, a, b, c, d - положительные параметры.

Модель (1) является консервативной. Приведем соответствующее определение.

Функция $v(x)$ называется первым интегралом динамической системы

$$x' = f(x), \quad x \in R^N \quad (2)$$

если производная функции $v(x)$ в силу этой системы равна нулю:

$$(v'(x), f(x)) \equiv 0$$

Динамическая система (2) называется консервативной, если она имеет нетривиальный первый интеграл.

Система (1) является консервативной, так как она имеет нетривиальный первый интеграл $F(x, y) = x^c y^a e^{-dx-by}$.

Консервативность динамической системы позволяет изучить многие ее свойства существенно более детально.

В нашем докладе изучаются вопросы о консервативности обобщенной модели типа «хищник-жертва», предложенной А.Н.Колмогоровым

$$\begin{cases} x' = a(x)x - L(x)y \\ y' = b(x)y \end{cases}$$

в которой $a(x), L(x)$ и $b(x)$ – некоторые функции.

Литература

1. Юмагулов М.Г. Введение в теорию динамических систем: Учебное пособие-СПб: Издательство “Лань”, 2015, 272с.
2. Братусь А.С., Новожилов А.С., Платонов А.П. Динамические системы и модели биологии. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 400 с.

© Усманова Д.Р., Шабалина А.В., 2021 г.

СЕКЦИЯ «МЕХАНИКА»

УДК 537.876.23

DOI: 10.33184/fmpve-2021-10-06.8

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ОБРАБОТКИ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЫРОЙ НЕФТИ ТАЙЛАКОВСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Ковалева Л.А., Мухарямова Г.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Тайлаковское нефтегазовое месторождение расположено в Ханты-Мансийском автономном округе Тюменской области и является перспективным для России объектом добычи нефти. Тайлаковское месторождение имеет некоторые особенности: главная из них: высокая вязкость нефти, что затрудняет ее транспортировку и требует предварительной подготовки.

Одним из методов подготовки нефти к ее дальнейшей транспортировке путем улучшения реологических свойств является электромагнитная (ЭМ)обработка нефти, которой посвящена работа. На специализированной лабораторной установке собранной на базе ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет» образец нефти Тайлаковского месторождения подвергался воздействию высокочастотного (ВЧ) (частоты 13,56 МГц), сверхвысокочастотного (СВЧ) электромагнитных полей. Результаты проведенного эксперимента представлены на рис 1.

Из рис. 4 видно, что во-первых после электромагнитного воздействия на нефть Тайлаковского месторождения сама форма реологической кривой меняется незначительно для СВЧ диапазона и значительно для ВЧ. В результате ВЧ электромагнитной обработки нефти, происходит уменьшение коэффициента динамической вязкости в интервале температур от 5 до 20 С°. При температуре 10 С° коэффициент динамической вязкости снижается в 3 раза по сравнению с необработанным образцом; после СВЧ обработки - динамическая вязкость становится в 1,5 раза меньше своего первоначального значения. При температурах нефти более 20 С° эффективность ВЧ обработки снижается (все кривые накладываются друг на друга рис 4), так как доминирующее влияние оказывает тепловое воздействие, при котором в веществе происходит хаотичное тепловое движение частиц.

Таким образом, ВЧ ЭМ обработка нефти Тайлаковского месторождения позволяет снизить ее вязкость почти в три раза при

температурах соответствующих температурам эксплуатации магистральных неизоотермических нефтепроводов, равным температуре грунта на глубине залегания нефтепровода. Исследованные в работе ВЧ ЭМ и СВЧ ЭМ методы воздействия на вязкую нефть Тайлаковского месторождения показали свою высокую эффективность и способны стать перспективными методами обработки нефти Тайлаковского месторождения с целью ее последующей перекачки.

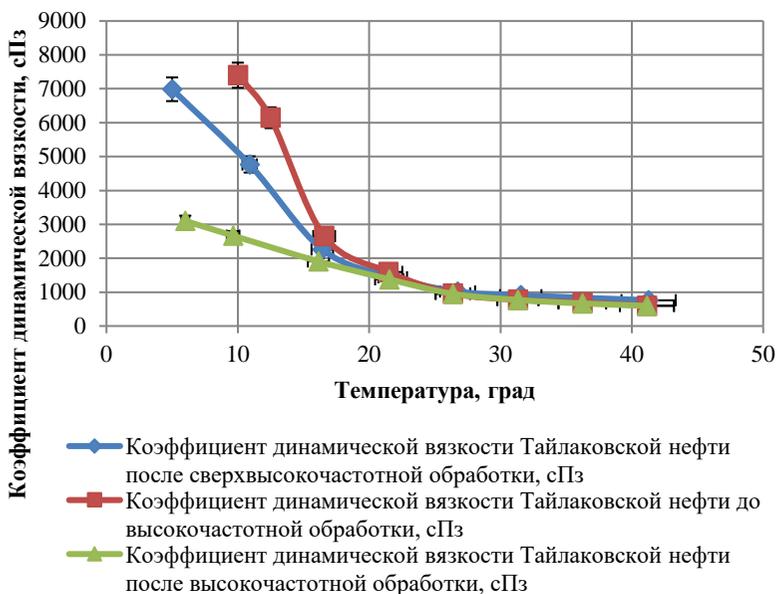


Рис. 1 Зависимость коэффициента динамической вязкости нефти Тайлаковского месторождения от температуры до и после электромагнитной обработки

© Ковалева Л.А., Мухарьмова Г.И., 2021 г.

ЗАДАЧИ ОЧИСТКИ И ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В ТЕХНОЛОГИЯХ ПОДГОТОВКИ И ХРАНЕНИЯ НЕФТИ

Пангаева А.О.², Галиакбарова Э.В.^{1,2}

Институт механики УФИЦ РАН им. Р.Р. Мавлютова, г. Уфа, Россия
Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия

Рассмотрена задача очистки нефти от минерализованных частиц (размера 1-10 мкм) пластовой воды зацеплением крупной капли промывочной воды при встречном движении. Составлена математическая задача движения минерализованных частиц в лобовой зоне крупной капли промывочной воды [1-2], с учетом замедленного движения капли относительно нефти. Введен безразмерный параметр характерного объема нефти, очищаемого одной каплей промывочной воды.

Рассмотрена задача перемешивания нефти разной плотности в вертикальном резервуаре с помощью инжекторного устройства [3-4], предложено характеристическое уравнение и коэффициент полезного действия этого устройства. Получены расчетные графики характеристик турбулентной затопленной струи в резервуаре хранения нефти.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-11-00207, <https://rscf.ru/project/21-11-00207/>.

Литература

1. Шагапов В.Ш., Галиакбарова Э.В., Гималтдинов И.К. К теории вымывания солей из водонефтяной эмульсии пресной водой // Прикладная механика и техническая физика. 2019. Т.60 № 4. С. 91 - 99.
2. Шагапов В.Ш., Галиакбарова Э.В. Влияние размеров и начальной скорости капель промывочной воды при струйной инъекции на эффективность промывки нефти от минерализованных частиц// Труды Академэнерго, 2020. № 1. С. 84- 94.
3. Шагапов В.Ш., Галиакбарова Э.В. Элементы теории вынужденного перемешивания нефтей в резервуарах// Многофазные системы 2019. Том 14 №2. С. 101-107.
4. Шагапов В.Ш., Галиакбарова Э.В. К теории принудительного смешения углеводородных жидкостей в системах хранения// Инженерно-физический журнал, 2021. Т.94, № 2. С. 474-482.

© Пангаева А.О., 2021 г.

ИЗМЕНЕНИЕ РАСХОДА И ДАВЛЕНИЯ ПРИ ПЕРЕМЕННЫХ РЕЖИМАХ РАБОТЫ СКВАЖИНЫ

Шамматова А.А., Башмаков Р.А.

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассматривается вертикальная нефтяная скважина. Параллельно оси скважины расположена трещина, полученная путем гидроразрыва пласта. Считаем трещину симметричной, заполненной пропантом, препятствующим смыканию. Проницаемость трещины предполагается существенно более высокой, чем проницаемость пласта.

В работе получены приближенные формулы, описывающие распределение давления в трещине ГРП при переменных режимах работы скважины. С помощью метода последовательной смены стационарных состояний (ПССС) получены простые формулы, связывающие изменяющийся расход жидкости на скважине с давлением в трещине ГРП и на забое.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 21-11-00207, <https://rscf.ru/project/21-11-00207/>.

Литература

1. Нагаева, З. М. Об упругом режиме фильтрации в трещине, расположенной в нефтяном или газовом пласте / З. М. Нагаева, В. Ш. Шагапов // Прикладная математика и механика. – 2017. – Т. 81, № 3. – С. 319 – 329.

© Шамматова А.А., Башмаков Р.А., 2021 г.

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

УДК 517.925

DOI: 10.33184/fmpve-2021-10-06.11

«КВАНТОВАНИЕ» ОДНОЙ ИЗ ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ КИМУРЫ

Павленко В.А.

ИМ ВЦ УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

В предыдущих работах неоднократно было сказано, что в настоящий момент интересна тема исследования дифференциальных уравнений, которые интегрируются методом изоэнодромной деформации (ИДМ). На сегодняшний день существует конечный список таких уравнений. К их числу относятся решения иерархии гамильтоновых вырождений системы Гарнье, выписанной в известной статье Х. Кимуры [1].

В настоящий момент некоторые из них уже рассмотрены, то есть выписаны решения аналогов временных уравнений Шредингера, определяемых соответствующими гамильтонианами соответствующей определённой гамильтоновой системе.

В предстоящем докладе будет рассмотрена система H^{3+2} . А именно, будут представлены решения аналогов временных уравнений Шредингера, определяемых соответствующими гамильтонианами $H^{3+2}(s_j, q_j, p_j)$ ($j=1,2$) соответствующей гамильтоновой системе H^{3+2} в двух видах: в рациональном и в полиномиальном.

Литература

1. Hironobu Kimura. The degeneration of the two dimensional Garnier system and the polynomial Hamiltonian structure// Annali di Matematica pura et applicata IV. V. 155. No. 1. P. 25 - 74.

© Павленко В.А., 2021 г.

ОБОБЩЕННЫЕ ИНВАРИАНТНЫЕ МНОГООБРАЗИЯ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ

Хакимова А.Р.

Институт математики с ВЦ УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

В докладе обсуждается понятие обобщенного инвариантного многообразия, введенное в наших предыдущих работах (см. [1]-[4]). В литературе метод дифференциальных связей используется для построения частных решений нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Его суть состоит в том, чтобы добавить к заданному нелинейному уравнению в частных производных более простое, как правило, обыкновенное дифференциальное уравнение, совместное с заданным. Тогда любое решение ОДУ также является частным решением уравнения в частных производных. Однако главной проблемой является найти это совместное ОДУ. Наше обобщение состоит в том, что мы ищем обыкновенное дифференциальное уравнение, которое совместно не с самим нелинейным уравнением в частных производных, а с его линеаризацией. Такое обобщенное инвариантное многообразие эффективно ищется. Кроме того, оно позволяет построить такие важные атрибуты теории интегрируемости, как пары Лакса и операторы рекурсии, также частные решения интегрируемых нелинейных уравнений (более подробно см. [5]).

Работа выполнена при поддержке конкурса «Молодая математика России».

Литература

1. Habibullin I.T., Khakimova A.R., Poptsova M.N. On a method for constructing the Lax pairs for nonlinear integrable equations // J. Phys. A: Math. Theor., 2016, v. 49, no. 3, 35 pp.
2. Habibullin I.T., Khakimova A.R. On a method for constructing the Lax pairs for integrable models via a quadratic ansatz // J. Phys. A: Math. Theor., 2017, v. 50, no. 30, 19 pp.
3. Хабибуллин И.Т., Хакимова А.Р. Прямой алгоритм построения операторов рекурсии и пар Лакса для интегрируемых моделей // ТМФ, 2018, v. 196, no. 2, с. 294-312.
4. Habibullin, I.T., Khakimova, A.R. Invariant manifolds and separation of the variables for integrable chains // J. Phys. A: Math. Theor., 2020, v. 53, no. 38, 17 pp.
5. Habibullin, I.T., Khakimova, A.R., Smirnov, A.O. Generalized invariant manifolds for integrable equations and their applications // Ufa Math. J., 2021, vol. 13, no. 2, 141-157.

©Хакимова А.Р., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ БИФУРКАЦИЙ РОЖДЕНИЯ СЕМЕЙСТВ СОЛИТОНОВ В СИСТЕМЕ СВЯЗАННЫХ УРАВНЕНИЙ ГРОССА-ПИТАЕВСКОГО

Гришова-Будылева П.А.

НИУ МИЭТ, г Москва, г Зеленоград, Россия

Основным объектом исследования являются солитонные решения следующей системы уравнений

$$\begin{cases} u_{1,xx} + (\mu_1 - U(x))u_1 - (|u_1|^2 + \beta|u_2|^2)u_1 = 0 \\ u_{2,xx} + (\mu_2 - U(x))u_2 - (|u_2|^2 + \beta|u_1|^2)u_2 = 0 \end{cases}$$

Проведено изучение бифуркаций рождения сложных семейств ее решений от более простых, моделирование эволюции таких начальных данных с целью выяснения устойчивости найденных солитонов во времени.

Рассмотрены случаи для фиксированного параметра $\mu_1 = 4, 6, 8$ и РТ-симметричного гармонического потенциала. Были найдены значения параметров μ_2 и β для указанных μ_1 .

В случае действительного потенциала $U(x) = x^2$ очевидна зависимость количества семейств решений от значения μ_2 . Для $3 < \mu_2 < 5$ два семейства решений, для $5 \leq \mu_2 < 7$ три семейства решений, для $7 \leq \mu_2 < 9$ есть четыре семейства решений. Все найденные семейства решений устойчивы.

В случае комплексного потенциала $U(x) = (x - ia)^2$ аналогична зависимость количества семейств решений от значения μ_2 . Для четного количества решений парные ветки решений при $a \rightarrow \infty$ сливаются. Для непарных веток решение вырождается, стремясь к нулю. Переход к комплексному потенциалу изменяет устойчивость решений системы: если простейшие солитоны остаются устойчивыми, то более сложные солитоны устойчивость теряют.

© Гришова-Будылева П.А., 2021 г.

**СЕКЦИЯ «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТАТИСТИКА»**

УДК 537.6

DOI: 10.33184/fmpve-2021-10-06.14

**ANALYSIS OF THE MAGNETIZATION PROCESS WITH NEURAL
NETWORKS APPROACH**

Kozacheck V.V., Klevets Ph.N., Yarygina E.A.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University, Simferopol, Russia

Numerical simulation of quantum systems is one of the important research methods. Unfortunately, the use of numerical methods in quantum mechanics is quite costly, especially in the context of studying open quantum systems with a large number of degrees of freedom. The complexity of these studies is associated with the fact that the rank of the density matrix grows exponentially with an increase in the size of the system. Of course, the numerical simulation of quantum systems is not as expensive as, for example, the construction of an accelerator, but still significant computing power is required for high-quality simulation of quantum systems.

Different approaches are used to minimize costs, but, recently, neural networks have become one of the most promising. The concept of neural networks was introduced a long time ago, but recently the dawn of this technology has been observed, associated both with the increase in the productivity of computing systems and with the development of fundamentally new computing devices – quantum computers.

In this work, we use the simplest property of a neural network – the ability to train it and respond to external influences in an appropriate way.

The factors described above were a prerequisite for the emergence of the idea of using neural networks in modeling open quantum systems. In the present work, we develop a variational method for simulating the nonequilibrium stationary state of Markov open quantum systems. This method is based on the variational Monte Carlo methods and the representation of the density matrix in the form of a neural network. With the help of neural networks based on variational regeneration (bringing the system to an equilibrium state), it is possible to represent a quantum system in the form of a matrix of weights, which later makes it possible to determine the state of the system based on the input data.

Developed instrument was applied to the well-known Ising system. We compared the results obtained using “classical” numerical solutions with the results obtained using developed neural network. An example of the equilibrium distribution of the spins is shown in Fig. 1 below.

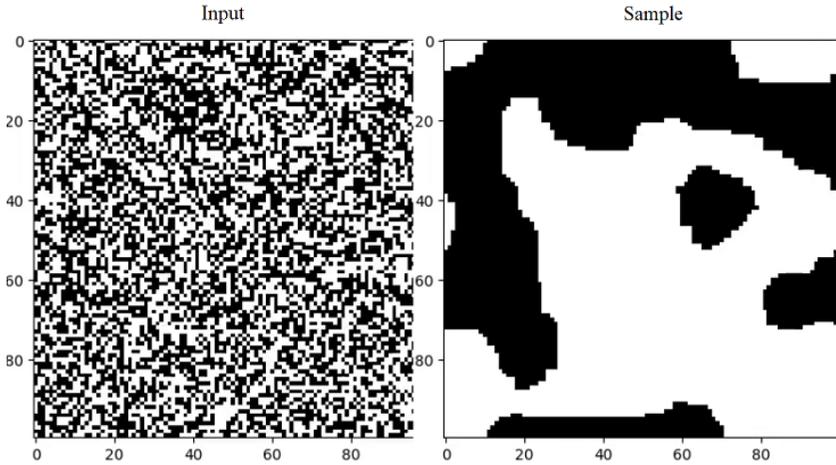


Fig. 1. Initial distribution of the spins for 100x100 Ising model (left) and equilibrium distribution of the spins (right), obtained using our neural network

The results of neural network coincide with the “classical” numerical analysis, but the speed of calculation exceeds the “classical” approach by several orders.

Acknowledgements

The research was funded by RFBR and Republic of Crimea, project number 20-42-910003, and by RFBR, project number 20-32-90027.

© Kozacheck V.V., Klevets Ph.N., Yarygina E.A., 2021

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ В СТНО БОЛЬШОГО ДИАМЕТРА ПРИ КОМБИНИРОВАННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ И СПИН ПОЛЯРИЗОВАННОГО ТОКА

Антонов Г.И., И. Левашова, Степанов С.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Большое внимание, в настоящее время, привлекают исследования переключения и возбуждения осцилляций намагниченности в магнитных наноструктурах с помощью спин-поляризованного тока и внешнего магнитного поля, которые могут позволить увеличить скорости устройств магнитной памяти, вплоть до терагерцового уровня. Интересны, в этом плане, микроволновые спин-трансферные наноосцилляторы (СТНО), которые отличаются относительно большим спектром частот осцилляций магнитных вихрей, реализуемых даже без приложения внешнего магнитного поля. Большинство таких структур имеют два магнитных слоя, разделенных немагнитной прослойкой. Одной из наиболее перспективных разновидностей СТНО, является вихревой, в котором магнитный вихрь реализуется как основное состояние в магнитных слоях. Появилось много работ, посвященных исследованию динамики магнитостатически связанных магнитных вихрей (см. например, [1,2]). Показано, что для системы из двух взаимодействующих магнитных дисков, находящихся в вихревом состоянии, спектр колебаний магнитных вихрей может кардинально измениться. Также экспериментально найдена зависимость величины магнитного поля переключения полярности каждого из вихрей от величины поляризованного тока. В работе с помощью численного решения обобщенного уравнения Ландау-Лифшица, проведено исследование динамики и структуры двух дипольно связанных магнитных вихрей в СТНО большого диаметра 400 нм, с разными по толщине магнитными слоями под действием внешнего магнитного поля и спин-поляризованного электрического тока. Найдены различные режимы связанного движения вихрей. Построены траектории движения вихрей для случаев разных динамических режимов. Для случая стационарной динамики связанных вихрей обнаружена линейная зависимость частоты колебаний от величины тока. Показано, что переключение под действием тока полярности вихря для случая большого диаметра нанопластина возможно только в толстом слое с помощью динамического механизма переключения, сопровождающегося генерацией пары вихрь-антивихрь. Увеличение диаметра диска по сравнению со случаем нанодиска 200 нм [1]

приводит к заметному увеличению интервала величин спин-поляризованного тока в которых существует стационарный режим связанных колебаний вихрей и увеличению критической величины тока для наступления режима переключения полярности одного из вихрей. Показана возможность управления частотой стационарного движения вихрей и подстройки амплитуды управляющих токов с помощью внешнего магнитного поля. Построена зависимость величины магнитного поля, раздельно переключающего полярность вихрей от величины спин-поляризованного тока. Рассмотрены особенности динамического и квазистатического сценариев переключения полярности вихря при различных значениях поля/тока.

Литература

1. *Ekomasov A., Stepanov S., Zvezdin K., Ekomasov E.* Spin current induced dynamics and polarity switching of coupled magnetic vortices in three-layer nanopillars // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2019. Vol. 471. P. 513–520.
2. Екомасов Е.Г., Степанов С.В., Звездин К.А., Пугач Н.Г., Антонов Г.И. Влияние спин-поляризованного тока на динамику и изменение структуры магнитных вихрей в трехслойном проводящем наноцилиндре большого диаметра / *Физика металлов и металловедение* – № 3, т. 122. – 2021. – С. 212-220.

© Антонов Г.И., И. Левашова, Степанов С.В., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ И ПОСТРОЕНИЕ СТОХАСТИЧЕСКИХ ФРАКТАЛОВ

Супрун Г.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Фрактальные множества - сравнительно недавно открытые объекты. Черты фрактальных множеств несут в себе многие природные объекты: растения, облака, горные вершины, дельты рек, галактики и так далее. Да и сама Вселенная в некотором смысле фрактальна. Фрактальные множества возникают в математических моделях естественных процессов.

Фракталы делятся на алгебраические, геометрические и стохастические. Наиболее точно естественные процессы описывают стохастические фрактальные множества, так как они образуются путем многократных повторений случайных изменений каких-либо параметров.

В результате итерационного процесса получают объекты очень похожие на природные фракталы, несимметричные деревья, изрезанные лагунами береговые линии островов и многое другое. Двумерные стохастические фракталы используются преимущественно при моделировании рельефа местности и поверхности моря.

Стохастические фракталов помогает объяснять и моделировать сложные природные процессы, например, броуновское движение. Начала исследования броуновского движения датируется 1827 годом, когда шотландский ботаник Роберт Браун обнаружил, что маленькие частицы, взвешенные в жидкости, совершают непрерывное беспорядочное движение в 1905 году. Альберт Эйнштейн объяснил это движение хаотическими столкновениями с молекулами окружающей среды. Норберт Винер в 1923 году построил первую удовлетворительную с математической точки зрения модель выборочных реализаций и доказал их «почти наверное» (на языке теории вероятностей) непрерывность. Простейшей дискретной аппроксимацией броуновского движения служит одномерное случайное блуждание. В этом случае частица первоначально располагается в нулевой точке на прямой. Частица совершает единичный шаг вправо или влево зависимости от случайного выбора.

Представляет интерес проведение исследования и построения стохастических фракталов комбинацией методов нелинейной динамики и методов теории вероятности. Обсуждению соответствующих вопросов и посвящен мой доклад.

© Супрун Г.И., 2021 г.

ФРУСТРИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Муртазаев А.К., Бадиев М.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А.

Институт физики ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия

Одним из наиболее интенсивно исследуемых фрустрированных спиновых систем за последние десятилетия являются антиферромагнетики на слоистой треугольной решетке. К настоящему моменту времени такие системы достаточно хорошо изучены, как для квантовых, так и для классических систем. Однако остаются невыясненными некоторые вопросы, связанные с влиянием внешнего магнитного поля на фазовые переходы, термодинамические, критические и магнитные свойства слоистых антиферромагнетиков с треугольной геометрией [1-3].

Поэтому в данной работе нами изучается влияние магнитного поля на фазовые переходы, магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Гамильтониан антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - h \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

Величина значений внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq h \leq 12$. Все параметры приводятся в безразмерных величинах.

Исследование фазовых переходов, магнитных и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле выполнено с использованием репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153-а.

Литература

1. Sh. Ma. Modern Theory of Critical Phenomena. – Springer –Verlag, London 1976.
2. Kazuaki M. and Yukiyasu O. // Phys. Rev. B. – 2020, V – 101, P. – 184427.
3. Antonenko S.A., Sokolov A.I. and Varnashev V.B. // Phys. Lett. A. – 1995, V. – 208, P. – 161.

© Муртазаев А.К., Бадиев М.К.,
Рамазанов М.К., Магомедов М.А., 2021 г.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ТРЕКИНГА НА ОСНОВЕ ДАТЧИКОВ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ПАЦИЕНТОВ С БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА

Харитонов В.Н.¹, Намсараев Ж.Ж.¹, Огнев А.В.¹,
Самардак А.С.¹, Бризицкий Р.В.²

¹Кафедра компьютерных систем ШЕН ДВФУ, г. Владивосток, Россия

²Кафедра информатики, математического и компьютерного
моделирования ШЕН ДВФУ, г. Владивосток, Россия

Одну из ключевых ролей при диагностике болезней или травм, связанных с нарушением мышечной активности и нейродегенеративными процессами, как например при болезни Паркинсона (паркинсонизме), играет выявление признаков гипокинезии – снижения двигательной активности [1].

Поскольку для установки более точного курса лечения и реабилитации пациента необходимо производить объективную оценку его состояния, в данной работе показана попытка создать систему трекинга, позволяющую произвести с достаточно высокой скоростью и точностью объективную оценку мелкой моторики рук и тремора пациентов при диагностике болезни Паркинсона по показаниям таких сенсоров как акселерометр, гироскоп и магнитометр.

Для работы с данными MEMS-сенсоров был реализован метод считывания показаний на базе микроконтроллера ESP32, включающий в себя применение к выходным данным датчиков полосового фильтра, позволяющего установить частоты среза для установления ограничений как сверху, так и снизу. Кроме того, данный тип микроконтроллеров позволяет осуществлять отправку данных посредством беспроводных сетей типа Wi-Fi или Bluetooth.

Используемый датчик ICM-20948 представляет собой содержит нескольких сенсоров. Каждый из этих сенсоров имеет погрешность измерения ускорения, угла наклона и магнитного поля. Перед тем как производить расчеты величин, необходимых для решения задачи трекинга, была проведена калибровка сенсоров по следующим алгоритмам [2].

Вычисление координат по методу магнитного трекинга проводится с использованием формул для расчета в точке пространства вектора индукции магнитного диполя, создаваемого диполем [3].

В результате работы разработанной системы трекинга производилось отслеживание перемещения MEMS - сенсора в одно-, двух- и трехмерном случаях как показано на рисунке 1(а), 1(б) и 1(в) соответственно.

Для оценки относительной ориентации сенсора в поле одного диполя был применен фильтр Маджевика [4], уточняющий углы гироскопа по совокупности таких показателей как данные акселерометра, гироскопа и магнитометра.

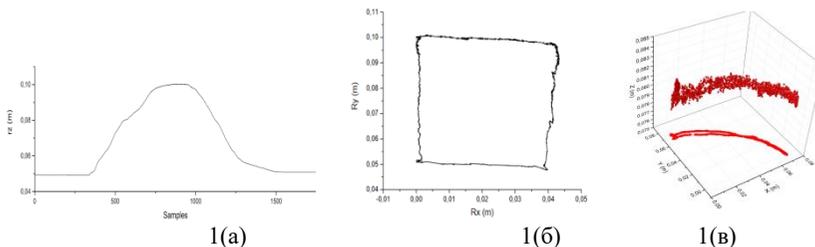


Рис. 1. Результат отслеживания положения сенсора в одномерном (рис. 1(а)), двумерном (рис. 1(б)) и трехмерном (рис. 1(в)) случаях

Для управления виртуальной моделью предлагается использование метода FABRIK [5]. Разработанный прототип был апробирован на тестах, применяемых для диагностики состояния пациентов с болезнью Паркинсона. Показано, что используемые аппаратные решения и методы определения положения сенсоров, в совокупности с метод обратной кинематики работает быстро и позволяет регистрировать мелкую моторику пациентов с восстановлением положения сегментов кисти пациентов. Дальнейшие работы направлены на разработку алгоритмов анализа получаемого массива данных с целью предоставления объективной оценки эффективности терапии болезни Паркинсона.

Литература

1. Fox S. H., Katzenschlager R., Lim S. Y. et al. The Movement Disorder Society Evidence-Based Medicine Review Update: Treatments for the Motor Symptoms of Parkinson's Disease // *Mov. Disord.* 2011; 26 (Suppl 3): p 2–41.
2. Bin Fang, Wusheng Chou and Li Ding, *International Journal of Advanced Robotic Systems*, 2014: An Optimal Calibration Method for a MEMS Inertial Measurement Unit.
3. Hui-Min Shen, *ICIRA 2017: Intelligent Robotics and Applications*, China, 2017 p. 428-437.
4. S.O.H. Madgwick, *An efficient orientation filter for inertial and inertial/magnetic sensor arrays*, 2010. p. 1-32.
5. Andreas Aristidou, Joan Lasenby, Elsevier Inc 2011: FABRIK: A fast, iterative solver for the Inverse Kinematics problem.

© Харитонов В.Н., Намсараев Ж.Ж., Огнев А.В., Самардак А.С., Бризницкий Р.В., 2021 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРОЦИКЛИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПЛАСТ С УЧЁТОМ КОНВЕКТИВНЫХ ПОТОКОВ

Гильманов А.Я., Шевелёв А.П.

Тюменский государственный университет, г. Тюмень, Россия

Разработка трудноизвлекаемых запасов является актуальной задачей для нефтегазовой промышленности. Одним из наиболее эффективных тепловых методов увеличения нефтеотдачи для этого является пароциклическое воздействие на нефтяные пласты, поскольку в этом методе наиболее эффективно используется тепло, нагнетаемое в пласт. Для наибольшей рентабельности процесса необходимо предварительное моделирование пароциклической обработки. Существующие модели, основанные на подходе Маркса-Лангенхейма [1], не учитывают влияния конвективных потоков на движение теплового фронта. Использование гидродинамических симуляторов не позволяет однозначно определить необходимое время закачки пара и паротепловой конденсации. Поэтому целью исследования является разработка интегральной математической модели пароциклического воздействия на пласт с учётом влияния конвективных потоков на динамику теплового фронта. Вследствие наличия конвективных потоков распространение теплового фронта при пароциклическом воздействии рассматривается в два этапа: на первом этапе геометрия прогретой области соответствует треугольнику с раскрывающимся вершинным углом, на втором этапе фронт движется от нагнетательной скважины с постоянным углом к горизонту. Поскольку в реальности эти этапы происходят совместно, то в модели используется суммарный вектор скорости. Уравнение теплопроводности, используемое в модели, интегрируется в направлении, перпендикулярном направлению распространения теплового фронта, и усредняется по схеме Ловьерье [2]. Тепловой баланс позволяет рассчитать время закачки теплоносителя в пласт. Конденсация пара осуществляется за счёт тепловых потерь в кровлю и подошву пласта, из теплового баланса рассчитывается время паротепловой конденсации. С учётом формулы Дюпюи для зонально-неоднородного пласта рассчитывается дебит нефти. Установлено, что дебит нефти является убывающей функцией времени.

Литература

1. Marx, J. W., Langenheim, R. H. Reservoir heating by hot fluid injection // Т. АИМЕ, 1959, v. 216, no 1, pp. 312–315.
2. Lauwerier, H. A. The transport of heat in an oil layer caused by the injection of hot fluid. Appl. Sci. Res., 1955, v. 5, no 2, pp. 145–150.

© Гильманов А.Я., Шевелёв А.П., 2021 г.

ОБ УПРОЩЁННОЙ ВЕРСИИ ПРОБЛЕМЫ АДАМАРА

Шарипов Р.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нерешённая математическая проблема Адамара состоит в нахождении максимального значения детерминанта матрицы $n \times n$ с элементами 1 и -1. Её можно переформулировать к матрицам с элементами 0 и 1. В [1] была предложена **упрощённая версия** этой проблемы. Она звучит так: вычислить последовательность квадратных матриц A_n размера $n \times n$ с элементами 0 и 1, каждая следующая из которых 1) содержит предыдущую в качестве левого верхнего диагонального блока на единицу меньшего размера и 2) имеет максимальный детерминант среди матриц, удовлетворяющих первому из этих двух условий. Последовательность A_n начинается с единичной матрицы $A_1 = \parallel 1 \parallel$ размера 1×1 .

В работе [1] упрощённая версия проблемы Адамара исследовалась численно до матриц размером 15×15 и был построен начальный фрагмент одной из последовательностей A_n , решающей эту проблему. Для этого использован пакет Maxima версии 5.42.2 в Linux Ubuntu 16.04 LTS.

При найденной матрице A_n выбор следующей матрицы A_{n+1} может быть неоднозначен. Эта неоднозначность проявляется уже при $n = 1$. Для матрицы A_2 имеется три возможных выбора:

$$A_2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}, \quad A_2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad A_2 = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Это наблюдение означает, что полным решением упрощённой проблемы Адамара будет не одна последовательность, а дерево последовательностей, каждые две последовательности в котором имеют некоторый общий начальный фрагмент. Подобно исходной проблеме Адамара, на сегодняшний день её упрощённая версия также является нерешённой математической задачей.

Я выражаю благодарность Назиму Мехтиеву из города Баку, который привлёк моё внимание к проблеме Адамара.

Литература

1. Sharipov R.A., On a simplified version of Hadamard's maximal determinant problem, e-print arXiv:2104.01749 (2021).

© Шарипов Р. А., 2021 г.

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРУСТРИРОВАННОЙ ЧЕТЫРЕХВЕРШИННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА

Курбанова Д.Р., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А.

Институт физики ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия

Фрустрации, как результат конкурирующих взаимодействий, является источником вырождения и беспорядка, приводящий к появлению новых и интересных физических явлений.

В настоящей работе на основе алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло мы исследуем влияние конкуренции обменного взаимодействия на фазовые переходы, термодинамические свойства и магнитные структуры основного состояния двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на треугольной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.

Гамильтониан модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos \theta_{i,k}, \quad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$.

Согласно результатам нашего исследования, учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в интервале $-0.9 \leq J_2 \leq -1.2$ приводит к фрустрации и нарушению магнитного упорядочения. Установлено, что переход из ферромагнитной и страйпово-триплетной фаз в парамагнитную является фазовым переходом первого рода. Кроме того, определены магнитные структуры основного состояния, соответствующие различным областям фазовой диаграммы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №19-02-00153.

Литература

2. D.P. Landau and K. Binder, Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
3. Курбанова Д.Р., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А., Тааев Т.А. // ЖЭТФ, 2020, Т. 158(6), С. 1095-1100.

© Курбанова Д.Р., Муртазаев А.К., 2021 г.

ПРИМЕНЕНИЕ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ PYTHON И СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ БИБЛИОТЕК В БИОЛОГИИ

Полупанова А.Д.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Последнее время язык программирования Python используется во многих отраслях, в которых, казалось бы, программирование смотрится чужеродным – в лингвистике, политологии, медицине, биологии. Это объясняется необходимостью работать с большими объемами данных, анализировать, проверять гипотезы, моделировать.

Несомненным достоинством Python является легкость понимания кода и написания программ (в шутку язык называют «программистской версией английского»). Ещё одно преимущество Python – большое количество библиотек программных модулей, своеобразных «кубиков», на основе которых можно сконструировать программу для решения поставленной задачи. Известны как библиотеки «широкого профиля», например для обработки случайных величин, массивов или текста, так и узкоспециализированные, например, для машинного обучения или web-разработки [1]. Приведем примеры профильных библиотек с готовым набором функций специально для биологов.

Biopython [2] — это набор свободно доступных инструментов для биологических вычислений. В эту библиотеку включены модули для работы с последовательностями ДНК, РНК, синтаксические анализаторы для чтения всех основных генетических баз данных и многое другое.

DeepChem [3] – ещё одна популярная библиотека, для реализации методов машинного обучения в науках о жизни. Она предоставляет широкий выбор моделей, алгоритмов и наборов данных для разработки приложений в биологии, медицине, химии. Таким образом для биолога Python – прекрасный инструмент и помощник для решения задач, характеризующихся большими объемами данных.

Литература

1. Полупанов Д.В., Абдюшева С.Р., Ефимов А.М. Программирование в Python 3: учебное пособие – Уфа: РИЦ БашГУ, 2020. – 164 с.
2. Cock PA, Antao T, Chang JT, Chapman BA, Cox CJ, Dalke A, Friedberg I, Hamelryck T, Kauff F, Wilczynski B and de Hoon MJL (2009) Biopython: freely available Python tools for computational molecular biology and bioinformatics. *Bioinformatics*, 25, 1422-1423.
3. Рамсундар Б., Истман П., Уолтерс П., Панде В. Глубокое обучение в биологии и медицине. – М.: ДМК Пресс, 2020. – 200 с.

© Полупанова А.Д., 2021 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ИЗ ГРАФА ВОЛЬПЕРТА

Исмагилов Р.Ф., Хамидуллина З.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При исследовании механизмов сложных каталитических реакций возникают физико-химические и математические проблемы. Физико-химические проблемы сводятся к невозможности измерения промежуточных веществ – недоинформативность доступных массивов кинетических измерений, что приводит к неоднозначности кинетических параметров построенной математической модели. Таким образом, возникает задача создания теоретических моделей на основе исследования детальных кинетических механизмов – идентификации математической модели. Математические проблемы исходят от большой размерности реальных механизмов химических реакций. Учитывая, что используемые на практике модели химических процессов являются нелинейными, задача идентификации модели усложняется аналитическими вычислениями с нелинейными выражениями. Определение базиса нелинейных параметрических функций кинетических констант в аналитическом виде для систем большой размерности крайне затрудняется.

Взаимно однозначное соответствие механизма химической реакции и графа Вольперта позволяет сформулировать следующие правила. Выделить подграфы в графе Вольперта путем исключения: а) вершин, соответствующих промежуточным веществам; б) вершин, отвечающих за наблюдаемые вещества, которые не являются исходными веществами, в) вершин-реакций, для которых нет ребер исходящих от вершин-наблюдаемых веществ; г) ребра, инцидентные удаленным вершинам; д) ребра, направленные от вершин-реакций к вершинам-веществам. Выписать из полученного несвязного графа матрицу связей. Строкам данной матрицы соответствуют определяемые кинетические параметры. Число столбцов матрицы связей равно числу вершин-наблюдаемых веществ. Вершины-реакции и вершины-вещества (наблюдаемые), смежные в полученном подграфе, определяют местоположение ненулевых элементов матрицы. Значение элемента определяется соответствующим кинетическим параметром. Функциональные зависимости кинетических параметров определяются как совокупность частных решений системы дифференциальных уравнений в частных производных, построенной на основании полученной матрицы связей, согласно общей теории анализа информативности.

© Исмагилов Р.Ф., Хамидуллина З.А., 2021 г.

БУСТИНГОВЫЕ АНСАМБЛИ И МЕТА-АНСАМБЛИ В ЗАДАЧЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ БАНКРОТСТВА

Галлямов В.В., Полупанов Д.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Прогнозирование банкротства – актуальная задача в сфере анализа данных, успешное решение которой позволяет избежать существенных финансовых затрат вследствие возможной неплатёжеспособности предприятий. В настоящий момент распространение получают ансамблевые методы машинного обучения, улучшающие эффективность за счёт объединения прогнозов разных моделей, которые совершают разные ошибки. Суть работы состоит в исследовании эффективности бустинговых методик, а также способов их объединения в мета-ансамбли в контексте решения задачи прогнозирования банкротства.

В силу ориентированности бустинга на «слабых учеников», в качестве базовой модели представлены решающие деревья. Рассматриваются такие алгоритмы бустинга как: RandomForest, BaggingClassifier, AdaBoost, CatBoost, GradientBoosting, XGBoost, LGBost. Для каждого алгоритма выполняется оптимизация гиперпараметров и сохраняются пять наилучших архитектур. На этом этапе получены промежуточные результаты, позволяющие судить об эффективности алгоритма в контексте решаемой задачи. Наилучшим образом проявили себя CatBoost и BaggingClassifier.

Следующим этапом исследования является объединение прогнозов нескольких архитектур каждого алгоритмов бустинга, рассмотрены три способа: мажоритарное голосование, взвешенное голосование на основе алгоритма оптимизации, а также линейная обучаемая модель. Лучшие мета-ансамбли: GradientBoosting-weighted, BaggingClassifier-hard, RandomForest-weighted. Дальнейшие позиции занимают weighted и hard объединители, что позволяет судить о низкой эффективности линейных моделей. Подбор весовых коэффициентов для объединения прогнозов ансамблей различных архитектур в мета-ансамбли позволил значительно повысить качество прогнозов по сравнению с базовыми ансамблями.

Литература

1. Полупанов Д.В., Абдюшева С.А., Галлямов В.В. Применение нейросетевых ансамблей в оценке банкротства корпораций // Вестник технологического университета. – 2021 – № 1. – С. 98-103
2. Schapire, Robert E.. The Strength of Weak Learnability // Machine Learning. — Boston, MA: Kluwer Academic Publishers, 1990. — V. 5, № 2.

© Галлямов В.В., Полупанов Д.В., 2021 г.

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ МЕТОДЫ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЁМА ПОРАЖЕНИЯ ЛЁГКИХ ПРИ КОРОНАВИРУСНОЙ ИНФЕКЦИИ

Гарипова А.Г., Полупанов Д.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящий момент обычным этапом диагностики COVID-19 является компьютерная томография (КТ). Радиолога просят оценить степень повреждения объема легких: это трудоемкая процедура, так как рентгенолог должен просмотреть все аксиальные срезы на КТ и сегментировать каждый из них. Качественная модель компьютерного зрения поможет врачам поставить быстрый и надежный диагноз, а пациенты получат правильное лечение до того, как проявятся самые серьезные последствия вируса. Задача сводится к сегментации многослойных изображений: требуется выделить на них лёгкие и поражённые участки, а затем подсчитать процент поражения. В результате обзора методов сегментации было принято решение использовать нейросетевой свёрточный метод. Для улучшения качества изображений производилась предобработка, основным этапом которой было усиление контакта при помощи алгоритма CLAHE. Помимо этого, производилась нормализация, обрезание неинформативных слоёв, масштабирование (интерполяция кубическим сплайном).

Нейросетевая модель была разработана на основе архитектуры U-Net: изображение попеременно проходит через свёрточные и макс-субдискредитирующие слои. После достижения размерности 448×32^2 , полученные карты признаков комбинируются с помощью последовательности слоев развертки и объединения с признаками высокого разрешения, полученных из соответствующих слоев стягивающей части. Для обучения были использованы 4 набора КТ-датасетов из открытых источников. Качество модели было оценено на тестовой выборке с коэффициентом Дайса в качестве основной метрики. Модель показала высокую точность: 98.53% в задаче сегментации лёгких и 81.41% в задаче сегментации поражений. На основе модели компьютерного зрения было разработано ПО с графическим интерфейсом и функцией вычисления объёма поражения лёгких.

Литература

1. Ефремцев В. Г. и др. Классификация рентгеновских изображений грудной клетки больных вирусной пневмонией и COVID-19 с помощью нейронных сетей //Компьютерная оптика. – 2021. – Т. 45. – №. 1.

© Гарипова А.Г., Полупанов Д.В., 2021 г.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ
МАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В СПЛАВЕ FeRh**

Комлев А.С., Макарьин Р.А., Перов Н.С.
Московский государственный университет
им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

В настоящее время определение механизмов магнитного фазового перехода первого рода является одной из актуальных задач физики магнитных явлений. Наиболее подходящим объектом изучения данного перехода является сплав FeRh. Данный сплав обладает объемно кубической кристаллической решеткой, симметрия которой не изменяется при переходе из антиферромагнитного (с меньшим параметром решетки) в ферромагнитное (с большим параметром решетки) состояние. Этот факт позволяет упростить приближения выстраиваемой модели фазового перехода, путем пренебрежения параметрами анизотропии. Ожидается, что результаты создаваемой модели динамики фазового перехода позволят приблизиться к пониманию механизмов, ответственных за магнитный фазовый переход первого рода [1].

В рамках предложенной модели рассматривается цепочка упруго связанных атомов, описываемая уравнением вида (1):

$$\frac{d^2 x_l}{dt^2} + \left(-\frac{k_{l-1}}{m_l} x_{l-1} + \frac{k_{l-1} + k_l}{m_l} x_l - \frac{k_l}{m_l} x_{l+1} \right) = 0 \quad (1)$$

Величину упругого взаимодействия между атомами определяет параметр упругости k . В качестве начального условия выбрано смещение атомов от положения равновесия, подчиняющееся логарифмическому распределению [2]. Условием возникновения фазового перехода считается увеличение расстояния между соседними атомами до критического значения. Необратимость фазового перехода обеспечивается путем переопределения положения равновесия x_l в уравнении (1) для атомов с увеличенным параметром решетки.

Анализ динамического поведения фазообразования и ее роста позволяют определить роль коллективных эффектов на процесс фазового перехода в целом.

Литература

1. Komlev A.S. et al. Ferromagnetic phase nucleation and its growth evolution in FeRh thin films // Journal of Alloys and Compounds. 2021. Vol. 874. P. 159924.
2. Batlle X., Labarta A. Finite-size effects in fine particles: magnetic and transport properties // J. Phys. D: Appl. Phys. IOP Publishing, 2002. Vol. 35, № 6. P. R15–R42.

© Комлев А.С., Макарьин Р.А., Перов Н.С., 2021 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ PYTHON ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Аскерова Л.Н.

Уральский государственный экономический университет,
г. Екатеринбург, Россия

Моделирование – это фундаментальный процесс во многих аспектах научных исследований, инженерии и бизнеса. Моделирование включает в себя формулировку упрощенного представления системы или объекта реального мира. Инструменты моделирования можно использовать по-разному: объяснять явления, возникающие в системе, делать прогнозы о будущих состояниях системы, оценивать ключевые факторы, влияющие на явления в системе, выявлять экстремумы в системе, которые могут представлять наихудшие сценарии или планы с минимальными затратами.

Современные системы компьютерной алгебры, такие как matlab, mathcad, maple, wolfram mathematica, обладают очень широкими возможностями, но имеют ряд недостатков. Среди них наиболее существенными являются следующие: довольно высокая стоимость и невозможность создания полноценных программ с графическим пользовательским интерфейсом, способных работать самостоятельно без предустановленной системы компьютерной алгебры.

При этом существует современный интерпретируемый язык сценариев высокого уровня Python, который, с одной стороны, позволяет разрабатывать независимые программы, а с другой - близок по синтаксису к языку Matlab, что делает его удобным для решения задач компьютерного моделирования.

Язык Python является проектом с открытым исходным кодом и распространяется под довольно либеральной лицензией, которая позволяет использовать его, среди прочего, в коммерческих программных продуктах без лицензионных отчислений [1]. Основные преимущества использования этого языка заключаются в следующем:

- читаемость кода, простота обслуживания и повторного использования.
- использование отступов в качестве выборки субциклов, что делает правила проектирования одинаковыми для всех. При разработке большой программы, в которой участвует более одного человека, это играет значительную роль.

- скорость разработки кода на Python намного выше, чем на таких языках, как C++, Java. Для сравнения, код на Python может занимать до трети размера C++ или Java [2].
- переносимость. Поскольку программы выполняются собственным интерпретатором, их код работает без изменений на всех основных платформах и операционных системах.
- интеграция. Язык может взаимодействовать с другими языками. Например, Python может вызывать функции из C/C++.

Этот язык имеет большое сообщество и широкий набор дополнительных библиотек для решения самых разных задач. В частности, для математического моделирования можно использовать библиотеки `numpy` (реализует удобную работу с матрицами), `scipy` (реализует математические алгоритмы решения обычных и дифференциальных уравнений и т.д.), `matplotlib` (реализует средства графической визуализации результатов) и другие [3].

Таким образом, Python имеет большой потенциал для написания программ, посвященных математическому моделированию. Его возможности позволяют создавать кроссплатформенную, легко изменяемую программу за относительно короткое время. Репутация медленного языка покрывается большим количеством специально написанных для инженерных и математических расчетов оптимизированных библиотек, сравнимых по скорости с C++ и Java. Кроме того, если производительности недостаточно, всегда можно заменить медленный фрагмент кода на быстрый язык, такой как C, это возможно благодаря отличным возможностям интеграции Python с другими языками.

Литература

1. Jay Gopalakrishnan. Lectures on Mathematical Computing with Python // Portland State University Library. July 29, 2020. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://pdxscholar.library.pdx.edu/pdxopen/29/>
2. Кирдяев М.М. Обзор языка программирования Python для решения задач математического моделирования // НиКа. 2016. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/obzor-yazyka-programmirovaniya-python-dlya-resheniya-zadach-matematicheskogo-modelirovaniya>
3. Оборотов А.В. Использование языка программирования Python для решения задач математического моделирования // Системы управления, сложные системы: моделирование, устойчивость, стабилизация, интеллектуальные технологии. Елец, 16-17 сентября 2020 г. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?selid=44147281&id=44145530&>

© Аскерова Л.Н., 2021 г.

ПОСТРОЕНИЕ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МЕТАМАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА В СОЕДИНЕНИЯХ $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$

Макарьин Р.А., Шипкова Е.Д., Карпенков Д.Ю.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
г. Москва, Россия

Технология магнитного охлаждения активно применяется для достижения сверхнизких температур, но также может быть использована для создания холодильных установок, работающих вблизи комнатных температур. Данный проект направлен на разработку научных основ повышения охлаждающей мощности магнитных рефрижераторов за счет разработки новых циклов охлаждения, использующих рабочие тела с настраиваемой в процессе работы температурой Кюри, а также за счет уменьшения отрицательного эффекта, вызванного тепловым и полевым гистерезисом рабочих тел. Для уменьшения гистерезисных потерь в магнитных материалах, испытывающих фазовый переход первого рода в процессе намагничивания и размагничивания, мы предлагаем прикладывать давление для смещения точки Кюри вниз и замыкания петель гистерезиса. Дополнительно, в работе [1] было показано, что приложение внешнего давления может не только сдвинуть точку Кюри, но и увеличить резкость фазового перехода, что приводит к увеличению магнитокалорического эффекта.

Таким образом, исследование термических, механических и полевых воздействий на магнитные свойства материалов является одним из ключевых аспектов для создания прототипов холодильных систем.

В работе [2] была предложена феноменологическая модель фазового перехода первого рода, где рассматривался термодинамический потенциал Гиббса. В данной работе была уточнена модель Бина и Родбелла, в частности было показано, что безразмерный параметр β является функцией, зависящей от приложенного давления. В ходе проведенных работ была проведена оценка верхнего предела внутреннего гистерезиса для сплава $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$.

Литература

1. D. Yu. Karpenkov, Pressure Dependence of Magnetic Properties in $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$: Multistimulus Responsiveness of Caloric Effects by Modeling and Experiment, Phys. Rev. Appl. 13, 034014 (2020)
2. C. P. Bean and D. S. Rodbell, Magnetic disorder as a firstorder phase transformation, Phys. Rev. 126, 104 (1962).

© Макарьин Р.А., Шипкова Е.Д., Карпенков Д.Ю., 2021 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ ПРИ ОБРАБОТКЕ ТЕКСТОВОЙ ИНФОРМАЦИИ

Идиатуллин Д.Р., Ефимов А.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Создание результативного метода поиска данных по взаимосвязанным проблемам представляет собой решение ряда задач, к числу которых первоочередно принадлежат:

- формирование области поиска данных по проблемам, взаимосвязь между которыми представляет собой предмет рассмотрения;
- формулирование и систематизация ситуаций поиска данных согласно взаимосвязанным проблемам; создание методов формализованного изображения и визуального определения классов ситуаций поиска;
- формирование интерфейса с пользователем: создание методов и конфигураций выдачи данных эксперту-аналитику.

Выбранный нами метод определения области действия причинно-следственных связей применялся для создания на языке Python робота, который использует его при нахождении вероятностей.

Данный программный комплекс основан на использовании вероятностной модели для сравнения названия дисциплины в учебном плане и в рабочей программе. В результате работы программы выдается отчёт о возможных ошибках, отвечающий поставленным задачам ВКР. Отчёт о работе – excel таблица – либо просматривается оператором вручную, либо может быть отправлен сотрудникам по указанным адресам электронной почты.

Проведено внедрение указанного комплекса в УМУ БашГУ. В процессе выполнения работы появилась возможность автоматизировать описанные задачи.

Литература

1. Бочаров В. А., Маркин В. И. Основы логики. Учебник. – М.: ИНФРА-М, 2003 – 296с.

© Идиатуллин Д.Р., Ефимов А.М., 2021 г.

МНОГОФАКТОРНЫЙ КОРРЕЛЯЦИОННО-РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ ПОКАЗАТЕЛЯ РОЖДАЕМОСТИ

Пруссакова Е.О., Абдюшева С.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Исследование зависимости рождаемости от различных факторов позволяет спрогнозировать демографические изменения, которые связаны с множеством условий [1].

Влияние политических, социальных, других факторов, достаточно сложно оценивать математически. Поэтому для расчетов были выбраны именно экономические показатели. В первую очередь был выбран показатель ввп на душу населения.

В результате проведенного исследования и установления степени тесноты связи, стало понятно, что зависимость достаточно значима, чтобы влиять на изменение естественного прироста населения.

Так как в реальной жизни такие показатели, как рождаемость, не могут изменяться в зависимости лишь от одного фактора, будет целесообразно исследовать одновременно влияние сразу нескольких факторов. Например, кроме ввп на душу населения можно рассмотреть, как повышение материнского капитала влияет на рождаемость, и следовательно, можно понять, насколько эта мера действенна для стимуляции демографического роста. В дальнейшем, при помощи многофакторного анализа, возможно будет получить наиболее объективные данные для последующего прогнозирования изменения показателей.

Построение регрессионной модели позволяет выявить функциональную зависимость между признаками. То есть можно не только увидеть взаимосвязь между признаками, но и по известным значениям факторов рассчитать величину зависимого признака. Важным здесь является возможность установить наиболее сильно влияющие на результирующий признак факторы.

Литература

1. Абдюшева С.Р., Гилязова Л.Р., Абрамчук М.А. Построение многомерной регрессионной модели для анализа демографических показателей. - Тезисы докладов XI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых – Уфа, 11-14 ноября 2020 г. – с. 45.

© Пруссакова Е.О., Абдюшева С.Р., 2021 г.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ УРОВНЯ РОЖДАЕМОСТИ В РЕСПУБЛИКЕ БАШКОРТОСТАН РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ

Важенина Л.Д., Абдюшева С.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

На основе показателей уровня рождаемости за период 1995-2019 гг. по Республике Башкортостан было проведено прогнозирование (начальные результаты представлены в [1]), а также анализ полученных прогнозных значений, на основе которого было выполнено сравнение различных методов с целью выявления наиболее подходящего для получения демографического прогноза. Исследование позволило сделать следующие выводы:

1. Экспоненциальное сглаживание (коэффициент сглаживания 0,1) дало высокие численные показатели, но хорошо отразило тенденцию спада.

2. Экспоненциальное сглаживание (коэффициент сглаживания 0,8) дало ожидаемый резкий спад, прогноз попал в предполагаемый диапазон.

3. В методе скользящего среднего была выбрана наименьшая база, что привело к приемлемым результатам с точки зрения тенденции в изменении данных. Получен прогноз роста рождаемости. Однако пандемия внесла свои коррективы.

4. Экстраполяция по среднему коэффициенту роста показала плавный спад и оптимальное значение без каких-либо резких скачков.

Проведённые исследования позволяют сделать заключение, что экстраполяция по среднему коэффициенту роста наиболее явно отображает тенденцию к спаду рождаемости в Республике Башкортостан, но из-за пандемии прогноз не может быть точным.

В дальнейшем планируется провести анализ уровня рождаемости на актуальных данных, рассмотреть применение регрессионного анализа на меньших временных промежутках, например, ежемесячным.

Литература

1. Абдюшева С.Р., Важенина Л.Д. Сравнение методов прогнозирования для показателей рождаемости. Тезисы докладов XI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых – Уфа, 11-14 ноября 2020 г. – с. 48.

© Важенина Л.Д., Абдюшева С.Р., 2021 г.

PHASE STATES OF SPIN-1 ISING-LIKE MAGNETIC WITH STRONG SINGLE-ION ANISOTROPY OF THE EASY-PLANE TYPE

Yarygina E.A., Matunina Ya. Yu., Klevets Ph.N.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University, Simferopol, Russia

We study the phase states and dynamics of a two-sublattice Ising antiferromagnet with easy-plane single-ion anisotropy in an external magnetic field perpendicular to the easy-plane of the system. The model Hamiltonian has the following form:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{n_1, n_2} J_1(n_1 - n_2)(S_{n_1}^z S_{n_2}^z) + \sum_{m_1, m_2} J_2(m_1 - m_2)(S_{m_1}^z S_{m_2}^z) \\ & + \sum_{n, m} J_3(n - m)(S_n^z S_m^z) + \beta \sum_n (S_n^z)^2 + \beta \sum_m (S_m^z)^2 \\ & - H \sum_n S_n^z - H \sum_m S_m^z, \end{aligned} \quad (1)$$

where J_1 and J_2 are the constants of in-sublattice exchange interaction of the ferromagnetic type, that is, both constants are negative; J_3 is the constant of inter-sublattices exchange interaction of the antiferromagnetic type, that is $J_3 > 0$; $\beta > 0$ is the constant of the easy-plane single-ion anisotropy; H is the external magnetic field.

It is shown that depending on the relationship between the material constant and the external field, one of the four phase states can realize in the system:

1. Ferromagnetic phase;
2. “Supersolid” magnetic phase or non-collinear antiferromagnetic phase in which each sublattice has non-zero magnetization, but they are tilted with respect to the OZ axis on different angles;
3. Mixed phase in which one of the sublattices is characterized with a vector order parameter, while another sublattice – with a quadrupole order parameter. At this, one sublattice has non-zero magnetization, while magnetic moment per site equals zero for another sublattice;
4. Quadrupolar phase in which both sublattices has zero magnetic moment per crystal site.

As we were interested in the case of strong single-ion anisotropy when the “supersolid” magnetic phase is possible, we have not considered the antiferromagnetic phase which can also realize in the model considered.

All phase transitions between the phases, listed above, are of the first kind. The phase diagram of the system for the case of strong single-ion anisotropy ($\beta_c > 4|J_1|$) is shown in Fig. 1 below.

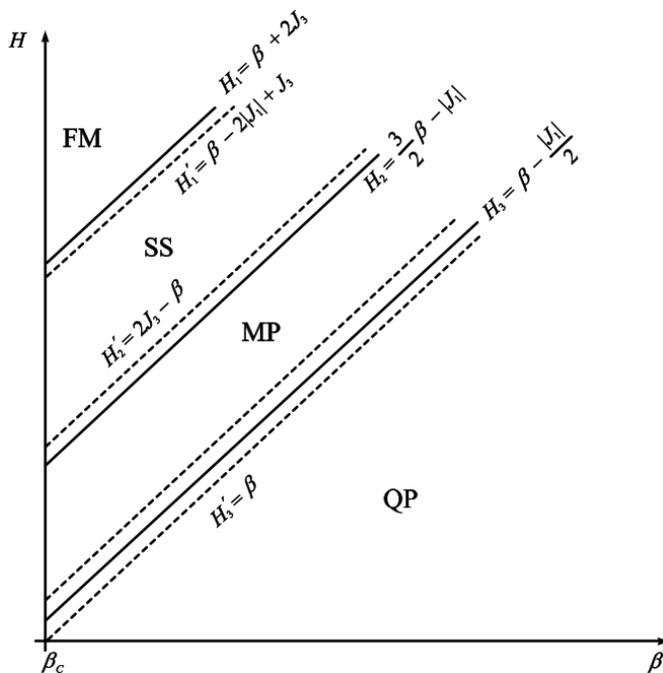


Fig.1. Phase Diagram of the system. Solid lines denote the phase transitions fields, dash lines – the fields of stability for the corresponding phases. FM denotes the ferromagnetic phase; SS – the “supersolid” magnetic phase; MP – the mixed phase; QP – the quadrupolar phase

It should be noted that the SS phase becomes metastable when the constant of single-ion anisotropy is less than the β_c value, defined above.

Acknowledgements

The research was funded by RFBR and Republic of Crimea, project number 20-42-910003, and by RFBR, project number 20-32-90027.

© Yarygina E.A., Matunina Ya.Yu., Klevets Ph.N., 2021

ДИНАМИКА И ТРАНСФОРМАЦИЯ МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ В МУЛЬТИСЛОЙНЫХ ПРОВОДЯЩИХ НАНОЦИЛИНДРАХ МАЛОГО ДИАМЕТРА

Мухамадеева В.В., Степанов С.В., Саломасов А.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время одним из перспективных технических устройств для спинтроники, является микроволновой спин-трансферный наносциллятор (СТНО) [1, 2]. В его основе обычно лежат пермаллоевые наностолбики, которые имеют два магнитных слоя, разделенных немагнитной прослойкой [2, 3]. В работе проведено численное исследование динамики намагниченности СТНГ диаметром 120 нм, состоящего из трех слоев (пермаллой 4 нм / медь 15 нм / пермаллой 15 нм), в которых намагниченность обоих пермаллоевых слоев может поддерживаться в вихревом состоянии, схожим с изученным ранее экспериментально. Когда спин-поляризованный ток проходит через наностолбик, возбуждается режим, соответствующий связанной вихревой динамике. Изучена динамика вихревых состояний в толстом и тонком магнитных слоях при различных значениях плотности тока. Найдена зависимость частоты стационарного движения вихрей в толстом и тонком слоях от величины плотности спин-поляризованного тока. Построен график зависимости радиуса стационарного движения вихря в толстом и тонком слоях от величины плотности спин-поляризованного тока. Проведено сравнение полученных результатов с ранее изученным случаем немагнитной прослойки 10 нм [3, 4]. Установлено, что временной промежуток характеризующий время вылета вихрей за пределы диска увеличивается с увеличением толщины немагнитной прослойки. Так же обнаружено изменение критических плотностей токов характеризующих области затухающего и стационарного режимов связанных колебаний магнитных вихрей.

Литература

1. Litvinenko A., Iurchuk V., Sethi P., Louis S., Tyberkevych V., Li J., Jenkins A., Ferreira R., Dieny B., Slavin A., and Ebels U., *Nano Lett.*, 20, 6104 (2020).
2. Звездин А.К., Хвальковский А.В., Звездин К.А., УФН, 178, 436 (2008).
3. А. Е. Екомасов, С. В. Степанов, К. А. Звездин, Е. Г. Екомасов. ФММ, 2017, том 118, № 4, с. 345–351.
4. Е.Г. Екомасов, Г.И. Антонов, С.В. Степанов, М.И. Фахретдинов, А.Е. Екомасов, К.А. Звездин. Челябин. физ.-матем. журн. 2020. Т. 5, в. 2., С. 161-173

© Мухамадеева В.В., Степанов С.В., Саломасов А. М. 2021 г.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВАКАНТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ 2-КУМАРАНОНА И БЕНЗОФУРАН-3(2Н)-ОНА

Маркова А.В., Асфандиаров Н.Л.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

В данной работе был проведен теоретический анализ вакантных орбиталей молекул 2-кумаранона и бензофуран-3(2Н)-она с использованием квантово-химических расчетов энергий орбиталей, исследованных методами теории функционала плотности (DFT) с помощью гибридного функционала B3LYP [1] в базе 6-31G(d), реализованными в программном пакете Gaussian 09. На основе изображений пространственного распределения орбиталей определяли их π^* - и σ^* -характер, так как σ^* -орбиталь симметрична относительно линии связи, а π^* -орбиталь симметрична относительно плоскости, проходящей через линию связи. Для уточнения рассчитанных значений энергий орбиталей (virtual orbital energies, VOE) использовали подход, предложенный в работе [2], состоящий в корректировке — масштабировании согласно результатам исследований для малых сопряженных органических молекул [2, 3].

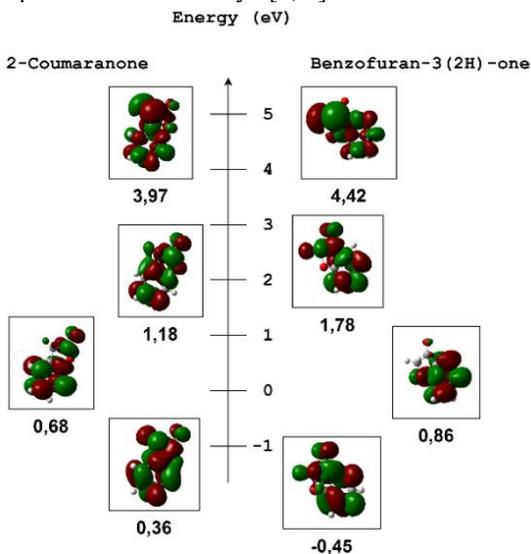


Рис. 1. Схематическое изображение и энергии первых пяти вакантных МО π -типа

Для дальнейшего анализа использовали отмасштабированные значения энергий орбиталей (scaled virtual orbital energies, SVOE). Для масштабирования π^* -молекулярных орбиталей использовали выражение $SVOE = (VOE + 1.14)/1.24$, а для σ^* -орбиталей — выражение $SVOE = (VOE + 0.97)/0.79$ [2, 4].

Исследование проведено при поддержке Российского научного фонда, проект № 19-13-00021.

Литература

1. A.D. Becke. J. Chem. Phys. 98, 5648 (1993).
2. P.D. Burrow, A. Modelli. SAR and QSAR in Env. Res. 24, 647 (2013).
3. Таюпов М.М., Рахмеев Р.Г., Маркова А.В., Сафронов А.М., Математическая физика и компьютерное моделирование, Том 24, № 2, 2021, с. 54-67.
4. A.M. Scheer, P.D. Burrow. J. Phys. Chem. B 110, 17 751 (2006).

© Маркова А.В., Асфандиаров Н.Л., 2021 г.

ДИНАМИКА НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОНА С ТРЕМЯ ПРИТЯГИВАЮЩИМИ ПРИМЕСЯМИ

Самсонов К.Ю.¹, Гумеров А.М.², Кудрявцев Р.В.³, Екомасов Е.Г.^{1,2}

¹Тюменский государственный университет, г. Тюмень, Россия

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

³Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Уравнение синус-Гордона (УСГ) является одним из интенсивно изучаемых нелинейных дифференциальных уравнений математической физики. Данное уравнение описывает волновые процессы в самых разнообразных областях естествознания [1]. Найдены различные точные решения УСГ типа кинка, бризера и некоторые другие решения более сложного мультисолитонного типа.

Обычно для использования в реальных физических моделях требуется модификация УСГ, например, путем добавления дополнительных слагаемых и функций. Они могут описывать наличие внешней силы, диссипации в системе, неоднородность параметров среды и др. Хотя получаемое в результате модифицированное уравнение синус-Гордона (МУСГ) уже не имеет точных аналитических решений, разработан и широко применяется ряд аналитических методов (например, теория возмущений для солитонов или метод коллективных координат).

Интересно с точки зрения физических приложений изучение влияния пространственной модуляции периодического потенциала (или примеси) на динамику солитонов УСГ. Возбуждение локализованной на примеси волны (примесной моды) в результате рассеяния кинка приводит к значительному изменению его динамики. Ранее были проанализированы структура и свойства локализованных нелинейных волн, возбужденных на одной и двух примесях [2,3]. Было показано, что притягивающая примесь может быть использована для возбуждения мультисолитонов УСГ. В случае, когда на двух примесях возбуждаются локализованные примесные волны, аналитически показано, что их колебания можно описать системой двух гармонических осцилляторов со связью упругого типа. Аналитические результаты качественно совпадают с результатами численного моделирования УСГ (как для двух точечных, так и для двух протяженных примесей). Случай двух примесей дает большее разнообразие новых мультисолитонных решений и динамических эффектов по сравнению со случаем одной примеси. Можно ожидать еще

большого разнообразия решений и эффектов при наличии трёх и более примесей в системе.

В данной работе исследована динамика примесных мод в модели синус-Гордона с тремя одинаковыми точечными притягивающими примесями, находящимися на одинаковом расстоянии друг от друга. С помощью метода коллективных переменных получена система дифференциальных уравнений (1), приближенно описывающая колебания примесных мод. Полученные уравнения представляют собой уравнения колебательной системы с тремя степенями свободы или трёх связанных гармонических осцилляторов. Колебания системы представляют собой сумму трёх типов гармонических колебаний: синфазного, синфазно-антифазного и антифазного. Найдена зависимость частот гармонических колебаний и их коэффициентов, определяющих, наряду с начальными условиями, вклад каждой гармоники в колебания примесных мод, от величин неоднородности и расстояния между примесями. Вычислены пределы квадратов частот и коэффициентов при бесконечном расстоянии между примесями, соответствующем случаю невзаимодействующих примесных мод. При уменьшении расстояния между примесями частота синфазных колебаний уменьшается, частота синфазно-антифазных колебаний увеличивается, частота антифазных колебаний увеличивается не так быстро по сравнению с синфазно-антифазным случаем. Найдены зависимости амплитуд примесных мод от времени. В случае возбуждения одной гармоники наблюдаемые колебания гармонические. При возбуждении двух гармоник возникают биения, колебания похожи на колебания в случае двух одинаковых примесей. При возбуждении трёх гармоник форма колебаний сильно усложняется. Показано, что рассмотренная модель может быть использована, например, для описания и управления динамикой волн намагниченности в мультислойных магнетиках.

$$\begin{cases} \ddot{a}_1 + a_1 \omega_1^2 + a_2 k_{12} + a_3 k_{13} = 0 \\ \ddot{a}_2 + a_2 \omega_2^2 + (a_1 + a_3) k_{21} = 0 \\ \ddot{a}_3 + a_3 \omega_3^2 + a_1 k_{13} + a_2 k_{12} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где a_1, a_2, a_3 – амплитуды примесных мод, локализованных на первой, второй и третьей примесях, $\omega_1^2, \omega_2^2, k_{12}, k_{21}, k_{13}$ – параметры, связанные с размерами примеси и расстоянием примесей друг от друга.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-31-90048.

Литература

1. Cuevas-Maraver, J. The Sine-Gordon Model and Its Applications: From Pendula and Josephson Junctions to Gravity and High-energy Physics / J. Cuevas-Maraver, P. G. Kevrekidis, F. Williams (Eds.) // Springer. — 2014. — V. 10. — P. 263.
2. Ekomasov, E. G., Gumerov, A. M., and Murtazin, R. R., Interaction of Sine-Gordon Solitons in the Model with Attracting Impurities, *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 2016, vol. 40, no. 17, pp. 6178–6186.
3. Ekomasov, E. G., Gumerov, A. M., Kudryavtsev, R. V., Dmitriev, S. V., and Nazarov, V. N., Multisoliton Dynamics in the Sine-Gordon Model with Two Point Impurities, *Braz. J. Phys.*, 2018, vol. 48, no. 6, pp. 576–584.

© Самсонов К.Ю., Гумеров А.М.,
Кудрявцев Р.В., Екомасов Е.Г., 2021 г.

ТЕМНЫЕ БРИЗЕРНЫЕ МОДЫ В КИРАЛЬНОМ ГЕЛИМАГНЕТИКЕ: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Синицын Вл.Е.¹, Овчинников А.С.¹, Бострем И.Г.¹, Екомасов Е.Г.²

¹Институт естественных наук и математики, УрФУ, Екатеринбург, Россия

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Мы рассматриваем фазу вынужденного ферромагнетизма в киральном гелимагнетике CrNb_2S_3 . В работах [1-3] показано, что в фазе вынужденного ферромагнетизма в таких системах возможны локализованные в пространстве и осциллирующие по времени состояния в виде дискретных бризеров.

Мы демонстрируем, что в этой фазе в CrNb_2S_3 возможны возбуждения типа темной бризерной моды, причем они являются стационарными ввиду особенностей доменной структуры CrNb_2S_3 , которая состоит из отдельных доменов с разным направлением киральной оси.

В качестве модели кирального гелимагнетика мы рассматриваем цепочку спинов конечной длины L , гамильтониан которой выглядит следующим образом:

$$\mathcal{H} = -2J \sum_n \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + A \sum_n (S_n^z)^2 - H_0 \sum_n S_n^z + \mathcal{D} \sum_n [\mathbf{S}_n \times \mathbf{S}_{n+1}]_z,$$

Первое слагаемое описывает Гайзенберговский обмен, второе — антисимметричный обмен, третье — магнитная анизотропия типа легкая плоскость и последнее — Зеемановское взаимодействие с магнитных полем.

В настоящей работе с помощью технологии Nvidia CUDA было проведено численное моделирование статических бризерных состояний в конечной цепочке с вышеуказанным гамильтонианом.

При рассмотрении статической амплитуды бризерного решения нами были получены выражения, позволяющие рассчитать значения всех спинов цепочки по краевому значению спина.

$$\Omega_{s_n} = -2Bs_n \sqrt{1 - s_n^2} + s_n \left(\sqrt{1 - s_{n+1}^2} + \sqrt{1 - s_{n-1}^2} \right) - \sqrt{1 - s_n^2} (s_{n-1} + s_{n+1}) \sqrt{1 + \frac{D^2}{4J^2}}$$

Нами использовался следующий алгоритм нахождения решения: (1) задавалось пробное отклонение S_0 и по вышеуказанной формуле рассчитывались значения S_n до концов цепочки. (2) Проверялось

выполнение критерия для крайних узлов S_L, S_{L-1} . (3) Выбиралось новое значение S_0 и пункты 1-2 повторялись. Сначала подбор производился для крупного шага по S_0 , затем полученные примерные значения S_0 , для которых выполнялся критерий, уточнялись с более мелким шагом. Величина шага для поиска некоторого вида бризерных решений уменьшалась до 10^{-18} , по этой причине была применена технология вычисления на графическом процессоре Nvidia CUDA.

В континуальном приближении были получены аналитические выражения для всех типов бризеров, а также были проанализированы условия существования темных и светлых бризеров. По отношению к спиноволновому спектру были выделены нижний и верхний типы бризерных решений. Аналитическое решение имеет хорошее согласие с численными данными (рис. 1).

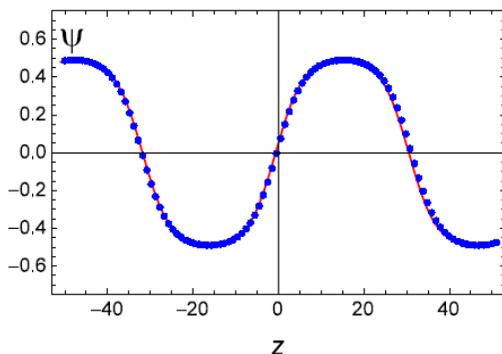


Рис. 1: Огибающая функция темного нижнего бризера для $L=101$ (линия) и численное моделирование (точки) при параметрах, характерных для CrNb_2S_3

Согласно выведенным условиям существования бризерных решений, единственный тип бризеров, который может существовать в CrNb_2S_3 – это так называемый нижний темный бризер.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект No. 20-02-00213), Акта Правительства Российской Федерации (контракты No. 02.A03.21.0011 и No. 02.A03.21.0006)

Литература

1. R.F. Wallis, D.L. Mills, A.D. Boardman, Phys. Rev. B, 52, R3828 (1995).
2. S. Rakhmanova, D.L. Mills, Phys. Rev. B, 54, 9225 (1996).
3. R. Lai, S.A. Kiselev, A.J. Sievers, Phys. Rev. B, 54, R12665 (1996).

© Синуцын Вл.Е., Овчинников А.С.,
Бострем И.Г., Екомасов Е.Г., 2021 г.

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ МАГНИТООДНООСНЫХ ПЛЁНОК С КОЛУМНАРНЫМ ДЕФЕКТОМ В ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОМ ПОЛЕ

Вахитов Р.М., Ахметова А.А., Солонецкий Р.В., Филиппов М.А.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последнее время существенно возрос интерес к исследованиям магнитных скирмионов, которые благодаря их необычным свойствам могут найти применение в качестве носителя информации в современных запоминающих устройствах нового поколения. Магнитные скирмионы — это вихреподобные магнитные неоднородности, несущие топологический заряд. Впервые обнаруженные в киральных магнетиках [1], они стабилизируются в них благодаря взаимодействию Дзялошинского-Мория (DMI). Однако существуют методы стабилизации магнитных скирмионов в магнетиках и в отсутствие в них DMI. В данной работе рассматривается один из таких способов — зарождение стабильного скирмиона на колумнарном дефекте типа потенциальная яма в одноосной ферромагнитной плёнке [2].

В работе [2] был проведён теоретический анализ микромагнитных структур, которые возникают в магнитных плёнках данного типа. Было выяснено, что они бывают четырёх типов, два из которых представляют собой нетопологический солитон, а два — магнитный скирмион. Они различаются между собой ориентацией кора и направлением намагниченности на границе диска. Однако они имеют и общие топологические особенности; в их структуре можно выделить три участка вращения магнитных моментов: кор, промежуточный и граничный участки. Наложение магнитного поля \mathbf{H} , направленного вдоль лёгкой оси анизотропии, приводит к трансформации их структуры, в частности, магнитный солитон с ориентацией кора, противоположной полю \mathbf{H} , перемагничивается в три этапа: вначале уменьшаются размеры кора, затем при его критическом значении H_c переключается ориентация кора и скирмион превращается в нетопологический солитон. Последний с увеличением \mathbf{H} уменьшается в размерах, он как бы “испаряется” [2] и исчезает.

Однако вопрос о механизме переключения кора на колумнарном дефекте остался неизученным. Для решения этой проблемы было проведено микромагнитное моделирование процессов перемагничивания ферромагнитной плёнки, взятой в форме диска, с колумнарным дефектом в центре. Моделирование было осуществлено с помощью пакета программ

открытого доступа OOMMF. Устойчивое состояние скирмиона в отсутствие поля было обнаружены при следующих параметрах: диаметр диска 600 нм, толщина диска 30 нм, диаметр дефекта 60 нм, $K_{u1}=3\times 10^4$ Дж/м³ (вне дефекта), $K_{u2}=-0.5\times 10^4$ Дж/м³ (на дефекте), $M_s=6.6\times 10^5$ А/м, $A=2.5\times 10^{-13}$ Дж/м [3]. У полученного скирмиона радиус кора был $r_0=6.2$ нм, радиус скирмиона $r_v=27.7$ нм. При значении перпендикулярного поля $H=525$ мТ происходит скачкообразное перемагничивание области кора (переключение кора) по направлению внешнего поля. В поле $H=791$ мТ происходит полное перемагничивание диска. Кроме того, было проведено исследование зависимости значений критических полей от радиуса дефекта. Установлено, что при увеличении радиуса дефекта значение поля переключения кора уменьшается, а критическое поле полного перемагничивания диска от радиуса дефекта практически не зависит.

Литература

- 1 K.Everschor-Sitte, J.Masell, R.M.Reeve, M.Kläui, Perspective: Magnetic skyrmions, J. Appl. Phys. 124, 240901 (2018)
- 2 R.M.Vakhitov, R.V.Solonetsky, A.A.Akhmetova, J. Appl. Phys. 128, 153904. (2020).
- 3 M.V.Sapozhnikov, S.N.Vdovichev, O.L.Ermolaeva, N.S.Gusev, A.A.Fraerman, S.A.Gusev, Yu.V.Petrov, J. Appl. Phys. 109, 042406 (2016).

© Вахитов Р.М., Ахметова А.А.,
Солонецкий Р.В., Филиппов М.А., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ 180 ГРАДУСНОЙ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ В МАГНИТНЫХ ПЛЕНКАХ С ФЛЕКСОМАНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ЭФФЕКТОМ

Низямова А.Р., Вахитов Р.М., Солонецкий Р.В., Фомин В.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время ведутся интенсивные исследования магнитоэлектрических явлений в мультиферроиках, которым относятся и пленки ферритов – гранатов [1]. В них было обнаружено явление смещения доменных границ (ДГ) под действием неоднородного электрического поля. Авторами [2] было высказано предположение, что эффект обусловлен наличием в магнетике неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия (флексомагнитоэлектрический эффект).

В данной работе в рамках флексомагнитоэлектрического механизма рассмотрено влияние внешнего магнитного поля \mathbf{H} на топологию и свойства микромагнитных структур, индуцированных неоднородным электрическим полем ϵ в магнитоодноосных пленках. Как показано в [3], в таких магнетиках при действии электрического поля ($\mathbf{H} = 0$) могут иметь место три вида микромагнитных структур: 180 – градусные ДГ (180° ДГ) с некруговой траекторией вектора намагниченности \mathbf{M} , 0 – градусные (0° ДГ) с квазиблоховской структурой и 0° ДГ неелевского типа.

Показано, что при включении магнитного поля топология этих неоднородностей будет меняться, однако характер этих трансформаций будет зависеть как от их структуры, так и от ориентации магнитного поля относительно плоскости ДГ и оси симметрии пленки. Выявлено, что для каждого вида микромагнитных структур всегда существует такое направление магнитного поля, при котором возрастает интегральная величина поляризации рассматриваемой неоднородности, и, следовательно, происходит усиление проявления флексомагнитоэлектрического эффекта. В частности, в поперечном магнитном поле (\mathbf{H} перпендикулярно плоскости ДГ) при ее возрастании интегральная величина электрической поляризации 180° ДГ также увеличивается. Кроме того, меняя направление магнитного поля на противоположное, можно характер взаимодействия 180° ДГ с источником электрического поля сменить на обратное, например, с притяжения на отталкивание и наоборот.

Литература

1. А.П.Пятаков, А.К.Звездин УФНБ 182, 593 (2012)
2. A.S. Logginov, G.A. Meshkov, A.V.Nikolaeva, E.P.Nikolaeva, A.P. Pyatakov, A.K.Zvezdin. Appl.Phys.Lett.**93**, 182510(2008)
3. Р.М. Вахитов и др., ФТТ **61** (2019), 1120-1127.

© Низямова А.Р., Вахитов Р.М.,
Солонецкий Р.В., Фомин В.В., 2021 г.

НЕОДНОРОДНЫЙ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В (001) – ОРИЕНТИРОВАННОЙ ПЛЕНКИ ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ

Баймухаметова З.А., Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Открытый более десяти лет неоднородный магнитоэлектрический эффект в [1], привлек к себе внимание тем, что при воздействии неоднородного электрического поля на пленки ферритов-гранатов имело место смещение доменных границ (ДГ). Кроме того, этот эффект наблюдался при комнатных температурах, что создает предпосылки его практического применения. Особенностью обнаруженного эффекта является то, что степень его проявления зависит от ориентации развитой поверхности пленки относительно кристаллографических осей: в (210)- пленке эффект проявлялся наиболее сильно, в (011)- пленке был менее выражен, а в (111)- пленке эффект не наблюдался. Однако, среди рассматриваемых образцов не были исследованы пленки другой ориентации, в частности, (001)- ориентированные пленки.

В данной работе изучены топология и свойства микромагнитных структур, возникающих в пленках ферритов-гранатов типа (001), при действии на них неоднородного электрического поля в рамках флексомагнитоэлектрического механизма [2]. Показано, в отсутствие электрического поля в области существования фазы $\mathbf{M} \parallel [001]$ (\mathbf{M} – вектор намагниченности) в рассматриваемой пленке имеют место решения уравнений Эйлера–Лагранжа, которым соответствуют 180° ДГ блоховского или неелевского типа, но отсутствуют решения, отвечающие 180° ДГ с некруговой траекторией вектора \mathbf{M} [3].

Показано, что при включении электрического поля в рассматриваемой пленке соответствующие 180° ДГ становятся квазиблоховскими. Кроме того, в области локализации ДГ возникает поляризация (за счет флексомагнитоэлектрического механизма [2]), которая является чётной функцией. Установлено так же, что в случае отсутствия вклада парциальной части НМЭВ, содержащий gotm , возникает двойной электрический слой.

Литература

1. А.С.Логинов, Г.А.Мешков, А.В.Николаева, Е.П.Николаева, А.П.Пятаков, А.К.Звездин. Письма в ЖЭТФ **93**, 182510 (2008)
2. А.П.Пятаков, А.К.Звездин УФНБ **182**, 593 (2012)
3. Р.М.Вахитов, З.В.Гареева, Р.В.Солонецкий, Ф.А.Мажитова, ФТТ **61** (2019), 1120-1127.

© Баймухаметова З.А., Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р., 2021 г.

ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИЙ В ГРАФЕНЕКлявлиная А.И.¹, Галияхметова Л.Х.²¹ Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия² Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Дефекты кристаллической решетки одного из самых прочных материалов - графена, активно исследуются последние годы. Наличие дефектов оказывает большое влияние на механические и электрические свойства графена. Наиболее распространенным дефектом является дефект Стоуна-Уэльса, который представляет собой пару дефектов 5-7, и может рассматриваться как дислокационный диполь [1,2]. В работе методом молекулярной динамики были изучены диполи, находящиеся на разном расстоянии друг от друга при постоянной температуре. Пример решетки с дефектами представлен на Рис.1.

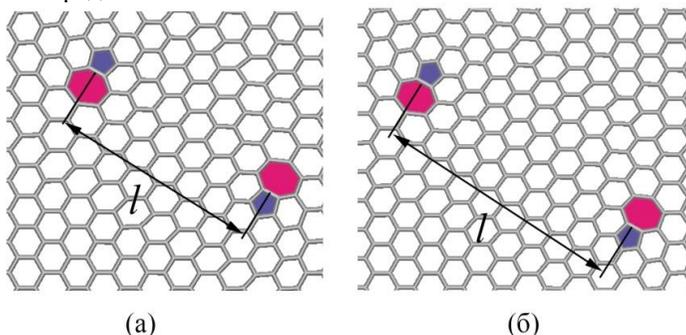


Рис. 1. Решетка графена с дислокационными диполями с плечом $l = 16,4\text{Å}$ (а) и $l = 22\text{ Å}$ (б)

Для каждого диполя проведен анализ влияния температуры на движение дефектов, колебание решетки, рассмотрены сценарии перемещения дефектов по решетке графена и рассчитаны критические температуры.

Литература

1. J. Ma, D. Alfè, A. Michaelides, E. Wang. Stone-Wales defects in graphene and other planar sp^2 -bonded materials // Phys. Rev. B., 2009, V.80, P. 033407.
2. A.I. Klyavlina, L. Kh. Rysaeva, R.T. Murzaev. Dislocation dipole in graphene at finite temperature // J. Phys.: Conf. Ser. 2020, V. 1435, P. 012063.

© Клявлиная А.И., Галияхметова Л.Х., 2021 г.

МЕТОД УСРЕДНЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО УРАВНЕНИЯ sin-ГОРДОНА

Бердюгина Е.А., Нерадовский Д.Ф., Самсонов К.Ю.

Тюменский государственный университет, г. Тюмень, Россия

Часто, для описания реальных физических процессов требуется учет различных возмущений и модификаций уравнение синус-Гордона (УСГ). В данной работе рассматривается трехмерная пространственная модуляция периодического потенциала. Показано, что решение модифицированного УСГ может быть получено методом усреднения [1]. Пусть константа перед слагаемым с периодическим потенциалом в УСГ осциллирует около некоторого среднего значения $\beta = \beta_1$, с периодом, много меньшим характерного размера $\Delta_0 = \sqrt{\frac{a}{\beta}}$, т.е.

$$\begin{aligned}\beta &= \beta_1 + \delta\beta(\vec{r}) \\ \overline{\delta\beta} &= 0\end{aligned}\quad (1)$$

Усреднение производится по трем направлениям с периодами λ_i , удовлетворяющими условию:

$$\Delta_0 \gg \lambda_i \gg a_0.$$

Пусть $\theta = \theta_0 + \theta_1$, где θ_1 - малое отклонение от θ_0 и $\overline{\theta_1} = 0$. Решение будем искать в виде суммы медленно меняющегося угла θ_0 и осциллирующей функции θ_1 . В результате мы получили, что если вариация $|\delta\beta|_{\max} \gg \beta_1$, то влияние пространственных осцилляций периодического потенциала на однородные и неоднородные состояния системы существенно. Введена эффективная константа

$$\tilde{\beta}_2 = \beta_1 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{|\delta\beta_n|^2}{(nl)^2 \beta_1^2 \Delta_0} \quad (2)$$

где $\delta\beta_n$ – коэффициенты фурье-разложения осциллирующего слагаемого. Показано, что если $\frac{|\delta\beta_n|^2}{\beta_1^2} \gg 1$, то значение константы будет существенно отличаться от среднего значения β_1

Литература

- Капица П. Л. ЖЭТФ, т. 21, вып. 5. С. 588-597. 1951

© Нерадовский Д.Ф., Бердюгина Е.А., Самсонов К.Ю., 2021г.

ВЛИЯНИЕ Al НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ Fe-Ge: ИССЛЕДОВАНИЯ *AB INITIO*

Загребин М.А., Матюнина М.В., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.
Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Функциональные сплавы на основе железа вызывают интерес научного сообщества из-за их необычных механических, магнитных и электрических свойств. Небольшая добавка немагнитных атомов, таких как Ga, Ge и Al приводит к существенному увеличению значения магнитострикции относительно чистого железа. Наиболее перспективными и широко исследуемыми магнитострикционными сплавами являются системы Fe-Ga. Стоит отметить, что в диапазоне малого содержания добавки $x \approx 10$ ат.% атомов Al, Ge или Ga, сплавы системы Fe-Al, Fe-Ge и Fe-Ga обладают схожими характеристиками [1]. Данное сходство обусловлено кристаллизацией данных сплавов в неупорядоченную структуру A2. Дальнейшее увеличение концентрации немагнитных атомов приводит к более существенным различиям в характеристиках данных систем. С одной стороны, в области концентрации добавочного элемента $x \leq 18$ ат.% для систем $Fe_{100-x}Ga_x$ и $Fe_{100-x}Al_x$ зависимость $-b_1(x)$ имеет схожий характер поведения, значение $-b_1$ увеличивается с ростом концентрации Ga(Al) и достигает максимального значения при $x \approx 18$ ат.%. В случае сплавов Fe-Ge, максимум приходится на композицию с содержанием Ge около 10 ат.%, при дальнейшем увеличении атомов величина $-b_1$ резко уменьшается и достигает минимума при $x \approx 18$ ат.%. С другой стороны, изменение тетрагонального модуля упругости в области $0 \leq x \leq 18$ ат.% более существенны для сплавов Fe-Ga и Fe-Ge, и в области максимума/минимума C' уменьшается на $\approx 79\%$ по сравнению с чистым железом, в то время как для систем Fe-Al данное уменьшение составляет порядка 50%. Оценка влияния небольшой добавки атомов Al в бинарные сплавы Fe-Ga [1, 2] показала, что величина тетрагональной магнитострикции тройных сплавов Fe-Ga-Al уменьшается незначительно. Данные о характере поведения магнитоупругой постоянной, тетрагонального модуля упругости и магнитострикции в сплавах Fe-Ge-Al отсутствуют. В связи с этим, интересной представляется задача исследования влияния небольшой добавки атомов Al на структурные и магнитные свойства систем Fe-Ge.

Исследования выполнены с помощью метода проекционных присоединённых волн (Projector augmented wave), реализованного в

вычислительном пакете VASP [3, 4]. Для создания нестехиометрических композиций и структурного беспорядка использовался подход 32-атомной суперячейки совместно со специальными квазислучайными структурами, созданными при помощи пакета ATAT [5]. Учет обменно-корреляционных эффектов проводился в приближении обобщенного градиента в формулировке Пердюю, Бурке и Эрнцернхофа [6]. В результате получены зависимости равновесных параметров кристаллической решетки, модулей упругости, магнитных моментов, постоянной тетрагональной магнитострикции от содержания Al, а также зависимости энергии магнитокристаллической анизотропии от величины малой деформации для сплавов $\text{Fe}_{100-x}(\text{Ge}_x\text{Al}_y)$.

Работа выполнена при поддержке фонда перспективных научных исследований ЧелГУ.

Литература

1. Restorff J.B., Wun-Fogle M., Hathaway K.B. et al. Tetragonal magnetostriction and magnetoelastic coupling in Fe-Al, Fe-Ga, Fe-Ge, Fe-Si, Fe-Ga-Al, and Fe-Ga-Ge alloys // J. Appl. Phys., 2012, V. 111, pp. 023905.
2. Clark A.E., Restorff J.B., Wun-Fogle M. et al., Temperature dependence of the magnetostriction and magnetoelastic coupling in $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$ ($x=14.1, 16.6, 21.5, 26.3$) and $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$ // J. Appl. Phys., 2008, V. 103, pp. 07B310.
3. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab-initio total-energy calculations using plane-wave basis set // Phys. Rev. B., 1996, V. 54, pp. 11169.
4. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B., 1999, V. 59, pp. 1758.
5. van de Walle A., Asta M., Ceder G., The alloy theoretic automated toolkit: A user guide // Calphad, 2002, V. 26, pp. 539.
6. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett., 1996, V. 77, pp. 3865.

*© Загребин М.А., Матюнина М.В., Соколовский В.В.,
Бучельников В.Д., 2021 г.*

УСКОРЕНИЕ ШАГА АЛГОРИТМА МЕТРОПОЛИСА ДЛЯ ДВУХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Кадыров А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Ферромагнетики могут состоять из доменов конечного размера, в которых спины атомов имеют одинаковое направление (по-другому, говорят, что существует дальний порядок магнитных моментов атомов). Если к такому материалу приложить магнитное поле, разные домены выстраиваются, и материал становится намагниченным. При повышении температуры, намагниченность уменьшается, а при прохождении точки Кюри, система испытывает фазовый переход, при котором намагниченность пропадает [1].

В качестве модели ферромагнетика рассмотрена двухмерная модель Изинга в приближении ближайшего соседа на квадратной решетке со стороной N частиц из N^2 фиксированных в пространстве частиц, а спины которых $x_{i,j}$ (проекции спинов на ось z) могут принимать 2 значения:

$$x_{i,j} = \pm 1, \quad (1)$$

$$E(x) = -J \sum_{i,j} (x_{i+1,j} + x_{i,j+1}) x_{i,j} - h \sum_{i,j} x_{i,j}, \quad (2)$$

$$M(x) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} x_{i,j}. \quad (3)$$

Формулы для ускорения шага алгоритма Метрополиса:

$$\Delta E_{i,j} = 2J (x_{i-1,j} + x_{i,j-1} + x_{i+1,j} + x_{i,j+1}) x_{i,j} + 2hx_{i,j}, \quad (4)$$

$$\Delta M_{i,j} = -2 \frac{1}{N} x_{i,j}. \quad (5)$$

На рис. 1 представлен расчет кривых с 200 точками для системы 160000 частиц без внешнего поля $h = 0$ с энергией взаимодействия $J = 1$.

Теплоемкость расходится в точке Кюри $T_c \approx 2.269185J$. На графике теплоемкости $C(T)$ приблизительно в T_c наблюдается резкий пик.

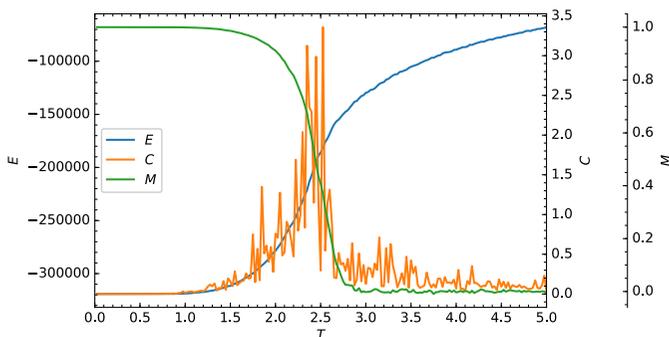


Рис. 1. График кривых энергии E , теплоемкости C и намагниченности M от температуры T

Программа расчета написана на языке программирования Python с применением библиотек NumPy для векторизации вычислений и Numba для трансляции кода на Python с NumPy в производительный машинный код. Расчет на рис. 1 занял 33.2 секунд на компьютере с процессором Intel Pentium 4415U и операционной системой Ubuntu 20.04.

Литература

1. Ising E., Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus // Hamburg, 1924
2. Биндер К., Хеерман Д. В., Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике // Наука, М., 1995, 144 с.

© Кадыров А.В., 2021 г.

ПРЕДЕЛ СВЕТИМОСТИ ЭДДИНГТОНА ДЛЯ БЕЗМАССОВЫХ КРОВОТЫХ НОР СО СКАЛЯРНЫМ ПОЛЕМ

Юсупова Р.М.¹, Мухтарова Г.Р.², Измаилов Р.Н.^{1,2}

¹Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

²Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Светимость является одним из важных наблюдательных свойств астрофизических объектов (звезд, аккреционных дисков и т.д.). Но для светимости имеется предел, называемой пределом Эддингтона или эддингтоновская светимость, при котором силы гравитации объекта уравниваются с силой давления излучения [1].

В данной работе были получены пределы светимости безмассовых кротовых нор Гуларта [2] и Эллиса – Бронникова [3], которые характеризуются электрическим (Q), магнитным (P), дилатонным (Σ) зарядами и скалярной массой (m), соответственно. На рис. 1а приведен график зависимости светимости Эддингтона кротовой норы Эллиса – Бронникова от радиальной координаты r и на рис. 1б – предел светимости кротовой норы Гуларта.

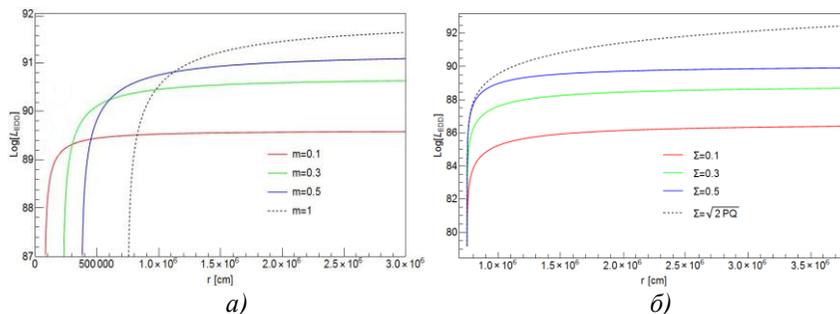


Рис.1. Зависимость светимости Эддингтона от радиальной координаты r для кротовой норы Эллиса-Бронникова при различных значениях скалярного заряда m (а) и кротовой норы Гуларта при различных значениях дилатонного заряда Σ и $P = 0.5$ и $Q = 0.5$ (б)

В работе показано, что в случае кротовой норы Эллиса - Бронникова значение предела Эддингтона увеличивается с ростом скалярной массы m и принимает максимальное значение при $m = 1$, и в случае кротовой норы Гуларта максимальное значение эддингтоновской светимости достигает при $\Sigma = \sqrt{2PQ}$.

Литература

1. Karimov, R.K., Izmailov, R.N., Potapov, A.A. et al. Can accretion properties distinguish between a naked singularity, wormhole and black hole? // Eur. Phys. J. C, 2020, v. 80, pp.1138.
2. Goulart, P. Dyonic black holes and dilaton charge in string theory // 2017, arXiv:1611.03093.
3. Ellis, H.G. Ether flow through a drainhole: A particle model in general relativity // J. Math. Phys. 1973, v. 14, pp.104-118.

© Юсупова Р.М., Мухтарова Г.Р., Измаилов Р.Н., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Fe-Ni-Al

Мирошкина О.Н.^{1,2}, Соколовский В.В.¹, Бучельников В.Д.¹

¹Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

²Университет Дуйсбурга-Эссена, г. Дуйсбург, Германия

Сплавы Гейслера являются объектами интенсивных исследований мирового научного сообщества, так как они обладают рядом уникальных свойств, таких как большое магнитосопротивление, магнитодеформация, магнитокалорический эффект и эффект памяти формы. Указанные характеристики сильно зависят от состава материала, его устойчивости и типа кристаллического упорядочения.

В данной работе из первых принципов исследуются структурные и магнитные свойства сплавов Гейслера $\text{Fe}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Al}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) при нулевых и конечных температурах. Наряду с прямой и обратной гейслеровскими структурами рассмотрены новые T^p , T^c [1] и $T^\#$ структуры, обладающие послойным атомным упорядочением. Из *ab initio* расчетов показано, что для композиций $x = 0$ и 0.25 энергетически выгодной является T^p структура. Кроме того, эти составы устойчивы к тетрагональным искажениям, тогда как дальнейшее увеличение избытка Ni приводит к тому, что выгодной становится мартенситная фаза. Особо стоит отметить, что T^p - Fe_2NiAl в аустенитной фазе обладает энергией магнитокристаллической анизотропии того же порядка, что и тетрааенит FeNi. Данный факт делает сплав T^p - Fe_2NiAl перспективным кандидатом на роль постоянных магнитов нового поколения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ № 17-72-20022 (геометрическая оптимизация, энергия смешения и обменные параметры), Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-00250-20-03 (энергия магнитокристаллической анизотропии) и Немецкого научно-исследовательского общества (DFG) в рамках проекта TRR 270 (расчеты фононов).

Литература

1. Neibecker, P. et al. Ordering tendencies and electronic properties in quaternary Heusler derivatives // Phys. Rev. B, 2017, v. 96, p. 165131.

© Мирошкина О.Н., Соколовский В.В., Бучельников В.Д., 2021 г.

ЗАДЕРЖКА ШАПИРО В МОДЕЛИ ГРАВИТАЦИИ БАМБЛБИ

Тулеганова Г.Ю.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Общая теория относительности основана на фундаментальном принципе Лоренц-инвариантности, но в дискретном квантовом режиме он может не выполняться. Модель гравитации Бамблби (Bumblebee gravity) [1] разрешает это противоречие, допуская нарушение симметрии Лоренца (НСЛ). Точное решение типа Керра характеризуется параметром НСЛ ℓ .

В работе рассматривается реалистичная конечная линзируемая система и поднимается принципиальный вопрос, связанный с оценкой времени прихода сигналов после их прохождения вблизи вращающейся черной дыры. Для этого проинтегрированы нулевые геодезические метрики Керра в теории гравитации Бамблби в экваториальной плоскости до третьего порядка и вычислено время прохождения лучей света (также называемое задержкой Шапиро), необходимое для их прохождения от произвольной точки в источнике r на расстоянии наименьшего сближения луча b по обе стороны от вращающейся линзы, которое можно представить в виде:

$$t^{\pm}(r, b, \ell) = \sqrt{1 + \ell} [t_{flat}(r, b, \ell) + t_{mass}(r, b, \ell) \pm t_{fd}(r, b, \ell)] \quad (1)$$

где t_{flat} – задержка в плоском пространстве, t_{mass} – задержка, вызванная массой черной дыры и t_{fd} – ведущий порядок задержки, вызванный эффектом увлечения инерциальных систем отсчета, содержащий параметр вращения a . Расстояние наименьшего сближения b луча определяется массой черной дыры M и угловым моментом J . Пользуясь методом, предложенным Вангом и Линем [2], в работе получено выражение для задержки времени до третьего порядка. Результаты показывают, что в третьем порядке вклад массы сопоставим с вкладом вращения. Влияние параметра ℓ на задержку Шапиро потенциально может быть использовано для ограничения этого параметра [3].

Литература

1. Kostelecky, V. A., Samuel, S. Spontaneous breaking of Lorentz symmetry in string theory // *Phys. Rev. D.*, 1989, D40, 1886.
2. Wang, K., Lin, W. A third-order approximation for time delay of light propagation in the equatorial plane of Kerr black hole // *Gen. Relativ. Gravit.*, 2014, 46, 1740.
3. Tuleganova, G. Y., Muhamadieva, L. Y. Relative time delay in Bumblebee gravity // *Astrophysics and Space Science*, 2020, 366(1).

© Тулеганова Г.Ю., 2021г.

НИЗКОЛЕЖАЩИЕ ЧАСТОТЫ КВАЗИНОРМАЛЬНЫХ МОД ЧЕРНОЙ ДЫРЫ ТАУБ-НУТ ДЛЯ СКАЛЯРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

Измаилов Р.Н., Каримов Р.Х., Имаев И.И.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Идея о существовании квазинормальных мод (гравитационных волн) у гравитационных астрофизических объектов впервые была предсказана Альбертом Эйнштейном более 100 лет назад. С момента их предсказания, квазинормальные моды были исследованы во многих модифицированных теориях гравитации различными методами. Особую актуальность исследованиям в этой области придает обнаружение квазинормальных мод от столкновения двух черных дыр детектором лазерно-интерферометрической гравитационно-волновой обсерватории (LIGO) в 2015 году [1].

В работе проводится анализ квазинормальных мод черной дыры Тауб-НУТ, метрика которой задается в виде $ds^2 = -f(r)dt^2 + f(r)^{-1}dr^2 + r^2d\Omega^2$, где $f(r) = (r^2 - 2mr - v^2)/(r^2 + v^2)$ и v – параметр НУТ. Радиальная составляющая скалярных возмущений за пределами горизонта событий удовлетворяет следующему волновому уравнению

$$\frac{d^2\Psi_s}{dr_*^2} + \{\omega^2 - V_s(r)\}\Psi_s = 0, \quad (1)$$

где ω – квазинормальные частоты, $V_s(r)$ – эффективный потенциал (потенциал Реджи-Уиллера) и r_* – «черепашья» координата, которая определяется как $dr_* = dr/f(r)$. Эффективный потенциал пространства-времени Тауб-НУТ имеет вид:

$$V_s(r) = \frac{(r^2 - 2mr - v^2)[\{2m + k(1+k)r\}r^3 - 2r\{m - (2+k+k^2)r\}v^2 + k(1+k)v^4]}{r^2(r^2 + v^2)^3} \quad (2)$$

где $k = 0, 1, 2, 3, \dots$

Литература

1. B. P. Abbott et al. (LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration). Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger // Phys. Rev. Lett., 2016, v. 116, pp. 061102.

© Измаилов Р.Н., Каримов Р.Х., Имаев И.И., 2021 г.

СВОЙСТВА ОТРАЖАТЕЛЬНО-АСИММЕТРИЧНЫХ КРОВОТЫХ НОР ГМГГС-ШВАРЦШИЛЬДА

Ахтарьянова ГФ, Айгишева Э.Э., Измаилов Р.Н.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

В работе исследуется модель кротовой норы, полученной соединением пространства-времени ГМГГС (Гиббонс - Маеда - Гарнфикл – Горовиц - Стромингер) [1-3] массы M_- и заряда Q с одной стороны от горловины и пространства-времени Шварцшильда массы M_+ с другой. Эти объекты являются сферически симметричными по форме, но не отражательно-симметричными, поскольку связанные пространства-времена различаются. Отражательно-асимметричные кротовые норы могут отражать значительную часть падающего излучения обратно в пространство-время, в котором оно возникло. В работе [4] этот эффект был рассмотрен в рамках эффективного фотонного потенциала. В зависимости от параметров модели, изображение такой кротовой норы, видимое удаленным наблюдателем (ее «тень»), может содержать фотонное кольцо, сформированное на стороне наблюдателя, и фотонное кольцо, сформированное на другой стороне кротовой норы, или оба фотонных кольца. Эти уникальные топологические особенности позволят нам четко отличить этот класс объектов от черных дыр с помощью радиоастрономических наблюдений.

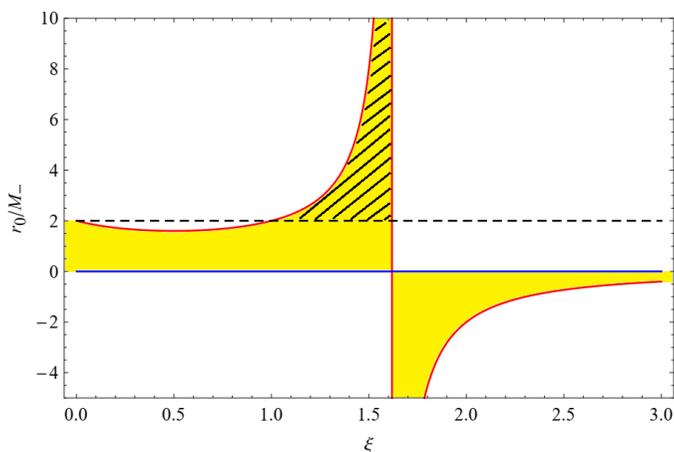


Рис. 1. Параметрическое пространство кротовой норы ГМГГС-Шварцшильда

На рис. 1 представлен график зависимости критических кривых для класса кротовых нор ГМГТС-Шварцшильда, отличающихся асимметрией пространств-времени, в которых они соединены, асимметрия «отражения» происходит относительно горловины кротовой норы [4]. Критические кривые соответствующие $Q = 0$ и $\sqrt{2}M_-$ (ограничение заряда было получено в [3]) представлены линиями синего и красного цвета, соответственно. Таким образом, область допустимых значений r_0 и $\xi (= M_+/M_-)$ определяется этими критическими кривыми и представлена желтым цветом. Однако критические кривые не могут быть определены в отрицательной области, и, следовательно, $\xi \lesssim 1.6$. Еще одним важным условием соединения двух пространств-времен является то, что критические кривые должны быть больше чем радиусы горизонтов событий. Из этого условия мы определяем нижний предел параметра $\xi \sim 1$. Таким образом, область допустимых значений параметра ξ для полученной модели определена заштрихованной областью и составляет $1 < \xi < 1.6$.

Литература

1. Gibbons, G.W., Maeda, K. Black holes and membranes in higher-dimensional theories with dilaton fields // Nucl. Phys. B, 1988, v. 298, pp. 741-775.
2. Garfinkle, D., Horowitz, G.T., Strominger, A. Charged black holes in string theory // Phys. Rev. D 43, 1991, 3140 [Erratum-ibid. Phys. Rev. D 45, 3888 (1992)].
3. Karimov, R.K., Izmailov, R.N., Bhattacharya, A., Nandi, K.K. Accretion disks around the Gibbons–Maeda–Garfinkle–Horowitz–Strominger charged black holes // European Physical Journal C 78, 2018, pp. 788.
4. Wielgus, M., Horák, J., Vincent, F., Abramowicz, M. Reflection-asymmetric wormholes and their double shadows // Phys. Rev. D 102, 2020, 084044.

© Ахтарьянова ГФ, Айгишева Э.Э., Измаилов Р.Н., 2021 г.

МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НА ИНТЕРФЕЙСЕ В СВЕРХРЕШЕТКАХ МУЛЬТИФЕРРОИКОВ

Юлдашева А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Исследование фазовых переходов, поверхностных эффектов и критических явлений в сверхрешетках или многослойных магнитных нанопленках активно развивается в течение последних двух десятилетий [1].

В данной работе методология моделирования многослойных пленок Гейзенберга [2] используется для Монте-Карло моделирования и расчета магнитных свойств сверхрешеток мультиферроиков, влияния внешних магнитного и электрического полей на термодинамические свойства сверхрешетки мультиферроика. Рассматривается многослойная пленка мультиферроика, состоящая из ферромагнитных и сегнетоэлектрических слоев, чередующихся в направлении оси z . Для Монте-Карло моделирования используется алгоритм Метрополиса для системы с линейными размерами $L \times L \times L_z$, где варьируется в диапазоне $L=40, 60, 80, 100$ для определения размерных эффектов. Толщина сверхрешетки в численных расчетах выбиралась $L_z=8, 16, 12, 24$. При исследовании влияния магнитоэлектрической связи на магнитные, сегнетоэлектрические и интерфейсные свойства, для простоты использовались одинаковые линейные размеры и толщины для сегнетоэлектрического и магнитного слоев.

Изучены влияние температуры, внешних магнитных и электрических полей, магнитоэлектрической связи в сверхрешетке мультиферроика, образованной чередующимися магнитными и сегнетоэлектрическими пленками. Исследованы функциональные зависимости различных физических величин для анализа происходящих в каждой подсистеме фазовых переходов от температур T , параметра магнитоэлектрического взаимодействия на интерфейсе двух подсистем и приложенных магнитных и электрических полей.

Литература

1. V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, D.E. Romanovskii. JETP Letters. 2015, 102 (10), p.668.
2. I.F. Sharafullin, A.G. Nugumanov, A.R. Yuldasheva, A.R. Zharmukhametov, H.T. Diep. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2019, 475, p.453.

© Юлдашева А.Р., 2021 г.

ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В ПОЛИНУКЛЕОТИДНЫХ ЦЕПОЧКАХ

Закирьянов Ф.К., Семерикова М.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Использование квазиодномерных молекулярных цепочек различного типа в качестве нанопроводников в перспективных устройствах нанобиоэлектроники представляется весьма актуальным из-за необычных проводящих свойств таких систем. Теоретическое исследование этих процессов связано с использованием дискретных математических моделей типа представленной в работе [1], в которой показано, что конформационные возмущения в виде бризеров, возбуждаемые в модели ДНК, взаимодействуют с зарядами. В рассматриваемой в [1] модели движение заряда описывается уравнением Шрёдингера, а динамика сайтов – классическими нелинейными уравнениями движения модели Пейрара-Бишопа.

Нами предлагается альтернативная модель переноса заряда в молекуле ДНК, отличающаяся от модели, рассмотренной в [1], тем, что изменение конформации происходит не за счет поперечного смещения нуклеотидов, а за счет их вращения вокруг сахара-фосфатного остова, что характерно для так называемых Y-моделей. Начальное конформационное возмущение в нашей модели задаётся в виде солитонной пары "кинк-антикинк". Основная плотность заряда находится в пределах этого возмущения.

Как показали результаты компьютерного моделирования, расстояние, которое проходит солитон, связанный с зарядом, до его превращения в бризер, растёт с уменьшением коэффициента взаимодействия между конформационным возмущением и плотностью заряда – параметра χ . После превращения пары "кинк-антикинк" в движущийся бризер плотность заряда стремится к нулю. Кроме того, нами исследованы зависимости от начальной скорости солитона и параметра χ следующих величин: 1) времени существования связанного состояния «солитон-заряд» и 2) максимального расстояния, на которое продвигается вдоль полинуклеотидной цепочки связанное состояние «солитон-заряд».

Литература

1. Лахно В.Д., Четвериков А.П. Возбуждение бабблов и бризеров в ДНК и их взаимодействие с носителями заряда // Математическая биология и биоинформатика. 2014. Т. 9. № 1. С. 4–19.

© Закирьянов Ф.К., Семерикова М.А., 2021 г.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ ВОЛНЫ ОТСЕЧКИ ДЛЯ
ОДНОМОВОГО РЕЖИМА ВОЛНОВОДА**

Лопатюк А.В., Зиганшина А.Р., Кискужина Н.У.

Башкирский государственный университет, г Уфа, Россия

В данной работе в системе проектирования ВаemPpoc рассматривали волновод со следующими параметрами: показатель преломления оболочки - 1.453, разница показателей преломления оболочки и сердцевины – 0,008, диаметр волновода - 13 мкм.

Целью работы является определение длины волны, при которой в волноводе может распространяться одна мода. Этот режим работы волновода является наиболее энергетически выгодным, с точки зрения дальности передачи информации.

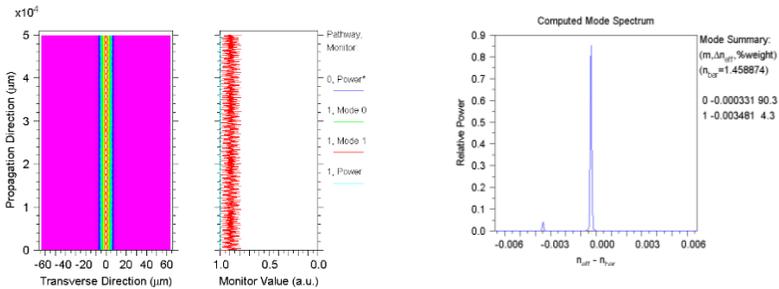


Рис. 2 Диаграмма распределения выходной мощности и спектр мод в волноводе на длине волны 1550нм

На спектре мод рисунка 1 видно, что волновод многомодовый, то есть распространяются две первые моды. Для заданных параметров существует определенная длина волны, при котором можно получить одномодовое волокно. Условие отсечки в оптическом волокне также часто выражается через длину волны отсечки λ_c

$$\lambda = \frac{\pi d_c n_c \sqrt{2\Delta}}{2,405}$$

Для любой λ , большей λ_c , данное волокно будет всегда одномодовым. С другой стороны, при $\lambda < \lambda_c$ оно становится многомодовым. С помощью

заданных параметров определили показатель преломления сердцевины и относительную разность показателей с помощью формулы преломления

$$\Delta = \frac{(n_c - n_0)}{n_c}$$

С помощью вычислений определили длину волны отсечки 2,71 мкм.

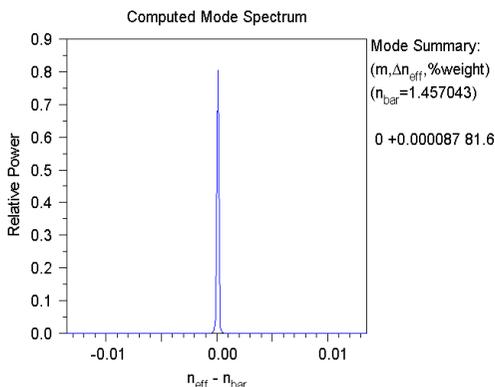


Рис. 3. Спектр мод в волноводе с заданными параметрами и длиной волны 2,71 мкм

Как видно из рис.2, на длине волны 2,71 мкм в волноводе действует одномодовый режим. Если задать длину волны, меньше чем 2,71 мкм $< \lambda_c$, то волокно будет многомодовым.

Литература

1. Вагапов Э.И., Лопатюк А.В. ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ОТСЕЧКИ МОД В ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ . Тезисы докладов XI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых 11 – 14 ноября 2020 г. г. Уфа.

© Лопатюк А.В., Зиганишина А.Р., Киеккужина Н.У., 2021 г.

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЦИФРОВОЙ КОЛЬЦЕВОЙ СЕТИ В КРУПНОМ ГОРОДЕ

Лопатюк А.В., Селовсянова Л.З., Буале Эбиоле
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Расчет скорости цифрового кольца необходим при проектировании цифровых кольцевых сетей.

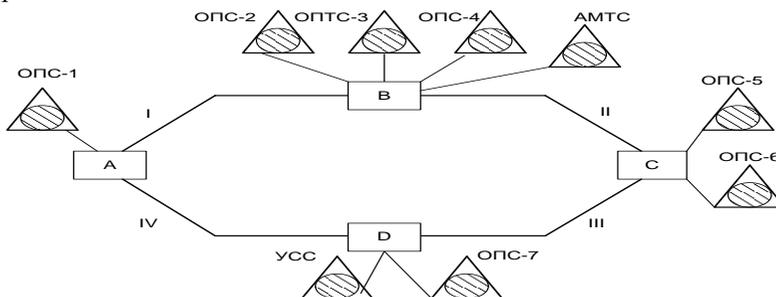


Рис. 1. Схема сети для расчета

Все абоненты считаются квартирными, нагрузка по ЗСЛ и СЛМ не зависит от численности, все станции считаются как АТСЭ. Для расчета скорости цифрового кольца выполняется предварительный расчет нагрузки и интенсивности межстанционной нагрузки:

$$A_{вн} = K_{вн} \times A_i / 100 \quad (1)$$

$$A_{зсл} = \alpha_{зсл} \times N_i \text{ и } A_{слм} = \alpha_{слм} \times N_i \quad (2)$$

$$A_{усс} = 0,02 \times (A_i - A_{вн} - A_{зсл}) \quad (3)$$

$$A_{исх} = A_i - A_{вн} - A_{усс} - A_{зсл} \quad (4)$$

Таблица 1

Результаты расчетов возникающих нагрузок

	A_i , Эрл	m_i	$K_{вн}$	$A_{вн}$, Эрл	$A_{исх}$, Эрл	$A_{усс}$, Эрл	$A_{зсл}$, Эрл	$A_{слм}$, Эрл
ОПС-1	510	3,8	19,9	101,49	370,02	4,49	34	25,5
ОПС-2	300	2,2	19,1	57,3	218,25	4,45	20	15
ОПС-3	300	2,2	19,1	57,3	218,25	4,45	20	15
ОПС-4	990	7,4	23,3	230,67	679,46	13,87	66	49,5
ОПС-5	840	6,3	21,4	179,76	592,16	12,08	56	42
ОПС-6	1170	8,7	25,4	297,18	778,92	15,9	78	58,5
ОПС-7	360	2,7	19,3	69,48	261,19	5,33	24	18

Таблица 2

Интенсивности межстанционной нагрузки

от к	ОПС-1	ОПС-2	ОПС-3	ОПС-4	ОПС-5	ОПС-6	ОПС-7	АМТС	УСС
ОПС-1	-	29,39	29,39	91,48	79,73	104,87	35,17	34	4,49
ОПС-2	27,85	-	16,43	51,14	44,57	58,62	19,66	20	4,45
ОПС-3	27,85	16,43	-	51,14	44,57	58,62	19,66	20	4,45
ОПС-4	103,09	60,81	60,81	-	164,98	217,01	72,77	66	13,87
ОПС-5	86,74	51,16	51,16	159,28	-	128,59	61,23	56	12,08
ОПС-6	123,20	72,67	72,67	226,24	197,17	-	86,97	78	15,9
ОПС-7	33,83	19,95	19,95	62,12	54,13	71,21	-	24	5,33
АМТС	25,5	15	15	49,5	42	58,5	18	-	-

Для расчета количества цифровых потоков типа Е1 воспользуемся формулой:

$$V_{ij} = n_{ij} / 30 \quad (5)$$

Суммарное количество ПЦТ, вводимых в мультиплексор X и выводимых. Общее число ПЦТ на каждом участке кольца (1,2,3,4) определяется суммарным значением ПЦТ, вводимых на данном участке и ПЦТ, проходящих транзитом по данному участку от мультиплексоров других участков кольца. Для данной схемы имеется четыре участка, суммарное число ПЦТ на каждом участке будет равно:

$$V_1 = 58, V_2 = 53, V_3 = 62, V_4 = 57 \quad (6)$$

Требуемая скорость цифрового кольца определяется максимальным значением пропускной способности отдельного участка, т.е. выбирается участок кольца, на котором требуется наибольшее количество ПЦТ $V_{\text{МАКС}}$, эта величина и будет определять требуемую способность цифрового кольца:

$$V_3 = V_{\text{МАКС}} = 62 \quad (7)$$

Требуемая пропускная способность цифрового кольца при коэффициенте запаса $K_p = 1,5$:

$$V_{\text{ТРЕБ}} = V_{\text{МАКС}} \times K_p = 62 \times 1,5 = 93 \quad (8)$$

Скорость цифровой системы передачи для реализации цифрового кольца выбирается стандартной по сетке иерархий SDH. Так как $V_{\text{ТРЕБ}} \leq 252$, то выбираем уровень STM-4 (622 Мбит / с).

© Лопатюк А.В., Селовсянова Л.З., Буале Эбиоле, 2021 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОКАНАЛЬНОГО ПЛАНАРНОГО РАЗВЕТВИТЕЛЯ ДЛЯ ЦИФРОВЫХ СИСТЕМ ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ

Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В данной работе получен разветвитель 1x8 полюсов на основе гребенчатого волновода в системе проектирования VeamProp. Целью работы является проектирование разветвителя, на выходе которого мощность излучения наиболее равномерно распределяется между всеми каналами при минимально возможных потерях. Это необходимо для построения распределенных систем передачи данных.

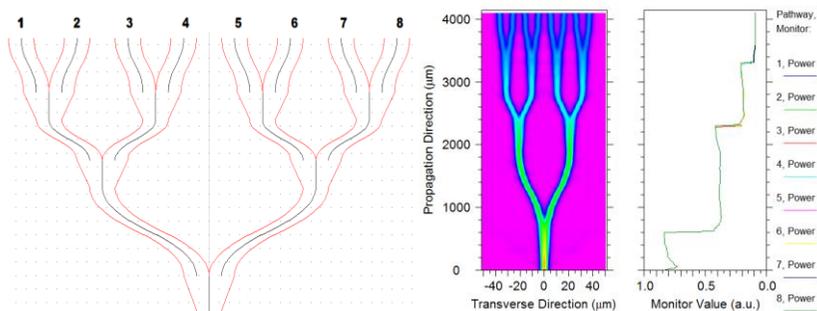


Рис. 1. а) модель полученного разветвителя 1x8; б) диаграмма распределения выходной мощности по каналам разветвителя

Мощность излучения в каждом из выходных полюсов (рис. 1 б) не опускается ниже 10%, что говорит о довольно равномерном распределении ее между всеми каналами. Таким образом, суммарная мощность на выходе разветвителя составляет около 80% от входной.

Максимальное значение мощности в выходных каналах (рис. 2), при длине волны 1310 нм, достигается при выборе высоты световедущей пленки 4 мкм, а для длины волны 1550 нм в диапазоне от 4 до 9 мкм. Из этого следует, что для эффективной работы разветвителя на различных длинах волн следует выбрать толщину волновода 4 мкм.

Как видно из рисунка 2, равномерное разделение сигнала наблюдается в диапазоне 1,26 мкм – 1,565 мкм, что соответствует O, E, S и C-диапазонам стандарта ITU, и при этом разность мощностей в каналах не превышает 2%, что является удовлетворительным значением при использовании планарных разветвителей для цифровых систем передачи

данных.

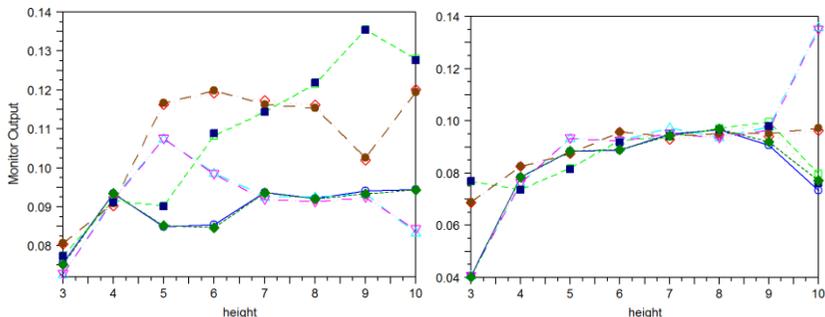


Рис. 2. Зависимость распределения мощности по каналам от высоты световедущей пленки: а) при 1310 нм, б) при 1550 нм

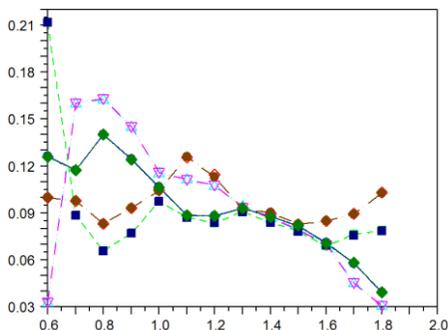


Рис. 3. Зависимость выходной мощности в разветвителе от длины волны излучения в микрометрах

Литература

1. Лопатюк А.В, Грачева А.М. Анализ прочности и ресурса оптических волокон. В сборнике: XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики Сборник трудов. В 4-х томах. 2019. С. 705-706.

© Лопатюк А.В., 2021 г.

ЭЛЕКТРОГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ЖИДКИХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

Шайхитдинов Р.З., Шахмаев Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Объектом исследований являлся водный мостик (ВМ), возникающий между двумя стеклянными сосудами с дистиллированной водой под действием приложенного постоянного высоковольтного напряжения между электродами, погруженными в жидкость. В результате проведенных исследований, начиная с работы [1], выявлен ряд особенностей водного мостика (ВМ). Так, при диаметре от 1 до 3 мм и длине до 25 мм он устойчиво существует в течение порядка одного часа в атмосфере воздуха, кислорода и азота, в то время как в среде гелия и углекислого газа наблюдаются лишь пробои разрядов между стеклянными мензурками [2]. Одной из экспериментально наблюдаемых особенностей ВМ является транспортировка жидкости через мостик; причем, с применением лазерного доплеровского анемометра обнаружено винтовое вращение внешнего слоя воды вдоль продольной оси. Установлено, что после формирования ВМ первоначально общий поток жидкости через мостик направлен от анода к катоду. По истечению нескольких минут направление потока меняется на противоположное и далее наблюдается периодический повтор инверсии за все время существования ВМ. Это периодическое реверсирование потока является установившейся чертой мостика и, как полагают [2], обусловлено гидростатическим давлением, возникающим из-за разных уровней воды в стаканчиках. Если для объяснения механизма формирования и устойчивого существования ВМ предложено несколько моделей, приведенных в [3], то относительно механизма инверсии потока нам из литературы, кроме [3], известна одна работа теоретического характера [4-Моравец].

В данной работе приводятся результаты экспериментов по исследованию направления потока жидкости (дистиллированная вода), которые показывают, что с момента формирования ВМ подбором диаметров электродов цилиндрической формы можно управлять массопереносом от анода к катоду (прямое направление). Эксперименты проводились на аналогичной установке, используемой в работах [1-3]. Дистиллированная вода объемом 60 г наливалась в чашки Петри, одна из которой была установлена на электронные весы с точностью измерений 0.01 г, а другая – на подставке с регулируемой высотой подъема. Диаметры электродов менялись от 0,2 до 6,0 мм.

На рисунке 1 приводятся временные зависимости перетекающей через ВМ массы жидкости для системы электродов с диаметрами, мм: А=1,8 мм, К=6 мм (кривая 1); А=6 мм, К=1,8 мм (кривая 2). Как видно, сразу после формирования ВМ поток жидкости через ВМ направлен от электрода с меньшим диаметром к электроду большего диаметра независимо от полярности приложенного напряжения 15 кВ.

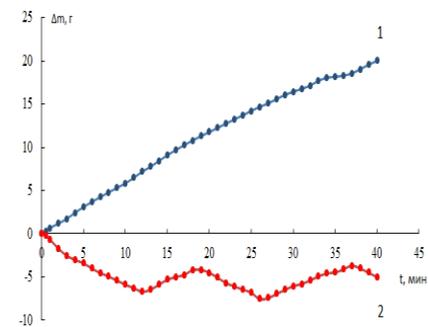


Рис. 1.

Необходимо подчеркнуть, что все эти рассуждения справедливы в случае использования электродов с гладкой поверхностью и без заострений, приводящих к инжекции зарядов. Именно по этой причине, на наш взгляд, в экспериментах других работ из-за отсутствия контроля над состоянием поверхности электродов (это видно, например, из рис. 7 [2])

наблюдались непредсказуемые направления течения жидкости через ВМ.

Направленность потока от электрода меньшего диаметра к электроду с большим диаметром мы объясняем следующими факторами. Во-первых, напряженность электрического поля, как известно, зависит от диаметра цилиндра d примерно $E \sim d^{-1}$, вследствие чего эмиссия зарядов облегчена в области сильных электрических полей. Во-вторых, при симметричных электродах (одинаковые диаметры) преимущественный поток жидкости, как показывают результаты наших экспериментов, а также других работ [1,2], направлен от анода к катоду. Это объясняется тем, что подвижность положительных ионов (H^+ и H_3O^+) примерно в два раза превышает подвижность ионов ОН-. Однако дрейфовое движение ионов не может обеспечить массоперенос жидкости в объеме, наблюдаемом в экспериментах. Поэтому мы предполагаем, что массоперенос обеспечивается увлечением молекул воды ионами. Проведенные нами расчеты показывают, что скорости увлеченных молекул уменьшаются всего лишь до 5% от движущегося иона до соседнего. Поэтому можно утверждать, что молекулы воды между ионами движутся коллективно, образуя сплошную струю. Обратный поток обусловлен аномально быстрым уходом протонов на катод, вследствие чего в чашке с катодом возникает избыточный отрицательный объемный заряд, а у электрода — слой положительного заряда. Это приводит к инверсии потока от катода к аноду.

Литература

1. E.C. Fuchs. The floating water bridge // J. Phys. D: Appl. Phys, 2007, v. 40, pp. 6112 - 6114.
2. E.C. Fuchs. Experiments in a floating water bridge // Exp. Fluids., 2009, v.48, pp. 121-131.
3. E.C. Fuchs et al. Electrically induced liquid-liquid phase transition in a floating water bridge identified by refractive index variations // Water (MDPI), 2021, v. 13(5), pp. 602-617.
4. Morawetz, K. Reversed Currents in Charged Liquid Bridges // Water, 2017, v. 9, pp. 353-360.

© Шайхитдинов Р.З., Шахмаев Р.Р., 2021 г.

СЗМ-ИССЛЕДОВАНИЯ СИНТЕТИЧЕСКИХ ОДНОЦЕПОЧЕЧНЫХ ДНК С ГОМОНУКЛЕОТИДНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬЮ

¹Кудояров Д.Ш., ¹Шарипов Т.И., ²Гарафутдинов Р.Р.

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Институт биохимии и генетики УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Олигонуклеотиды – природные или синтетические олигомерные соединения, состоящие из немногих остатков нуклеотидов (мононуклеотидов), соединённых фосфодиэфирной связью. Олигонуклеотид (от греч. *оλυος* — малый, немногий, незначительный и от лат. *nucleus* — ядро, англ. *oligonucleotide*) — короткий фрагмент ДНК или РНК, получаемый либо путём химического синтеза, либо расщеплением более длинных полинуклеотидов. В настоящее время принято считать, что олигомерная форма нуклеиновой кислоты может содержать до 20-100 нуклеотидов. Для исследования проводимости кластеров ДНК часто используют сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) [1-2]. Уже первые эксперименты с использованием СТМ показали, что это подходящий инструмент для исследования как одиночных молекул ДНК, так и кластеров молекул в монослойных пленках.

Основная идея этого исследования была в том, чтобы синтезировать олигонуклеотиды состоящие только из одного вида нуклеотида, провести серию экспериментов, измерить вольтамперные характеристики и выяснить проводимость. После чего сравнить их между собой и узнать какой тип нуклеотида вносит больший вклад в проводимость всей молекулы. Для этого мы синтезировали олигонуклеотиды с повторяющейся последовательностью, состоящие из 12 одинаковых звеньев.

В СТМ-экспериментах в качестве подложек применяли серебро, термически напыленное в вакууме на поверхность слюды. В АСМ-исследованиях подложкой служила поверхность свежего скола слюды.

Сначала в режиме прерывистого контакта получали АСМ-изображение кластеров ДНК $d(C)_{12}$ на поверхности слюды. На одном из таких АСМ-изображений (Рис. 1а) четко визуализируются объекты сферической формы, некоторые из которых представляют собой отдельные молекулы олигонуклеотидов, а другие - агрегаты, являющиеся скоплениями единичных молекул олигонуклеотидов.

Затем молекулы кластеров ДНК $d(C)_{12}$ исследовала методом сканирующей туннельной микроскопии, наносив на атомарно ровную поверхность серебра.

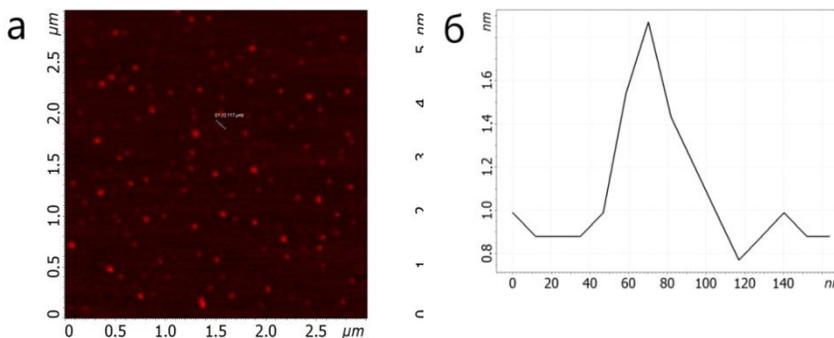


Рис. 1. а) АСМ–изображение поверхности слюды с нанесенными олигонуклеотидами; б) профиль сечения кластера олигонуклеотида, выполненного по линии проведенной на рисунке 1а

Литература

1. Шарипов Т.И., Гарафутдинов Р.Р., Бахтизин Р.З. Исследование одноцепочечных ДНК с повторяющейся нуклеотидной последовательностью методами сканирующей зондовой микроскопии. // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2020. Том 84. № 5. С. 675-678.
2. Быков В.А., Лазарев М.И., Саунин С.А. Сканирующая зондовая микроскопия для науки и промышленности. // Электроника: наука, технология, бизнес. – 2008. – № 5. – С. 7 – 14.

© Кудояров Д.Ш., Шарипов Т.И., Гарафутдинов Р.Р., 2021 г.

РАЗРАБОТКА УСТРОЙСТВА СБОРА И ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ С ДАТЧИКОВ ТЕМПЕРАТУРЫ И ВЛАЖНОСТИ НА ЖК ДИСПЛЕЙ

Кузьмин Г.В., Шарипов Т.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Разрабатывая данное устройство, собирающее и передающее данные, получаем простую схему, называющуюся метеостанция. Больше всего эта система подходит под домашнюю метеостанцию.

Домашняя метеостанция — это современный измерительный прибор, который следит за изменением микроклимата в помещении и погодой за окном. Устройство состоит из двух отдельных блоков, синхронизированных друг с другом. Основной блок — сама плата и дисплей. На экране отображается информация о температуре и влажности воздуха. Основной блок всегда устанавливают внутри помещения. Второй блок — внешний датчик. Его следует устанавливать снаружи, так как он отвечает за сбор данных.

Для вывода температуры на LCD дисплей с датчика DHT11, мы использовали плату Arduino UNO. И собрали схему, которая показана ниже (рис. 1).

Прошивка Arduino при включении вызывает функцию `setup`. Функция `setup` вызывается лишь раз, при каждом запуске платы. Это место идеально подходит для инициализации (задания начальных значений) переменных, установки режимов пинов (ввод/вывод), задания соответствия подключенных датчиков/сервоприводов/прочего с пинами.

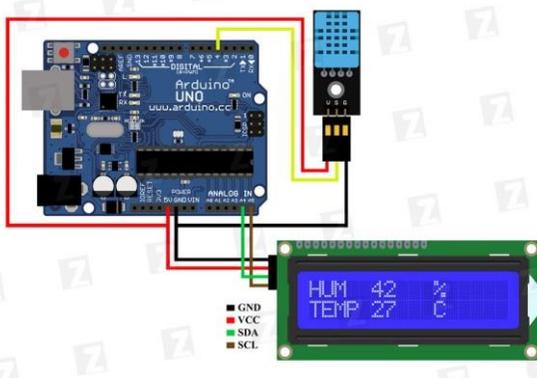


Рис. 1. Схема подключения устройства.
После сборки схемы, загрузили в микроконтроллер скетч.

Скетч - это программа, написанная для платформы Arduino и имеющая определенную структуру (рис.2.). Скетч обязательно содержит 2 функции: функцию setup и функцию loop.

```
#include <Wire.h> // Добавляем необходимые библиотеки
#include <LiquidCrystal_I2C.h>
#include "DHT.h"
#define DHTPIN A0 // к какому пину будет подключен сигнальный выход датчика
//выбор используемого датчика
#define DHTTYPE DHT11 // DHT 11
//#define DHTTYPE DHT22 // DHT 22 (AM2302)
//#define DHTTYPE DHT21 // DHT 21 (AM2301)
//инициализация датчика
DHT dht(DHTPIN, DHTTYPE);
byte degree[8] = // кодируем символ градуса
{
  000111,
  000101,
  000111,
  000000,
  000000,
  000000,
  000000,
  000000,
};
LiquidCrystal_I2C lcd(0x27,16,2); // Задаем адрес и размерность дисплея
void setup()
```

Рис. 2. Скетч

После выполнения функции setup идет циклический вызов функции loop (т.е. сразу после выхода из функции setup, выполняется функция loop, после выхода из неё, она же вызывается снова. Процесс продолжается пока питание не будет отключено.)

Мы рассмотрели, как сделать простую домашнюю метеостанцию на Arduino UNO с LCD дисплеем 1602a и датчиком температуры и влажности воздуха DHT11. Данную разработку можно доработать, добавив к схеме еще больше датчиков для анализа метеоусловий. Также можно сделать беспроводную метеостанцию на Arduino UNO, используя блютуз или радио модули для передачи информации на расстояние.

Литература

1. Подключение датчика DHT11 к Arduino UNO. [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://tsarevstudio.ru/blog/hobby/humidity_and_temp_with_dht11_and_arduinouno.html
2. Плата Arduino UNO R3: схема, описание, подключение устройств [https://www.arduino.cc/en/Main/ArduinoBoardUno/](https://www.arduino.cc/en/Main/ArduinoBoardUno)
3. Структура скетчей. [Электронный ресурс] http://zelectro.cc/what_is_sketch/

© Кузьмин Г.В., Шарипов Т.И., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ВРЕМЕНИ ПРОГРЕВА РАСТВОРА ДНК НА КАЧЕСТВО ПОЛУЧАЕМЫХ АСМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ

Ахметов Р.Р., Шарипов Т.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время атомно-силовая микроскопия (АСМ) является одним из основных методов исследований в нанофизике. Она позволяет выполнять экспериментальные исследования на наномасштабном уровне. АСМ позволяет исследовать топографию различных объектов, в том числе наноструктур [1, 2], а также изучать их свойства [3]. Объектами могут служить как твердотельные материалы, так и биологические объекты различной природы, а именно от биополимерных молекул до клеток, вирусов и бактерий.

Одним из важнейших и, возможно, наиболее часто исследуемых биомолекул являются молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК). Молекулы ДНК являются одним из перспективных материалов для нанoeлектроники, поскольку могут играть роль нанопроводов благодаря своим уникальным размерам: при диаметре всего 2 нм их длина может достигать несколько единиц микрон. Для изучения физических свойств молекулы ДНК, а именно электропроводности, необходимо научиться осаждать отдельные молекулы на поверхность гладкой подложки в единичном состоянии с тем, чтобы была возможность беспрепятственно подвести электрические контакты к концам исследуемой молекулы и пропустить через нее электрический ток. Поэтому перед нами ставилась первоначальная задача - получить качественное изображение молекул ДНК, осажденных на подложку из слюды.

В работе исследовалось два образца, отличающихся способом приготовления. Образец №1 был приготовлен следующим образом. Мы взяли раствор ДНК с концентрацией $23,7 \cdot 10^{-5}$ М и разбавили его бидистиллированной водой milli-Q до получения концентрации $23,7 \cdot 10^{-7}$ М. После этого эппендорф с раствором встряхивали для перемешивания и прогревали в течение 45 сек при температуре 80°C с целью деглобулизации. Затем 12 мкл полученного раствора наносили на свежий скол слюды. И сушили в атмосфере воздуха в течение 90 мин. После чего исследовали на атомно-силовом микроскопе NtegraPrima в полуконтактном режиме с кантилевером жесткостью 11,5 Н/м.

Образец №2: эппендорф с раствором ДНК в той же концентрации, что и образец №1, прогревали теперь в течение 90 сек. Затем 12 мкл

полученного раствора наносили на свежий скол слюды, сушили в атмосфере воздуха в течение 120 мин. После чего исследовали на атомно-силовом микроскопе при тех же условиях.

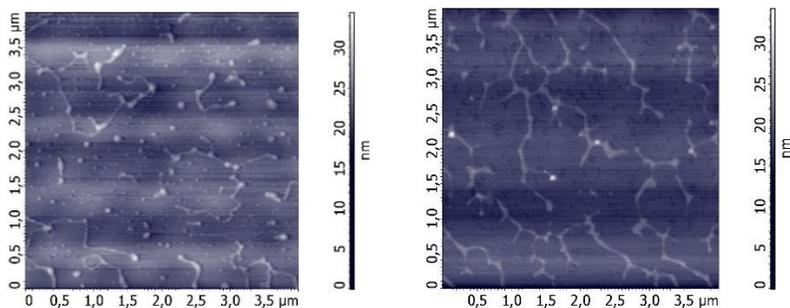


Рис. 1. АСМ-изображение образца №1 (а) и образца №2 (б)

На полученных АСМ-изображениях отчетливо визуализируются как глобулы, так и отдельные «ниточки» молекул ДНК. Поверхностная плотность глобул на АСМ-изображении образца №2 (рис. 1б) значительно меньше, чем на АСМ-изображении образца №1 (рис. 1а). На АСМ-изображении образца №2 форма молекул имеет резкие изломы (вместо изгибов «нитей» образца №1) и прямолинейные участки. Объяснения этому пока найти не удалось.

Литература

1. T I Sharipov, S. Santer, A. Kopyshv, I T Amangulova, R Z Bakhtizin. Scanning probe microscopy/spectroscopy of oligonucleotides with a homonucleotide sequence. // Fifth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials, Vladivostok, Russia, July 30 – August 03, 2020: Proceedings. – Vladivostok : Dalnauka Publishing, 2020. – p.46.
2. Шарипов Т.И., Гарафутдинов Р.Р., Бахтизин Р.З. Исследование одноцепочечных ДНК с повторяющейся нуклеотидной последовательностью методами сканирующей зондовой микроскопии. // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2020. Том 84. № 5. С. 675-678. DOI: 10.31857/S0367676520050336.
3. D. Porath, A. Bezryadin, S. de Vries and C. Dekker, Direct measurement of electrical transport through DNA molecules, Nature 403 (2000) 635-638.

© Ахметов Р.Р., Шарипов Т.И., 2021 г.

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ДЕГРАДАЦИОННЫХ И ФЛУКТУАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В МЕТАЛЛАХ

Захаров Ю.А., Гоц С.С., Бахтизин Р.З., Шарипов Т.И.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Раздельное исследование деградационных и флуктуационных процессов в электротехнике и радиоэлектронике важно для оценки надёжности и долговечности приборов и стабильности их работы. Большой интерес представляет имитационное моделирование этих процессов на Солнце и в звездных системах. В [1] рассмотрен метод исследования флуктуационных процессов в нитях накала ламп, при использовании которого деградационные процессы и флуктуации напряжения источника питания не влияют на результаты измерений. Для исследования деградационных процессов в [2] использован метод компенсации напряжения. На рисунке показаны зависимости относительного изменения тока для деградационных и флуктуационных процессов.

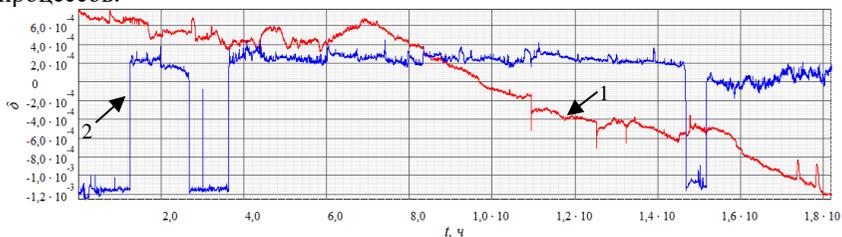


Рис. 1. Относительное изменение тока для деградационного (1) и флуктуационного (2) процессов в нитях накала 25 Вт лампы

Рассмотренные в [1-2] методы могут использоваться для имитационного моделирования данных процессов в металлах.

Литература

1. Захаров Ю.А., Гоц С.С., Бахтизин Р.З. Мостовой метод исследования спектров токовых флуктуаций в вольфрамовых нитях накала в диапазоне частот $1,5 \cdot 10^{-5} - 5 \cdot 10^{-1}$ Гц // Измерительная техника. 2021. № 5. С. 18-25.
2. Захаров Ю.А., Гоц С.С., Бахтизин Р.З., Шарипов Т.И. Деградационные процессы в вольфрамовых нитях накала при высоких температурах // Всероссийская конференция «XXXVII Сибирский теплофизический семинар»: тезисы докладов. – Новосибирск: Институт теплофизики СО РАН. 2021. С. 229.

© Захаров Ю.А., Гоц С.С., Бахтизин Р.З., Шарипов Т.И., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ КОНЦЕНТРАЦИИ РАСТВОРА АСФАЛЬТЕНОВ НА РАЗМЕРЫ ПОЛУЧАЕМЫХ КЛАСТЕРОВ

Некрасова Т.В., Шарипов Т.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Асфальтены - наиболее высокомолекулярные вещества из всех выделенных компонентов нефти, состоящие на 90 – 95% из углеводорода. Они имеют твёрдую хрупкую структуру чёрного или бурого цвета. Содержание асфальтенов в нефтях колеблется от 1 до 20%. Молекулы асфальтенов легко растворяются в толуоле, бензоле, хлороформе, а также в сероуглероде.

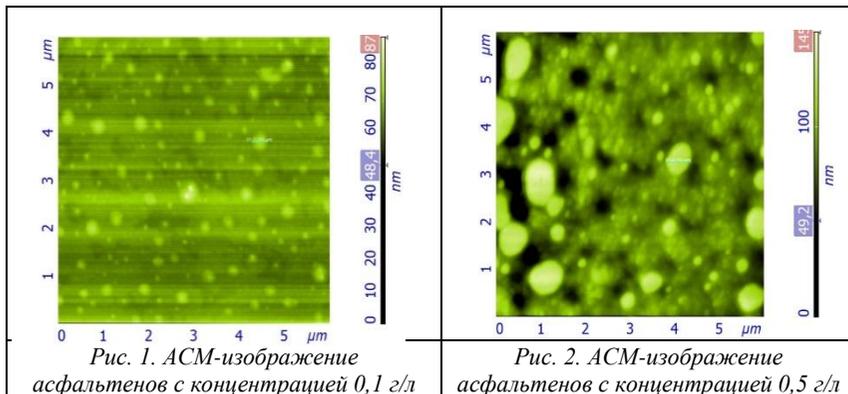
Одним из методов исследования поверхности как кластеров, так и отдельных молекул асфальтенов является сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ), в частности, атомно–силовая микроскопия (АСМ). Этот метод уникален тем, что он позволяет со сверхвысоким разрешением наблюдать надмолекулярную структуру различных объектов, вплоть до отдельных молекул. С его помощью можно исследовать поверхности твёрдых тел, органических материалов, в частности, углеводородов.

В данной работе была исследована поверхностная структура асфальтенов с помощью атомно–силового микроскопа. Целью исследования является выявление и сравнение кластеров асфальтенов в образцах, полученных при двух разных концентрациях.

В этом эксперименте были взяты растворы асфальтенов исходного вакуумного остатка висбрекинга КИШ 42 (№ 3) с концентрациями 0,1 г/л и 0,5 г/л. В качестве подложки была использована слюда. Метод получения тонкой пленки асфальтенов на слюдяной подложке заключался в следующем: в дистиллированную воду опускали подложку, затем на поверхность воды наносили 15 мкл раствора асфальтенов в толуоле. После образования на поверхности воды пленки подложку, ориентированную горизонтально в пространстве, медленно извлекали из жидкости в вертикальном направлении вверх через нанослой асфальтенов. Такую подложку далее помещали в чашку Петри и сушили 90 минут до полного высыхания. После чего полученный образец исследовали на атомно – силовом микроскопе. Готовые АСМ–изображения приведены на рисунках 1 и 2.

На АСМ–изображениях (Рис. 1 и 2) отчетливо видны различные объекты. На поверхности имеются скопления светлых пятен, эти светлые пятна являются кластерами асфальтенов.

Измерив кластер первого изображения, находим его высоту, равную 0,33 мкм, и ширину, равную 0,35 мкм. Точно также получаем размеры на втором изображении, где высота равна 0,60 мкм, а ширина – 0,55 мкм. Далее можно увидеть, что скопление объектов на рисунке 2 значительно превосходит по количеству объектов на рисунке 1.



На основании проделанного эксперимента можно сделать вывод, что размер кластера имеет прямую зависимость от концентрации приготовленного раствора, кластеры с концентрацией 0,1 г/л имеют

Литература

1. T I Sharipov, G.F. Gilyazova, R Z Bakhtizin. AFM visualization of asphaltene surface structure. // Fifth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials, Vladivostok, Russia, July 30 – August 03, 2020: Proceedings. – Vladivostok :Dalnauka Publishing, 2020. – p.64.
2. И.С. Кутлубаев, Т.И. Шарипов, М.Ю. Долوماتов, Т.Н. Нурахметов, Ж.М. Салиходжа, Р.З. Бахтизин. Визуализация единичных молекул асфальтенов. // Вестник Башкирского университета. 2020. Том 25. №2. С. 257-261. DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2020.2.5.
3. Schuler B., Meyer G, Pena D., Mullins O. C., Gross L. // Journal of the American Chemical Society. 2015. 137 (31). P. 9870-9876.

© Некрасова Т.В., Шарипов Т.И., 2021 г.

СЗМ-ИССЛЕДОВАНИЕ ТОПОГРАФИИ ПОВЕРХНОСТИ ВЫСОКООРИЕНТИРОВАННОГО ПИРОЛИТИЧЕСКОГО ГРАФИТА

Исхакова В.Ш., Шарипов Т.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ) всё чаще привлекает внимание ученых. Ведь появление СЗМ открыло новые возможности для исследования объектов в самых различных областях науки [1].

Высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ) был выбран объектом нашего исследования, поскольку является одним из немногих образцов, изображение поверхности которого в нанометровом масштабе можно достаточно легко получить даже начинающим ученым в области зондовой микроскопии. А также работать с ВОПГ полезно для получения навыков работы на СЗМ.

В данной работе одним из методов СЗМ, а именно сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), была исследована поверхность ВОПГ. Принцип работы СТМ основан на явлении туннелирования электронов через узкий потенциальный барьер междуметаллическим зондом и проводящим образцом во внешнем электрическом поле.

На поверхности графита часто наблюдаются полосы с высотой 1 – 2 Å и шириной до 100 нм, которые соответствуют рядам частичных дислокаций с вектором Бюргерса, лежащим в плоскости графитовых слоев. Полная дислокация в графите расщепляется на две частичных, между которыми образуется дефект упаковки. При сканировании игла может оказывать значительное давление на поверхность, особенно, если процесс сканирования происходит при большом токе (> 1 нА) и маленьком напряжении (< 40 мВ). Под силовым воздействием иглы дислокационные полосы могут перемещаться вдоль поверхности графита [2].

После проведения СТМ-исследований мы получили СТМ-изображения топографии поверхности высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ). На них хорошо идентифицируются специфичные для данного материала поверхностные особенности: ступени и террасы (рис. 1). Ступени образуются на поверхности исследуемого образца графита в результате его скола. На поверхности графита наблюдаются многочисленные ступени, высота которых несколько единиц или десятков атомных слоев графита.

В результате выполненной работы были получены необходимые навыки работы на микроскопе SolverP47 и изучена топография

поверхности ВОПГ. Измерены некоторые геометрические параметры ступеней и террас.

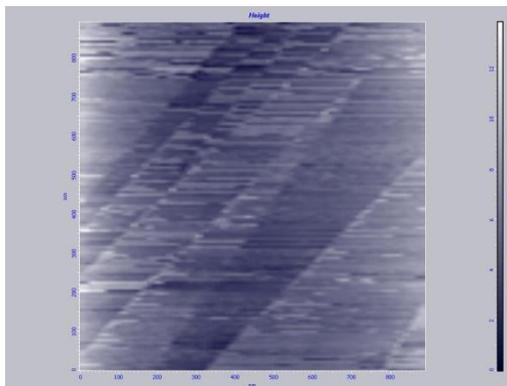


Рис. 1. СТМ-изображение фрагмента поверхности ВОПГ

Литература

1. Т. Шарипов, А. Копышев, С. Лёбнер, Й. Йелкен, М. Соколовский, П.Арья, Р. Бахтизин, С. Сангер. Влияние условий приготовления образца на структурирование длинных молекул.// *Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании: тезисы докладов XI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых*(г. Уфа, 11-14 ноября 2020 г.)/ отв. ред. Е.Г. Екомасов, Л.А. Габдрахманова.- Уфа: НИЦ «АЭРЕРНА», 2020.- с. 105-106.
2. О.В. Синицына, Г.Б. Мешков, О.И. Киселева, И.В. Яминский. Визуализация атомной решетки графита.С.

© Исхакова В.Ш., Шарипов Т.И. 2021 г.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ
ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ГРАФЕНА,
ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ГИДРОКСОГРУППАМИ**

Беленков М.Е., Чернов В.М.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Химическая адсорбция неуглеродных атомов и молекулярных групп на поверхности графеновых слоев позволяет модифицировать их свойства для различных практических приложений, в первую очередь для применений в области нанoeлектроники. Свойства функционализованного графена также изменяются в результате формирования структуры различных полиморфных модификаций [1-3]. В данной работе проведены первопринципные расчеты структуры и электронных свойств ряда полиморфных разновидностей гексагонального графена функционализованного гидроксогруппами.

Моделирование было выполнено методом теории функционала плотности. В результате было установлено, что возможно устойчивое существование пяти структурных типов OH-L_6 графена, отличающихся порядком присоединения гидроксильных групп к графеновому слою. Максимальной энергией сублимации равной 18,93 эВ/(СОН) обладает слой $\text{COH-L}_6\text{-T1}$. Именно эта структурная разновидность должна быть наиболее термически устойчивой. Все COH-L_6 слои имеют запрещенную зону на уровне энергии Ферми, изменяющуюся в диапазоне от 3,02 до 4,56 эВ. Новые структурные разновидности COH-L_6 графена могут найти практическое применение для создания нанoeлектронных устройств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90002. Acknowledgments: The reported study was funded by RFBR, project number 20-32-90002.

Литература

1. Belenkov, M.E., Chernov, V.M. Dependence of the electronic and crystal structure of a functionalized graphene on the concentration of chemically adsorbed fluorine // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2020, V. 11 (6), pp. 685-689.
2. Беленков, М.Е., Чернов, В.М. Ab initio расчеты кристаллической и электронной структуры полиморфов 5-7 фторографена // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*, 2020, Т. 12, С. 326-337.

© Беленков М.Е., Чернов В.М. 2021 г.

ВЫСОКАЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ПЛЕНОК ПММА/ПММА

Алтыншина Г.Р.¹, Лачинов А.Н.^{1,2}

¹Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

²Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

В докладе представлены результаты измерения аномально высокой проводимости, возникающей вдоль границы раздела двух диэлектрических пленок полиметилметакрилата (ПММА) и влияния на нее поверхностного дипольного упорядочения. Недавно [1] были обнаружены аномально высокие значения электропроводности вдоль границы раздела ПММА/ПММА. Аналогичные результаты были получены на полимерах другого класса [2]. Ранее была высказана гипотеза о влиянии поверхностной поляризации функциональных групп полимера на формирование квазидвумерного электронного газа вдоль границы раздела [2]. В настоящей работе гипотеза была проверена на ПММА, молекула которого имеет боковую функциональную группу с большим дипольным моментом. Изменение поверхностной поляризации проводили путем введения в полимерную пленку ПММА низкомолекулярного соединения 3,3-дифенилфталид-4',4''-дикарбоновой кислоты (ДДК), имеющего большой дипольный момент. Концентрацию добавки варьировали в пределах 1 – 15% от веса полимера. Образцы представляли собой двухслойную структуру общей толщиной до 1 мкм. с внедренными в область границы раздела медными электродами. Исследования проводились классическим методом вольт-амперных характеристик (ВАХ).

Анализ ВАХ проведен в модели инъекционных токов. Получена информация о подвижностях носителей заряда, которая, как и проводимость, оказалась аномально высокой. Установлено, что наибольшие значения проводимости наблюдаются при допировании нижней пленки соединениями с большим дипольным моментом. Полученные результаты интерпретируются с точки зрения изменения поверхностной поляризации пленок вдоль границы раздела полимер/полимер. В докладе обсуждаются возможные применения нового явления и приводятся значения подвижностей и концентрации носителей заряда.

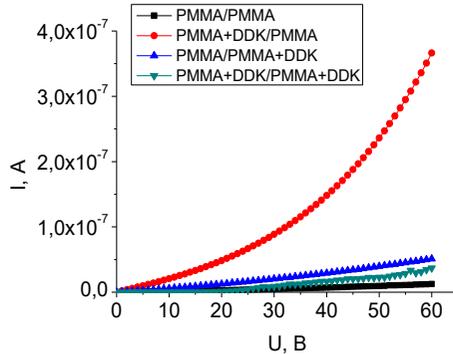


Рис. 1. Влияние допирования на вольт-амперные характеристики измеренные вдоль границы раздела ПММА/ПММА. На вставке приведена маркировка кривых для разных комбинаций допированных слоев

Литература

1. А.Н. Лачинов 1, 2, Г.Р. Алтыншина 1, Г.Ш. Байбулова 2, М.Ф. Киан 2, А.Р. Юсупов //ФТТ, 2021, том 63, вып. 4, с. 554-558.
2. R.M.Gadiev, A.N.Lachinov, V.M.Kornilov, and others // Appl. Phys. Lett. (2011) **98**, 173305.

© Алтыншина Г.Р., Лачинов А.Н., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЧ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК $(\text{Co}_{0,51}\text{Fe}_{0,49})_x(\text{MgO}_2)_y$

Котов Л.Н.¹, Ласёк М.П.¹, Харитонов А.И.¹,
Калинин Ю.В.², Ситников А.В.²

¹Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина,
г. Сыктывкар, Россия

²Воронежский государственный технический университет,
г. Воронеж, Россия

В этих тезисах сообщается, что наблюдалось положительное СВЧ магнитосопротивление (M) в композитных пленках состава $(\text{Co}_{0,51}\text{Fe}_{0,49})_{0,21}(\text{MgO}_2)_{0,79}$. M определялось по формуле:

$$M = \frac{(Z_H - Z_0)}{(Z_0)} \quad (1)$$

$|Z_H|$ и $|Z_0|$ - это абсолютные значения импедансов в статическом магнитном поле и в отсутствии магнитного поля соответственно. Исследуемые пленки были изготовлены методом ионно-лучевого напыления в атмосфере аргона при давлении 0,04 Па. Положительное СВЧ магнитосопротивление наблюдалось, когда ток параллелен магнитному полю, а магнитное поле находится в плоскости пленки. Элементный состав пленок был определен с помощью сканирующего электронного микроскопа Tescan Mira 3. Для исследования спектров СВЧ магнитосопротивления использовались: анализатор спектра (INSTEK GSP-7830), генератор качающейся частоты (ГКЧ), компланарная линия и постоянный электромагнит. Диапазон частот составлял от 10 МГц до 3 ГГц. Спектры измерялись в магнитном поле напряженностью от 0 до 7 кЭ. Пленки были помещены в разрыв проводника компланарной линии. Сама компланарная линия была соединена с ГКЧ и анализатором спектра. Все измерения были проведены при комнатной температуре.

Максимальный рост магнитосопротивления составил порядка 100% от изначального значения. Максимум магнитосопротивления наблюдался при частоте равной 0,7 ГГц. Дальнейшее увеличение магнитного поля приводило к росту магнитосопротивления в диапазоне частот от 0,5 до 1 ГГц и от 1,6 до 2,5 ГГц.

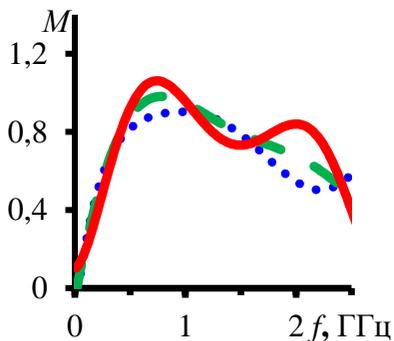


Рис. 1. График зависимости магнитосопротивления M от частоты f для композитной пленки $(\text{Co}_{0,51}\text{Fe}_{0,49})\text{x}(\text{MgO}_2)_\text{y}$, где $x=0,21$, $y=0,79$

Исследование выполнено за счет гранта Российского Научного Фонда (проект №21-72-20048).

Литература

1. Магнитная структура и ВЧ, СВЧ электрические потери в композитных плёнках / Л.Н. Котов, М.П. Ласёк, О.А. Кирпичёва и др. // Вестник Челябинского государственного университета. Серия Физика, вып. 21. – 2015. – № 22 (377). – С. 44–48.

© Котов Л.Н., Ласёк М.П., Харитонова А.И.,
Калинин Ю.В., Ситников А.В., 2021 г.

ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И РАСЧЕТ ПОДВИЖНОСТИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛЕВЫХ ТРАНЗИСТОРАХ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК PANI

Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Активно исследуются механизм транспорта заряда в тонких органических пленках и полимерные тонкие пленки с повышенной проводимостью [1-2].

Транзисторы изготовлены на подложке в виде стеклянной пластины с омическим контактом оксида индия-олова (ИТО). С диэлектрическим слоем из оксида алюминия. Поверх AlO_x наносилась пленка PANI или его производных методом центрифугирования из раствора. Сверху были нанесены алюминиевые электроды, зазор между электродами 50 мкм.

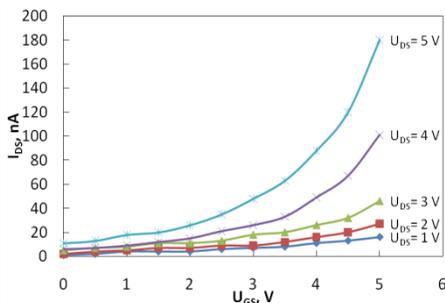


Рис. 1. Семейство передаточных ВАХ транзистора

Получены и проанализированы выходные и передаточные вольтамперные характеристики (ВАХ) (Рис. 1). Подвижность носителей заряда равна $0,023 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. Зависимости имеют нелинейный характер в диапазоне напряжений затвора как у открытого полевого транзистора.

Литература

1. Salikhov R.B., Lachinov A.N., Rakhmeyev R.G. Mechanisms of conductivity in metal-polymer-si thin film structures // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 2007, v. 467, № 1, pp. 85-92.
2. Salikhov R.B., Lachinov A.N., Rakhmееv R.G. Conduction mechanisms in silicon-polymer-metal heterostructures // *Semiconductors*, 2007, v. 41, № 10, pp. 1165-1169.

© Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н., 2021 г.

ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛЕВЫХ ТРАНЗИСТОРОВ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК C60

Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Изучение механизмов транспорта заряда в тонких органических пленках и отработка технологии получения полимерных слоев с повышенной проводимостью [1-2] – необходимые условия для развития органической электроники.

Транзисторы изготовлены на подложке в виде стеклянной пластины с пленкой ИТО. На слой ИТО наносился слой оксида алюминия, который использовался в качестве подзатворного диэлектрика (AlO_x). Поверх AlO_x наносилась пленка полимер PANI или его производных методом центрифугирования из раствора. Сверху были нанесены алюминиевые электроды, зазор между электродами 50 мкм.

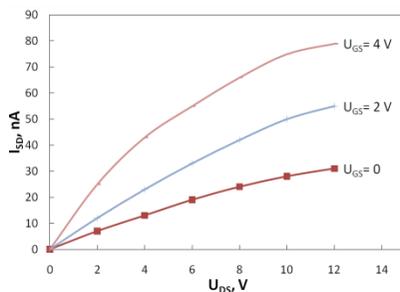


Рис. 1. Семейство выходных ВАХ транзистора

Получены и проанализированы выходные и передаточные вольтамперные характеристики (ВАХ) (Рис. 1). Зависимости имеют нелинейный характер во всем диапазоне приложенных к затвору напряжений и характерны для нормально открытого полевого транзистора.

Литература

1. Lachinov A.N., Salikhov R.B., Bunakov A.A., Tameev A.R. Charge carriers generation in thin polymer films by weak external influences // *Nonlinear Optics Quantum Optics*, 2005, v. 32, № 1-3, pp. 13-20.
2. Салихов Р.Б., Лачинов А.Н., Рахмеев Р.Г. Транспортный слой на границе раздела двух полимерных пленок // *Письма в Журнал технической физики*, 2008, v. 34, № 11, с. 88-94.

© Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н., 2021 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЛАЖНОСТИ ВОЗДУХА СЕНСОРАМИ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК PANI

Бадретдинов Б.Р., Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Наибольшее распространение получили химические сенсоры с органическими полимерными сорбентами [1]. Химические свойства ПАНИ дают перспективы для создания из полимера различные типы сенсоров [2].

На подложку из ситалла были нанесены алюминиевые контакты с зазором 50 мкм. В области зазора методом центрифугирования была сформирована тонкая пленка производного полианилина, толщина которой 300 нм.

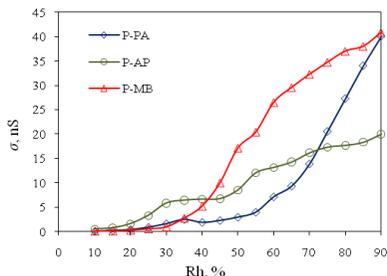


Рис. 1. Зависимость проводимости пленки от влажности воздуха

Были получены зависимости проводимости пленки от влажности (Рис. 1). Основное преимущество полученных сенсоров влажности (H_2O) заключается в высокой крутизне характеристик.

Литература

1. Salikhov R.B., Biglova Yu.N., Mullagaliev I.N., Salikhov T.R., Mustafin A.G. Functionalized polyanilines: influence of the surface morphology on the electrophysical and sensory properties of thin films based on them // Письма о материалах, 2021, в. 11, № 2 (42), pp. 140-145.
2. Салихов Р.Б., Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н. Электронные сенсоры на основе тонких полимерных пленок // В сборнике: Современные проблемы физики. Межвузовский сборник научных статей, посвященный 100-летию открытия Уфимского Физического института. Ответственный редактор М.Х. Балапанов. Уфа, 2019, с. 191-196.

© Бадретдинов Б.Р., Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б., 2021 г.

СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИАНИЛИНА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ПАРАМИ АММИАКА

Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Зиннатулина А.А.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Распространены химические сенсоры с органическими полимерными сорбентами [1-2]. В производствах востребованы приборы для измерения концентрации паров газов и контроля климата[3].

На подложку из ситалла были нанесены алюминиевые контакты с зазором 50 мкм. В области зазора была сформирована тонкая пленка производного полианилина, толщина которой 300 нм.

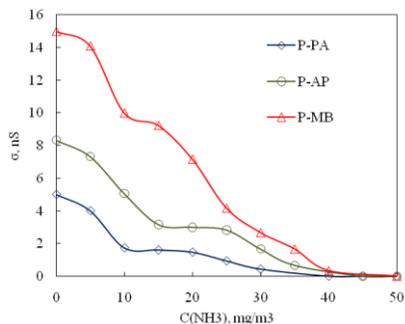


Рис. 1. Зависимость проводимости пленки от концентрации NH₃

Были получены зависимости проводимости пленки от концентрации паров аммиака. К достоинствам полученных абсорбционных датчиков NH₃ на основе пленок полианилина следует отнести малый гистерезис.

Литература

1. Salikhov R.B., Salikhov T.R. Charge transport in thin polymer films // Письма о материалах, 2015, в. 5, № 4 (20), pp. 442-447.
2. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б. Разработка средств автоматизации с использованием WI-FI модулей ESP8266 И LPWAN технологий // Электротехнические и информационные комплексы и системы, 2017, т. 13, № 4, с. 98-108.
3. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б. Информационно-измерительная система дистанционного контроля параметров микроклимата // Электротехнические и информационные комплексы и системы, 2016, т. 12, № 3, с. 91-99.

© Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Зиннатулина А.А., 2021 г.

ФОТОТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ФУЛЛЕРЕНА: РАСЧЕТ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ

Салихов Р.Б., Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последние годы активно исследуются фототранзисторы на основе органические полимеров [1-2].

Для изготовления фототранзисторов были использованы в качестве подложки стекло со слоем ИТО, который играет роль затвора. Сверху была нанесена пленка полианилина. Полианилин находился в непроводящем состоянии и выступал в качестве подзатворного диэлектрика. Следующим полимером наносился слой пирролидинофуллерена 1 толщиной 300 нм. Затем были нанесены два алюминиевых электрода сток и исток с зазором 50 мкм.

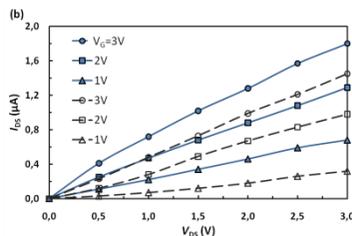


Рис. 1. Семейство передаточных ВАХ транзистора

Чувствительность R можно рассчитать по следующей формуле:

$$R = I_{ph} P_{opt} = (I_{illum} - I_{dark}) / E_{opt} \cdot a \quad (4)$$

где E_{opt} - плотность мощности падающего излучения, а - область устройства, доступная падающему излучению.

В ходе работы были измерены вольтамперные характеристики и параметры созданных фототранзисторов. Подвижности носителей заряда составили $2,3 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. Оценка чувствительности по формуле (1) дает значения 180 мкА/Вт . Исследование показало перспективность создания фототранзисторов на основе органических материалов.

Литература

1. Lachinov A.N., Salikhov R.B., Bunakov A.A., Tameev A.R. Charge carriers generation in thin polymer films by weak external influences // *Nonlinear Optics Quantum Optics*, 2005, v. 32, № 1-3, pp. 13-20.
2. Салихов Р.Б., Лачинов А.Н., Рахмеев Р.Г. Транспортный слой на границе раздела двух полимерных пленок // *Письма в Журнал технической физики*, 2008, v. 34, № 11, с. 88-94.

© Салихов Р.Б., Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., 2021 г.

ПОЛЕВЫЕ ФОТОТРАНЗИСТОРЫ С АКТИВНЫМ СЛОЕМ ПОЛИИНДОЛА: РАСЧЕТ ПОДВИЖНОСТИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б., Андрианова А.Н.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Полимерная электроника – связана с созданием новых электронных устройств, базовыми элементами которой являются органические тонкопленочные полевые транзисторы и фотовольтаические ячейки. В последние годы активно исследуются фототранзисторы на основе органические полимеров [1-2].

Для изготовления фототранзисторов были использованы стеклянные пластины с омическим контактом в виде ИТО. На слой ИТО наносилась пленка оксида алюминия (AlO_x). Подложки отжигались при $T= 350$ °С. Затем наносился слой органического соединения полииндола, изменяющий свои электрофизические свойства под действием ультрафиолетового облучение. Сверху были нанесены алюминиевые электроды с зазором 50 мкм.

$$I_{DS} = (W/L)\mu C(U_G - U_{th})U_{DS}, \quad (1)$$

где W — ширина канала, L — длина канала, μ – подвижность, C — емкость на квадрат площади подзатворного диэлектрика AlO_x (для толщины 300 nm $C= 8,9$ nF/cm²), U_G — напряжение на затворе, U_{DS} – напряжение между стоком и истоком, U_{th} — пороговое напряжение.

В ходе работы были измерены вольтамперные характеристики и основные параметры созданных фототранзисторов. Рассчитана подвижность носителей заряда по формуле (1), которая равна 0,016 cm²/V*s, полученное значение сопоставимо с аналогичными данными. Исследование показало перспективность создания фототранзисторов на основе органических материалов.

Литература

1. Salikhov R.B., Lachinov A.N., Rakhmeyev R.G. Mechanisms of conductivity in metal-polymer-si thin film structures // Molecular Crystals and Liquid Crystals, 2007, v. 467, № 1, pp. 85-92.
2. Salikhov R.B., Lachinov A.N., Rakhmeev R.G. Conduction mechanisms in silicon-polymer-metal heterostructures // Semiconductors, 2007, v. 41, № 10, pp. 1165-1169.

© Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б., Андрианова А.Н., 2021 г.

УПРАВЛЕНИЕ МИКРОКЛИМАТОМ В СМАРТ-ТЕПЛИЦАХ

Зиннатулина А.А., Салихов Р.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Основные системы, используемые в смарт-теплице включают в себя коммуникационную технологию, ирригационные системы, материалы обработки, клапаны и насосы, а также систему управления. Приложение позволяет удаленно следить за работой теплицы, оптимизировать энергозатраты и увеличить производительность.

В качестве датчиков влажности воздуха нами были использованы полимерные датчики собственной разработки на основе тонких пленок полианилина. Были использованы датчики двух типов: резисторные и транзисторные. Датчики взаимодействуют с хостом, например, Arduino, использующий собственный протокол. В связи с тем, что датчик производит измерения только по запросу, энергоэффективность системы увеличивается. Благодаря управлению микроклиматом в смарт-теплицах процесс выращивания растений становится более организованным, при этом возрастает экономичность и повышается урожайность. Датчики влажности грунта и атмосферы, а также датчики температуры регулярно отслеживают показания. Данные показания обрабатываются в плате Arduino Uno и выдаются команды, согласно загруженной в неё программе. Программа содержит два условия и бесконечный цикл. Если температура воздуха меньше установленного значения, то подаётся команда на включение через электромагнитное реле керамического нагревателя и кулера. Под действием конвекции воздух начинает равномерно прогреваться, когда воздух прогреется до нужной температуры, то подаётся команда на отключения нагревателя через реле. Если влажность почвы будет ниже установленного значения, то также подаётся команда на реле, где запускается насос для полива растений и увлажнения почвы, пока влажность не повысится до нужного значения.

Литература

1. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б. Информационно-измерительная система дистанционного контроля параметров микроклимата // Электротехнические и информационные комплексы и системы. 2016. Т. 12. № 3. с. 91-99.
2. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б., Исследование возможности применения информационно-измерительных технологий и интернета вещей в агропромышленном комплексе // Электротехнические и информационные комплексы и системы. 2017. Т. 13. № 2. с. 85-95.

© Зиннатулина А.А., Салихов Р.Б., 2021 г.

ФОТОТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК НОВЫХ ФУЛЛЕРЕН ПРОИЗВОДНЫХ

Остальцова А.Д., Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

На основе фотохромных гибридных молекул изготовлены светорегулируемые органические полевые транзисторы, которые продемонстрировали достаточно высокую светочувствительность и чувствительность, быструю реакцию на облучение. Эти результаты представляют практический интерес для создания ячеек оптической памяти, оптронов и фотосенсоров [1].

Исследование вольт-амперных характеристик изготовленных транзисторов показало, что в отсутствие облучения токи в фототранзисторах не превышают 1 нА или имеют такой же порядок величины. При облучении УФ-светом (350 нм) в поле зазора транзистора ток сток-исток увеличивается на три порядка для обоих устройств. Таким образом, отношение тока I_{on}/I_{off} составляет около 1000. Наибольшее значение подвижности носителей заряда для исследованных фототранзисторов составляет $\mu=0,043 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Кинетика фотоотклика показана на рис. 1.

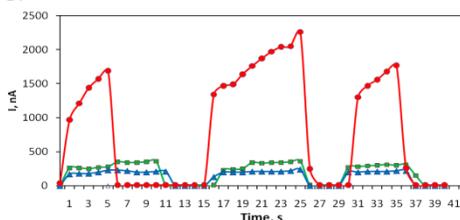


Рис. 1. Кинетика увеличения и уменьшения токов I_{DS} для ОФЕТ пирилодинофуллерена 4 (круглые точки), раздельных слоев фуллерена C_{60} и дитинилэтена 2 (треугольные точки), а также смешанных слоев C_{60} и дитинилэтена 2 (квадратные точки)

Литература

1. Tuktarov A.R., Khuzin A.A., Dzhemilev U.M., Salikhov R.B., Safargalin I.N., Mullagaliev I.N., Venidiktova O.V., Valova T.M., Barachevsky V.A. Optically controlled field effect transistors based on photochromic spiropyran and fullerene C_{60} films // *Mendelev Communications*, 2019, T. 29, № 2, С. 160-162.

© Остальцова А.Д., Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б., 2021г.

ОРГАНИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА – ТЕХНОЛОГИЯ БУДУЩЕГО

Юльякшин А.С., Салихов Р.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Органическая электроника - область материаловедения, занимающаяся разработкой электронных устройств на органических материалах. Эта электроника построена не на привычных нам кремнии, германии и подобных неорганических полупроводниках, а на применении пластиков, проводящих полимеров и органических соединений с низкой молекулярной массой. Основные преимущества такой технологии - сравнительно недорогое производство, а также: гибкость, лёгкость, миниатюрность устройств, созданных с её помощью.

Из актуальных, на данный момент, изобретений в области органической электроники, можно выделить два направления: полимерные светодиоды (OLED) и солнечные панели. Полимерные светодиоды - органические светодиоды, использующие органический полимер, в качестве излучающего слоя. OLED технология имеет преимущества во многих аспектах: меньший вес и габариты, гибкость экранов, сравнительно меньшее энергопотребление. Достоинством органических солнечных панелей являются дешевизна производства и экологичность, а их КПД уже близок к кремниевым солнечным элементам. При всех указанных преимуществах существуют и недостатки, например недолговечность. Эту проблему можно решить путем капсуляции и добавления ингибиторов. В настоящее время в лаборатории органической электроники БашГУ на основе недавно синтезированных новых производных полианилинов, полииндоллов и фуллеренов создаются лабораторные образцы полевых транзисторов, химических сенсоров и фототранзисторов, характеристики которых рассматриваются в данной работе.

Литература

1. Салихов Р.Б., Органическая электроника // В сборнике: Современные проблемы физики. Межвузовский сборник научных статей, посвященный 100-летию открытия Уфимского Физического института. Уфа, 2019. С. 185-190.

© Юльякшин А.С., Салихов Р.Б., 2021 г.

BLUETOOTH LOW ENERGY ДЛЯ РАЗРАБОТКИ СИСТЕМЫ

ОБМЕНА ДАННЫМИ НА ОСНОВЕ NRF52832

Юмалин Т.Т., Абдрахманов В.Х., Салихов Р.Б.

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

Сегодня технический прогресс все больше продвигает технологии беспроводной передачи данных, а появление сетей пятого поколения (5G) еще больше ускорило этот процесс, требуя отказа от проводов и кабелей. Существует множество различных классификаций беспроводных технологий (WPAN, WLAN, WMAN, WWAN), которые включают такие известные стандарты, как Wi-Fi, GPRS, LTE и другие [1]. Но особое внимание следует уделить технологии Bluetooth и, в частности, ее новой спецификации Bluetooth Low Energy (BLE), которая позволяет обмениваться данными на небольших расстояниях с минимальным энергопотреблением (рис.1).

Основные преимущества технологии Bluetooth Low Energy:

- Меньшее энергопотребление: благодаря высоко оптимизированному протоколу BLE потребляет намного меньше энергии по сравнению с другими энергосберегающими технологиями [2].
- Открытый доступ к официальной спецификации: для большинства других протоколов требуется членство в официальном консорциуме. Спецификация Bluetooth полностью открыта и доступна для скачивания с официального сайта.
- Доступная цена модулей: микросхемы с поддержкой Bluetooth производятся многими крупными компаниями, такими как Cambridge Silicon Radio, Dialog Semiconductor, Nordic Semiconductor, STMicroelectronics, Cypress Semiconductor, Silicon Labs и Texas Instruments и др. Доступная цена.
- Широкое распространение: сегодня Bluetooth поддерживается всеми смартфонами и ноутбуками, что дает этой технологии преимущество перед ZigBee, Z-Wave, Thread.

Для реализации серверной части проекта мы используем отладочную плату NRF52832 производства Nordic Semiconductor (рис.2).

Для реализации клиентской части мы используем смартфон на операционной системе iOS, однако можно использовать и смартфоны на системе Android [3,4].

Все полученные данные с периферийного устройства обрабатываются и отображаются на экране. Итак, данные поступают и с датчика температуры, и с датчика расстояния, а также состояние кнопки.

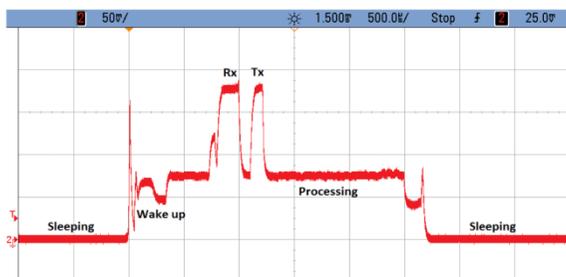


Рис. 1. Потребление тока в зависимости от времени во время одного события подключения

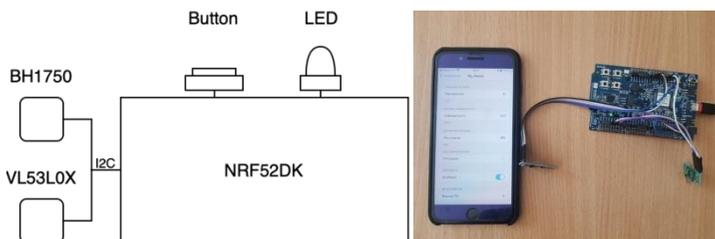


Рис. 2. Блок-схема информационно-измерительной системы и макет устройства

Таким образом, использование энергоэффективного беспроводного протокола BLE позволяет быстро создавать автономные измерительные системы с использованием любых датчиков [5]. Отсутствие кабелей увеличивает надежность и масштабируемость системы, что значительно упрощает процесс настройки и дальнейшей эксплуатации.

Литература

1. Carlsen, Simon, and Stig Petersen. "When the Industry Goes Wireless: Drivers, Requirements, Technology and Future Trends." Factory Automation. IntechOpen, 2010.
2. Ashton, K. "That «Internet of Things» Thing. In the real world, things matter more than ideas/K. Ashton." (2017).
3. Page, Apple Developer. "About Core Bluetooth." CoreBluetooth framework (2020).
4. NordicSemiconductor/Android-BLE-Library. [online] Available at: <https://github.com/NordicSemiconductor/Android-BLE-Library>.
5. Somani, Nisha Ashok, and Yask Patel. "Zigbee: A low power wireless technology for industrial applications." International Journal of Control Theory and Computer Modelling (IJCTCM) 2.3 (2012): 27-33.

© Юмалин Т.Т., Абдрахманов В.Х., Салихов Р.Б., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ АТОМОВ АЛЮМИНИЯ И ТИТАНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Полякова П.В.¹, Пухачева Ю.А.²

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последнее время перспективные направления исследования связаны с разработкой и широким применением композитов, поскольку подобные материалы превосходят традиционные по своим механическим характеристикам, что делает их перспективными материалами для применения в различных областях промышленности.

В данной работе методом молекулярной динамики с использованием свободно распространяемого программного пакета LAMMPS и потенциала, основанного на методе погруженного атома [1], исследована взаимная диффузия атомов в системе Al-Ti под действием одноосного сжатия комбинированного с деформацией сдвига. Размер кристаллов во всех направлениях выбран одинаковым $L_x = L_y = L_z \approx 100 \text{ \AA}$. Расстояние между двумя кристаллами составляет $(a_1 + a_2)/2 = 3,5 \text{ \AA}$.

К структуре было приложено сжимающее давление вдоль оси z в сочетании с деформацией сдвига в плоскости xy . Скорость сжатия $\dot{\epsilon}_{zz} = 6.2 \times 10^{-8} \text{ пс}^{-1}$, скорость сдвига $\dot{\epsilon}_{xy} = 6.2 \times 10^{-7} \text{ пс}^{-1}$. Кроме того, для

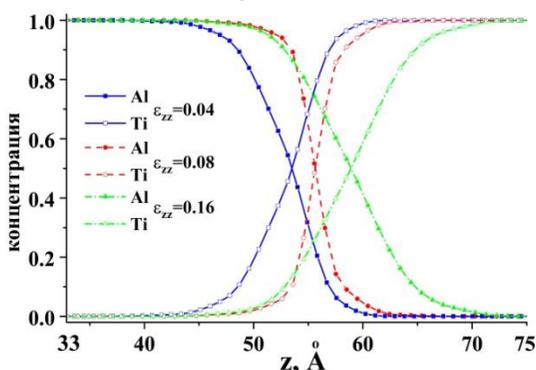


Рис. 1. Концентрация атомов Ti и Al вдоль оси z после одноосного сжатия комбинированного с деформацией сдвига при $\epsilon_{zz} = 0,04$ (синяя линия), $\epsilon_{zz} = 0,08$ (красная линия), $\epsilon_{zz} = 0,16$ (зеленая линия)

структуры было проведено одноосное растяжение перпендикулярное границе перемешивания атомов после комбинированного сжатия вплоть до степени деформации $\varepsilon_{zz} = 0,16$.

Подобное моделирование позволило на атомистическом уровне проследить за перемешиванием атомов Ti и Al из двух первоначально разделенных кристаллов в результате сильной пластической деформации. Предложенная модель является упрощением сценария, экспериментально наблюдаемого ранее [2-5]. Установлено, что дополнительные сдвиговые компоненты напряжения значительно облегчают диффузионный процесс [6]. Анализ структуры показал, что атомы Al диффундируют в блок Ti легче, чем атомы Ti - в блок Al. Однако, необходимы дополнительные исследования, чтобы исключить влияние различных факторов на процесс диффузии в системе Al-Ti.

Литература

1. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys / J. Cai and Y. Y. Ye // Physical Review B, 1996, v.54, pp.8398–8410.
2. Effect of annealing on the structure and phase composition of Al-Cu laminated metal-matrix composites produced by shear deformation under pressure / V.N. Danilenko, G.F. Korznikova, A.P. Zhilyaev, S.N. Sergeev, G.R. Khalikova, R.Kh. Khisamov, K.S. Nazarov, L.U. Kiekkuzhina, R.R. Mulyukov // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2018, v.447, pp.012 - 021.
3. Al-Cu layered composites fabricated by deformation/ G.F. Korznikova, R.R. Mulyukov, A.M. Zhilyaev, V.N. Danilenko, R.Kh. Khisamov, K.S. Nazarov, S.N. Sergeev, G.R. Khalikova, R.R. Kabirov// AIP Conference Proceedings, 2018, v.2053, pp.030-028.
4. An approach for fabrication of Al-Cu composite by high pressure torsion / V.N. Danilenko, S.N. Sergeev, J.A. Baimova, G.F. Korznikova, K.S. Nazarov, R. Kh. Khisamov, A.M. Glezer, R.R. Mulyukov // Materials Letters, 2019, v.236, pp.51-55.
5. Current achievements on superplasticity and related phenomena at the Institute for Metals Superplasticity Problems / R.R. Mulyukov, A.A. Nazarov, R.M. Imayev // Letters on Materials, 2018, v.8, pp.510-516.
6. Fabrication of magnesium–aluminum composites under high-pressure torsion: Atomistic simulation/ P.V. Polyakova, J.A. Pukhacheva, S.A. Shcherbinin, J.A. Baimova, R.R. Mulyukov//Applied Sciences (Switzerland), 2021, 11(15), 6801.

© Полякова П.В., Пухачева Ю.А., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛАЗЫ МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Хасанов И.И., Корнилов В.М.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М.Акмуллы, г. Уфа, Россия

Атомно-силовая микроскопия в настоящее время активно используется для изучения структурных особенностей биологических макромолекул (белков, ДНК), поскольку позволяет получать изображения с разрешением в несколько нанометров. Большинство биосенсоров ориентированы на анализ биологических жидкостей. Задача заключается в том, чтобы быстро и эффективно определить концентрацию нужного соединения [1]. В качестве чувствительного элемента использовалась двухслойная пленка из полидифениленфталида. При нанесении второго слоя его фталидные группы испытывают дополнительные ориентирующие действие первого слоя. В результате формируется самоорганизующийся слой с квазидвумерным электронным газом [2]. На основе органических интерфейсов типа полимер/полимер возможно формирование химических сенсоров. В эксперименте были использованы водные растворы белка каталазы различной концентрации от 10^{-4} до 10^{-17} моль/л. рН воды составило 5,55. Каталаза была выбрана как типичный модельный белок для разработки биосенсоров. На поверхность полимера в области зазора перпендикулярного контактам наносилось 2 мкл раствора белка. После испарения воды образец исследовался в атомно-силовом микроскопе.

Была измерена шероховатость поверхности белковых слоев, изготовленных из растворов различных концентраций. Для каждой концентрации было отобрано 10 типичных АСМ-изображений, для каждого изображения определена шероховатость поверхности. Затем отбрасывались крайние значения, а остальные усреднились. Было установлено, что шероховатость белкового слоя зависит от концентрации немонотонно. При формировании белкового слоя на поверхности нужно учитывать ряд факторов: взаимодействие молекул друг с другом, взаимодействие молекул с подложкой, переход от монослоев к многослойной структуре и т.д. Все эти факторы могут повлиять на величину сигнала в биосенсоре и исследование шероховатости белковых слоев позволяет конкретизировать методику приготовления образцов.

Литература

1. Биосенсоры: основы и приложения: Пер. с англ./Под ред. Э. Тёрнера, И. Карубе, Дж. Уилсона. М.: Мир, 1992. 614 с.
2. Gadiev R.M., Lachinov A.N., Kornilov V.M., Salikhov R.B., Rakhmееv R.G., Yusupov A.R. The conducting polymer/polymer interface. // Appl. Phys. Lett. 2011 – V. 98 – P.173305

© Хасанов И.И., Корнилов В.М., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ С ПРОВОДЯЩИМ ЗОНДОМ

Исламгулов А.Р., Корнилов В.М.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М.Акумуллы, г. Уфа, Россия

Эффективным инструментом экспериментального исследования локальных электрофизических свойств ультратонких диэлектрических полимерных пленок является метод атомно-силовой микроскопии с проводящим зондом. Эта методика позволяет производить одновременное картографирование морфологии поверхности и регистрацию электрических неоднородностей в пленке полимера [1]. Для исследования изготавливались полимерные пленки на полированных подложках из нержавеющей стали по методике, описанной в работе [2]. Толщина пленок задавалась концентрацией полимера в растворителе - циклогексаноне. Для определения толщины пленок и их внутреннего строения пленки механически деформировались. Ранее при АСМ-исследовании полимерных слоев была установлена возможность создания сплошных и однородных по толщине субмикронных пленок ПДФ при уменьшении толщины вплоть до 5 nm. Было установлено, что характер воспроизведения токовых особенностей на изображениях зависит от режима работы прибора. При работе в режиме поддержания постоянной силы взаимодействия кантилевера с образцом, ни на полимере, ни на металле токовые особенности не регистрируются. Сила взаимодействия кантилевера с образцом в данном эксперименте составляла 10 nN, и этого оказалось недостаточно для создания электрического контакта. Для того, чтобы пронаблюдать токовые особенности внутри полимерного слоя были искусственно созданы деформированные участки полимерной пленки не на всю глубину, то есть устранен поверхностный слой. Удалось зарегистрировать токовые особенности в виде темных точек, расположенных приблизительно по границе элемента изображения. Оценка величины плотности тока, локально протекающего сквозь полимерный образец, дает значения $10^6 - 10^7$ А/см². Характерное расположение мест протекания тока хорошо соотносится с данными о надмолекулярной структуре полимерных пленок [2].

Литература

1. M. Trapatseli, D. Carta, A. Regoutz, A. et al. Conductive Atomic Force Microscopy Investigation of Switching Thresholds in Titanium Dioxide Thin Films // J. Phys. Chem. C, 2015, 119, p.11958–11964.
2. В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Д.Д. Карамов, и др. Надмолекулярная структура тонких пленок электроактивного полимера // ФТТ. – 2016, т.58, №5, с.1030-1035.

© *Исламгулов А.Р., Корнилов В.М., 2021 г.*

МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ КОНСТАНТЫ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ

Шипкова Е.Д., Комлев А.С., Перов Н.С.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
г. Москва, Россия

В настоящее время наиболее перспективной методикой лечения раковых опухолей является гипертермия. Данная методика основана на нагреве наночастиц, которые расположены вблизи пораженных тканей, в переменном магнитном поле. Одним из важных параметров, характеризующих величину нагрева является константа магнитной анизотропии. Данная величина может зависеть от состава материала, типа кристаллического упорядочения и размера объекта. Определение константы анизотропии композитных наноматериалов является трудоемкой задачей в случае [1].

В данной работе исследовались наночастицы с различными диаметрами, ядро которых имело состав $ZnFe_2O_4$, а оболочка - $MnFe_2O_4$. Для каждого из образцов были определены константы анизотропии двумя различными способами. В первом случае константа K_{eff}^1 была определена из условия равенства энергии анизотропии и энергии тепловых флуктуаций. Температура, участвующая в расчете энергии тепловых флуктуаций, была определена экспериментально из измерений ZFC-FC кривых. Вторым способом константа K_{eff}^2 рассчитывалась из аппроксимации кривых намагничивания по закону Акулова [2](1):

$$M(H) = M_s + P_2 H - \frac{K_{eff}^2}{M_s H^2} \quad (1)$$

где M_s – намагниченность насыщения, P_2 – параметр парамагнитного вклада, H – магнитное поле. Рассчитанные константы анизотропии по двум различным методикам оказались коррелированными, что повышает достоверность полученных результатов. Ожидается, что дальнейшие расчеты величины нагрева частиц в переменном магнитном поле с помощью констант анизотропии, определенных по предложенным методикам, окажутся близки к эксперименту.

Литература

1. Balivada S. et al. A/C magnetic hyperthermia of melanoma mediated by iron(0)/iron oxide core/shell magnetic nanoparticles: a mouse study // BMC Cancer. 2010. Vol. 10. P. 119.
2. Akulov N.S. Uber den Verlauf der Magnetisierungskurve in starken Feldern // Zeitschrift fur Phys. 1931. Vol. 69, № 11–12.

© Шипкова Е.Д., Комлев А.С., Перов Н.С., 2021 г.

ГАЗОВЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ

Ханафин И.И., Харрасов Р.Р., Салихов Р.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Сенсоры химические (от лат. *sensus* — чувство, ощущение) — чувствительные элементы небольших размеров, которые генерируют аналитический сигнал, зависящий от концентрации определяемого компонента в анализируемой смеси. Из-за высокой токсичности разработка высокочувствительного сенсора CO для контроля за его содержания является актуальной задачей. Газовые датчики на основе металлоксидные полупроводники широко используются для обнаружения токсичных газов, таких как CO. Эти датчики страдают от недостатка ограниченного срока службы из-за их работы при высоких температурах. С другой стороны, часто бывает трудно достичь высокой чувствительности, селективности и специфичности в присутствии смеси газов. Чтобы преодолеть эти недостатки, были опробованы нанокристаллические пленки полианилина, полученные в вакууме и пригодные для обнаружения угарного газа. Датчики, использующие эти пленки, работают при комнатной температуре. Высокая чувствительность, селективность и специфичность получаются при легировании порошка полианилина многостенными углеродными нанотрубками. Ожидается, что эти тонкопленочные датчики будут отличаться высокой стабильностью, надежностью и низким пределом обнаружения газов. Таким образом, в данной работе продемонстрирована возможность создания газовых сенсоров угарного газа на основе полианилина и многостенных углеродных нанотрубок.

Литература

1. Salikhov T.R., Yumaguzine Y. M., Salikhov R.B., Electronics applications based on thin polyaniline films, 2015 International Siberian Conference on Control and Communications, SIBCON 2015-Proceedings , 2015, 7147207
2. Andriinova, A. N., Gribko, D.E., Petrov, I.S., Salikhov, R.B., Abdrakhmanov, I.B., Mustafin, A.G., Influence of Synthesis Conditions on the Physicochemical Properties of Poly-2-[(2E)-1-methyl-2-buten-1-yl]aniline, Polymer Science – Series B, 2021, 63(2), стр. 135-141
3. Salikhov, T.R., Yumaguzine, Y. M., Salikhov, R.B., Electronics applications based on thin polyaniline films, 2015 International Siberian Conference on Control and Communications, SIBCON 2015-Proceedings , 2015, 7147207.

© Ханафин И.И., Харрасов Р.Р., Салихов Р.Б., 2021 г.

ОРГАНИЧЕСКИЕ ДАТЧИКИ НА NO_x

Козин К.Д., Султанов Д.И., Салихов Р.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время активно разрабатываются газовые химические датчики на основе полимерных пленок [1-2]. Комплекс оксидов азота NO_x представляет собой семью из семи соединений, но регистрируется одна из наиболее распространенных форм – диоксид азота (NO₂). Помимо того, что NO₂ сам по себе является загрязнителем воздуха, он также вступает в реакцию образования тропосферного озона (O₃) в атмосфере и является причиной кислотных дождей. Поскольку в настоящее время проблема загрязнения окружающей среды NO_x является актуальной, то большинство компаний пытаются изобрести датчики, которые точнее и быстрее измеряли бы содержание NO_x в производственных выбросах.

Одним из перспективных датчиков является высокоэффективный датчик диоксида азота на основе органического тонкопленочного транзистора с использованием смешанной пленки P3HT/OH-MWCNT (политиофен с многостенной углеродной нанотрубкой). За счет оптимизации соотношений смесей (P3HT/OH-MWCNT) чувствительность транзисторного датчика на его основе к NO₂ - 30 ppm повышена примерно в 10 раз на основе чистого P3HT [3]. В этой работе опробованы транзисторные датчики на основе политиофена для обнаружения диоксида азота. Для увеличения чувствительности планируется проведение дополнительных исследований легированием чувствительного слоя углеродными нанотрубками.

Литература

1. Salikhov R.B., Biglova Yu.N., Mullagaliev I.N., Salikhov T.R., Mustafin A.G. Functionalized polyanilines: influence of the surface morphology on the electrophysical and sensory properties of thin films based on them // Material letters, 2021, v. 11, № 2 (42), pp. 140-145.
2. Салихов Р.Б., Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н. Электронные сенсоры на основе тонких полимерных пленок // В сборнике: Современные проблемы физики. Межвузовский сборник научных статей, посвященный 100-летию открытия Уфимского Физического института. Ответственный редактор М.Х. Балапанов. Уфа, 2019, с. 191-196.
3. Shixiong Zhao, Sihui Hou, Huidong Fan, Zijun Wang, Junsheng Yu High performance nitrogen dioxide sensor based on organic thin-film transistor utilizing P3HT/OH-MWCNTs blend film // Synthetic Metals, 2020, V. 269, 116569.

© Козин К.Д., Султанов Д.И., Салихов Р.Б., 2021 г.

УМНЫЙ СВЕТОФОР

Абдрахманов В.Х., Харрасов Р.Р., Ханафин И.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время в мире насчитывается более 150-ти проектов по автоматизации дорожного движения. Новая идея, заложенная в данном проекте, способна предоставит уникальные возможности для всех участников дорожного движения, открыв перспективу в разработке программно-аппаратных комплексов для развития инфраструктуры мегаполисов. Уникальностью проекта есть сочетание современных IT-технологий, математических моделей и аппаратно-технических средств в единой целостной системе [1].

Surtrac - это инновационный подход к управлению сигналами дорожного движения в реальном времени, сочетающий исследования искусственного интеллекта и теории дорожного движения.

Отклик в реальном времени на фактический трафик. Surtrac оптимизирует каждую секунду на основе фактических потоков трафика.

Мультимодальная оптимизация. Благодаря расширенному зондированию Surtrac может интегрировать потоки транспортных средств, пешеходов, автобусов и велосипедистов в соответствии с заранее заданными приоритетами [2].



Рис. 1. Система «умный светофор»

Литература

1. Теоретическая суть проекта «Smart Roads». Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/teoreticheskaya-sut-proekta-smart-roads>
2. Адаптивная система управления дорожными сигналами. Режим доступа: <https://www.rapidflowtech.com/surtrac>

© Абдрахманов В.Х., Харрасов Р.Р., Ханафин И.И., 2021 г.

ОСНОВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ТОНКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЁНОК ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Сапожников М.А., Салихов Р.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В наше время для получения полимерных плёнок в нанoeлектронике широкое распространение получили такие методы, как метод термического напыления в вакууме, а также метод центрифугирования.[1-2]

Методом термического напыления в вакууме получение тонкой плёнки происходит посредством напыления органического порошка при помощи ячейки Кнудсена. В таком методе требуется использование вакуума порядка $10^{-5} - 10^{-7}$ Па. За счёт конденсации испаряемого вещества на поверхности при направлении на подложку потока частиц и происходит образование тонкого слоя.

Метод центрифугирования же заключается во вращении в центрифуге подложки с нанесенным на неё полимерным материалом. При этом подложка вращается со скоростью около 800 об/мин при поддержании постоянной определенной температуры в камере центрифуги. После данной процедуры подложку помещают в муфельную печь для обжига при температуре около 100 °С.

На основе полученных плёнок были созданы и измерены ВАХ различных резистивных сенсоров и датчиков, электрические свойства которых зависят от внешних условий. На основе тонких плёнок создаются тонкоплёночные транзисторы, которые, зачастую, используются при создании ЖК-дисплеев. Плёнки полиимида используются при создании тонкоплёночных конденсаторов.

Литература

1. Андриянова А.Н., Грибко Д.Э., Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б., Мустафин А.Г. Влияние условий синтеза на физико-химические свойства поли-2-[(2E)-1-метил-2-бутен-1-ИЛ]анилина.// Высокомолекулярные соединения. Серия Б. 2021. Т. 63. № 2. С. 131-137.
2. Салихов Р.Б. Органическая электроника.// В сборнике: Современные проблемы физики. Межвузовский сборник научных статей, посвященный 100-летию открытия Уфимского Физического института. Ответственный редактор М.Х Балапанов. Уфа, 2019. С. 185-190.

© Сапожников М.А., Салихов Р.Б., 2021г.

СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ СЕРВЕРНОЙ

Сапожников М.А., Абдрахманов В.Х.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время в виду наращивания мощности кремниевых вычислительных систем остро встает вопрос оптимизация охлаждения массивных вычислительных систем, например, серверов. Наиболее распространенными среди них являются варианты с использованием систем кондиционирования воздуха или активного охлаждения. Также большое распространение систем охлаждения для серверных комнат получил такой вид, как принцип холодной комнаты. [1]

В настоящий момент большинство операций обладают системой мониторинга затрат ресурсов и температуры, в виду чего, можно использовать данный мониторинг, установив дополнительные температурные датчики для создания температурной карты помещения (рис.1). Так будет получена карта распределения температуры по всей серверной комнате.



Рис. 1. Пример температурной карты помещения

На Российском рынке решение данной задачи представлено компанией Axielogic. Эта компания предоставляет услуги установки систем мониторинга микроклимата, создание которого необходимо для

оптимального функционирования серверной, а также для создания температурной карты помещений. [2]

Для реализации системы охлаждения серверной можно установить кулеры охлаждения для создания оптимальной циркуляции воздуха, и регулировать их силу обдува в зависимости от температурных показателей ближайшего к нему датчика. По такому принципу можно создать автоматизированную и самодостаточную систему, которая, взаимодействуя с тепловой картой помещения сможет регулировать температуру серверной и создавать необходимый для работы сервера микроклимат. Поддержание микроклимата в серверной необходимо для его дальнейшего эксплуатации, так как изменения температуры воздуха в серверной может напрямую влиять на работоспособность серверов, а также, при чрезмерной нагрузке может вывести сервер из строя. [3]

Количество серверов, на сегодняшний день, растёт, как возрастают и их мощности, из-за чего тема оптимизации охлаждения серверной становится всё более востребованной, а её реализация может снизить затраты ресурсов на содержание серверных.

Таким образом на сегодняшний день необходимо развитие в данной области не только посредством поиска альтернативных источников охлаждения (использование диэлектрической жидкости или же эффекта испарения), но и при помощи облачных технологий и возможности искусственного интеллекта.

Литература

1. Исследование возможности реализации технологии точного позиционирования. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б. / Электрические и информационные комплексы и системы. – 2019. - № 3. – Т 15. - С.118-129.
2. Системы мониторинга микроклимата:
<http://axiologic.com/system?yclid=5512977366428997136>.
3. Информационно-измерительная система дистанционного контроля параметров микроклимата. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б. / Электрические и информационные комплексы и системы. – 2016. - № 3. – Т 13. - С.91-99.

© Сапожников М.А., Абдрахманов В.Х., 2021 г.

ПРОЕКТИРОВАНИЕ РАДИОМОДУЛЯ ДЛЯ GPS-ТРЕКЕРА

Аюпов А. Ф., Абдрахманов В.Х.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

GPS-трекер (или GPS-контроллер) — устройство, отслеживающее данные местоположения для спутникового контроля автомобилей, людей или других объектов, к которым оно прикреплено, использующее GPS для точного определения местонахождения объекта [1,2]. Даже несмотря на то, что изначально проект GPS был направлен на военные цели, сегодня GPS широко используются в гражданских целях: геодезия, картография, навигация, спутниковый мониторинг транспорта, сотовая связь, тектоника, активный, геотегинг. Каждая модель трекера состоит из приемника и передатчика. Приемник базируется на глобальной спутниковой системе GPS. Устройство принимает сигнал от спутников, и таким образом определяет точные координаты отслеживаемого объекта. Система GPS сама по себе бесплатная и может работать без подключения к интернету: за запросы к паре десятков американских спутников платить не нужно, но оплаты может потребовать сотовая связь или GPRS – именно такие форматы связи использует передатчик. Функция этого модуля заключается в том, чтобы передать полученные приемником данные на компьютер или смартфон.

Данный проект позволяет не использовать сотовую связь или GPRS. Функцию передатчика выполняет радиомодуль NRF24L01[3]. Радиомодуль обеспечивает связь между GPS-трекером и смартфоном/компьютером. Это решение позволяет использовать GPS-трекер в местах, где не доступна сотовая связь и GPRS, что сильно расширяет возможности и применение GPS-трекера. Помимо этого, снижается цена эксплуатации.

Для связи со спутниками используется GPS-модуль NEO-6M[4], как самый практичный и недорогой модуль. Для связи приемника и передатчика используется радиомодуль NRF24L01. Вывода координат непосредственно на приемник обеспечивает OLED-дисплей на чипе SSD1306. В качестве микроконтроллера для приемника используется ESP8266, а для передатчика используется ArduinoNano (ATmega328).

Программный код написан на языке на языке программирования Arduino (базируется на C/C++). схема устройства (рис.1) собрана в среде разработки «Proteus ISIS»

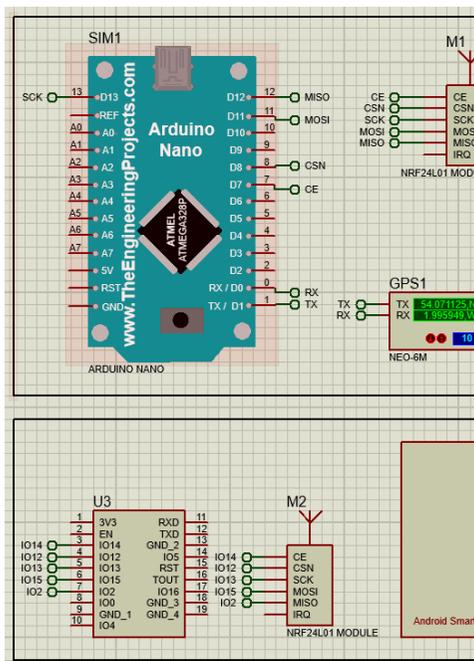


Рис. 1. Моделирование работы устройства



Рис. 2. 3D- модель готового устройства (приемник и передатчик)

Проект представляет собой два устройства, связывающихся по радиоканалу 2,4 ГГц через радиомодуль.

Литература

1. Исследование возможности реализации технологии точного позиционирования. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б. / Электрические и информационные комплексы и системы. – 2019. - № 3. – Т 15. - С. 118-129.
2. Информационно-измерительная система дистанционного контроля параметров микроклимата. Абдрахманов В.Х., Важаев К.В., Салихов Р.Б. / Электрические и информационные комплексы и системы. – 2016. - № 3. – Т 13. - С. 91-99.
3. Радиомодуль nRF24L01+ быстрый старт. Режим доступа: <http://we.easyelectronics.ru/Radio/radiomodul-nrf24l01-bystryy-start.html>
4. GPS модуль NEO-6M - Режим доступа: <https://roboshop.spb.ru/modules/gy-neo6m?yclid=2700428377216541288>.

© Аюпов А. Ф., Абдрахманов В.Х., 2021 г.

РАЗРАБОТКА УСТРОЙСТВА ГОЛОСОВОГО УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ УМНОГО ДОМА

Мансурова Д.Д., Абдрахманов В.Х.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Основными структурными звеньями в работе являются микрофон, компьютер с программой распознавания речи, выполняющий роль сервера, и плата Arduino UNO, которая будет выполнять соответствующие операции в зависимости от голосовых команд. Компьютер, выполняющий роль сервера и обрабатывающий голосовые команды, передаёт команды с помощью набора функции Serial через последовательный порт (UART). А Arduino, в свою очередь, выполняет соответствующие операции.

В данной дипломной работе была разработана и собрана система распознавания речи и голосового управления для умного дома, частично демонстрирующая преимущества концепции голосового управления [1]. В ходе разработки системы и устройства удалось достичь простого, но эффективного результата.

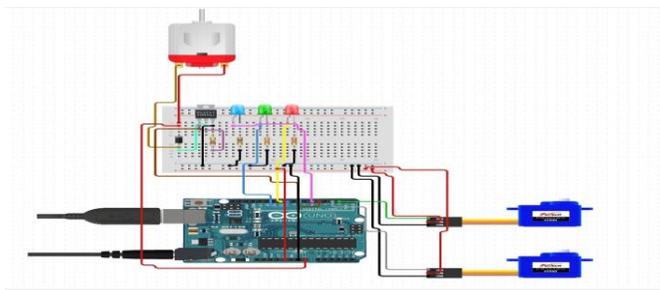


Рис. 1 - Принципиальная схема устройства

Литература

1. Косарев Ю.А. Естественная форма диалога с ЭВМ. – Л.: Машиностроение, 2012. – 143 с. Карпов А.А., Ронжин А.Л. Многомодальные интерфейсы в автоматизированных системах управления // Известия вузов. Приборостроение. 2005. Т. 48, № 7. С. 9-14

© Мансурова Д.Д., Абдрахманов В.Х., 2021 г.

**ЗАВИСИМОСТЬ СОРБЦИОННОЙ ЕМКОСТИ СКОМКАННОГО
ГРАФЕНА ОТ СТЕПЕНИ ДЕФОРМАЦИИ:
АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Апкадилова Н.Г.¹, Крылова К.А.^{1, 2}

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Введение

На сегодняшний день углеродные материалы вызывают большой интерес в научном сообществе из-за уникальных механических и физических свойств. Трехмерные материалы на основе графена, в том числе и скомканный графен (СГ), обладают высокой удельной площадью поверхности и пористостью [1]. Эти свойства открывают возможность применения таких структур в водородной энергетике в качестве среды для хранения и транспортировки водорода [2].

СГ представляет собой трехмерные чешуйки графена, связанные между собой силами Ван-дер-Ваальса. Простой способ синтеза такого объемного наноматериала предложен в работе [1]. Известно, что максимально достигнутая химическая сорбция водорода графеном равна 2 % (вес.). Однако, физический способ хранения водорода в углеродном материале может увеличить массу накопленного в структуре водорода.

В данной работе рассматривается влияние деформации на сорбционную емкость скомканного графена методом молекулярно-динамического моделирования.

Описание модели

В работе исследуется графеновая чешуйка, полученная в результате вырезания атомных рядов из углеродной нанотрубки хиральностью (7,7) и длиной 2,5 нм. Во внутреннюю полость чешуйки графена помещалось 224 атома водорода. Далее создавалась трехмерная структура за счет повторения 3x3x3 единичных чешуек графена вдоль направления x , y и z (см. рис. 1 (а)). Для уплотнения структуры скомканного графена применялось гидростатическое сжатие до степени деформации $\varepsilon = 0,77$ при температуре 1 К (рис.1 (б)). Процесс разводороживания скомканного графена исследовался при температурах 77 и 300 К.

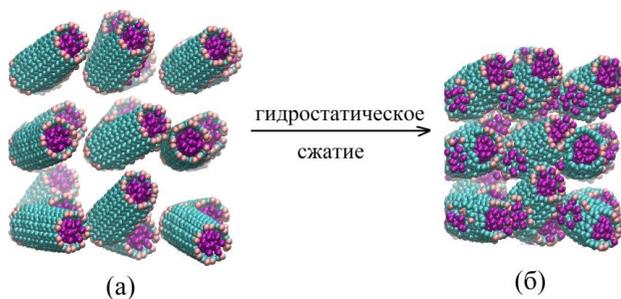


Рис. 1. Структура наводороженного скомканного графена до (а) и после сжатия $\varepsilon = 0,77$ (б)

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось с использованием общедоступного и широко применяемого программного пакета LAMMPS. Для описания межатомного взаимодействия использовался многочастичный потенциал AIREBO [3], который неоднократно эффективно применялся при изучении деформационных процессов в трехмерных углеродных структурах, а также при исследовании разводороживания углеродных структур [4].

Результаты моделирования

В результате моделирования проведен анализ изменения объемной плотности водорода в ячейке моделирования от степени гидростатической сжимающей деформации ε после выдержки при 77 и 300 К в течении 20 пс (рис. 2). Установлено, что с ростом ε при 77 К

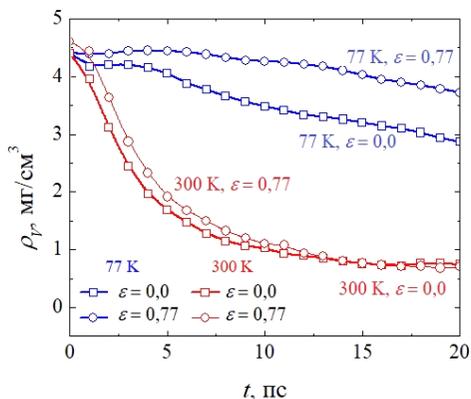


Рис. 2. Изменение объемной плотности водорода скомканного графена с разной степенью деформации в процессе выдержки при температурах 77 и 300 К

количество водорода, покинувшего структуру, уменьшается. Это связано с тем, что молекулы водорода удерживаются графеном за счет сил Ван-дер-Вальса. Однако при 300 К влияние гидростатического сжатия на процесс разводороживания структуры не наблюдается, поскольку силы Ван-дер-Вальса разрываются за счет возникающих тепловых колебаний атомов. Отметим, что после выдержки при 77 и 300 К большинство атомов водорода переходят в молекулярное состояние. При этом с увеличением степени деформации их количество незначительно возрастает.

Заключение

Методом молекулярной динамики установлено, что гидростатическое сжатие является эффективным способом увеличения объемной плотности наводороживания СГ. Полученные данные позволяют прогнозировать возможность использования СГ как среды для хранения и транспортировки водорода в порах материала.

Литература

1. L. Zhang, F. Zhang, X. Yang et al. // Sci. Rep. 2013. V. 3. P. 1408.
2. D. Broom, C. Webb, G. Fanourgakis, et al. // Int. J. Hydrogen Energy 2019. P. 15-44.
3. S. Stuart, A. Tutein, J. Harrison. Chem J. Phys/ Journal of Chemical Physics. 2000. № 14, pp. 6472.
4. К.А. Krylova, J.A. Baimova, I.P. Lobzenko, A.I. Rudskoy // Physica B: Physics of Condensed Matter. 2020. 583, 412020.
5. N.G. Apkadirova, K.A. Krylova // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering: 2021. 1008, 012051.

© Анкадилова Н.Г., Крылова К.А., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА НА ЛОКАЛЬНЫЕ И ИНТЕГРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КВАЗИОДНОМЕРНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА

Арутюнов К.Ю.

МИЭМ НИУ ВШЭ, ИФП им. П.Л. Капицы РАН, г. Москва, Россия

Хорошо известно, что в низкоразмерных системах флуктуационные явления играют существенную роль. В частном случае квазиодномерного сверхпроводящего канала уже было установлено, что квантовые флуктуации параметра порядка могут радикально подавить такие интегральные атрибуты сверхпроводимости как нулевое сопротивление и незатухающие (мейсснеровские) токи [1]. Однако о влиянии квантовых флуктуаций на *локальные* свойства, такие как плотность состояний и энергетическая щель, известно не много.

Исследование туннельных характеристик, отражающих локальные свойства сверхпроводника, обнаруживает конечное значение джозефсоновского тока в контактах SIS* и вполне стандартные ВАХ переходов NIS*, где S* обозначает очень тонкую сверхпроводящую нанополоску, в режиме квантовых флуктуаций, S - макроскопический сверхпроводник, N - нормальный металл, I - диэлектрик. Теоретический расчет дает квази-БКШ форму энергетического спектра с небольшим уширением плотности состояний [2]. Поразительное различие между интегральными и локальными свойствами квазиодномерного сверхпроводника связано со сложным взаимодействием между отдельными флуктуационными событиями, происходящими в различных точках пространства и времени и взаимодействием между такими флуктуациями. Это фундаментальное свойство низкоразмерных сверхпроводников необходимо учитывать при разработке различных крио- и наноэлектронных устройств.

Литература

1. K. Yu. Arutyunov, D. S. Golubev, A. D. Zaikin, Phys. Rep. 464, 1 (2008).
2. K. Yu. Arutyunov, J. S. Lehtinen, A. Radkevich, A. G. Semenov, A. D. Zaikin, Comm. Phys. 4, 146 (2021).

© Арутюнов К.Ю., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПОДГОТОВКИ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ/ПОЛИМЕР/МЕТАЛЛ НА ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ

Киан М.Ф., Лачинов А.Н.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Тонкие нанометровой толщины плёнки полиарилефталидов обладают уникальными электронными свойствами, изучение которых имеет большое значение не только для фундаментальной науки, но и для практического использования в устройствах органической электроники. Однако до сих пор мало внимания уделялось изучению стадии формирования полимерной пленки и влиянию окружающей среды на электронные свойства тонкопленочных устройств [1]. В докладе представлены результаты изучения электронного переключения тонких пленок полидифениленфталида при различных условиях их формирования от стадии растворения до стадии формирования гетероструктуры.

Экспериментальные образцы имели структуру металл – полимер – металл. В качестве полимера был использован полидифениленфталид. Толщина полимерных плёнок составляла от 40 до 400 нм. Контроль толщины и качества плёнок осуществлялся с помощью атомно-силового микроскопа SMM-2000T. Электроды были из меди и изготавливались методом термического осаждения в вакууме.

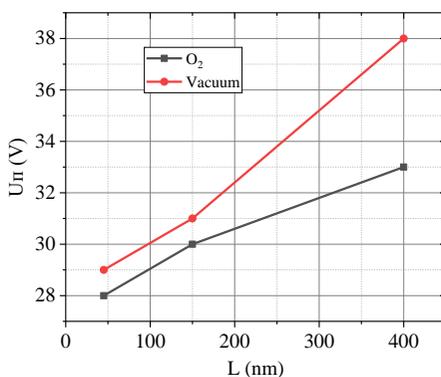


Рис. 1. Зависимость порога электронного переключения от толщины полимерной пленки отожжённые на воздухе и в вакууме

Экспериментальные образцы были изготовлены в условиях вакуума и условиях открытой атмосферы. Были проведены измерения вольт-амперных характеристик, на которых были обнаружены участки с отрицательным дифференциальным сопротивлением, обусловленным явлением электронного переключения проводимости в гетероструктуре.

В результате проведенных исследований установлено, что с увеличением толщины плёнки, порог электронного переключения возрастает и во-вторых, наличие кислорода при формировании пленки приводит к уменьшению порога переключения (рис. 1.).

Обсуждаются механизмы влияния кислорода на параметры электронного переключения.

Литература

1. А.Р. Юсупов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина, Р.М. Гадиев, Д.В. Никитина //Физика твердого тела, 2019, том 61, вып. 3, С.581-586.

© *Киан М.Ф., Лачинов А.Н., 2021 г.*

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ БЕНЗОФУРАН-3(2Н)-ОНА

Сафронов А.М., Рахмеев Р.Г.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Метод масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата медленных электронов ранее использовался для интерпретации механизмов биохимических превращений, происходящих в живых клетках [1, 2]. Ключевой идеей предлагаемого подхода является предположение о подобии фрагментов, образующихся при диссоциации отрицательных молекулярных ионов и метаболитов биологически активных органических соединений, распад которых происходит вблизи электрон-транспортных цепей в живой клетке [3].

В данной работе, такой подход применен в отношении бензофуран-3(2Н)-она, который, согласно недавним исследованиям, обладает высокой антимицробной и умеренной антиоксидантной активностью [4].

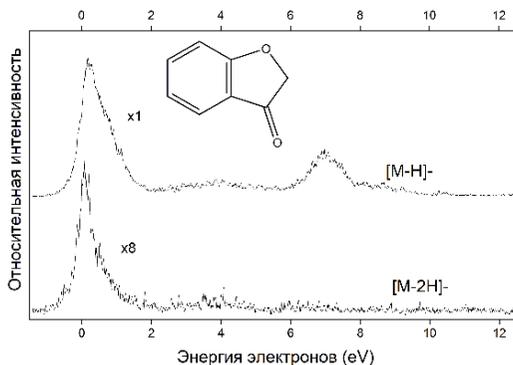


Рис. 1. Спектр диссоциативного захвата электронов для молекул бензофуран-3(2н)-она

Литература

1. Pshenichnyuk S. A., Modelli A. and Komolov A. S. Interconnections between dissociative electron attachment and electron-driven biological processes, *Int. Rev. Phys. Chem.*, V. 37, P. 125–70.
2. Таюпов М.М., Рахмеев Р.Г., Маркова А.В., Сафронов А.М., *Математическая физика и компьютерное моделирование*, Том 24, № 2, 2021, с. 54-67.

3. Pshenichnyuk S.A., Modelli A., Vorob'ev A.S., Asfandiarov N.L., Nafikova E.P., Rakhmeyev R.G., et al. Fragmentation of chlorpyrifos by thermal electron attachment: a likely relation to its metabolism and toxicity *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (2018), pp. 22272-22283.
4. Шубин Д. А. и др. Изучение биологической и антиоксидантной активности (Z)-2-(гидроксипбензилиден)-4, 6-дигидрокси-7-метилбензофуран-3 (2H)-онов //Бутлеровские сообщения. – 2020. – Т. 61. – №. 2. – С. 37-45.

© Сафронов А.М., Рахмеев Р.Г., 2021 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ РЕЗОНАНСНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВИБРАЦИОННОГО МЕХАНИЗМА РАСПОЗНОВАНИЯ ОДОРАНТОВ

Таюпов М.М., Галеев Р.В.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Устройства, воспроизводящие работу обонятельной системы, т.н. «электронный нос», вызывают повышенный интерес достаточно давно (см., например, описание истории вопроса в [1]). В настоящее время делаются попытки построения устройств наномасштаба на основе белков, предназначенных для связывания молекул одорантов в обонятельной системе [2], а сами системы электронного обоняния находят широкое применение в медицине [3,4]. Не вызывает сомнения, что более глубокое понимание *in vivo* механизмов запахового восприятия является ключевым моментом в разработке аналогичных искусственных конструкций.

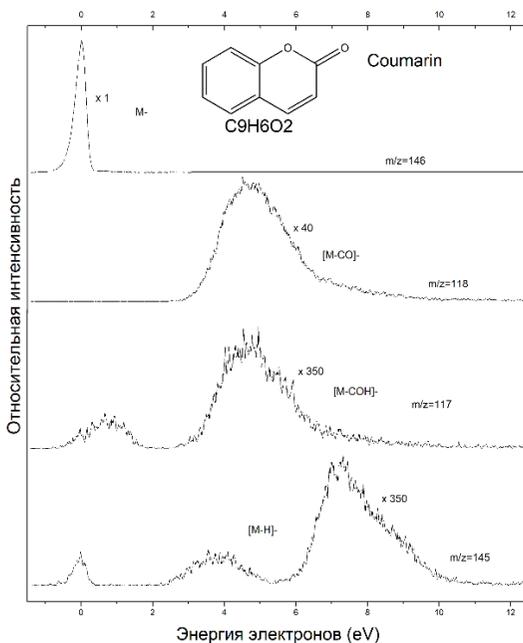


Рис. 1. Спектр диссоциативного захвата электронов молекулами кумарина

Современный вариант оригинальной вибрационной теории механизма обоняния, предложенный Люкой Турином [5], подразумевает перенос электрона на рецептор, что приводит к изменению его конформации и дальнейшему распространению запахового сигнала посредством активации G-протеина. Ранее, нами было показано, что данный механизм очень схож с процессами происходящими при диссоциативном захвате электрона [6,7].

В представленной работе, данный подход был применен к молекулам кумарина, одного из самых распространенных в парфюмерной индустрии веществ. Токи масс-сепарированных отрицательных ионов, образованных при взаимодействии электронов с молекулами приведены в зависимости от энергии электронов на рис. 1 (в порядке убывания интенсивности).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90013.

Литература

1. Gardner, J. W., & Bartlett, P. N. (1994). A brief history of electronic noses. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 18(1-3), 210-211.
2. Mulla, M. Y., Tuccori, E., Magliulo, M., Lattanzi, G., Palazzo, G., Persaud, K., & Torsi, L. (2015). Capacitance-modulated transistor detects odorant binding protein chiral interactions. *Nature communications*, 6.
3. Montuschi, P., Mores, N., Trov e, A., Mondino, C., & Barnes, P. J. (2013). The electronic nose in respiratory medicine. *Respiration*, 85(1), 72-84.
4. Westenbrink, E., Arasaradnam, R. P., O'Connell, N., Bailey, C., Nwokolo, C., Bardhan, K. D., & Covington, J. A. (2015). Development and application of a new electronic nose instrument for the detection of colorectal cancer. *Biosensors and Bioelectronics*, 67, 733-738.
5. Turin L. A spectroscopic mechanism for primary olfactory reception. *Chemical senses*, 21(6), 1996, P.773-791
6. Таюпов М.М., Рахмеев Р.Г., Асфандиаров Н.Л., Пшеничнюк С.А., Математическая физика и компьютерное моделирование, 2020, Том 23, № 3, стр. 45-59.
7. Pshenichnyuk S. A., Rakhmeyev R. G., Asfandiarov N. L., Komolov A. S., Modelli A., and Jones D., *J. Phys. Chem. Lett.* 9, 2018, 2320.

© Таюпов М.М., Галеев Р.В., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ДВУХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК

Панова Н.А. Юсупов А.Р.

БГПУ им. Акмуллы, г. Уфа, Россия

При создании электронных устройств на основе органических материалов, необходимо учитывать влияние внешнего воздействия, а также технологию изготовления. Ранее в работе [1] было показано, что при облучении границы раздела полимер/полимер наблюдается рост тока. В настоящей работе, основной целью является исследование влияния длины волны оптического излучения на фотопроводимость и влияния электрического поля при изготовлении экспериментальных структур на фотопроводящие свойства.

В качестве основного материала был использован полимер полидифениленфталид (ПДФ). На рисунках 1 и 2 представлены люкс-амперные характеристики (ЛАХ) полученных структур. Из полученных данных, представленных на рис. 1 наибольший вклад в рост фототока оказывает облучение лазером с длиной волны 405 нм. Кривые на ЛАХ существенно отличаются. В частности, на ЛАХ полученной при 405 нм имеет два ярко выраженных участка, в отличие от ЛАХ полученных на 520 нм и 636 нм.

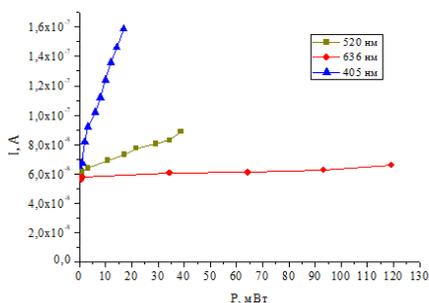


Рис. 1. Люкс-амперная характеристика исследуемой, структур

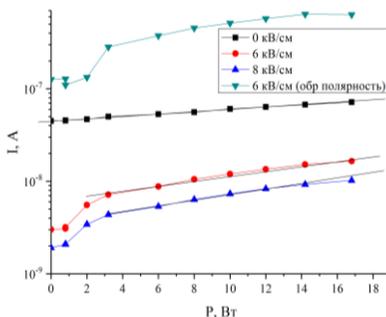


Рис. 2. Люкс-амперная характеристика исследуемой, структур

На рисунке 2 представлены ЛАХ для образцов, которые освещали длиной волны 405 нм. Исследование релаксации фотопроводимости

показало, что с увеличением электрического поля, время релаксации существенно возрастает, от 30 мин при изготовлении в отсутствии поля до 55 минут при напряженности в 8 кВ/см.

Литература

1. Юсупов А.Р., Лачинов А.Н., Гадиев Р.М., Рахматова Л.И., Калимуллина Л.Р., Байбулова Г.Ш. //Физика твердого тела. – 2020. – Т. 62. – №. 7. – С. 1111-1115.

© Панова Н.А. Юсупов А.Р., 2021 г.

АНОМАЛЬНО МЕТАСТАБИЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ В СПЕКТРЕ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ КУМАРИНА

Таюпов М.М., Галеев Р.В.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Метастабильные ионы, в эксперименте масс-спектрометрии резонансного захвата электронов, достаточно «стабильны» в том смысле, что они могут существовать в течение времени, необходимого для их вытягивания из ионизационной камеры ($\sim 10^{-6}$ с) и формирования ионного луча, но не достигают канала регистрации. Если константа скорости распада $10^{-4} - 10^{-6} \text{ с}^{-1}$, то они распадаются на фрагменты в первой бесполовой области, обуславливая широкие «диффузные» (m^*) пики на шкале m/z . Вообще говоря, такие диффузные пики в масс-спектрах отрицательных ионов (ОИ) органических соединений редки, но в некоторых случаях их число может достигать до одного-двух десятков, как, например, в случае металлоорганических и фторорганических

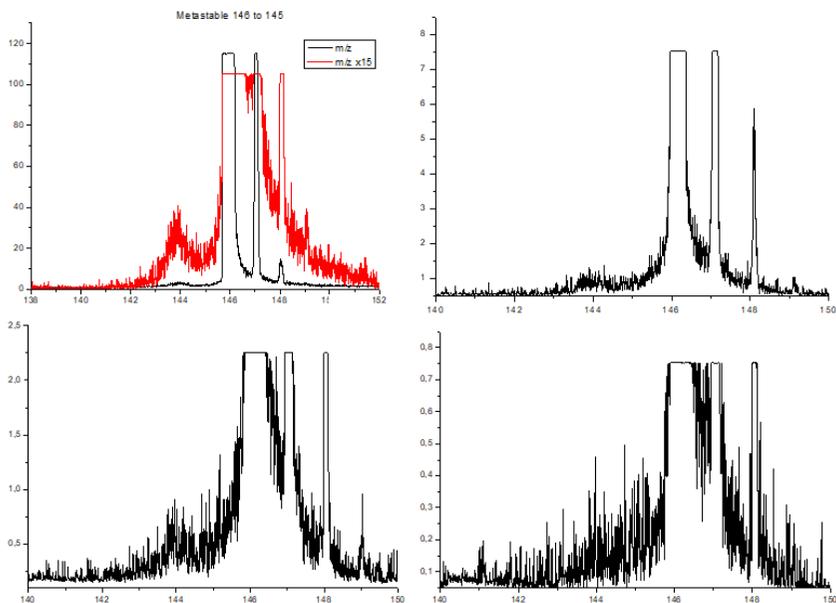


Рис. 1. Масс-спектр резонансного захвата электронов молекулами кумарина

соединений. Если резонансы случаются при тепловых и близких к ним E_e , то $E_{ар}$ и E_{max} резонансных пиков родительских, дочерних и метастабильных ОИ зачастую совпадают. Но при более высоких энергиях электронных резонансные пики разнесены по энергии и расположены в порядке: материнский — «метастабильный» — дочерний. Интенсивность их тоже может быть велика [1].

Обычно, метастабильные состояния, связанные с отрывом от молекулярного иона атома водорода, в масс-спектре не наблюдаются, т.к. время их существования критически мало. Однако, в ходе изучения такого класса веществ как кумарины [2], было показано, что оно может встречаться в масс-спектре отрицательных ионов кумарина. На рис.1 представлен масс-спектр. Молекулярный ион находится при массе 146 а.е., фрагментарный ион, связанный с отрывом водорода расположен при массе 145 а.е., метастабильное же состояние соответственно имеет массу 144,0 а.е..

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90013.

Литература

1. А.И. Парахненко, Ю.С. Некрасов, В.А. Мазунов и др., «Масс-спектрометрия положительных и отрицательных ионов α,β -дифторкоричной кислоты и некоторых ее паразамещенных аналогов», Изв. АН СССР. Сер. хим., 1307–1311 (1984).
2. Таюпов М.М., Рахмеев Р.Г., Асфандиаров Н.Л., Пшеничнюк С.А., Математическая физика и компьютерное моделирование. 2020. Том 23. № 3, стр. 45-59.

© Таюпов М.М., Галеев Р.В., 2021 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ПРОИЗВОДНЫХ АКРИДИН-ДИОНА ИЗ СТАЦИОНАРНЫХ СПЕКТРОВ

Михайлова Т.В.¹, Михайлова В.А.¹, Иванов А.И.¹,

Бондарев С.Л.², Райченко Т.Ф.², Тихомиров С.А.², Козлов Н.Г.³.

¹Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия

²Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Беларусь, г. Минск

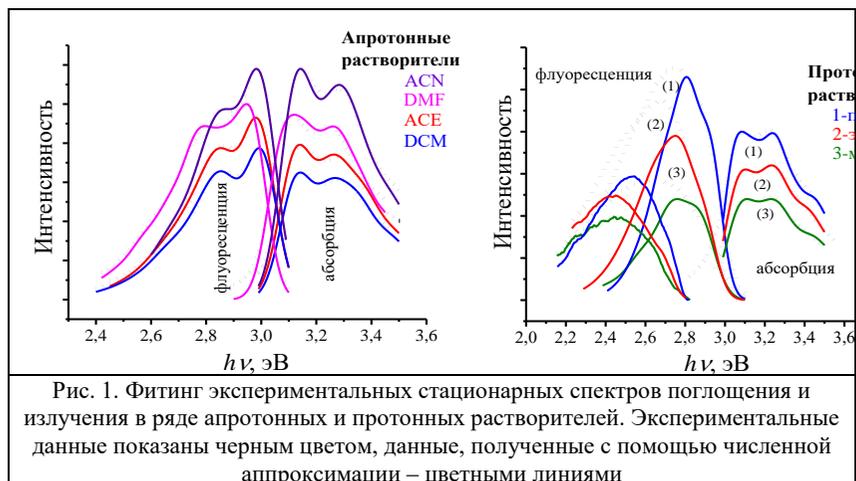
³Институт физико-органической химии НАН Беларуси, Минск

Реакция переноса заряда (протона и/или электрона) является наиболее важной стадией процессов в химических и биологических системах. Понимание основополагающих принципов процесса переноса заряда на уровне, позволяющем настраивать и контролировать его сверхбыструю динамику, имеет решающее значение с современной фотохимии и наноэлектронике. Поэтому интерес к их всестороннему изучению как у экспериментаторов, так и у теоретиков постоянно растет.

Целью данной работы является разработка модели для описания кинетики переноса протона в системах производного соединения акридин-диона (квадрупольная молекула 3,3,11,11-tetramethyl-8,16-diphenyl-3,4,8,10,11,12,13,16-octahydroacridino[4,3-c]-acridine-1.9(2H,5H)dion) [1, 2] в наборе апротонных (диметилформамид (DMF), ацетон (ACE), ацетонитрил (ACN), метиленхлорид (DCM)) и протонных (спирты) растворителей. Молекула, выбранная для текущего исследования, относится к квадрупольному типу. В подобных молекулах процесс переноса заряда может сопровождаться нарушением симметрии молекулы. В рамках текущего исследования предлагается использовать многоканальный стохастический подход, ранее успешно апробированный для описания реакций многостадийного переноса электрона в донорно-акцепторных комплексах [4–6]. Разрабатываемая модель учитывает динамику релаксации растворителя и реорганизации внутримолекулярных высокочастотных колебаний.

Количественное описание кинетики переноса заряда в рамках многоканальной стохастической модели требует знания основных энергетических параметров модели [5, 6]. В процессе работы проводилась численная аппроксимация экспериментальных стационарных спектров абсорбции и флуоресценции и впервые были оценены характерные энергетические параметры исследуемой системы в различных растворителях. Это параметр экзергоничности и энергии реорганизации среды, энергии реорганизации высокочастотных внутримолекулярных

колебательных мод, а также их частоты в основном и возбужденном состояниях.



Для описания процессов переноса заряда в апротонных растворителях достаточно использовать двухуровневую модель. Одновременный фитинг полос поглощения и флуоресценции в апротонных растворителях дает весьма удовлетворительный результат (см. рисунок 1, левая панель). В этом случае стационарные спектры абсорбции и эмиссии совместно определяют значения энергетических параметров на стадии фотовозбуждения системы. В спиртах же численно смоделированные спектры получаются гораздо уже экспериментальных, что указывает на возможность наличия двух или более электронных возбужденных состояний, из которых происходит эмиссия. Смещение положения спектра эмиссии при изменении полярности среды может свидетельствовать о возможном нарушении симметрии в молекуле. Таким образом, второе возбужденное состояние исследуемой структуры в протонных растворителях можно интерпретировать как состояние с нарушенной симметрией [1, 2]. Следовательно, модель для описания процессов переноса заряда в протонных растворителях должна учитывать как минимум три адиабатических состояния: основное, локально-возбужденное и состояние продукта реакции. Предполагается, что вторая полоса эмиссии определяет значения энергетических параметров продукта реакции, а параметры локально-возбужденного состояния можно определить из стационарных спектров абсорбции и первой полосы флуоресценции.

Таким образом, одновременный фитинг экспериментальных спектров флуоресценции и абсорбции позволяет выявить наличие второй полосы

эмиссии в уширенном экспериментальном спектре [1]. Существование второй полосы флуоресценции в спиртах было подтверждено спектроскопией высокого разрешения [1]. Можно отметить, что способность протонных растворителей (спиртов) образовывать водородные связи с растворенным веществом является дополнительным мощным механизмом нарушения симметрии в квадрупольных молекулах.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ (№ 20-53-00021) и гранта БРФФИ (№ P20R-340).

Литература

1. Bondarev, S.L., Raichenok, T.F., Tikhomirov, S.A., Kozlov, N.G., Mikhailova, T.V., Ivanov, A.I. // J. Phys. Chem. B, 2021, v. 125, pp.8117–8124.
2. Козлов, Н.Г., Жихарко, Ю. Д., Бондарев, С.Л., Барановский, А.В., Кнюкшто, В.Н., Басалаева, Л.И. // J. Appl. Spectroscopy, 2018, т 4, с. 343-350.
3. Feskov, S.V., Mikhailova, V.A., Ivanov, A.I. // J. Photochem. Photobiol. C, 2016, v. 29, pp. 48–72.
4. Ionkin, V.N., Ivanov, A.I. // J. Phys. Chem. A, 2009, v. 113, pp. 103–107.
5. Mikhailova, V.A., Malykhin, R.E., Ivanov A.I. // Photochem. Photobiol. Sci., 2018, v. 17, pp. 607–616.
6. Mikhailova, T.V., Mikhailova, V.A., Ivanov, A.I. // J. Phys. Chem. C, 2018, v. 122, pp. 25247– 25259.

© Михайлова Т.В., Михайлова В.А., Иванов А.И., Бондарев С.Л., Райченко Т.Ф., Тихомиров С.А., Козлов Н.Г., 2021 г.

МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА 4,7-ДИГИДРОКСИКУМАРИНА

Сафронов А.М., Рахмеев Р.Г.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Ранее было проведено комплексное исследование молекул производных фталида, которые являются мономерами для синтеза полиариленфталидов, тонкие пленки которых проявляют эффект зарядовой неустойчивости, что приводит к уменьшению на несколько порядков их удельного сопротивления [1]. Было показано, что переход полимерной пленки в высокопроводящее состояние связан с тенденцией мономерного соединения к раскрытию пятичленного цикла [2]. Логично, что подобный разрыв связи более вероятен в газовой фазе и в присутствии избыточного заряда, что в случае отдельной молекулы соответствует молекулярному аниону [3]. Позднее это было подтверждено в работе [4], в которой методами спектроскопии проходящих электронов и масс-спектрометрии отрицательных ионов диссоциативного захвата электронов была исследована молекула фталида. Эксперименты показали, что образование долгоживущих молекулярных отрицательных ионов происходит с разрывом связи С–О. Было выдвинуто предположение, что полимерные пленки, мономеры которых содержат в себе шестичленный цикл, так же могут переходить в высокопроводящее состояние по схожему механизму [5] и они представляют большой интерес для исследований.

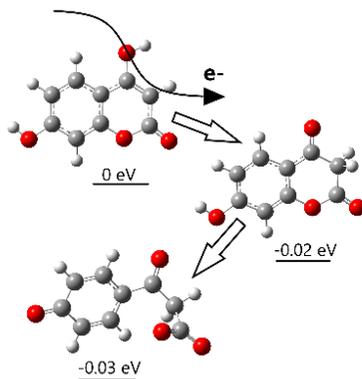


Рис. 1. Механизм образования отрицательного молекулярного иона

Данная работа, посвящена изучению механизма образования отрицательного молекулярного иона 4,7-дигидроксикумарина.

Результаты расчетов методом B3LYP/6-31G+(d), приведенные на рис.1, показывают, что это может быть связано с миграцией атома водорода с последующим раскрытием 6-членного цикла в молекуле, которые приводят к колебательно-возбужденному состоянию аниона с открытой структурой.

Исследование проведено при поддержке Российского научного фонда, проект № 19-13-00021.

Литература

1. Лачинов А.Н., Жеребов А.Ю., Корнилов В.М. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 52. Вып. 2. С. 742–745.
2. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В. // УФН. 2006. Т. 176. № 12. С. 249–266.
3. Зыков Б.Г., Васильев Ю.В., Фалько В.С., Лачинов А.Н., Хвостенко В.И., Гилева Н.Г. // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 64. Вып. 6. С. 402–406.
4. Asfandiurov N.L., Pshenichnyuk S.A., Vorob'ev A.S., Nafikova E.P., Lachinov A.N., Kraikin V.A., Modelli A. // J. Chem. Phys. 2015. Vol. 142. P. 174308.
5. Таюпов М.М., Рахмеев Р.Г., Асфандиаров Н.Л., Пшеничнюк С.А., Математическая физика и компьютерное моделирование. 2020. Том 23. № 3, стр. 45-59.

© Сафронов А.М., Рахмеев Р.Г., 2021 г.

МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ МОРСКОГО ЛЬДА ДЛЯ ГЛОБАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ ПЛАВ

^{1,2}Алипова К.А., ³Кошкина А.С., ⁴Лапин Т.Е., ³Озерова Н.А.,

⁵Переладова Н.А., ⁶Сахно А.В., ^{1,2}Фадеев Р.Ю.

¹ФГБУ Гидрометцентр России, г. Москва, Россия

²ИВМ им. Г.И. Марчука РАН, г. Москва, Россия

³РГГМУ, г. Санкт-Петербург, Россия

⁴МФТИ, г. Долгопрудный, Россия

⁵НГУ, г. Новосибирск, Россия

⁶НИУ «МИЭТ», г. Москва, г. Зеленоград, Россия

Неотъемлемой частью глобальных моделей атмосферы для численного прогноза погоды является блок параметризованного описания процессов подсеточного масштаба. В работе представлены методы одномерной параметризации морского льда, которые позволяют рассчитывать температуру его поверхности - нижнее граничное условие для глобальной модели атмосферы ПЛАВ. Отличительной особенностью методов является учёт фазовых переходов, а также невысокая вычислительная сложность. Особенность реализации рассматриваемых параметризаций заключается в возможности применения технологии распараллеливания на общей памяти OpenMP. Работа над параметризацией была инициирована на школе “Вычислительные технологии, многомерный анализ данных и моделирование” в образовательном центре Сириус.

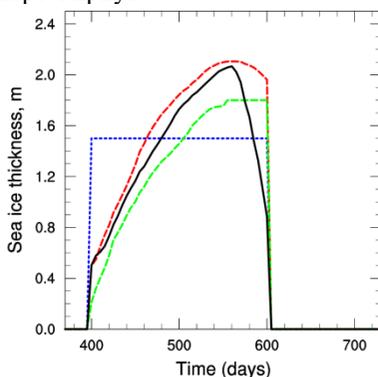


Рис. 4. Изменение толщины льда за один сезон

На рис. 1 представлены результаты моделирования с использованием двух параметризаций: первая параметризация – зелёным, вторая параметризация (версия 1 и 2) – красным и чёрным соответственно.

© Алипова К.А., Кошкина А.С., Лапин Т.Е., Озерова Н.А.,
Переладова Н.А., Сахно А.В., Фадеев Р.Ю., 2021 г.

РЕЗОНАНСНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ КУМАРИН-3-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Сафронов А.М., Пшеничнюк С.А.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Метод масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата медленных электронов ранее использовался для интерпретации механизмов биохимических превращений, происходящих в живых клетках [1, 2]. Ключевой идеей предлагаемого подхода является предположение о подобии фрагментов, образующихся при диссоциации отрицательных молекулярных ионов и метаболитов биологически активных органических соединений, распад которых происходит вблизи электрон-транспортных цепей в живой клетке [3].

В данной работе, такой подход применен в отношении бензофуран-3(2H)-она, который, согласно недавним исследованиям, обладает высокой антимикробной и умеренной антиоксидантной активностью [4].

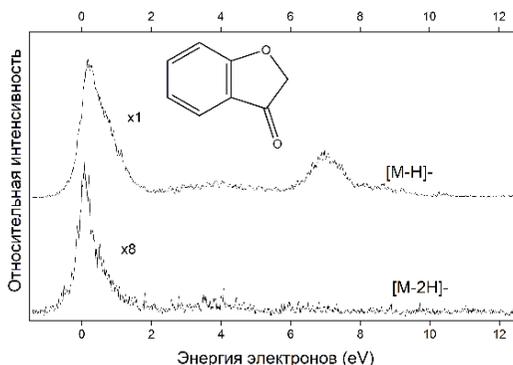


Рис. 1. Спектр диссоциативного захвата электронов для молекул бензофуран-3(2H)-она

Литература

1. Pshenichnyuk S. A., Modelli A. and Komolov A. S. Interconnections between dissociative electron attachment and electron-driven biological processes, *Int. Rev. Phys. Chem.*, V. 37, P. 125–70.

2. Таюпов М.М., Рахмеев Р.Г., Маркова А.В., Сафронов А.М., Математическая физика и компьютерное моделирование, Том 24, № 2, 2021, с. 54-67.
3. Pshenichnyuk S.A., Modelli A., Vorob'ev A.S., Asfandiarov N.L., Nafikova E.P., Rakhmeyev R.G., et al. Fragmentation of chlorpyrifos by thermal electron attachment: a likely relation to its metabolism and toxicity Phys. Chem. Chem. Phys., 20 (2018), pp. 22272-22283.
4. Шубин Д. А. и др. Изучение биологической и антиоксидантной активности (Z)-2-(гидроксипбензилиден)-4, 6-дигидрокси-7-метилбензофуран-3 (2H)-онов //Бутлеровские сообщения. – 2020. – Т. 61. – №. 2. – С. 37-45.

© Сафронов А.М., Пшеничнюк С.А., 2021 г.

ПОДБОР ПАРАМЕТРА ДЛЯ ОЦЕНКИ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ ПО ДАННЫМ О СРЕДНИХ ВРЕМЕНАХ ЖИЗНИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ АНИОНОВ

Маркова А.В.^{1,2}, Асфандиаров Н.Л.²

¹Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Величина сродства к электрону $E A_a$ – одна из важнейших характеристик молекулы, определяющая времена жизни отрицательных молекулярных относительно автоотщепления (спонтанного выброса) избыточного электрона, каналы диссоциации и энергии появления осколочных ОИ, пути и константы скорости химических реакций, проходящих через стадию образования анионов. Ранее нами была разработана методика количественной оценки величины $E A_a$ по данным о средних временах жизни молекулярных анионов [1, 2]. Коротко, все сводится к формуле вида:

$$E A_a = \frac{\ln(\tau_a/t_0) \cdot (N k_B T + \varepsilon)}{N - \ln(\tau_a/t_0)}$$

В этой формуле, в основном, присутствуют измеряемые в эксперименте величины, за исключением t_0 – это характерное время движения иона по координате реакции, параметр теории, величина которого варьируется в зависимости от класса соединения. Еще одной физической интерпретацией параметра t_0 является характерное время перераспределения колебательной энергии между внутренними степенями свободы иона.

Оптимальной методикой оценки сродства к электрону является исследование рядов родственных соединений, для части которых (или хотя бы одного из них) величина $E A_a$ известна [3]. Тогда молекулы с известным $E A_a$ можно использовать как опорные точки для выбора величины t_0 . В работе [4] подробнее описаны результаты описанных выше преобразований. Там было показано, что варьирование величины t_0 может существенно улучшить согласие результатов с имеющимися в литературе данными о величинах сродства к электрону.

В таблице 1, показаны рассчитанные по формуле (2) для обоих веществ значения $E A_a$, при различных параметрах τ_0 . Рассчитанная методом V3LYP/6-31G+(d) величина $E A_a$ молекул составляет 0,68 и 0,56 eV,

соответственно, что достаточно близко к значению, оцененному по экспериментальным данным при параметре $\tau_0 = 1000 \mu\text{s}$. В целом же корреляция адиабатического сродства к электрону и параметра τ_0 свидетельствует о том, что квантово-химические расчеты могут достаточно сильно завышать величину E_{Aa} .

Таблица 1

τ_0	100	500	1000
E_{Aa} 2-метилхиноксалин	0,93	0,81	0,77
E_{Aa} 2,3-диметилхиноксалин	0,88	0,78	0,73

Литература

1. Asfandiarov N.L., Pshenichnyuk S.A., Vorob'ev A.S. et al., Rapid Commun. Mass Spectrom., 2014. V. 128. P. 1580.
2. Таюпов М.М., Рахмеев Р.Г., Маркова А.В., Сафронов А.М., Математическая физика и компьютерное моделирование, Том 24, № 2, 2021, с. 54-67.
3. Asfandiarov N.L., Pshenichnyuk S.A., Vorob'ev A.S. et al., Ibid. 2015. V. 29. P. 910.
4. N. Asfandiarov, S. Pshenichnyuk, E. Nafikova, A. Modelli // Book of Contributed Papers. 21st Symposium on Application of Plasma Processes, Strbke Pleso, Slovakia, 2017, p. 62.

© Маркова А.В., Асфандиаров Н.Л., 2021 г.

ОБРАТНЫЙ ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В НАНО-СТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНИТНЫЙ ДИЭЛЕКТРИК

Селезнёв Д.В.¹, Пугач Н.Г.¹, Екомасов Е.Г.²

¹Национальный Исследовательский Университет ВШЭ, Москва, Россия

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Микроэлектроника, основанная на переносе спина, является перспективным направлением научных исследований. Отдельно можно выделить направление сверхпроводящей спинтроники[1], которое открывает новые горизонты для создания более совершенных вычислительных устройств. Особый интерес в этой области представляют квантовые явления в структурах, состоящих из слоёв сверхпроводника и ферромагнетика. Таким квантовым явлением является обратный эффект близости, при котором наблюдается генерация спин-триплетных куперовских пар вблизи границы контакта сверхпроводника с ферромагнитным диэлектриком.

В данной работе производилось численное моделирование структуры сверхпроводник-ферромагнитный диэлектрик в среде технических расчётов Matlab, которое сопоставлялось с ранее полученным аналитическим способом [2-3]. Для этого решались уравнения Узаделя в параметризации Риккати с граничными условиями для случая сильной спиновой поляризации ферромагнетика.

Д. Селезнёв благодарит проект «Экспериментальное и теоретическое исследование неравновесных явлений в гибридных наноструктурах» Научного фонда НИУ ВШЭ, Н. Пугач и Е. Екомасов благодарят проект сотрудничества НИУ ВШЭ и БГПУ «Зеркальные Лаборатории».

Литература

1. J. Linder and J. W. A. Robinson. Superconducting spintronics // Nature Physics 11, 2015, с307–315.
2. V.O. Yagovtsev and N.G. Pugach and M.Eschrig. The inverse proximity effect in strong ferromagnet–superconductor structures// Supercond. Sci. Technol., 2021.
3. В. О. Яговцев, Н. Г. Пугач. Намагниченность, наведенная в сверхпроводнике из-за эффекта близости с ферромагнитным диэлектриком// физика металлов и металловедение, 2020, том 121, № 3, с. 277–282.

© Селезнёв Д.В., Пугач Н.Г., Екомасов Е.Г., 2021 г.

СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СПИНОВЫЕ ВЕНТИЛИ - ЭЛЕМЕНТЫ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СПИНТРОНИКИ

Пугач Н.Г.

Национальный исследовательский университет
Высшая школа экономики, г. Москва, Россия

Сверхпроводниковая спинтроника является новой областью в наноэлектронике квантовых систем, которая появилась в 21 веке и активно развивается последние годы. Её основной идеей, как и в обычной спинтронике, является использование переноса спина электронов для хранения и обработки информации, но реализованная в сверхпроводящих контурах при низкой температуре.

Основные приложения сверхпроводниковой спинтроники включают магнитную память, Джозефсоновскую логику, кубиты, и квантовые компьютеры.

Основными, хорошо разработанными на сегодняшний день элементами сверхпроводниковой спинтроники являются сверхпроводящие спиновые вентили. Будет дан обзор этих разработок. Будут обсуждаться перспективы и проблемы их применения в качестве совместимой магнитной памяти для сверхпроводниковых классических и квантовых логических устройств. В заключение расскажу о нашей последней разработке – сверхпроводниковых спиновых вентилях нового типа и их управлением с помощью импульсов магнитного поля.

Автор благодарит проект «Зеркальные Лаборатории» НИУ ВШЭ за поддержку сотрудничества. Результаты по спиральным спиновым вентилям получены при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00316. Работа по магнотному управлению спиновыми вентилями поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, Мегагрант № 075-15-2019-1934.

© Пугач Н.Г., 2021 г.

ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО РЕЗОНАНСНОМУ ЗАХВАТУ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПРИМЕРЕ МОЛЕКУЛ 2-КУМАРАНОНА

Маркова А.В.^{1,2}, Рахмеев Р.Г.²

¹Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

При изучении механизмов и энергетики диссоциативного захвата электронов, установлении спектроскопических состояний отрицательных ионов, а также при решении разнообразных аналитических задач методом масс-спектрометрии резонансного захвата электронов (МС ОИ РЗЭ) очень важны достоверность и воспроизводимость [1] энергетических характеристик кривых эффективного выхода отрицательных ионов (КЭВ ОИ). Почти все преимущества метода так или иначе связаны с энергетической шкалой: сдвиг резонансов на шкале энергий, наличие нескольких резонансов для одного сорта ионов, появление новых резонансов и т.д. Тщательная калибровка шкалы E_e вызвана еще одним обстоятельством — сравнение данных нескольких комплементарных методов (МС ОИ РЗЭ, ФЭС, УФ-спектроскопии и спектроскопии проходящих электронов), а также использованием в термохимии.

В ходе данной работы, совместно с коллективом лаборатории физики атомных столкновений ИФМК УФИЦ РАН, были проведены исследования воспроизводимости экспериментов по резонансному захвату электронов молекулами 2-кумаранона. Для этого, был проведен анализ КЭВ при различных температурах ячейки столкновений и при разных токах подаваемых на источник электронов. В качестве реперных точек использовались резонансные пики SF_5^- (127 а.е.м.), SF_6^- (146 а.е.м.), Cl^- (35 и 37 а.е.м.). Откалиброванные по шкале энергии электронов пики кривых эффективного выхода совпали между собой, что показывает хорошую воспроизводимость проводимого эксперимента.

Литература

1. В.А. Мазунов, Ю.В. Васильев, М.В. Муфтахов, В.И. Хвостенко, «Воспроизводимость результатов масс-спектрометрического анализа с резонансным захватом электронов», Журн. аналит. химии 44, 1989–1994 (1989).

© Маркова А.В., Рахмеев Р.Г., 2021 г.

ВЕРОЯТНОСТЬ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА НА ПАРАМАГНИТНЫЙ ЦЕНТР

Михайлова В.А., Минакова Е.Н.

Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия

Бурное развитие, которое в последние годы наблюдается в области разработки электронных устройств на молекулярных компонентах, стимулирует и теоретические исследования механизмов физических процессов, протекающих в молекулярных системах. Одним из таких процессов является перенос элементарного заряда (электрона, протона). Это один из наиболее распространенных элементарных актов многих сложных химических, биохимических реакций, таких как дыхание, фотосинтез. С процессом переноса заряда также связан принцип работы молекулярных электронных устройств, например, фотовольтаических.

Целью данной работы, является теоретическое исследование динамики фотоиндуцированного переноса электрона с донора на акцептор, находящихся в полярной жидкости, при этом спин акцептора S_A считается ненулевым, например, предполагается $S_A=1/2$. В этом случае появляется возможность заселения, триплетного состояния донора. При этом это заселение не связано с интеркомбинационной конверсией между синглетным и триплетным состояниями донора, а вызвано последовательным переносом электрона с донора на акцептор и обратно на донор, но в триплетном состоянии. Очевидно, что такой процесс может представлять собой перспективный механизм накопления триплетных молекул (доноров).

Для количественного описания заселения триплетного состояния донора, обусловленного фотопереносом электрона из синглетного состояния донора на парамагнитный акцептор, далее используется хорошо апробированная стохастическая модель [1-5] и рассматриваются три состояния донорно-акцепторной системы: первое – электронно-возбужденное состояние донорно-акцепторной пары (1,S), сформированное в результате фотовозбуждения донора, второе – триплетное состояние донора (электрон на доноре, (2,T)) и третье – переносимый электрон локализован на акцепторе, спиновое состояние которого является синглетным (3,S) (рис. 1). Свободные энергии Гиббса для заданных состояний выбираются в виде:

$$U_1(Q) = Q^2 / 4E_r; \quad U_2(Q) = Q^2 / 4E_r - 2J_D; \quad U_3(Q) = (Q - 2E_r)^2 / 4E_r - \Delta G_{I3},$$

где ΔG_{I3} – изменение свободной энергии для перехода между состояниями

(1,S) и (3,S), J_D – величина расщепления между синглетным и триплетным состояниями донора, E_r – энергия реорганизации среды.

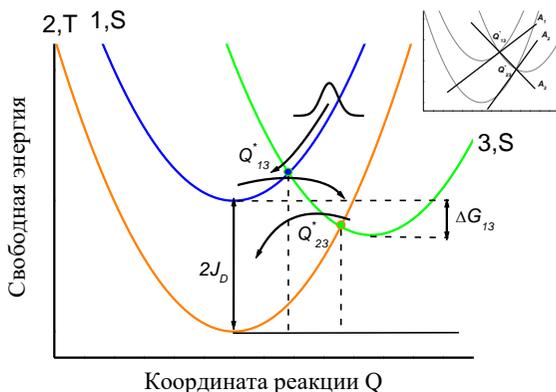


Рис. 1. Сечение поверхностей свободной потенциальной энергии вдоль координаты реакции Q . Состояния системы: (1,S) – переносимый электрон локализован на доноре, спиновое состояние донора – синглетное; (2,T) – переносимый электрон локализован на доноре, спиновое состояние донора – триплетное; (3,S) – переносимый электрон локализован на акцепторе, спиновое состояние акцептора – синглетное

В рамках стохастического подхода в квазистационарном случае [1-5] динамика переходов в рассматриваемой системы "донорно-акцепторная пара+среда" описывается системой дифференциальных уравнений для функций распределения вероятностей ρ_i ($i=1,2,3$):

$$\begin{aligned}
 I\delta(Q-Q_0) + \frac{2\pi V_{13}^2}{\hbar}(\rho_3 - \rho_1)\delta(Q-Q_{13}^*) + L_1\rho_1 &= 0 \\
 -\frac{2\pi\Delta_{32}^2}{\hbar}(\rho_3 - \rho_1)\delta(Q-Q_{13}^*) - \frac{2\pi\Delta_{32}^2}{\hbar}(\rho_3 - \rho_2)\delta(Q-Q_{23}^*) + L_3\rho_3 &= 0 \\
 -\frac{2\pi\Delta_{32}^2}{\hbar}(\rho_2 - \rho_3)\delta(Q-Q_{23}^*) + L_2\rho_2 &= 0
 \end{aligned}$$

где операторы L_i ($i=1,2,3$) описывают диффузионное движение вдоль координаты реакции на термах U_i и имеют вид [1-5]:

$$L_i = \frac{2E_r}{\tau_L} \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial Q^2} + \frac{\partial U_i}{\partial Q} \frac{\partial}{\partial Q} + k_B T \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right), i=1,2,3 \quad 2)$$

Здесь δ -образный источник, I - источник в начальный момент времени, T - температура; k_B - постоянная Больцмана; \hbar - постоянная Планка, V_{13} и

V_{23} – матричные элементы электронных переходов, локализованных в точках пересечения термов с координатами Q_{13}^* и Q_{23}^* (см. рис. 1) соответственно, причем $\Delta_{23}=(3/8)^{1/2}V_{23}$.

Заселение триплетного состояния донора происходит не вследствие интеркомбинационной конверсии, а в результате последовательного переноса электрона с донора на акцептор (переход $1 \rightarrow 3$) и обратно (переход $3 \rightarrow 2$), вероятность которого определяется выражением:

$$W_T = \frac{W_{13}W_{23}}{1 - W_{13}W_{23} \exp\left\{-\left|\Delta G_{13}^*\right|/k_B T\right\}} \left(A_1 / |A_2|\right)$$

где параметр $\Delta G_{13}^* = U_1(Q_{13}^*) - U_3(Q_{23}^*)$, определяет величину вертикального энергетического зазора между стоками локализованными в точках с координатами Q_{13}^* и Q_{23}^* (см. рис. 1), параметры A_α определяют наклоны касательных к термам в точках их пересечения Q_{13}^* и Q_{23}^* , равны средним значениям скорости движения частиц в окрестности этих точек. Вероятности переходов на каждом из стоков рассчитываются по формулам $W_{13} = 2\pi V_{13}^2 / [\hbar A_1 (1 + g_{13})]$, $W_{23} = 2\pi \Delta_{23}^2 / [\hbar |A_2| (1 + g_{23})]$. Здесь g_{13} и g_{12} – параметры неадиабатичности переходов

$$g_{13} = \frac{2\pi V_{13}^2}{\hbar} \left[\frac{1}{|A_1|} + \frac{1}{|A_3|} \right], \quad g_{23} = \frac{2\pi \Delta_{23}^2}{\hbar} \left[\frac{1}{|A_3|} + \frac{1}{|A_2|} \right]$$

зависящие только от наклонов термов.

Аналитические выражения позволяют количественно оценить влияние основных параметров модели на вероятность заселения триплетного состояния донора.

Литература

1. Иванов, А. И. В. А. Михайлова // Успехи химии. – 2010. – Т. 79. – Р. 1139–1163.
2. Feskov, S.V., Mikhailova, V.A., Ivanov, A.I. // J. Photochem. Photobiol. C, 2016, v. 29, pp. 48–72.
3. [Михайлова В.А., Феськов С.В., Иванов А.И. Глава 1. Моделирование неравновесных эффектов в сверхбыстрых фотохимических реакциях. с.4 - 65. Монография Моделирование неравновесных химико-физических процессов./ Михайлова В.А., Феськов С.В., Иванов А.И. и др. / Волгоград: Изд-во ВолГУ. 2018. 256С.](#)
4. Иванов А.И., Михайлова В.А., Феськов С.В. // Журнал физической химии. –1997. –Т. 71, № 8. – С.1487-1491.
5. Михайлова Т.В, Рощина Д.А, Михайлова Е.А, Михайлова В.А // Вестник ВолГУ. –2016. –Т.3(34). – С.63.

© Михайлова В.А., Минакова Е.Н., 2021 г.

НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Байбулова Г.Ш.¹, Алтыншина Г.Р.¹, Лачинов А.Н.^{1,2}

¹Башкирский государственный педагогический университет
им. М.Акумлы, г. Уфа, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов уфиц ран, г. Уфа, Россия

Недавно в тонких пленках полиметилметакрилата (ПММА) были обнаружены необычные электронные явления [1]. В связи с этим целью настоящей работы является комплексное исследование надмолекулярной структуры тонких пленок ПММА, в которых в результате процессов самоорганизации возникают массивы квазиодномерных электропроводящих структур. Исследования проводились методами квантовой химии. В качестве объекта исследования был выбран ПММА.

В процессе поликонденсации могут образовываться молекулы с различной геометрической структурой. В связи с этим для анализа строения молекул были рассмотрены четыре возможных типа молекулярных структур, различающихся направлением угла (линейная или спиральная синдиотактическая и изотактическая конфигурации).

В работе были смоделированы и проанализированы фрагменты полимерных макромолекул ПММА, состоящие из двух, трех, шести, девяти и двенадцати структурных единиц. Квантово-химические расчеты структур проводились полуэмпирическим методом в параметризации AM1 и методом теории функционала плотности (DFT) в приближении B3LYP/6-31+G(d).

Было установлено, что энергетически наиболее выгодными конфигурациями макромолекул являются линейная и спиральная синдиотактическая.

Из анализа полученных значений энтальпии реакций следует, что реакции являются экзотермическими, следовательно образование таких систем термодинамически выгодно. Наблюдаемые трансформации обусловлены стремлением молекулы принять наиболее выгодное положение с минимальной полной энергией.

Литература

1. А.Н. Лачинов, Г.Р. Алтыншина, Г.Ш. Байбулова, М.Ф. Киан, А.Р. Юсупов Физика твердого тела, 2021, том 63, вып. 4, с 554-558.

© Байбулова Г.Ш., Алтыншина Г.Р., Лачинов А.Н. 2021 г.

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ: ТЕКУЩЕЕ ПОЛОЖЕНИЕ И ВОЗМОЖНОЕ БУДУЩЕЕ

Скуратов М.И., Пугач Н.Г.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа
экономики», г. Москва, Россия

Нейронные сети – активно развивающаяся технология, появившаяся еще в 20 веке, но особенно быстро развивающаяся и используемая в наше время. Ее основной идеей является математическая модель, включая, но не ограничиваясь, ее программной или аппаратной реализацией, построенная по принципу организации и функционирования биологических нейронных сетей – сетей нервных клеток.

Основные реализации включают в себя программные версии, однако все чаще и чаще говорят об аппаратных решениях в данной сфере.

Основными разработанными решениями для построения аппаратных нейронных сетей являются полупроводниковые реализации. Будет дан обзор этих решений, будут обсуждаться преимущества и недостатки таких аппаратных реализаций. В завершение будет представлен ряд возможных решений с применением сверхпроводниковых структур.

Автор благодарит проект «Зеркальные Лаборатории» НИУ ВШЭ за поддержку сотрудничества.

© Скуратов М.И., Пугач Н.Г., 2021 г.

**ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА**Квашнина Е.О.¹, Ильин И.П.¹, Якупова Р.Р.¹, Михлисова Д.И.¹,Карамов Д.Д.²¹БГПУ им.М.Акмуллы, ²ИФМК УФИЦ РАН, г.Уфа, Россия

В последние годы органические диэлектрические пленки вызывают большой интерес с точки зрения их потенциальных применений. Полимер полиметилметакрилат (ПММА) рассматривается как вариант диэлектрика затвора из-за его высокого удельного сопротивления (2×10^{15} Ом·см) и диэлектрической проницаемости, аналогичной SiO₂. ПММА можно использовать в качестве изоляционного слоя в полевом транзисторе, который в последнее время широко изучался и имеет хорошие электрические характеристики. Также ПММА широко используется в качестве диэлектрической матрицы при создании нанокomпозиционных структур для возможных применений в наносенсорике, фотовольтаике и биомедицине. В этом аспекте, исследования электрофизических свойств ультратонких пленок ПММА является актуальной задачей.

В работе представлены результаты исследования температурных зависимостей вольт-фарадных характеристик (ВФХ) МДП структур на основе пленок ПММА, изготовленных методом центрифугирования из раствора в циклогексаноне. ВФХ исследовались в диапазоне от 20 кГц до 1 МГц, при температуре от 70 °С до 150 °С, в диапазоне напряжений от -20 до 20 В. Анализ структуры Al / PMMA / p-Si показал:

- Уменьшение емкости с увеличением частоты для исследуемого диапазона напряжения смещения, которое может быть связано с такими причинами, как уменьшение скорости ориентации диполей в быстро меняющемся электрическом поле и медленное высвобождение носителей заряда из относительно глубоких ловушек в аморфной пленке ПММА.

- Увеличение значения емкости при прямом смещении для отожженных пленок указывает на то, что эти пленки имеют меньше дефектов, таких как пустоты, напряжения, неоднородность и т.д., отсутствие молекул растворителя, а также может быть связано с локальной структурной перестройкой полимерных цепей.

Вывод: отжиг при температуре выше 100°С и увеличение частоты сигнала измерительного устройства приводит к уменьшению концентрации донорных уровней N_A в полимерной пленке ПММА. Таким образом, температурный диапазон изготовления и эксплуатации структур на основе ПММА будет вносить вклад на их электрофизические свойства.

© Квашнина Е.О., Ильин И.П., Якупова Р.Р.,
Михлисова Д.И., Карамов Д.Д., 2021 г.

**МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБЪЁМНОГО
МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА Vit-105,
ПОДВЕРГНУТОГО ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЮ**

Титов В.В.¹, Муллаянов А.И.², Гундерова С.Д.¹, Гундеров Д.В.^{1,3}

¹Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

³Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Преимуществом аморфных сплавов – объёмных металлических стёкол (ОМС) – являются большая прочность и большие упругие деформации (около 2%) [1,2]. Однако их пластичность мала. Причиной снижения пластичности аморфных сплавов является осуществление деформации возникновением и движением полос сдвига (в отличии от дислокаций в кристаллических материалах). Одним из путей повышения пластичности является термоциклирование - воздействия многократным погружением образцов в жидкий азот (-196° С) с последующим отогревом до комнатной температуры [3]. Проведены исследования механического поведения образцов аморфного сплава – ОМС Vit-105 (состава $Zr_{53}Cu_{18}Ni_{14}Al_{10}Ti_5$), подвергнутых термоциклированию.

Анализ данных после испытаний на трёхточечный изгиб показывает, что после одного термоцикла сплав демонстрирует повышение пластичности (до 8%) и больший прогиб (до 11%) по сравнению с исходным состоянием (пластичность до 3%, величина прогиба около 7%). При 10 термоциклах пластичность существенно уменьшается, наблюдается скорее хрупкое разрушение образцов.

Литература

1. Глезер, А.М. Структура и механические свойства аморфных сплавов / Глезер А.М., Молотилов Б.В. // М.: Металлургия(1992) - С., 208.
2. Судзуки, К. Аморфные металлы / Судзуки К., Фудзимори Х., Хасимото К., Перевод с япон. под. ред. Масумото Ц.// М.: Металлургия(1987) – С., 328.
3. On cryothermal cycling as a method for inducing structural changes in metallic glasses / S.V. Ketov, A.S. Trifonov, Y.P. Ivanov et al. // NPG Asia Materials. 2018. Vol. 10. P. 137–145.

© Титов В.В., Муллаянов А.И., Гундерова С.Д., Гундеров Д.В., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ МОДУЛИРОВАННЫХ СТРУКТУР СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Ni-Mn-In

Ерагер К.Р., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

В последние десятилетия проявляется большой интерес к классу тройных интерметаллических соединений, известных как сплавы Гейслера, обладающих рядом таких свойств, как гигантский магнитокалорический эффект, магнитосопротивление и т.д. Функциональные свойства ферромагнитных материалов с эффектом памяти формы обычно достигаются за счет образования модулированной мартенситной структуры.

Нами рассматривалась модулированная структура сплава Гейслера $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{37.5}\text{In}_{12.5}$ 6М: (3М) состоящая из 24 атомов с ферро- и ферримагнитным упорядочением магнитных моментов. Исследования из первых принципов были выполнены с помощью программного пакета «VASP» [1] в приближении GGA. Интегрирование зоны Бриллюэна проводилось на сетке $(12 \times 4 \times 8)$.

По полученным данным построен график зависимости энергии кристалла (ΔE) от тетрагонального искажения (c/a), показывающий, что энергия структуры 6М превышает по модулю энергию немодулированного мартенсита.

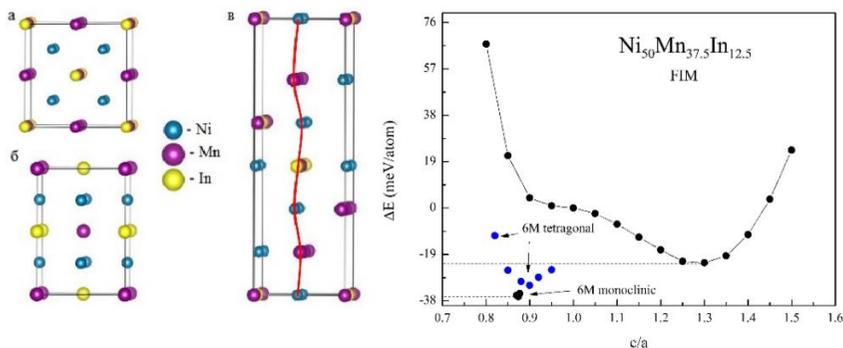


Рис. 1. Кристаллическая структура $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{37.5}\text{In}_{12.5}$ (а) –аустенита; (б) – немодулированного мартенсита (НМ) и (в) –структуры 6М; зависимость энергии кристалла (ΔE) от тетрагонального искажения (c/a)

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 17-72-20022.

Литература

1. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

© Ерагер К.Р., Соколовский В.В., Бучельников В.Д., 2021 г.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА ГРАФЕН-НИКЕЛЬ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Сафина Л.Р.¹, Баимова Ю.А.²

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа,
Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Важной областью является изучение возможности применения скомканного графена для создания новых композитных материалов [1, 2]. В данной работе методом молекулярно-динамического моделирования исследуются механические свойства композита графен-никель. Для создания композиционного материала нового поколения структура скомканного графена рассматривается как матрица, а наночастицы никеля, состоящие из нескольких размеров ($d = 6.2, 9.0, 10.4 \text{ \AA}$), как наполнители. Таким образом, исследуются три системы, где варьируется только количество атомов никеля (1344, 3008 и 4992 атомов), а количество атомов углерода остается неизменным (16128 атомов). Для того, чтобы сформировать прочный композитный материал, начальные структуры выдерживаются при комнатной температуре 300 К. Далее прикладывается гидростатическое сжатие для устранения пустот между единичными элементами композита. Следующим этапом структуры подвергаются всестороннему сжатию при повышенных температурах (1000-2000 К). Механические свойства композита оцениваются с использованием одноосного растяжения.

В результате моделирования выявлено, что композиционный материал может быть получен для всего рассматриваемого числа атомов никеля. Однако с увеличением количества атомов никеля в системе прочность композита снижается. Следовательно, для получения композита с улучшенными механическими свойствами желательно использовать наночастицы малых размеров, чтобы они могли равномерно распространяться внутри пор смятого графена, способствуя деформации и появлению новых химических связей между отдельными элементами композита.

Авторы благодарят Российский научный фонд (грант №20-72-11012).

Литература

1. Safina L.R., Baimova J.A., Kgylova K.A., Murzaev R.T., Mulyukov R.R. Simulation of metal-graphene composites by molecular dynamics: a review // Letters on Materials. 2020, v. 10, №3, p. 351-360.
2. Курапова О.Ю., Смирнов И.В., Соловьева Е.Н., Арчаков И.Ю., Конаков В.Г. Влияние восстановленного оксида графена (rGO) и терморасширенного графита (TEFG) на механические свойства никель-графеновых композитов // Письма о материалах. 2020, т. 10, №2. с. 164-169.

© Сафина Л.Р., Баимова Ю.А., 2021 г.

СТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ АЛЮМОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДАМИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

¹Басырова Р.А., ^{2,3}Халикова Г.Р., ^{2,3}Трифонов В.Г.

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,

³Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия

В работе алюмоматричные композиционные материалы (АКМ) были изготовлены методами интенсивной пластической деформации, такими как кручение под высоким давлением (КВД) и обработка трением с перемешиванием (ОТП). В качестве армирующего компонента применялись частицы SiC ($6,4 \pm 0,2$ мкм²). В случае КВД, стружка из чистого алюминия (99,99 мас.%) и порошок SiC (после предварительного перемешивания в шаровой мельнице) подверглись консолидации. В случае ОТП, порошок SiC в твердофазном состоянии был замешан в алюминиевый сплав АК4-1. В обоих случаях были изготовлены АКМ. В процессе КВД деформация сдвига была достаточной для фрагментации исходных конгломератов частиц SiC, но не достаточной для их равномерного распределения в алюминиевой матрице и получения однородной структуры. Поэтому наблюдались конгломераты раздробленных частиц SiC и отдельные фрагментированные частицы SiC. Средняя площадь конгломератов и отдельных частиц SiC уменьшилась с 367 ± 53 мкм² и $1,66 \pm 0,11$ мкм² в центре до 193 ± 35 мкм² и $0,72 \pm 0,02$ мкм² на периферии образцов, соответственно. В этом случае микротвердость АКМ увеличивалась от центра к периферии образцов с около 69 HV до около 106 HV. АКМ с частицами SiC был получен в зоне перемешивания при обработке ОТП. Средняя площадь частиц SiC уменьшилась до $0,13 \pm 0,01$ мкм². Зона перемешивания АКМ, содержащая армированные частицы SiC, обладает самой высокой твердостью 127-176 HV. В целом, микротвердость зоны обработки ОТП выше, чем у основного материала (около 86 HV).

© Басырова Р.А., Халикова Г.Р., Трифонов В.Г., 2021 г

РЕНТГЕНОФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ СКАНИРУЮЩАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУЛЬФИДОВ МЕДИ $K_xCu_{1.97}S$ ($0 < x < 0.05$)

Ахметгалиев Б.М.¹, Палымбетов Р. Ш.², Сахабаева С.², Балапанов М.Х.¹

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,
г. Нур-Султан, Казахстан

Сульфиды меди и их сплавы с щелочными металлами известны как перспективные термоэлектрические материалы [1,2]. В работе Ли [3] получены нанопроволоки $KCu_{7-x}S_4$, показавшие повышенные термоэлектрические свойства по сравнению с нанокристаллами Cu_7S_4 . При прессовании нанопроволок в объемный материал наблюдались низкая теплопроводность (менее $0.5 \text{ Вт м}^{-1}\text{К}^{-1}$ в интервале 325 - 575 К) и большой коэффициент термо-э.д.с. ($0.1 \pm 0.19 \text{ мВ/К}$ в интервале 425-575 К). Это позволило получить для $KCu_{7-x}S_4$ высокие значения термоэлектрической добротности $ZT \approx 0.12$ при 350 К, $ZT \approx 0.19$ при 575 К. Более перспективными выглядят объемные поликристаллические материалы на основе сульфида меди. В работе [4] представлены результаты исследований сплава $K_{0.2}Cu_{1.8}S$ в интервале температур от 300 до 673 К. Выше 573 К наблюдались сильный рост коэффициента термо-э.д.с. (до 4 мВ/К) и снижение теплопроводности до $0.4 \text{ Вт/м}^2\text{К}$, приводящие к очень высокому пиковому значению безразмерной термоэлектрической эффективности $ZT = 3.5$ при 653 К.

В данной работе впервые синтезированы и изучены полупроводниковые сплавы с небольшим содержанием калия - $K_xCu_{1.97-x}S$ ($x = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05$). Идея работы состоит в том, чтобы изучить влияние легирования калием на сульфид меди в фазе $Cu_{1.97-x}S$ (джарлеит).

Образцы были синтезированы в расплаве смеси гидрооксидов NaOH и KOH около 165 °С. Рентгенофазовый анализ на дифрактометре Rigaku SmartLab показал, что при комнатной температуре образцы представляют собой смесь различных фаз сульфида меди. Так, в состав $K_{0.01}Cu_{1.96}S$ входят фазы $Cu_{1.97}S$ (моноклинный жарлеит), Cu_2S (моноклинный халькоцит), имеются следы кубической фазы оксида Cu_2O (пространственная группа $R\bar{3}m$). Сплав $K_{0.05}Cu_{1.94}S$ состоит из тетрагонального жарлеита $Cu_{1.96}S$ и моноклинного халькоцита (Cu_2S). Вычисленные из полуширины рентгеновских линий размеры кристаллитов лежат в интервале от 10 - 64 нм у $K_{0.01}Cu_{1.96}S$, 7 - 47 нм у $K_{0.05}Cu_{1.94}S$.

Фазовые переходы исследовались с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии на ДСК-калориметре DSC404 NETZSCH в атмосфере аргона. На рисунке 1 представлены ДСК кривые всех пяти образцов в сравнении с чистым Cu_2S .

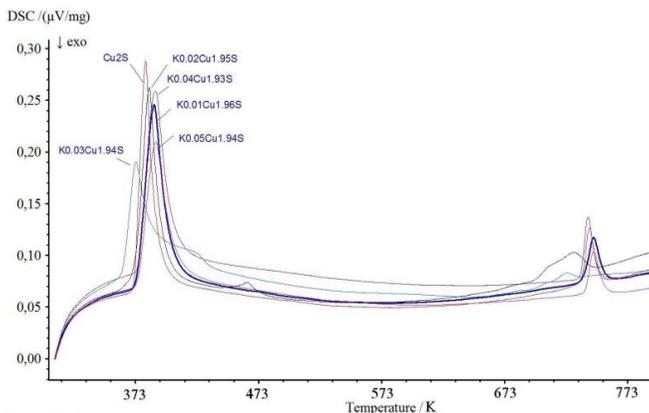


Рис.1. ДСК - кривые образцов $\text{K}_x\text{Cu}_{1.97-x}\text{S}$

Сильный термический эффект около 378 К присутствует у всех образцов, что соответствует высокому содержанию фазы моноклинного халькоцита в сплавах (фазовый переход в гексагональную фазу в бинарном Cu_2S происходит при 376 К [2]). На кривых ДСК всех сплавов имеется также эндотермический тепловой эффект в интервале 722 – 743 К. Для бинарного Cu_2S тепловой пик соответствует 737 К на рис.1. Возможно, что на температуру перехода повлияла нанокристалличность материала, так как по литературным данным он происходит при 710 К [2].

Литература

1. Qiu P., Shi X., Chen L. Cu-based thermoelectric materials // Energy Storage Materials. 2016. V.3. P. 85–97.
2. Kubenova M.M., Kuterbekov K.A., Balapanov M.Kh., Ishembetov R.Kh., Kabyshev A.M., Bekmyrza K.Zh. Some Thermoelectric Phenomena in Copper Chalcogenides Replaced by Lithium and Sodium Alkaline Metals. // Nanomaterials. 2021. V.11. P.2238 – 2286.
3. Li X., Hu C., Kang X., Len Q., Xi Y., Zhang K. and Liu H. Introducing kalium into copper sulfide for the enhancement of thermoelectric properties // J. Mater. Chem. A. 2013. V.1. P. 13721- 13726.
4. Балапанов М. Х., Ишембетов Р. Х., Ахметгалиев Б.М., Кутербек К. А., Палымбетов Р.Ш., Сахабаева С., Якшибаев Р. А. Явления переноса в суперионном сплаве $\text{K}_{0.2}\text{Cu}_{1.8}\text{S}$. // Вестник Башкирского университета. 2020. Т. 25, №4. С. 794-799.

© Ахметгалиев Б.М., Палымбетов Р. Ш., Сахабаева С.М., Балапанов М. Х., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КОБАЛЬТЕ

Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для получения материалов с нанокристаллической (НК) структурой часто применяют методы интенсивной пластической деформации (ИПД). При этом в материале образуется кристаллографическая текстура, которую необходимо учитывать для правильной интерпретации экспериментальных результатов. В данной работе приведены результаты исследований кристаллографической текстуры в НК кобальте, полученном ИПД кручением. Исследования проведены на рентгеновском дифрактометре ДРОН-7 на $\text{Co K}\alpha$ -излучении. В работе изучены интегральные интенсивности линий в зависимости от температуры отжига и полюсные фигуры.

Установлено, что линия (101) имеет максимальную интенсивность как для образца в виде порошка, так и для образца после пластической деформации. Однако линия (002) для порошка имеет интенсивность 27%, а для образца после пластической деформации – 82%. Это свидетельствует о том, что при пластической деформации плоскости кристаллитов (002) преимущественно ориентируются перпендикулярно направлению деформации. Так же в результате ИПД наблюдается уменьшение интенсивности линии (100) и увеличение интенсивности линии (103). Полученные результаты свидетельствуют о том, что при пластической деформации кобальта образуется кристаллографическая текстура.

В работе показано, что интегральные интенсивности линий (002), (103), (112), (102) и (100) с повышением температуры отжига до $T \sim 300^\circ\text{C}$ плавно увеличиваются (рис. 1). Мы полагаем, что этот рост связан, в основном, с возвратом, т.к. при возврате в результате совершенствования кристаллической структуры возрастает интенсивность всей линий. Интенсивность линии (100) в этом интервале температур меняется незначительно. В интервале температур $25 \div 450^\circ\text{C}$ рост интенсивности линии (002) коррелирует с уменьшением интенсивности линии (101). Данную зависимость мы связываем с образованием текстуры в образце в результате ИПД. Таким образом, полученные результаты показывают, что при пластической деформации в кобальте образуется текстура с преимущественной ориентацией кристаллографических плоскостей (002) перпендикулярно к направлению прессования.

Для подтверждения выводов, полученных выше, нами были проведены исследования полюсных фигур пластически деформированного кобальта [1]. Из полученных полюсных фигур следует, что при пластической деформации происходит преимущественная ориентация осей [002] кристаллитов параллельно направлению приложенной нагрузки (перпендикулярно к плоскости образца) и под углом $\varphi \sim 75^\circ$ к направлению прессования. Перпендикуляры к плоскостям (100), (101) и (110) ориентированы преимущественно нормально к оси прессования с большим углом рассеяния $\Delta\varphi \sim \pm 45 \sim 60^\circ$.

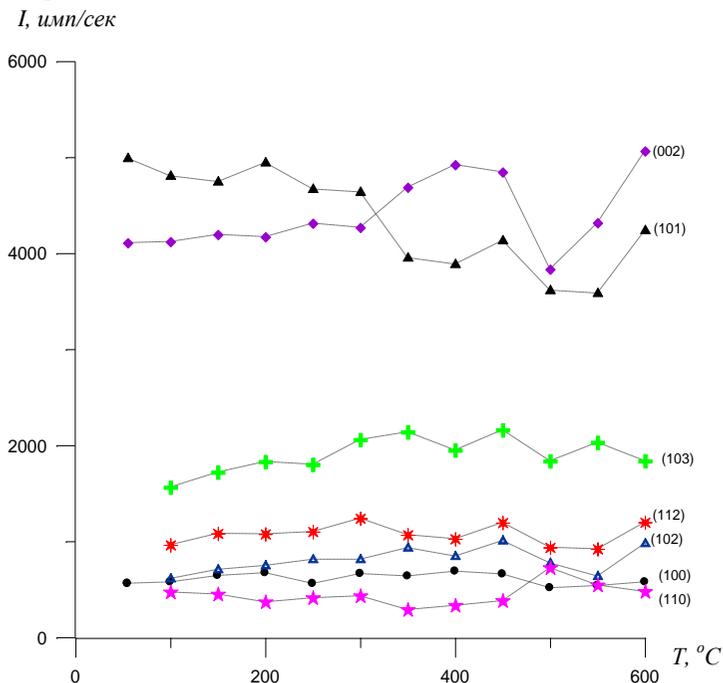


Рис. 1. Зависимость интегральной интенсивности дифракционных линий НК кобальта от температуры отжига

Таким образом, результаты исследований полюсных фигур подтверждают выводы, полученные при изучении интегральных интенсивностей дифракционных линий.

Литература

1. Almukhametov R. Structural studies of plastically deformed cobalt / R. Almukhametov, L. Gabdrakhmanova // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2018. Vol. 447 – P.012081.

© Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф., 2021 г.

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУЛЬФИДАХ МЕДИ $K_xCu_{1.85}S$ ($0 < x < 0.05$)

Баишева А.Х.¹, Палымбетов Р.Ш.², Сахабаева С.М.², Балапанов М.Х.¹

¹ Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

² Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,
г. Нур-Султан, Казахстан

Сульфиды меди и их сплавы с щелочными металлами представляют собой перспективные термоэлектрические материалы [1,2]. В основном, исследованы бинарные составы и их сплавы с малым содержанием лития и натрия. Работ по физическим свойствам калийсодержащих сульфидов меди в литературе мало. В работе Ли [3] сообщается о нанопроволоках $KCu_{7-x}S_4$, демонстрирующих повышенные термоэлектрические свойства по сравнению с бинарными нанокристаллами Cu_7S_4 . Наличие ионов K^+ формирует клатрат и структуру суперионной жидкости, которая обеспечивает состояние «фононного стекла» и «жидко-электронного кристалла». Низкая теплопроводность (менее $0.5 \text{ Вт м}^{-1}\text{К}^{-1}$ в интервале 325 - 575 К) и большой коэффициент термо-э.д.с. ($0.1 \div 0.19 \text{ мВ/К}$ в интервале 425-575 К) наблюдались при прессовании нанопроволок в объемный материал. Полученные для $KCu_{7-x}S_4$ пиковые значения термоэлектрической добротности $ZT \approx 0.12$ при 350 К, $ZT \approx 0.19$ при 575 К.

В работе [4] представлены результаты исследования сплава $K_{0.2}Cu_{1.8}S$ в интервале температур от 30 до 400 °С. По результатам рентгенофазового анализа сплав представляет собой смесь различных фаз: кубической $Fm\bar{3}m$ фазы $Cu_{1.84}S$, кубической $Fm\bar{3}m$ фазы Cu_2S , ромбоэдрической $R\bar{3}m$ фазы $Cu_{17}S_9$ и метастабильной тетрагональной $P4_32_12$ фазы Cu_2S . Дифференциальная сканирующая термометрия показала эндотермический пик, растянутый от 84 до 102 °С, вызванный фазовыми переходами из ромбоэдрической и тетрагональной фаз в гексагональную фазу сульфида меди. Выше 300 °С наблюдались сильный рост коэффициента термо-э.д.с. (до 4 мВ/К) и снижение теплопроводности до $0.4 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$, приводящие к очень высокому пиковому значению $ZT=3.5$ при 380 °С.

В данной работе были синтезированы полупроводниковые сплавы $K_xCu_{1.85}S$ ($x = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05$) в расплаве смеси гидроксидов NaOH и KOH при температуре около 165 °С. Рентгенофазовый анализ на дифрактометре Rigaku SmartLab показал, что при комнатной температуре образцы представляют собой смесь фаз моноклинного джарлеита ($Cu_{1.9375}S$), моноклинного и гексагонального халькоцита (Cu_2S). Размеры

кристаллитов, оцененные из полуширины рентгеновских линий по формуле Шерера, лежат в интервале от 20 до 200 нм.

Фазовые переходы исследовались с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии на ДСК-калориметре DSC404 NETZSCH при скорости нагрева 10 град/мин в атмосфере аргона. Электрическая проводимость и термо-эдс измерялись на постоянном токе четырехзондовым методом на экспериментальной установке ULVAC ZEM-3 (Япония).

По сканирующей калориметрии термический эффект около 370 К выражен достаточно слабо, но присутствует у всех образцов. Для образца $x = 0.04$, наблюдаются сильный эндотермический пик при 465.5 К и значительный пик при 643.7 К. Для всех образцов есть эндотермический тепловой эффект вблизи 670-700 К.

Электронная проводимость исследуемых сплавов лежит в интервале от сотен См/см до сотых долей См/см. В области фазовых переходов отмечаются аномалии. Сильный тепловой эффект, растянувшийся от 450 до 500 К на кривой ДСК, примерно соответствует резкому падению проводимости, происходящему в области от 450 до 550 К. Другому тепловому эффекту, занимающему область 630-660 К на кривой ДСК, соответствует локальный максимум проводимости около 630 К.

Энергия активации проводимости $K_{0.04}Cu_{1.85}S$ в области 360-400 К составила 0.15 ± 0.01 эВ, что близко к значению 0.20 ± 0.02 эВ для сплава $K_{0.2}Cu_{1.8}S$ [4]. Низкие ($0.02 \div 0.04$ мВ/К) значения коэффициента термо-эдс. $K_{0.04}Cu_{1.85}S$ в области до 400 К можно объяснить высокой проводимостью сплава (300 – 500 См/см).

Литература

1. Qiu P., Zhu Y., Qin Y., Shi X., Chen L. Electrical and thermal transports of binary copper sulfides Cu_xS with x from 1.8 to 1.96. // APL Mater. 2016. V.4, 104805, doi:10.1063/1.4953439.
2. Kubenova M.M., Kuterbekov K.A., Balapanov M.Kh., Ishembetov R.Kh., Kabyshev A.M., Bekmyrza K.Zh. Some Thermoelectric Phenomena in Copper Chalcogenides Replaced by Lithium and Sodium Alkaline Metals. // Nanomaterials. 2021. V.11. P.2238 – 2286.
3. Li. X., Hu C., Kang X., Len Q., Xi Y., Zhang K. and Liu H. Introducing kalium into copper sulfide for the enhancement of thermoelectric properties // J. Mater. Chem. A. 2013. V.1. P. 13721- 13726.
4. Балапанов М. Х., Ишембетов Р. Х., Ахметгалиев Б.М., Кутербеков К. А., Палымбетов Р.Ш., Сахабаева С., Якшибаев Р. А. Явления переноса в суперионном сплаве $K_{0.2}Cu_{1.8}S$. // Вестник Башкирского университета. 2020. Т. 25, №4. С. 794-799.

© Башиева А.Х., Палымбетов Р. Ш.,
Сахабаева С.М., Балапанов М. Х., 2021 г.

СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Co-Ni-Sn

Саносян А.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

В основе многих современных технологий лежат постоянные магниты. Редкоземельные металлы обеспечивают сильную спинорбитальную связь, способствующую возникновению высокой магнитокристаллической анизотропии. Однако, стоимость таких материалов очень высока, и поиск альтернативы, не уступающей по свойствам, остается одной из приоритетных задач современного материаловедения. С этой точки зрения интерес представляют сплавы Гейслера, в которых возможен мартенситный переход из высокосимметричной аустенитной фазы в тетрагональную, обладающую меньшей симметрией и, как следствие, способной демонстрировать ненулевую магнитокристаллическую анизотропию.

В данной работе рассматриваются сплавы Гейслера $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Расчеты выполнены в приближении GGA-PBE для 16-атомной суперячейки. На рис. 1 представлены пять типов кристаллических структур, использованных в расчётах. Наряду с известными прямой и обратной гейслеровскими структурами рассмотрены недавно предложенные T^p и T^c структуры [1], характеризующиеся чередующимися слоями атомов Co и Ni вдоль кристаллографических направлений $[1,0,0]$ и $[1,1,0]$, соответственно. Дополнительно рассмотрена частично разупорядоченная B2-like структура.

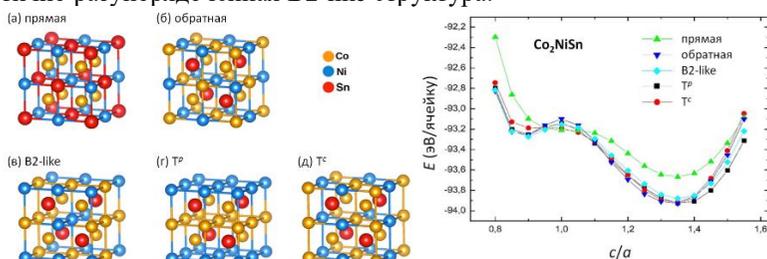


Рис. 1. (а) Прямая, (б) обратная, (в) B2-like, (г) T^p и (д) T^c структуры, использованные при моделировании; Зависимость полной энергии сплава Co_2NiSn от степени тетрагональных искажений c/a

Литература

1. Neibecker P. et al. Ordering tendencies and electronic properties in quaternary Heusler derivatives // Physical Review B. – 2017. – V. 96. – №. 16. – P. 165131..

© Саносян А.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ РКУП С КАНАЛОМ ДИАМЕТРОМ 10 ММ НА СПЛАВ Тi18ZR15NB

Ким К.А., Чуракова А.А., Гундеров Д.В.

Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

Перспективным материалом для имплантатов, являются биосовместимые сплавы Ti-Zr-Nb с низким модулем упругости, близким к упругости кости (разрабатываемые так же группой проф. С. Д. Прокошкина, МИСИС) [1]. В данных сплавах также протекает обратимое термоупругое мартенситное превращение $\beta \leftrightarrow \alpha'$ что обуславливает эффект памяти формы в данных сплавов и открывает дополнительные возможности для применения в качестве имплантатов. Дополнительное повышение прочностных характеристик данного сплава возможно путем формирования наноструктурного состояния методом равноканального углового прессования (РКУП). В нашей работе прутки подвергались РКУП при температуре $T = 250^0$ С, количество циклов составило $n = 4$ и $n = 7$. Использовалась оснастка РКУП с углом пересечения каналов 120^0 , диаметром 10 мм. В результате получены цельные РКУП образцы диаметром 10 мм и длиной около 60 мм. Исследования показали, что РКУП приводит измельчению структуры и к росту прочности с 700 МПа до 1000 МПа.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 20-69-47029

Литература

1. Sheremetyev V.A., Prokoshkin S.D., Dubinskiy S.M., Korotitskiy A.V., Filonov M.R., Petzshik M.I., Brailovski V. INVESTIGATION OF THE STRUCTURE STABILITY AND SUPERELASTIC BEHAVIOR OF THERMOMECHANICALLY TREATED TI-NB-ZR AND TINB-TA SHAPE-MEMORY ALLOYS The Phys.Met.Metallography. 2015. Т. 116. № 4. С. 413-422.

© Ким К.А., Гундеров Д.В., 2021г.

AB INITIO РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ

Колесникова А.Е., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

На основе каркасных углеродных наноструктур возможно формирование соединения двух типов: у первых происходит присоединение атомов на внешнюю поверхность наноструктуры, а у вторых, так называемых эндоэдральных соединений, инородные атомы оказываются инкапсулированы внутри фуллерена или нанотрубки [1,2]. В данной работе были выполнены модельные расчеты фуллеренов, инкапсулированных атомами щелочных металлов. Моделирование проводили при помощи программного пакета Quantum ESPRESSO ab initio методом теории функционала плотности. Расчеты выполняли для фуллеренов C_{20} , C_{24} , C_{48} и C_{60} в которых структурные позиции атомов эквивалентные [3]. В качестве инкапсулирующих атомов были рассмотрены атомы лития, натрия, калия, рубидия и цезия. Модельные расчеты показали, что инкапсулированные атомы увеличивают диаметр исходных фуллеренов и длины углерод-углеродных связей, а также снижают энергию связей. Увеличение диаметров, длин связей и уменьшение энергий тем меньше чем больше диаметр исходного фуллерена. Инкапсулированные фуллерены могут найти практическое применение в качестве прекурсора для синтеза новых алмазоподобных фаз при давлениях значительно меньших, чем для фуллеренов не содержащих инкапсулированных атомов [4].

Литература

1. Беленков Е.А., Шабиев Ф.К. Структура углеродных нанотрубок, содержащих цепочки из углеродных атомов // Известия Челябинского научного центра УрО РАН, 2005, № 4, С. 24-30.
2. Беленков Е.А., Трехмерная структура многослойных углеродных нанотрубок // Челябинский физико-математический журнал, 2016, Т. 1(4), С. 102-111.
3. Беленков Е.А., Грешняков В.А. Классификация структурных разновидностей углерода // Физика твердого тела, 2013, Т.55, Вып.8, С. 1640-1650.
4. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Ab initio calculations of the formation polymerized fullerite from endohedral clusters $Li@C_{24}$ // Journal of Physics: Conference Series, 2019, v. 1399, pp. 022022.

© Колесникова А.Е., Беленков Е.А., 2021 г.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕФЕКТЫ В ГРАФЕНЕ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Подоплелова Е.А., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

В слоях гексагонального графена и углеродных нанотрубках атомы углерода находятся в трехкоординированных (sp^2 гибридных) состояниях и формируют структуры, состоящие из шестиугольников. Если в структуре нанотрубки или графенового слоя вместо шестиугольника встречается другой многоугольник, то это топологический дефект [1]. Теоретически возможно существование графеновых слоев состоящих полностью из топологических дефектов [2]. Наиболее известным комбинированным топологическим дефектом является дефект Стоуна-Уэльса (дефект 5-7-7-5) который состоит из двух пятиугольников и двух семиугольников [3]. В данной работе выполнено моделирование процесса движения топологического дефекта Стоуна-Уэльса при растяжении графенового слоя и углеродных нанотрубок.

Расчеты были выполнены методом молекулярной механики ММ+ и полуэмпирическим квантово-механическим методом РМЗ. В результате выполненных исследований установлено, что при растяжении дефект 5-7-7-5 может разделяться на два парных дефекта 5-7, которые будут двигаться в противоположных направлениях. Движение дефектов 5-7 может происходить за счет поворота пар углеродных атомов на 90° . Такой механизм движения топологических дефектов может обеспечивать пластическую деформацию графеновых слоев и нанотрубок при напряжениях во много раз меньших предельных напряжений, при которых идеальные графеновые слои должны разрушаться.

Литература

1. Беленков Е.А., Зинатулина Ю.А. Топологические дефекты графеновых слоёв // Челябинский физико-математический журнал, 2008, № 25. С. 32-38.
2. Belenkov M.E., Kochengin A.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Graphene polymorphs // IOP Journal of Physics: Conference Series, 2019, Vol. 1399, P. 022024.
3. Беленков Е.А., Зинатулина Ю.А. Структура соединений однослойных углеродных нанотрубок на основе комбинированных топологических дефектов 5-7 и 4-8 // Физика твердого тела, 2010, Т.52(4), С.812-818.

© Подоплелова Е.А., Беленков Е.А., 2021 г.

НОВАЯ СТРУКТУРНАЯ РАЗНОВИДНОСТЬ СЛОЕВОГО НИТРИДА БОРА BN-L_{4-6-8e}

Ряшенцев Д.С., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Соединения нитрида бора могут иметь структуру, аналогичную структуре соединений углерода. Следовательно, возможно существование полиморфных разновидностей нитрида бора аналогичных полиморфам графена [1]. Ранее были теоретически предсказаны ряд новых полиморфов графена [2,3]. В данной работе выполнены расчеты кристаллической и электронной структуры нового полиморфа нитрида бора BN-L_{4-6-8e}, имеющего структуру подобную структуре соответствующего графенового полиморфа.

Для расчетов использовался метод теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. В результате была установлена возможность устойчивого существования новой разновидности нитрида бора BN-L_{4-6-8e} со слоевой структурой. Энергия сублимации этого слоя составляет 17,78 эВ/(BN), прямоугольная элементарная ячейка содержит 24 атома. Значения векторов элементарных трансляций $a = 1,523$ нм, $b = 0,443$ нм. Длины межатомных связей B-N изменяются в диапазоне от 0,1416 до 0,1471 нм, а углы между связями в диапазоне от 83,98° до 154,21°. Ширина запрещенной зоны для слоя BN-L_{4-6-8e} составляет 3,83 эВ. Этот слой должен быть широкозонным полупроводником и может найти практическое применение при создании гетероструктур для наноэлектронных устройств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Челябинской области в рамках научного проекта № 20-43-740015.

Литература

1. Ryashentsev D.S., Belenkov E.A. New BN polymorphs with two-dimensional structure // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, 2019, Vol. 537, P. 022060.
2. Belenkov M.E., Kochengin A.E., Chernov V.M., Belenkov E.A. Graphene polymorphs // IOP Journal of Physics: Conference Series, 2019, Vol. 1399, P. 022024.
3. Коченгин А. Е., Беленков Е. А. Новые полиморфные разновидности графена, сформированные из карбиновых цепочек // Перспективные материалы, 2017, № 2, с. 5-13.

© Ряшенцев Д.С., Беленков Е.А., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ХРОМА В СПЛАВЕ СИСТЕМЫ Cu-Cr НА СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ И СВОЙСТВА ПРИ РКУП И КИНЕТИКУ СТАРЕНИЯ

Шишкунова М.А.¹, Аксенов Д.А.^{1,2}, Асфандияров Р.Н.^{1,2}

¹Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Работа направлена на анализ влияния содержания хрома в сплаве системы Cu-Cr на величину упрочнения в процессе РКУП и последующего старения. Для этого было выбрано два состава, соответствующие различному уровню растворения хрома согласно диаграмме состояния. Известно, что предельная растворимость хрома в меди может достигать 0,5-0,6% вес. при температуре 1000-1050 °С. В работе были исследованы сплавы с содержанием хрома ниже (0,2% вес.) и выше (1,1% вес.) предела растворимости.

Анализ состояния твердого раствора (ТР) данных сплавов после высокотемпературной обработки при 1000 °С в течение 2 часов и последующей закалки в воду показал, что концентрация хрома –0,274% ат. в твердом растворе (ТР) наблюдается для сплава Cu-1,1Cr. Временное сопротивление разрыву и электропроводность сплава Cu-0,2Cr несколько выше, чем у сплава Cu-1,1Cr. Для низколегированных хромовых бронз электропроводность является структурно-чувствительным параметром, тем самым отражает состояние пересыщенного твердого раствора.

В процессе 1 прохода РКУП в обоих сплавах происходит измельчение зеренной структуры. Формируется преимущественно полосовая структура с поперечным размером фрагментов 210±12 и 170±8 нм для сплавов Cu-0,2Cr и Cu-1,1Cr соответственно. Небольшое восстановление параметра решетки и электропроводности сплавов может свидетельствовать о протекании деформационно-стимулированного процесса распада ТР. При этом для обоих исследуемых сплавов достигается одинаковый уровень прочностных свойств 370-380 МПа.

Старение сплавов при 450°С показало различную кинетику изменения микротвердости и электропроводности (рисунок 1). Так в сплаве Cu-0,2Cr после 1 часа старения происходит перестаривание материала, при этом электропроводность восстанавливается медленно. Даже после 5 часов выдержки значение электропроводности не превышает 54% IACS. В сплаве Cu-1,1Cr максимум микротвердости достигается после 4 часов выдержки и достигает 1660±50 МПа.

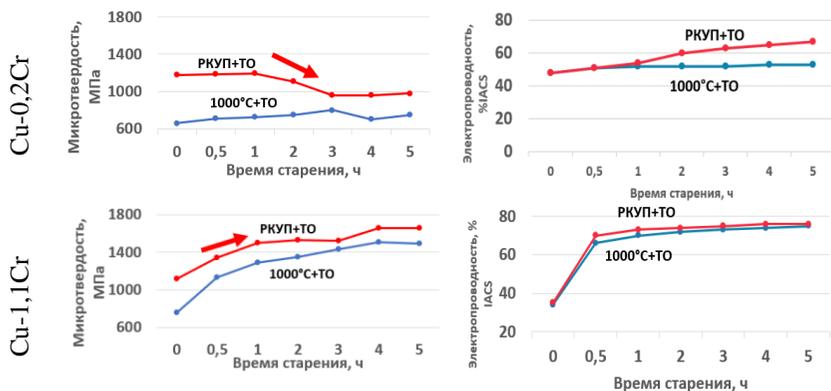


Рис. 1. – Графики изменения микротвердости и электропроводности сплава системы Cu-Cr в процессе старения

Далее было проведено старение при 450 °С сплава Cu-0.2Cr в течении 1 часа и сплава Cu-1.1Cr в течении 4 часов с целью анализа структурных изменений. Установлено, что в сплаве Cu-0.2Cr развиваются процессы рекристаллизации. Средний размер полос увеличивается до 215±12 нм. В сплаве Cu-1.1Cr средний поперечный размер фрагментов вырастает до 270±15 нм. При этом в теле фрагментов наблюдается развитая дислокационная структура в виде сеток. На дислокациях закреплены частицы вторых фаз, что вполне объяснимо, так как, дислокации являются преимущественными местами зарождения частиц вторых фаз.

Таким образом, показано, что в процессе высокотемпературной обработки в сплаве Cu-0.2Cr не происходит полного растворения, а в сплаве Cu-1.1Cr концентрация ТР хрома не достигает предельных значений (~0,6% вес. при 1000 °С). Концентрация ТР не влияет на уровень свойств, получаемых в процессе 1 цикла РКУП. Однако, в процессе старения в сплаве, содержащем существенно меньшее количества хрома, чем значение предельного растворения, активно развиваются процессы рекристаллизации, что не позволяет достичь высоких значений прочности. Сплав Cu-1.1Cr имеет хорошую термостабильность и в результате термомеханической обработки позволяет достичь высокого уровня микротвердости и электропроводности за 1 цикл РКУП.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда №19-19-00432.

© Шишкунова М.А., Аксенов Д.А., Асфандияров Р.Н., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ СПЛАВА Ti18Zr15Nb

Титова А.А.¹, Гундеров Д.В.^{1,2}, Шарафутдинов А.В.¹, Чуракова А.А.^{1,2}

¹Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Сплав Ti18Zr15Nb представляет большой интерес как материал для имплантатов, поскольку обладает высокой биосовместимостью и механическим свойствам, такими как низкая плотность, высокая коррозионная стойкость и модуль упругости E близкий к E кости. Улучшить механические свойства материалов позволяет интенсивная пластическая деформация (ИПД). В работе представлены результаты влияния интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) на сплав Ti18Zr15Nb. Показано, что низко модульная β фаза является основной как до, так и после ИПДК, а микротвердость после ИПДК значительно возрастает.

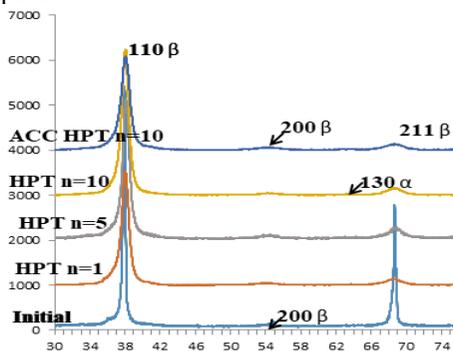


Рис. 1. Рентгенограммы сплава Ti18Zr15Nb в исходном состоянии, подвергнутого ИПДК (HPT) $n = 1$ $n = 5$ $n = 10$, и аккумулярующему ИПДК (ACC HPT) $n = 10$

Литература

1. Sheremetyev V.A., Prokoshkin S.D., et al/ Investigation of the structure stability and superelastic behavior of thermomechanically treated ti-nb-zr and tinb-ta shape-memory alloys The Phys.Met.Metallography. 2015. T. 116. № 4. С. 413-422.

© Титова А.А., Гундеров Д.В.,
Шарафутдинов А.В., Чуракова А.А., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ИЗМЕЛЬЧЕНИЕ ЗЕРЕН В МОДЕЛЬНОМ СПЛАВЕ СИСТЕМЫ Al-Cu

Загитов Р.Р., Ситдииков О.Ш., Автократова Е.В., Маркушев М.В.
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Исследовано влияние температуры равноканального углового прессования (РКУП) в интервале 150 - 400°C (~ 0,5-0,75 $T_{пл}$) на процессы измельчения зерен в литом сплаве Al-3%Cu. РКУП проводили по маршруту А до суммарной эффективной деформации $\epsilon = 8 - 12$. Показано, что при теплом ($T=150^\circ\text{C}$) РКУП имело место измельчение зеренной структуры, связанное с фрагментацией исходных зерен деформационными полосами / полосами микросдвига с последующим увеличением их числа и разориентировки их границ. При $\epsilon=8$ формировалась частично рекристаллизованная структура с размером зерен 1,2 мкм, средним углом разориентировки 23° и долей большеугловых границ около 50%.

Повышение температуры РКУП до 400°C приводило к увеличению размера новых зерен, снижению доли большеугловых границ и среднего угла разориентировки межкристаллитных границ и смещало формирование мелкозернистой структуры в область более высоких степеней деформации (рис. 1). Основными причинами подавления процессов формирования мелкозернистой структуры при повышении температуры РКУП являлись развитие более гомогенной деформации на начальных стадиях обработки и растворение частиц $\Theta(\text{Al}_2\text{Cu})$ -фазы, стабилизирующих структуру сплава.

Работа выполнена по государственному заданию ИПСМ РАН (АААА-1919-119021390107-8).

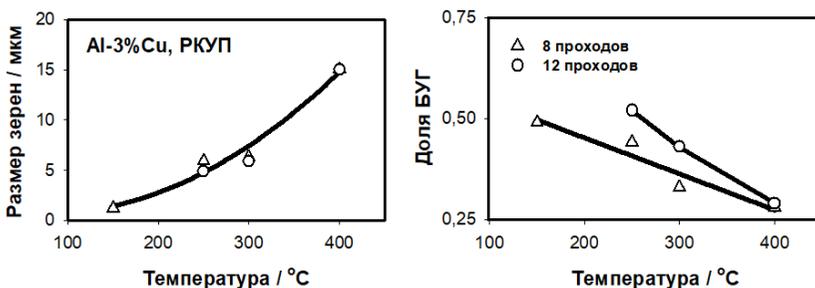


Рис. 1. Зависимость размера мелких зерен и доли большеугловых границ (БУГ) в сплаве Al-3%Cu от температуры РКУП

© Загитов Р.Р., Ситдииков О.Ш.,
Автократова Е.В., Маркушев М.В., 2021 г.

АМОРФНЫЕ СПЛАВЫ И ВЛИЯНИЕ НА НИХ ИПД¹Афанасьев М.О., ¹Гундерова С.Д., ^{1,2}Гундеров Д.В.¹Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Аморфные материалы, в том числе так называемые объемные металлические стекла (ОМС), активно исследуются несколько десятилетий. Формирование аморфной структуры в металлах и сплавах приводит к значительным изменениям их магнитных, электрических, механических, коррозионных и других свойств. Однако широкое применение аморфных сплавов существенно ограничено их хрупкостью. Механизмом деформации аморфных сплавов при комнатной температуре является формирование и распространение полос сдвига. В последние годы было показано, что предварительное пластическое деформирование интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) может приводить к повышению пластичности аморфных сплавов за счёт формирования в образце множественных полос сдвига[1]. Каждая из предварительно сформированных полос сдвига является источником зарождения новых многочисленных полос сдвига при последующем нагружении в другом направлении, что повышает пластичность.

Литература

1. Gunderov D., Astanin V. INFLUENCE OF HPT DEFORMATION ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF AMORPHOUS ALLOYS Metals. 2020. Т. 10. № 3. С. 415 [10.3390/met10030415](https://doi.org/10.3390/met10030415).

© Афанасьев М.О., Гундерова С.Д., Гундеров Д.В., 2021 г.

ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ КРИОГЕННОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ТВЕРДОСТЬ НИКЕЛЯ

Юрьева Е.К.¹, Валеев И.Ш.^{1,2}, Валеева А.Х.^{1,2}, Ильясов Р.Р.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Проведена изотермическая прокатка никеля марки НП2 при температуре жидкого азота со степенями обжатия 30, 50, 70 и 90%. Анализировали изменения микротвердости никеля в процессе прокатки, измеренной по методу Виккерса на цифровом микротвердомере MVDM 8 «AFFRY» при нагрузке 0,5 Н и длительности ее приложения 10 секунд.

Обнаружено (рис.1), что на начальном этапе деформирования прочность никеля возрастает с наибольшей интенсивностью и к 30% практически удваивается. Данный факт свидетельствует о наиболее значимых микроструктурных изменениях никеля при прокатке. В дальнейшем интенсивность упрочнения металла заметно уменьшается, однако она сохраняется вплоть до максимальных обжатий. В результате, после прокатки до 90% микротвердость никеля достигает рекордного уровня - 245 HV, что на 20-30 единиц больше, чем после аналогичной прокатки при комнатной температуре. Предположено, что большее упрочнение никеля при криопробатке вызвано более сильным подавлением динамического возврата и активизацией динамической рекристаллизации.

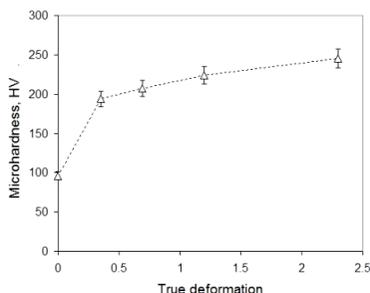


Рис. 1. Зависимость твердости Ni от истинной степени деформации при криопробатке

Для детального обсуждения обнаруженного механического поведения никеля требуется тщательный металлографический и рентгеноструктурный анализ эволюции параметров его структуры.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-08-00953А.

© Юрьева Е.К., Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Ильясов Р.Р., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЛАБОРАТОРНОГО ОБРАЗЦА КОНТАКТНОГО ПРОВОДА ИЗ СПЛАВА СИСТЕМЫ CU-CR

Нуриева Ю.Р.¹, Аксенов Д.А.^{1,2}, Асфандияров Р.Н.^{1,2}

¹Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Работа направлена на изучение деформационного разогрева и его влияния на структурообразование и фазовые превращения, исследование особенностей изменения структуры лабораторного образца контактного провода, оценка вкладов в упрочнение при РКУП-формообразовании и пост-деформационном старении. В работе был исследован сплав с содержанием хрома 0,65% вес.

Была получена заготовка контактного провода сечением 120 мм² путем деформирования методом РКУП с формообразованием. Деформация проводилась при предварительном разогреве заготовки до 450°C. Для достижения повышенного комплекса свойств образец был подвержен пост-деформационному старению при 450°C в течении 30 минут.

Для того чтобы проследить за разогревом в процессе деформации, который очень сильно влияет на структурообразование и фазовые превращения было проведено компьютерное моделирование РКУП с формообразованием сплава Cu-0,65Cr с анализом температурных полей и напряжений. В процессе деформирования происходит максимальный разогрев заготовки до 510°C в очаге деформации формообразования. Далее был проведен физический эксперимент – РКУП с формообразованием заготовки сплава Cu-0,6Cr с контролем температуры образца на выходе при помощи тепловизора (Testo 872). Полученные данные коррелируют с данными компьютерного моделирования.

Анализ структуры образцов подверженных РКУП с формообразованием провода показал, что формируется вытянутая в направлении сдвига структура со средним поперечным размером структурных составляющих 410±18 нм. Предел прочности при этом составляет 470±20 МПа. В теле фрагментов наблюдаются дисперсные частицы, закрепленные на дислокациях. Средний размер частиц составляет 14,5±1 нм, среднее расстояние между ними 309 нм.

После старения происходит совершенствование границ, средний поперечный размер структурных составляющих практически не изменяется 400±18 нм. Прочность образца провода составляет 540±15 МПа

и электропроводность 76% IACS. В теле фрагментов по больше- и малоугловым границам наблюдаются мелкодисперсные частицы. Средний размер частиц составляет $12,5 \pm 1$ нм, среднее расстояние между ними $101,5$ нм. Прочность образца провода составляет 540 ± 15 МПа и электропроводность 76% IACS.

Пост-деформационная термообработка проводит к термостимулированному распаду твердого раствора, в результате которого выделяется большое количество упрочняющих частиц вторых фаз, обеспечивающих дисперсионное упрочнение. В ходе физико-механических испытаний после деформации и старения повысилась прочность, пластичность и электропроводность.

Таблица 1

Физико-механические характеристики

	HV, МПа	σ_B , МПа	Относительное удлинение, %	Электропроводность, % IACS
РКУП-форм.	1120 ± 50	470 ± 20	16 ± 2	35 ± 2 %
РКУП-форм.+ТО	1450 ± 50	540 ± 20	20 ± 2	76 ± 2 %

Таким образом в ходе работы методом компьютерного моделирования установлена величина разогрева заготовки в процессе РКУП с формообразованием -510°C . РКУП с формообразованием и пост-деформационное старение позволяет достичь значения предела прочности 540 ± 20 МПа и электропроводность 76% IACS за счет формирования УМЗ структуры полосового типа со средним поперечным размером фрагментов 400 ± 18 нм с ансамблем мелкодисперсных частиц вторых фаз размером ~ 30 - 40 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда №1 9-19-00432..

© Нуриева Ю.Р., Аксенов Д.А.,
Асфандияров Р.Н., 2021 г.

ANALYSIS OF THE STRUCTURE OF THE TINI ALLOY UNDER THERMAL CYCLIC LOADING IN A FREE STATE

Vorobiev E.V.¹, Churakova A.A.^{1,2}

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa, Russia

²Institute of Molecule and Crystal Physics - Subdivision of the Ufa Federal Research Centre of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia

The NiTi shape memory alloys exhibit excellent characteristics such as shape memory effect and superelasticity and are materials for practical applications [1-3]. The discrepancy between the volumes of the B2/B19' phases during transformation leads to the generation of dislocations and plastic deformation [4-9].

In this study samples Ti_{49.2}Ni_{50.8} alloy were used. An ultrafine-grained structure was obtained using ECAP. A coarse-grained structure was obtained by quenching. Thermal cycling of samples in different initial states was carried out by the method of successive immersion of samples in liquid nitrogen (- 196 °C), followed by heating to a temperature of 150 °C, which is initially lower and higher than the temperatures M_f of the direct and A_f of the reverse martensitic transformation. The thickness of the samples subjected to TC was less than 1 mm in cross section, which ensured their rapid heating and cooling. The holding time at heating and cooling temperatures was 5 minutes to ensure complete heating and cooling of the samples. The study of the structure and substructure at room temperature by transmission electron microscopy (TEM) was carried out on a JEOL JEM-2100 transmission microscope with an accelerating voltage of 200 kV. Blanks for thin foils, cut by the electroerosive method, were made by jet two-sided electrolytic polishing on a Tenupol-5 apparatus in a solution of 10% perchloric acid (HClO₄) and 90% butanol (CH₃ (CH₂)₃OH), the voltage across the electrodes during electropolishing was 50 B, temperature T = 25 °C.

The structure of the coarse-grained alloy in the initial state is represented by coarse austenite grains about 62 ± 6 μm in size with clear boundaries. On the surface of the sample, small globular inclusions of the oxide phase are observed, the proportion of which can be up to 6%. Thermal cycling with the maximum number of heat changes leads to the formation of a dislocation structure in the form of clusters, disordered walls, and dislocation tangles. Also, in certain areas of the microstructure, according to TEM data, particles that appeared during processing are visible. In the state after ECAP in the Ti_{49.2}Ni_{50.8} alloy, optical microscopy reveals the boundaries of the initial austenite phase with a size of about 30 ± 2 μm, which have predominantly irregular crystal-geometric faceting. According to the TEM analysis, an ultrafine-grained structure with

nonequilibrium grain boundaries with insignificant dislocation accumulations in the grain body is observed in this state; the average size of structural elements is about 500 nm. In the UFG state, after thermal cycling for $n = 250$ cycles, grains are observed predominantly with nonequilibrium boundaries, which indicates a high imperfection of the structure. The average size of the structural elements: martensite plates with a size of $\sim 600 \pm 30$ nm, the average grain size after the maximum number of thermal changes is $\sim 31 \pm 9$ μm .

After 250 cycles, the structure has a grain/subgrain structure with an average size of about 400 ± 20 nm. Microscopy with high magnification shows the presence of nanotwins with a size of ~ 0.5 -1 nm. The performed X-ray structural analysis showed that as a result of thermal cycling, a decrease in CSR is observed, accompanied by an increase in internal microdistortions and, accordingly, in the density of dislocations. Also, the analysis of X-ray diffraction patterns showed that in the coarse-grained state after thermal cycling $n = 250$, the main peaks correspond to the B19' martensite phase; these data do not contradict the data on the microstructure obtained by other methods.

The authors express their gratitude for the financial support of the study provided by the Russian Science Foundation in the framework of the project No. 20-72-00075.

1. K. Otsuka, X. Ren, Prog. Mater. Sci., 50 (2005).
2. K. Yamauchi, I. Ohkata, K. Tsuchiya, S. Miyazaki, Shape Memory and Superelastic Alloys: Technologies and Applications, (Woodhead Publishing, Cambridge, UK, 2011).
3. L. Lecce, A. Concilio, Shape Memory Alloy Engineering for Aerospace, Structural and Biomedical Applications, (Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2015).
4. J. Zhang, C. Somsen, T. Simon, X. Ding, S. Hou, S. Ren, X. Ren, G. Eggeler, K. Otsuka, J. Sun, Acta Mater. 60 (2012).
5. M.L. Bowers, X. Chen, M. De Graef, P.M. Anderson, M.J. Mills, Scr. Mater. 78-79 (2014).
6. P. Chowdhury, H. Sehitoglu, Prog. Mater. Sci. 85 (2017).
7. Khachin, V.N.; Pushin, V.G.; Kondratyev, V.V. Titanium Nickelide: Structure and Properties; Nauka: Moscow, Russia, 1992; p. 161.
8. Brailovski, V.; Prokoshkin, S.; Terriault, P.; Trochu, F. Shape Memory Alloys: Fundamentals, Modeling, Applications; Ecole de technologie supérieure (ETS): Montréal, QC, Canada, 2003; p. 851.
9. Otsuka, K.; Wayman, C.M. Shape Memory Materials; Cambridge University Press: Cambridge, UK, 1999; p. 284.

© Vorobiev E.V., Churakova A.A., 2021

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И ТВЕРДОСТЬ КРИОДЕФОРМИРОВАННОГО АЛЮМИНИЯ

Ильясов Р.Р., Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Крымский С.В.,

Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Исследовали влияние энергии электроимпульсной обработки (ЭИО) на структуру и твердость алюминия (Авч) деформированного при температуре жидкого азота. Слиток деформировали в изотермических условиях многопроходной прокаткой с суммарной степенью обжатия 90%. ЭИО проводили по методике, описанной в [1], энергию импульса изменяли в диапазоне K_j от $0,066 \times 10^5$ до $0,290 \times 10^5$ А²с/мм⁴. Параметры структуры и твердость алюминия оценивали в плоскости прокатки с использованием стандартных методов оптической и электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа и микротвердости, соответственно.

Установлено, что ЭИО с энергией импульса до $K_j=0,104 \times 10^5$ А²с/мм⁴ практически не сказалась на твердости алюминия, зафиксированной после прокатки (45-50HV). При достижении энергии импульса до $0,121 \times 10^5$ А²с/мм⁴ отмечалось резкое снижение твердости до 30HV, которая при дальнейшем повышении K_j плавно снижалась до 25HV и стабилизировалась на этом уровне.

Металлографический анализ показал, что при криогенной прокатке в алюминии сформировалась неоднородная нагартованная структура с размером кристаллитов (зерен и субзерен) около 2 мкм и плотностью дислокаций 5×10^{13} м⁻². Электроимпульсная обработка с K_j до $0,104 \times 10^5$ А²с/мм⁴, наряду со снижением плотности дислокаций и микроискажений решетки, приводила к формированию новых зерен размером около 4 мкм и объемной долей около 6%. С увеличением энергии ЭИО до $K_j=0,121 \times 10^5$ А²с/мм⁴ процесс трансформации деформированной структуры в рекристаллизованную завершался и сопровождался нормальным ростом зерен до 50-60 мкм.

Обсуждена природа обнаруженного структурно-механического поведения алюминия.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-08-00953А.

Литература

1. I.Sh. Valeev, A. Kh. Valeeva, R. R. Ilyasov, O. Sh. Sitdikov, M. V. Markushev // Letters on Materials 9 (4), 2019 pp. 447-450.

© Ильясов Р.Р., Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Крымский С.В., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В., 2021 г.

ПОЛУЧЕНИЕ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ МЕДИ КРИОГЕННОЙ ПРОКАТКОЙ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКОЙ

Ильясов Р.Р., Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Крымский С.В.,

Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Исследовали влияние обработки, сочетающей криогенную прокатку при температуре жидкого азота и электроимпульсное воздействие (ЭИВ), на структуру и твердость меди марки М1 с исходным размером зерна 50 мкм. Деформацию меди осуществили многопроходной прокаткой с суммарной степенью обжатия 90% в изотермических условиях. ЭИО проводили по методике, описанной в [1], энергию изменяли в диапазоне K_j от $0,35 \times 10^5$ до $0,81 \times 10^5$ A^2c/mm^4 . Микроструктуру и твердость анализировали в плоскости прокатки. Использовали стандартные методы SEM-EBSD и рентгеноструктурного анализа и метод Виккерса, соответственно.

Металлографический анализ показал, что прокатка формировала сильнодеформированную (суб)зернистую структуру с размером кристаллитов 1 мкм и долей высокоугловых границ около 30%. При последующем ЭИВ с энергией $0,35 \times 10^5$ A^2c/mm^4 преимущественно развивались процессы возврата, приводившие к снижению микрорискажений кристаллической решетки и уменьшению плотности дислокаций без заметных изменений других параметров структуры. Обработка импульсами с более высокой энергией активизировала *in-situ* непрерывную статическую рекристаллизацию с формированием областей новых мелких свободных от дефектов зерен, доля которых увеличивалась с ростом K_j . После ЭИВ с $K_j=0,50 \times 10^5$ A^2c/mm^4 была получена однородная мелкозернистая структура с размером зерна 2 мкм и долей высокоугловых границ около 90%. При дальнейшем увеличении вложенной энергии до $0,81 \times 10^5$ A^2c/mm^4 отмечали нормальный рост зерен до 4 мкм, сопровождаемый интенсивным формированием двойников отжига. Обсуждена природа структурно-механического поведения меди. Сделан вывод о целесообразности использования сочетания криогенной прокатки и ЭИВ для получения ультрамелкозернистых листовых заготовок.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-08-00953А.

Литература

1. I.Sh. Valeev, A. Kh. Valeeva, R. R. Piyasov, O. Sh. Sitdikov, M. V. Markushev // Letters on Materials 9 (4), 2019 pp. 447-450.

© Ильясов Р.Р., Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Крымский С.В., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СЕЛЕНИДОВ МЕДИ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ДАВЛЕНИЯ

Цыганкова Л.В., Биккулова Н.Н., Акманова Г.Р., Сафаргалиев Д.И.
Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Поиск наиболее устойчивой структуры сводится к вычислению такого состояния вещества, которое обладает наименьшей энергией. Ее можно оценить с помощью квантово-механических расчетов, основанных на упрощенном уравнении Шредингера. Так в алгоритме USPEX используется теория функционала плотности, которая получила развитие во второй половине прошлого века. Ее основная цель заключается в упрощении расчетов электронной структуры молекул и кристаллов. Теория позволяет заменить многоэлектронную волновую функцию электронной плотностью, при этом оставаясь формально точной. На практике это приводит к уменьшению сложности вычислений и, как следствие, времени, которое на них будет затрачено. Таким образом, квантово-механические расчеты сочетаются с эволюционным алгоритмом в USPEX [1]. Поиск таких структур в системе Cu-Se при различных давлениях от 0 до 5 GPa показал, что при абсолютном нуле и давлении 0.1 GPa стабильным является состав Cu_6Se_4 . Экспериментальная фазовая диаграмма при нормальных условиях содержит тетрагональную фазу $P\bar{4}2_1m$ с параметрами ячейки $a=6.40 \text{ \AA}$, $c=4.28 \text{ \AA}$ [2].

При низких температурах и высоких давлениях стабильной оказывается фаза состава Cu_6Se_4 . Структуры и параметры стабильных фаз полученных при расчете представлены в табл.1., рис.1.

Табл.1. Структуры и параметры ячейки при различных давлениях

№	Фор- мула	Давле- ние	Параметры ячейки					
			a, А	b, А	c, А	α ,град	β , град	γ , град
1	Cu_6Se_4	0.1 GPa	6.1560	6.1468	4.71314	90.028	89.772	89.952
			2	4		4	4	5
2	Cu_6Se_4	1 GPa	6.1234	4.6857	4.68574	90.042	89.982	90.003
			9	4		7	2	9
3	Cu_6Se_4	5 GPa	6.0022	6.0121	4.66337	90.107	90.081	89.974
			7	4		8	5	5

Из результатов теоретического расчета следует, что тетрагональная сингония при низких температурах переходит в тригональную.

Повышение давления приводит к уменьшению параметров элементарно ячейки и тригональная сингония переходит в моноклинную. Дальнейшее повышение давления приводит к уменьшению параметров ячейки. Моноклинная сингония сохраняется.

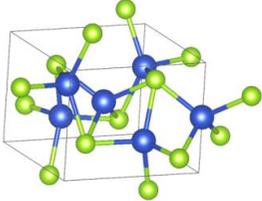
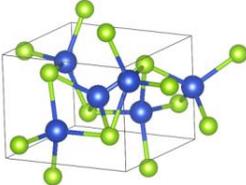
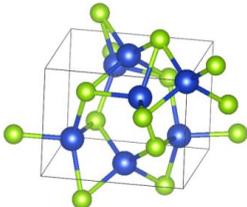
№	Формула	Давление	Структура
1	Cu_6Se_4	0.1 GPa	
2	Cu_6Se_4	1 GPa	
3	Cu_6Se_4	5 GPa	

Рис. 1. Рассчитанные структуры Cu_6Se_4 при различных давлениях

Доклад подготовлен при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90216.

Литература

1. USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography) [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://uspex-team.org>
2. Цыганкова (Биккулова) Л.В., Тихонов Е.В., Биккулова Н.Н., Нигматуллина Г.Р., Сафаргалиев Д.И., Курбангулов А.Р., Акманова Г.Р. Модельный расчет фазовой диаграммы Cu-Se // Инженерная физика. 2019. № 7, С.80-84.

© Цыганкова Л.В., Биккулова Н.Н., Акманова Г.Р., Сафаргалиев Д.И., 2021 г.

СТРУКТУРНЫЕ РАЗНОВИДНОСТИ АЛМАЗОПОДОБНЫХ БИСЛОЕВ 5-7

Грешняков В.А.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Углеродные наноструктуры, состоящие из sp^2 -, sp^3 - sp^2 - или sp^2 - sp -гибридизированных атомов находят широкое практическое применение в области медицины, наноэлектроники и солнечной энергетики. Слоевые соединения из sp^3 -гибридизированных атомов, вероятно, могли бы найти применение в качестве конструкционных и полупроводниковых материалов, однако экспериментально они не были получены. Поэтому необходимо выполнить теоретическое исследование стабильности и свойств алмазоподобных слоев на основе графена с топологическими дефектами Стоуна-Уэлса.

Структуры слоев были получены по методике из работ [1,2]. В результате расчетов методом теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении установлены две структурные разновидности алмазоподобных слоев 5-7 (рис. 1). Слои 5-7- α и 5-7- β имеют прямоугольные элементарные ячейки. Толщина слоев составляет ~ 0.161 нм. Полные энергии этих слоев на 1.31 эВ больше соответствующей энергии кубического алмаза. Структуры слоев 5-7- α и 5-7- β устойчивы примерно до 270-280 К. Ширина запрещенной зоны изученных слоев находится в интервале от 1.68 до 1.88 эВ.

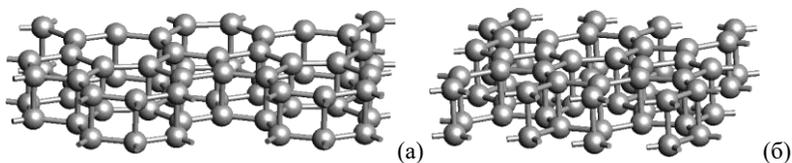


Рис. 1. Структуры алмазоподобных бислоев 5-7- α (а) и 5-7- β

Литература

2. Грешняков, В.А. Беленков, Е.А. Первопринципные расчеты углеродных бислоев с алмазоподобными структурами // ЖСХ, 2020, Т. 61, С. 887-895.
3. Грешняков, В.А. Беленков, Е.А. Теоретическое исследование устойчивости и способов получения слоистых алмазоподобных наноструктур // Письма о материалах, 2020, Т. 10, С. 457-462.

© Грешняков В.А. 2021 г.

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПОЛИМОРФА АЛМАЗА,
ПОЛУЧАЕМОГО ИЗ ГРАФЕНА 5-7- α**

Кузнецов А.С.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Углеродные соединения известны тем, что в зависимости от гибридизации атомов они могут обладать различными свойствами. Однако теоретические расчеты показали, что соединения из четырехкоординированных атомов в зависимости от модификации структуры могут быть как диэлектриками, так и полупроводниками [1-3]. Поэтому в данной работе был осуществлен поиск структурной разновидности алмаза, формируемого на основе графена 5-7- α и обладающего полупроводниковыми свойствами.

Расчет методом теории функционала плотности показал, что новая фаза имеет моноклинную элементарную ячейку, содержащую 16 атомов. Плотность полиморфа алмаза составила 3281 кг/м³, что на 6.3 % меньше плотности кубического алмаза. На рис. 1 приведена расчетная зонная структура фазы. Ширина прямой запрещенной зоны равна 4.1 эВ и на 24.1 % меньше соответствующего значения для кубического алмаза.

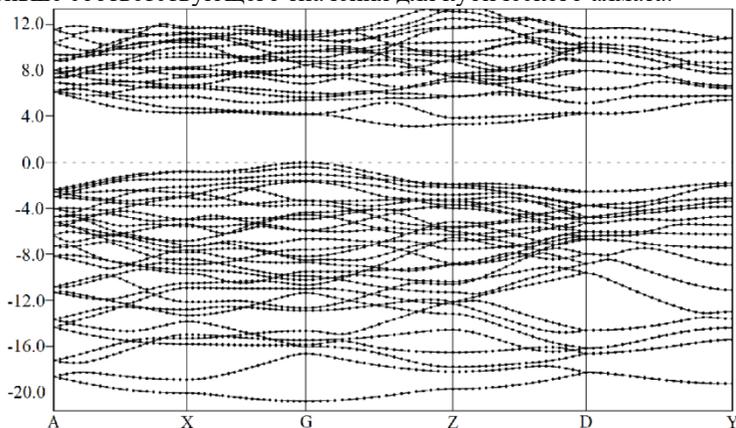


Рис. 1. Зонная структура моноклинного полиморфа алмаза

Литература

1. Беленков, Е.А., Грешняков, В.А. Новые структурные модификации алмаза: LA9, LA10, CA12 // ЖЭТФ, 2014, Т. 146, № 1, С. 116-122.
2. Беленков, Е.А., Грешняков, В.А. Структура, свойства и возможные механизмы формирования алмазоподобных фаз // ФТТ, 2016, Т. 58, № 10, С. 2069-2078.

© Кузнецов А.С., 2021 г.

РАСЧЕТ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ КРЕМНИЯ I4/МММ

Зубкова В.А.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Основой элементной базы современной микро- и нанoeлектроники является кремний и его соединения. Основной и наиболее устойчивой структурной разновидностью кремния является кубический 3С политип, однако теоретические исследования показали, что могут существовать его полиморфные разновидности со значительно отличающимися свойствами [1,2]. Следовательно, данное теоретическое исследование было посвящено расчетам структуры, электронных свойств и устойчивости Si фазы с кристаллической решеткой, подобной LA3 [3,4].

Релаксация структуры Si фазы была выполнена при использовании метода теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. Кристаллическая решетка кремниевой тетрагональной фазы относится к пространственной группе I4/mmm и имеет следующие параметры: $a = 0.6842 \text{ \AA}$ и $c = 0.3933 \text{ нм}$. В элементарной ячейке содержится восемь атомов. Длины связей изменяются от 0.2402 до 0.2447 нм, углы между этими связями – от 90.00 до 109.88 °. Полная энергия тетрагональной фазы выше соответствующей энергии 3С Si только на 0.09 эВ/атом, что указывает на устойчивость этой фазы. Далее был выполнен расчет зонной структуры фазы Si-LA3. Анализ показал, что минимальная ширина прямой запрещенной зоны этой фазы на 45.5 % меньше соответствующей величины для 3С политипа кремния. Также установлено, что значение ширины непрямоугольной запрещенной зоны фазы I4/mmm должна быть меньше соответствующего значения 3С Si на 20 %.

Литература

1. Грешняков В.А., Беленков Е.А. Алмазоподобные структуры кремниевых фаз // Челябинский физико-математический журнал, 2012, № 30 (284), С. 5-18.
2. Беленков Е.А., Грешняков В.А. Структура и некоторые физико-химические свойства углеродной и кремниевой фаз с алмазоподобной решеткой LA3 // ЖСХ, 2016, Т. 57, С. 932-939.
3. Грешняков В.А., Беленков Е.А. Структура алмазоподобных фаз // ЖЭТФ, 2011, Т. 140, С. 99-111.
4. Беленков Е.А., Грешняков В.А. Структура, свойства и возможные механизмы формирования алмазоподобных фаз // ФТТ, 2016, Т. 58, С. 2069.

© Зубкова В.А., 2021 г.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУЛЬФИДОВ МЕДИ

$K_xCu_{1.85}S$ ($0 < x < 0.05$)

Сахабаева С.М.¹, Ахметгалиев Б.М.², Кубенова М. М.¹, Балапанов М.Х.²

¹Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,

г. Нур-Султан, Казахстан

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Суперионные сульфиды меди и их сплавы являются перспективными термоэлектрическими материалами [1,2]. Низкая теплопроводность этих систем обеспечивается подавлением переноса фононов в «жидкоподобной» катионной подрешетке, не подавляющей перенос электронов. Работ по физическим свойствам калийсодержащих сульфидов меди в литературе мало. В работе Ли [3] сообщается о нанопроволоках $KCu_{7-x}S_4$, демонстрирующих повышенные термоэлектрические свойства по сравнению с бинарными нанокристаллами Cu_7S_4 . Низкая теплопроводность (менее $0.5 \text{ Вт м}^{-1}\text{К}^{-1}$ в интервале 325 - 575 К) наблюдались при прессовании нанопроволок в объемный материал. Полученные для $KCu_{7-x}S_4$ пиковые значения термоэлектрической добротности $ZT \approx 0.12$ при 350 К, $ZT \approx 0.19$ при 575 К. В работе [4] представлены результаты исследования сплава $K_{0.2}Cu_{1.8}S$ в интервале температур от 30 до 400 °С. Выше 300 °С в $K_{0.2}Cu_{1.8}S$ наблюдались сильный рост коэффициента термо-э.д.с. (до 4 мВ/К) и снижение теплопроводности до 0.4 Вт/м·К, приводящие к очень высокому пиковому значению $ZT=3.5$ при 380 °С.

В данной работе были синтезированы полупроводниковые сплавы $K_xCu_{1.85}S$ ($x = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05$) в расплаве смеси гидроксидов NaOH и KOH при температуре около 165 °С. При комнатной температуре образцы представляют собой смесь фаз моноклинного джарлeita ($Cu_{1.9375}S$), моноклинного и гексагонального халькоцита (Cu_2S). Размеры кристаллитов, оцененные из полуширины рентгеновских линий по формуле Шерера, лежат в интервале от 20 до 200 нм.

Теплоемкость измеряли на ДСК-калориметре DSC404 NETZSCH при скорости нагрева 10 град/мин в атмосфере аргона. Измерения температуропроводности и теплопроводности твердых образцов проводились на приборе LFA 467 HT HyperFlash (NETZSCH, Германия). Температуропроводность определяли по формуле Паркера:

$$a = 0.1388 \frac{l^2}{t_{1/2}} \quad (1)$$

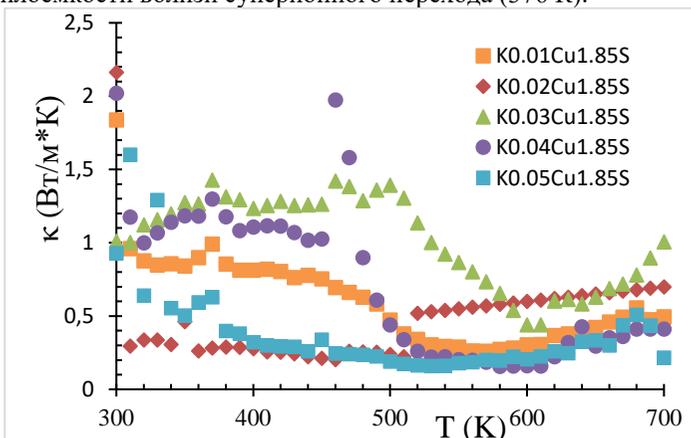
где, a – температуропроводность, l – толщина образца, $t_{1/2}$ – время в с, соответствующее увеличению температуры на 50%.

Теплопроводность рассчитывалась как

$$\chi(T) = a(T) * \rho(T) * c_p(T) \quad (2)$$

где T – температура, χ – теплопроводность, a – температуропроводность, ρ – плотность, c_p – удельная теплоемкость.

В области температур до 520 К наиболее низкая теплопроводность на уровне 0.3 Вт м⁻¹К⁻¹ у сплава K_{0.02}Cu_{1.85}S (рис.1), выше 520 К - у сплава K_{0.05}Cu_{1.85}S (0.2÷0.5 Вт м⁻¹К⁻¹). Теплоемкость сплавов в интервале 300-700 К меняется в пределах от 0.1 до 0.7 Дж К⁻¹г⁻¹. Для всех сплавов наблюдается пик теплоемкости вблизи суперионного перехода (376 К).



Литература

1. Qiu P., Zhu Y., Qin Y., Shi X., Chen L. Electrical and thermal transports of binary copper sulfides Cu_xS with x from 1.8 to 1.96. // APL Mater. 2016. V.4, 104805, doi:10.1063/1.4953439.
2. Kubenova M.M., Kuterbekov K.A., Balapanov M.Kh., Ishembetov R.Kh., Kabyshev A.M., Bekmyrza K.Zh. Some Thermoelectric Phenomena in Copper Chalcogenides Replaced by Lithium and Sodium Alkaline Metals. // Nanomaterials. 2021. V.11. P.2238 – 2286.
3. Li X., Hu C., Kang X., Len Q., Xi Y., Zhang K. and Liu H. Introducing kalium into copper sulfide for the enhancement of thermoelectric properties // J. Mater. Chem. A. 2013. V.1. P. 13721- 13726.
4. Балапанов М. Х., Ишембетов Р. Х., Ахметгалиев Б.М., Кутербеков К. А., Палымбетов Р.Ш., Сахабаева С., Якшибаев Р. А. Явления переноса в суперионном сплаве K_{0.2}Cu_{1.8}S. // Вестник Башкирского университета. 2020. Т. 25, №4. С. 794-799.

© Сахабаева С.М., Ахметгалиев Б.М.,
Кубенова М.М., Балапанов М.Х., 2021 г.

ИЗУЧЕНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ СЕЛЕНИДА МЕДИ

Сафаргалиев Д.И., Курбангулов А.Р., Акманова Г.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Квантовые точки применяются в гибридных солнечных батареях в качестве материала, преобразующего солнечную энергию в постоянный электрический ток. Использование квантовых точек в многослойных солнечных батареях позволяет добиться более эффективного поглощения солнечного излучения, так как они могут поглощать свет в более широком диапазоне, чем традиционные солнечные элементы.

Настоящая работа посвящена расчету зонной структуры селенида меди в наносостоянии. В качестве объекта исследования выбран смешанный суперионный проводник меди, обладающий кубической гранцентрированной решеткой в суперионном состоянии. Проведены модельные расчеты зонной структуры наноточек селенида меди в зависимости от расстояния между квантовыми точками.

Модельные компьютерные расчеты проведены с помощью программы Quantum Espresso [1]. При расчете были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для меди, для халькогенов – псевдопотенциалы сохраняющие норму, которые сгенерированы данной программой.

При высоких температурах Cu_2Se имеет ГЦК структуру (рис. 1).

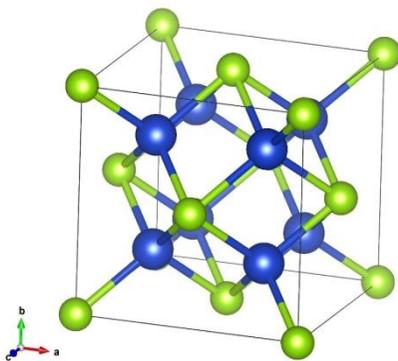


Рис. 1. Структура ГЦК соединения Cu_2Se в суперионном состоянии

На рис. 2 представлена зонная структура и плотность электронных состояний для объемного селенида меди.

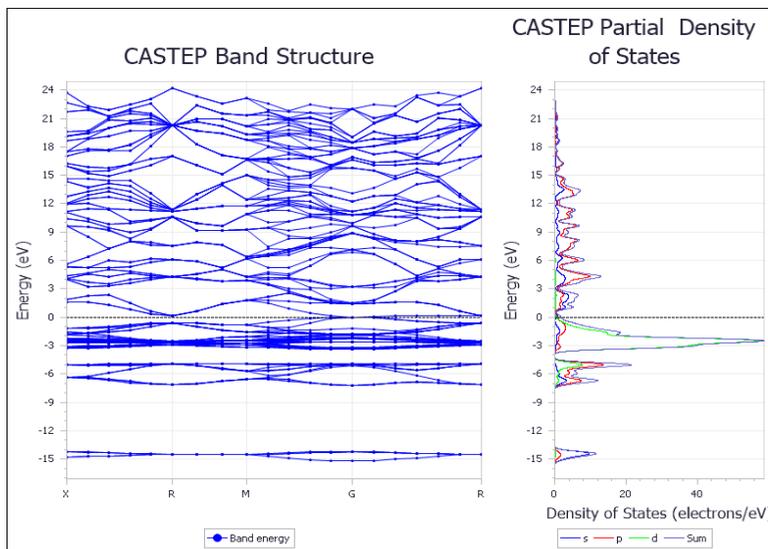


Рис. 2. Зонная структура и плотность электронных состояний для соединения Cu_2Se (кубическая структура)

Результаты исследования свидетельствуют о том, что электронная структура селенида меди характеризуется гибридизацией р-уровней селена и d-уровней меди. Анализ полученной парциальной и полной плотности электронных состояний показывает, что рd-гибридизация сильнее проявляется в теллуридах серебра, чем в селенидах меди.

Расчет зонной структуры показал, что соединение селенида меди является бесщелевым полупроводником.

Зонные структуры смоделированных наноточек селенида меди являются полностью дискретными, вид зонной структуры и ширина запрещенной зоны зависят от состава соединений и размера частиц.

Доклад подготовлен при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90216.

Литература

1. Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org>

© Сафаргалиев Д.И., Курбангулов А.Р., Акманова Г.Р., 2021 г.

РАСЧЁТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ХАЛЬКОГЕНИДОВ МЕДИ И СЕРЕБРА

Юлмухаметова А.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Зонная теория твёрдого тела — квантово-механическая теория движения электронов в твёрдом теле.

Свободные электроны могут иметь любую энергию — их энергетический спектр непрерывен. Однако, электроны, принадлежащие изолированным атомам, в соответствии с квантово-механическими представлениями, имеют определённые дискретные значения энергии. В твёрдом теле энергетический спектр электронов существенно иной, он состоит из отдельных разрешённых энергетических зон, разделённых зонами запрещённых энергий.

Расчет зонной структуры и распределения электронной плотности твердых растворов проводится в рамках теории функционала электронной плотности с помощью метода псевдопотенциала, реализованный в программных пакетах Material Studio и Vesta.

Теория функционала электронной плотности позволяет свести задачу многих частиц к задаче одной частицы, движущейся в эффективном потенциале. В данной теории основную роль играет распределение электронной плотности, а не многоэлектронная волновая функция.

Рассматривается некоторое число электронов, движущихся под действием внешнего потенциала $V(R)$ и взаимного кулоновского отталкивания. Стационарное состояние электронов описывается волновой функцией, которая является решением уравнения Шрёдингера:

$$H\Psi = [T + V + U] \Psi \quad (1)$$

Литература

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. — М.: Мир, 1968. — 366 с.
2. Цидильковский И. М. Электроны и дырки в полупроводниках. Энергетический спектр и динамика. М.: «Наука» 1972 г. — С. 91.

© Юлмухаметова А.Ю., 2021 г.

СЕКЦИЯ «ГЕОФИЗИКА»

УДК 532.5.013

DOI: 10.33184/fmpve-2021-10-06.132

ПРИМЕНЕНИЮ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАКОНОВ И ФОРМУЛ ДЛЯ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Бояркин С.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При выполнении оценки запасов подземных вод необходимо определение ряда физических параметров целевого водоносного горизонта. Далее будут описаны эти параметры:

1. Перспективный объем добычи (Q) – это суммарный перспективный объем добычи для технического водоснабжения системы ППД, определяется условиями геологического задания.

2. Срок эксплуатации водозабора (t) – это срок, который соответствует сроку амортизации водозабора, и как правило принимается величиной в 25 лет.

3. Эффективная мощность (m) – это суммарная мощность водоносных прослоев в пласте, способных отдавать извлекаемую воду. Определяется обычно по данным ГИС.

4. Плотность подземных вод – масса воды, находящаяся в единице ее объема.

5. Статический уровень ($H_{ст}$) – расстояние от устья скважины до устоявшегося уровня воды в скважине при отключенных насосах.

6. Допустимое понижение ($S_{доп}$) – Принимается для условия сохранения 200 м столба воды над верхней отметкой интервала перфорации с учетом абсолютной отметки статического уровня.

7. Коэффициент водопроницаемости (K_m) характеризует единичный расход (на 1 м ширины) потока подземных вод при градиенте, равном единице. Определяется двумя способами:

I. Через удельный дебит по формуле:

$$K_m = 1,7 \times q$$

где 1,7 – безразмерный коэффициент; q – удельный дебит скважин по результатам опытно-фильтрационных работ (ОФР).

II. Графоаналитическим методом при помощи графиков $s - \lg t$, построенным по результатам наблюдений за уровнями ПВ в ходе ОФР. На графики выносятся точки по величинам понижения уровня ПВ в соответствующие моменты времени. Далее график анализируется, выбирается участок, соответствующий тренду стабилизации уровня и

через 2 точки выбранного интервала проводится аппроксимационная (усредняющая/описывающая) прямая.

По частному разницы понижений и логарифмов времени выбранных точек определяется угловой коэффициент этой прямой:

$$C = (S_2 - S_1) / (\lg t_2 - \lg t_1)$$

Водопроницаемость определим по формуле:

$$K_m = 0,183 Q / C$$

III. Используя значения проницаемости, полученное в результате ГДИС на участках-аналогах, можно определить коэффициент фильтрации отложений по формуле

$$K_f = K_p \frac{\gamma}{\mu},$$

где K_f – коэффициент фильтрации, см/сек;

K_p – коэффициент проницаемости, Дарси;

γ – плотность жидкости, кг/см³;

μ – вязкость воды, сП (принимается по справочным данным, при температуре 22°C составляет 0,960 сП).

8. Пьезопроводность (а) – это показатель скорости перераспределения напора и сработки запасов водоносного пласта в условиях неустановившейся фильтрации.

9. Приведенный радиус влияния (R_{вл}) – это расстояние от скважины, из которой проводится откачка, до границ ее влияния.

$R_p = 1,5 \cdot \sqrt{at}$, где a – это пьезопроводность, t – время работы скважины.

Отмечаем, что приведенный радиус является теоретической величиной, на практике фактические величины приведенного радиуса, как правило, оказываются ниже теоретических.

Используя все эти параметры можно приступить к подсчёту запасов ПВ, которое сводится к расчету прогнозного понижения динамического уровня в водозаборных скважинах к концу времени эксплуатации при заданном водоотборе и его сопоставлению с величиной допустимого понижения. Запасы считаются доказанными, если расчетное понижение не превышает допустимой величины.

Подсчет запасов выполняется гидродинамическим методом, т.к. данный способ учитывает время эксплуатации водозабора, а также дополнительное влияние на уровень ПВ от взаимодействующих скважин.

Для расчета используется следующая формула:

$$S = [Q / (2\pi K_m)] * [\ln R / r]$$

,где S – понижение уровня, м;

Q – проектный дебит водозаборной скважины, м³/сут;

Km – водопроницаемость, $m^2/сут$;

R – приведенный радиус влияния, м;

r – радиус скважины, м.

Таким образом, при проведении работ по подсчёту запасов подземных вод следует учитывать все граничные условия, которые влияют на работу скважины, их можно определить и обосновать с помощью физических законов и формул.

Литература

1. Боровский Б.В. и др. Оценка запасов подземных вод. Киев, головное издательство объединения «ВЫЩА ШКОЛА» 1989.

© Бояркин С.А., 2021 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СНГК В НЕФТЯНЫХ И ГАЗОВЫХ СКВАЖИНАХ С ЦЕЛЬЮ УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА СКВАЖИННОГО МАТЕРИАЛА

Корытников А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время в нефтедобывающей промышленности наблюдается медленное истощение запасов и все большая их часть приходится на труднодоступные и трудно разрабатываемые месторождения.

Применения спектрометрических технологий во много раз упрощает процесс исследования недр, увеличивает эффективность разработки запасов, рост извлечения нефти.

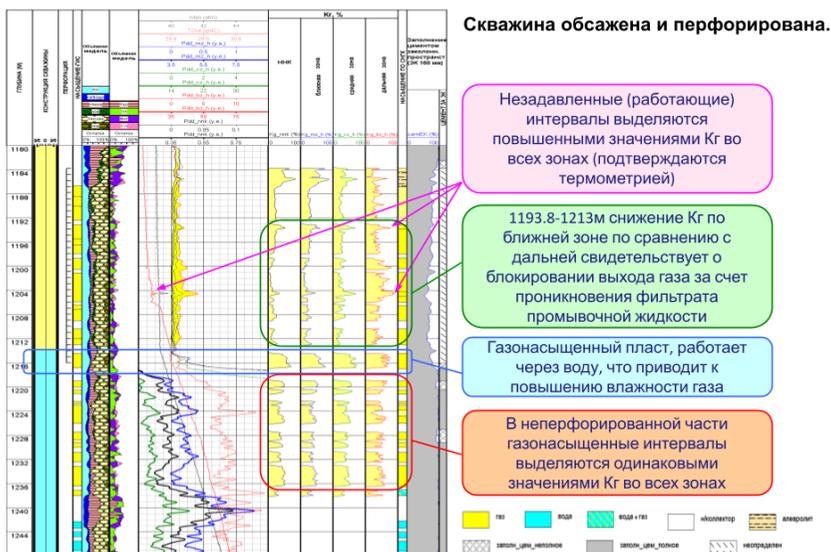


Рис. 1. Определение характера насыщения

Прибор СНГК основывается на взаимодействиях нейтрона с горными породами, пластовыми флюидами и газом, способен выполнять ряд важных для геофизических исследований скважин задач:

- литологическое расчленение разреза;
- определение минералогической плотности;

коэффициент пористости;
определение зоны проникновения и массовые содержания элементов, аномально поглощающих тепловые нейтроны: Cl, H, Si, Ca, Fe, Mn, Ni, Co и др.;

определение характера насыщения;
оценка качества цементажа и выделение границ (ВНК и ГНК);
контроль технического состояния скважины и качество цементажа.

Литература

1. Волков Н.Г. Методы ядерной спектрометрии // Н. Г. Волков, В. А. Христофоров, Н. П. Ушакова. //Москва : Энергоатомиздат, 1990. - 255.
2. Храмов А.С., Бикчантаев М.М., Хрипунов Д. М. Гамма-спектроскопия: регистрация естественной радиоактивности (на примере K40). Учебно-методическое пособие для студентов Института физики / А.С.Храмов, М.М. Бикчантаев, Д.М. Хрипунов // Казань: К(П)ФУ, 2014. - 29 с.: ил. 9
3. Реферат по теме 024 «Разработка аппаратуры спектрометрического нейтронного гамма– каротажа (СНГК) и методики ее применения в нефтегазовых скважинах Башкортостана» Н.М. Зараменских, В.И. Борисов ВНИИГИС, Октябрьский. 2000г. -275с.

© *Корытников А.А., 2021 г.*

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ SGK ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ДОСТОВЕРНОСТИ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ НЕФТЕГАЗОВЫХ СКВАЖИН

Кашапов А.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Прибор SGK основывается на измерении природы естественной радиоактивности горных пород, способен выполнять ряд важнейших задач:

- 1) выделение коллекторов и количественное определение их фильтрационно-емкостных свойств: оценка извлекаемых запасов нефти и газа;
- 2) литологическое расчленение разрезов, выявление геохимических и геологических закономерностей, присущих изучаемому разрезу;
- 3) оценка компонентного состава пород, включая содержания битумов, угля, твердой органики. Оценка содержаний отдельных глинистых минералов или их ассоциаций;

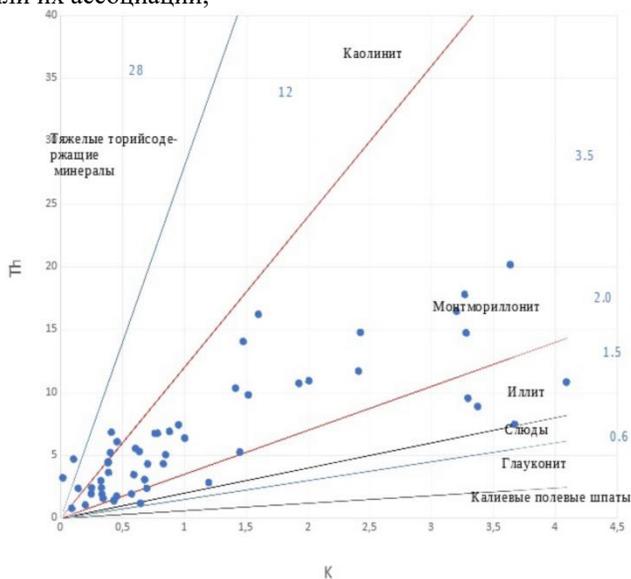


Рис. 1. Кросс-plot для определения минералогического состава глин

Литература

1. Урманов Э.Г. Спектрометрический гамма-каротаж нефтегазовых скважин. - М.: ВНИИОЭНГ, 1994.

© Кашапов А.И., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДА СНИЖЕНИЯ РАЗМЕРНОСТИ T-SNE В КОНТЕКСТЕ ПРИМЕНИМОСТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ГИС

Касимов А.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время большую популярность приобрели алгоритмы машинного обучения (ML) в анализе больших данных, в том числе в областях, связанных с геологией и геофизикой. Они позволяют выявить неочевидные закономерности среди большого количества информации. Поэтому все больше исследователей чья деятельность напрямую или косвенно связана с обработкой и интерпретацией данных ГИС пробуют применить эти алгоритмы для решения своих производственных или научных задач [1-2]. И основная проблема состоит в том, что использование конкретных методов ML, для их применения в отдельно взятой задаче требует не только специальных знаний в предметной области, но также применяемых инструментов (алгоритмы ML, языки программирования, математические программные модули) иначе корректность предоставленных исследователем решений могут вызвать сомнения, это обуславливает актуальность данной работы.

Цель работы – рассмотреть алгоритм снижения размерности t-SNE в контексте его применимости в решениях задач выделения коллекторов и определении типа насыщения, также реализовать программный модуль для использования рассмотренного метода ML на данных ГИС.

Заданная цель формирует задачи исследования - реализовать метод t-SNE в качестве программного модуля, сформулировать практические рекомендации, извлеченные из результатов эксперимента.

T-SNE [3] (Стохастическое вложение соседей с t-распределением) — это алгоритм машинного обучения для визуализации, являющейся техникой нелинейного снижения размерности хорошо подходящей для вложения данных высокой размерности и визуализации в пространство низкой размерности (двух- или трехмерное). В частности, метод моделирует каждый объект высокой размерности двух- или трёхмерной точкой таким образом, что похожие объекты моделируются близко расположенными точками, а непохожие точки моделируются с большой вероятностью точками, далеко друг от друга отстоящими.

С целью реализации возможности применения алгоритма t-SNE для решения задач ГИС был написан программный модуль, импортирующий данные каротажных исследований из файлов формата las. Далее программа

составляла все возможные сочетания кривых из имеющегося набора, после чего использовал их в качестве исходных данных для алгоритма t-SNE.

Результат работы алгоритма представляет собой двумерные или трёхмерные графы, содержащие семейства точек, при этом точки окрашены в соответствии с контрольными кривыми человеческой интерпретации (рис. 1). Расчёт производился для 20 различных скважин, имеющих стандартный комплекс каротажных исследований.

Анализ результатов проведённых вычислительных экспериментов выявил, что в рамках задачи выделения нефтенасыщенных интервалов наиболее приемлемый для дальнейшего кластерного анализа граф рассчитывается из кривых сопротивления, диаметра скважины и водородосодержания.

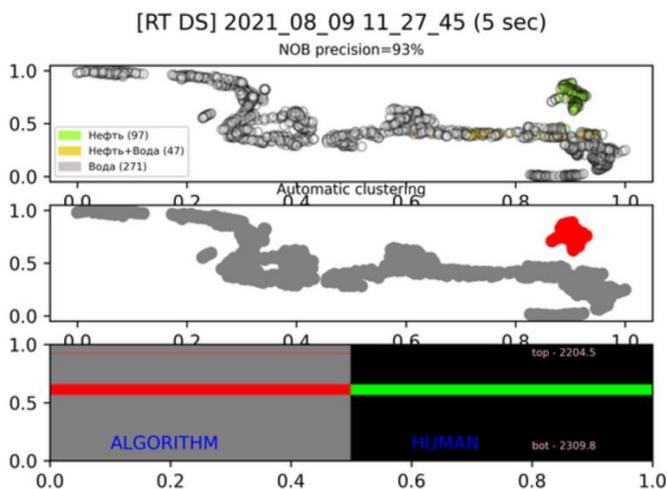


Рис. 1. Результат работы программы

Литература

1. Bougher, B. B. (2016). Machine learning applications to geophysical data analysis (Doctoral dissertation, University of British Columbia).
2. Hall, B., 2016, Facies classification using machine learning: The Leading Edge, 35, 906-909.
3. Van der Maaten L., Hinton G. Visualizing data using t-SNE //Journal of machine learning research. – 2008. – Т. 9. – №. 11.

© Касимов А.М., 2021 г.

О ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ ГИДРАТОНАСЫЩЕННОГО ПЛАСТА

Кофонова С.Р., Низаева И.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время газовые гидраты рассматривают как альтернативный источник углеводородного сырья. Однако выделение гидратонасыщенных пластов стандартным комплексом геофизических методов является достаточно сложной задачей, особенно в зоне вечной мерзлоты из-за схожих физических свойств гидрата и льда.

Данная работа посвящена анализу акустических свойств гидратонасыщенных пластов и удельного электрического сопротивления последних. Выявлены интервалы изменения указанных величин в зависимости от условий залегания.

В частности, согласно [1-3] значения скорости продольных волн в гидратных пластах в морской среде (Турбидитовые пески) находятся в пределах 1,5 – 2,5 км/с, в материковой части (песок) в пределах 3,4 – 4,0 км/с. Значения скорости поперечных волн гидратных отложений в аналогичных средах соответственно равны 0,5 – 1,3 км/с и 1,1 – 1,8 км/с.

Удельное электрическое сопротивление гидратных отложений оценено в морской среде и на материке, в том числе и в зоне вечной мерзлоты. Значения для морской среды находятся в пределах 2 – 20 Ом*м, для материка – 30 Ом*м (рыхлые отложения); в зоне вечной мерзлоты – 10 Ом*м.

Полученные результаты могут быть использованы для интерпретации геофизических скважинных данных.

Литература

1. Якушев В.С., Перлова Е.В., Махонина Н.А. и др. Газовые гидраты в отложениях материков и островов // Российский химический журнал. – 2003. – Т. XLVII. – № 3. – С. 80-90.
2. Methane hydrate reservoir model around the eastern Nankai trough area offshore Japan // Proceedings of the 6th International Conference on Gas Hydrates (ICGH 2008), Vancouver, British Columbia, CANADA, July 6-10, 2008.
3. Investigation of gas hydrate-bearing sandstone reservoirs at the "Mount Elbert" stratigraphic test well, Milne point, Alaska, proceedings of the 6th international conference on gas hydrates (ICGH 2008), Vancouver, British Columbia, Canada, July 6-10, 2008.

© Кофонова С.Р., Низаева И.Г., 2021 г.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ И ИНТЕРВАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ В ОТЛОЖЕНИЯХ ТЕРЕГЕННЫХ ПЛАСТОВ НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Шайбекова Г.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нейронные сети применяются для получения синтетических диаграмм в скважинах с отсутствием исходных измерений, путём обучения на данных хорошего качества в скважинах с полным комплексом геофизических методов (ГИС). Синтетические диаграммы, в частности, плотности и интервального времени необходимы для дальнейшей привязки сейсмических данных к разрезу месторождения, уточнения границ пластов и построения сейсмических моделей.

В работе представлены результаты синтеза акустического и плотностного каротажа с помощью нейронных сетей. Нейронные сети представляют собой эффективный механизм обработки данных для прогнозирования результатов разного рода, основанный на распознавании образов.

Расчет данных АК и ГГКп во всех скважинах было выполнено по методу нейронных сетей, который реализован в системе ПРАЙМ. Так как методы Фауста и Заляева применимы только для определенных типов литотипов, для восстановления был выбран метод нейронных сетей.

В данной работе обучение нейронов проводилось по методу Левенберга - Марквардта. Метод Левенберга - Марквардта был предложен как метод для решения задачи о наименьших квадратах.[1] Этот метод был применим для обучения нейронных сетей. Необходимо отметить, что в отличие от классического алгоритма обучения алгоритм на основе Левенберга-Марквардта использует «обучение по эпохам». В этом случае ошибка сети считается за всю эпоху обучения и параметры сети изменяются, когда сети уже предъявлены все элементы обучающего множества.[2] Данный метод считается самым быстрым и надёжным алгоритмом обучения.

После обучения был произведен расчет интервального времени ($DT_{\text{нейрон}}$) и плотности ($ГГКп_{\text{нейрон}}$) в опорных скважинах для сравнения с исходными кривыми (рисунок 1 а, б). Исходная кривая акустического каротажа показана на рисунке 1а вишневым цветом (DT), восстановленная - зеленым цветом ($DT_{\text{нейрон}}$). Исходная кривая плотности показана на рисунке 1б синим цветом ($ГГКп$), восстановленная - зеленым цветом ($ГГКп_{\text{нейрон}}$).

Как видно из рисунков, восстановленные и исходные кривые практически не отличаются. После обучения нужно обратить внимание на получившуюся погрешность. Если она слишком большая ~15%, стоит изменить входные данные, параметры до тех пор, пока погрешность не уменьшится.

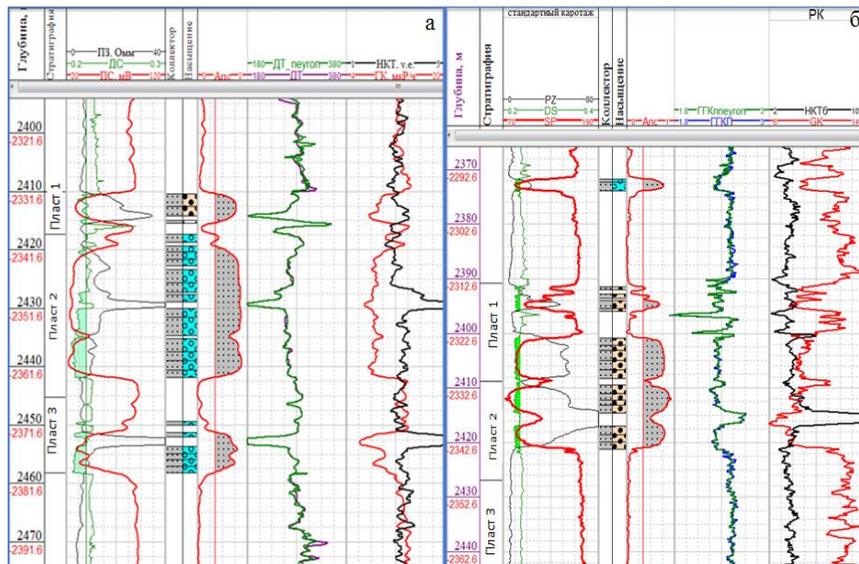


Рис. 1. – а) Сравнение исходной (ДТ) и восстановленной (ДТ_неуон) кривых акустического каротажа в опорной скважине; б) Сравнение исходной (ГГКп) и восстановленной (ГГКпneuon) кривых плотностного каротажа в опорной скважине

Литература

1. Заляев Н.З. "Методика автоматизированной интерпретации геофизических исследований скважин". – Минск, 1990г.
2. Gardner G.H.F., Gardner L.W., Gregory A.R. "Formation velocity and density - The diagnostic basics for stratigraphic traps: Geophysics", 1974, v39, pp 770-780.

© Шайбекова Г.Ф. 2021 г.

ИЗУЧЕНИЕ КОЛЛЕКТОРОВ СЛОЖНОГО ГЕОЛОГИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИНТЕРПРЕТАЦИИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО ГАММА-КАРОТАЖА

Косаева С.И, Вахитова Г.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Большую роль на всех этапах существования нефтяных месторождений со сложным геологическим строением продуктивных пластов играют результаты скважинных геофизических исследований. Они позволяют решать геологические задачи при подсчете запасов нефти и газа, контроле за разработкой месторождений, контроле технического состояния скважин.

Наиболее информативным в усложненных геологических условиях является спектрометрический гамма-каротаж (СГК).

Цель настоящей работы – выполнить анализ горных пород со сложным геологическим строением на основе результатов интерпретации спектрального гамма-каротажа в скважинах Степного месторождения. Для этого необходимо оценить минеральный состав глин, построить распределение U/Th , $K \cdot Th$ по площади в виде соответствующих карт, выполнить анализ полученных результатов.

В результате данного исследования выполнен анализ массового содержания в горных породах тория (Th), урана (U), и калия (K) по результатам регистрации в скважинах Степного месторождения естественной радиоактивности. Определен минеральный состав глин по разрезу месторождения на основе полученных палеток. Для карбонатных горных пород сложного геологического строения со смешанным типом пористости, включающим межзерновый, трещинный и каверновый типы, построены карты массового содержания радиоактивных элементов U, Th, K, а также отношения U/Th и калий-ториевого индекса $K \cdot Th$. Результаты работы имеют практическое значение для дальнейшего планирования мест бурения новых скважин на перспективных участках Степного месторождения.

Литература

1. Урманов Э.Г. Спектрометрический гамма-каротаж нефтегазовых скважин. М., ВНИИОЭНГ, 1994.
2. Хуснуллин М.Х. Геофизические методы контроля разработки нефтяных пластов. — М.: Недра, 1989. — 190с.
3. Д.А.Кожевников. Гамма-спектрометрия в комплексе геофизических исследований нефтегазовых скважин. — Методическое пособие. М.: 1998. — 42 стр.

© Косаева С.И, Вахитова Г.Р., 2021 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ПОТОКА ЖИДКОСТИ В НАГНЕТАТЕЛЬНОЙ СКВАЖИНЕ С УЧЕТОМ ИНЕРЦИОННОСТИ ДАТЧИКА ТЕРМОАНОМЕТРА ПРИ ПЕРЕМЕННОЙ СКОРОСТИ ДВИЖЕНИЯ ПРИБОРА

Шафииков Д.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Задача точного определения скорости потока жидкости в стволе нагнетательной скважины является важной задачей контроля за разработкой месторождения. Точное значение скорости потока жидкости позволяет определить приемистость каждого интервала перфорации, оценить величину утечки при наличии нарушения колонны.

Существуют методы, позволяющие измерить скорость потока, каждый из которых имеет свои преимущества и недостатки. В настоящее время используются расходомеры на основе перепада давлений, механического определения притока в скважине, многофазного потока возможно при применении аппаратуры таких фирм как Шлюмберже и Роксар. Определение дебита с помощью скважинного термоанометра возможно только при распределении температуры в добывающей скважине в зоне теплообмена и для однофазного потока при движении прибора близкой к скорости потока [1,2,3,4].

Существует методика определения скорости потока жидкости в нагнетательной скважине по данным скважинного термодобитомера [1]: при движении прибора со скоростью потока на замере наблюдается максимальное значение температуры.

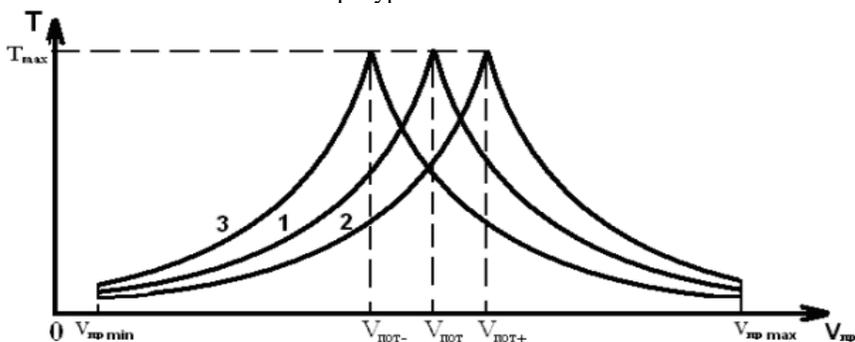


Рис. 1. Зависимость температуры от ускорения прибора

Автор данной методики предлагает учитывать инерционность датчика температуры, как среднее значение между значениями, полученными при ускоренном и замедленно движении прибора. Известно, инерционность датчика температуры можно учесть следующим образом [2]:

$$v = \frac{3600\Delta h}{\tau} \text{ [м/час]}$$

где - Δh - мощность пласта, в м, τ – инерционность термометра, с

В результате выполнения работы была получена пересчитанная зависимость показания термоанометра от глубины и выполнено определение скорости потока жидкости на глубинах, соответствующих максимальным значениям термоанометра:

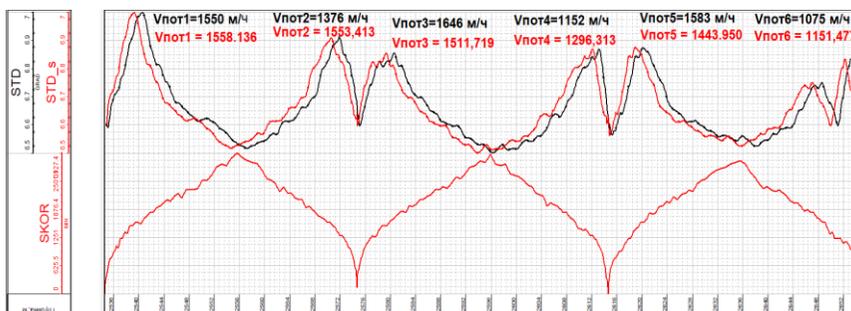


Рис. 2. Термограммы скважинного термодобитометра. Черная кривая (STD) – исходная. Красная кривая (STD_s) – это кривая с учетом поправки за инерционность

Литература

1. Мухутдинов В. К., Диссертация, Развитие термодобитометрии при исследовании технического состояния нагнетательных скважин. — Уфа: 2016. – 156с.
2. Р.А. Валиуллин, В.Ф. Назаров, А.Ш. Рамазанов, В.Я. Федотов, А.И. Филиппов, Р.К. Яруллин., Методические рекомендации по термическим исследованиям скважин. - Уфа: изд-во Башк. Госуд. Унта. 1989.
3. Яруллин Р. К., Курс лекций, Лекция №4, измерение скорости и расхода в промышленности и скважинной геофизики. — Уфа: 2010. — 23 с.
4. Д-р Стюарт Л.Скотт. Современное состояние технологии измерения многофазных потоков / Л.Скотт Стюарт // Многофазные расходомеры. – 2007. – С.-32-47.

© Шафигов Д.С., 2021 г.

В результате проделанной работы были получены следующие выводы: крутизна спада потока тепловых нейтронов ИГН характеризует водородосодержание; ИННК позволяет определить наличие перетока за колонной по сопоставлению кривых времени жизни тепловых нейтронов; использование замеров ИГН перспективно и для выявления трещин при ГРП: местоположение и высоты трещин.

Литература

1. Асланян А.М., Асланян И.Ю., Масленникова Ю.С., Минахметова Р.Н., Сорока С.В., Никитин Р.С., Кантюков Р.Р. Диагностика заколонных перетоков газа комплексом высокоточной термометрии, спектральной шумометрии и импульсного нейтрон-нейтронного каротажа // Территория «НЕФТЕГАЗ». 2016. № 6. С. 52–59.
2. Кантор С.А., Шимелевич Ю.С. Физические основы импульсных нейтронных методов исследования скважин. - М.: Недра, 1976. - 160 с.
3. Кожевников Д.А. Интерпретационное обеспечение метода естественной радиоактивности. //Геофизика, 2005. -№ 2. -С.42-49.

© *Ракунова К.В., 2021 г.*

АНАЛИЗ ПРИЧИН НЕЭФФЕКТИВНОЙ ЗАКАЧКИ

Дементьева Д.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из основных факторов, влияющих на эффективность добычи углеводородов при разработке месторождения, является система заводнения. Целью заводнения является поддержание пластового давления (ППД) и увеличение нефтеотдачи пласта за счет охвата при заводнении. Зачастую с этой целью осуществляют перевод добывающих скважин, отработавших на истощение, в нагнетание. В нагнетательном фонде скважин существует ряд проблем, таких как неэффективная закачка, неистинная компенсация, в большинстве случаев, связанных с наличием заколонной циркуляции (ЗКЦ), НЭК и внутриколонных перетоков; в результате чего снижаются дебиты нефти в добывающих скважинах, не вырабатываются запасы нефти, искажается гидродинамическая модель пласта и т.д. Знание о нецелевой закачке, также может поспособствовать снижению риска ГНВП при ЗБС. Поэтому очень важно знать о нецелевой закачке, чтобы избежать большого ущерба с точки зрения экономики и экологии.

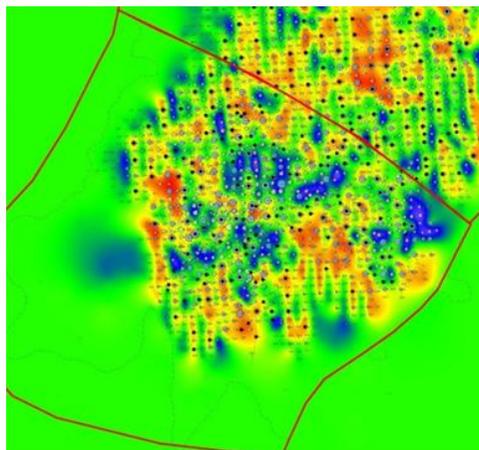


Рис. 1. Предлагаемая зона

В данной работе рассматривались группы скважин одного из месторождений Западной Сибири. Путем анализа высокообводненного добывающего фонда скважин были найдены нагнетательные скважины,

которые в значительной степени повлияли на рост темпа обводнения. Конкретно по этой выборке были отобраны такие нагнетательные скважины, у которых была изменена закачка в период, предшествующий скачку обводненности ближайшей добывающей скважины. Предлагаемая зона рис.1, эксплуатируемая системой разработки, имеет расчетный объем закачки на замере ГДИС рис.2 ниже фактической, это указывает на наличие ЗКЦ или негерметичность э/к в нагнетательной скважине. Далее была произведена оценка ухода жидкости в нецелевые объекты с помощью ПГИ.

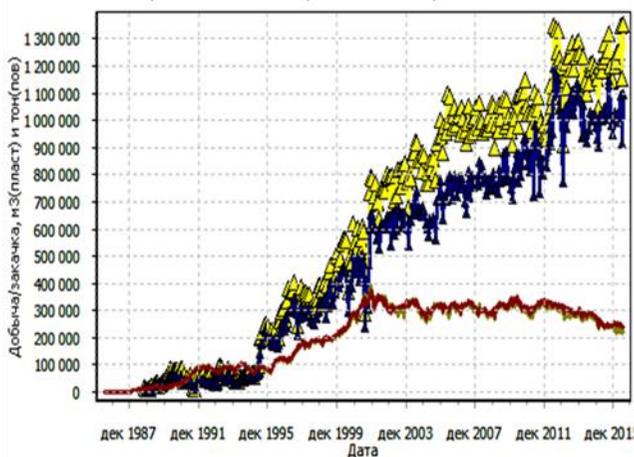


Рис. 2. Результаты адаптации модели

Литература

1. Ипатов А.И., Кременецкий М.И., Каешков И.С., Колесников М.В., Михайлов С.А., Хасаншин Р.Н. - Решение проблем оценки непроницаемой закачки воды в нагнетательных скважинах и эффективности ремонтно-изоляционных работ на основе гидродинамико-геофизических исследований, // Журнал «Геофизика» - 2019 - №1 - стр 41-48.
2. Байков В.А., Жданов Р.М., Муллағалиев Т.И. Усманов Т.С. Выбор оптимальной системы разработки для месторождений с низкопроницаемыми коллекторами. // Электронный научный журнал «Нефтегазовое дело». 2011. № 1. С. 84-100.

© Дементьева Д.В., 2021 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ РЕАЛЬНОЙ СКВАЖИНЫ В СИСТЕМЕ ДВУХ ПЛАСТОВ

Мухтаров Р.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При разработке месторождений полезных ископаемых, работа скважины сопровождается изменением различных геофизических полей. Применение термометрии позволяет решить ряд задач на разных этапах разработки.

При исследовании нефтяных скважин метод используется для выявления работающих интервалов, границ интервалов притока и для определения расхода и нефтеводопритоков [1].

В термометрии работающие интервалы скважины определяются за счет отклонения значения температуры от геотермического распределения, на верхних и нижних перфорированных интервалах, изменения в которых происходят за счет эффекта калориметрического смешивания и дроссельного эффекта соответственно. Для получения информации в работающем интервале пласта используется математические модели [3], позволяющая изучить процессы возникающие при притоке жидкости из пласта.

При построении термограммы первое нарушение будет обнаружено в участке приближения к рабочему пласту, это нарушение обусловлено теплопередачей от флюида, разогретого в процессе дросселирования. Далее температура будет расти из-за воздействия рабочего пласта, разогретого под влиянием теплового поля Земли. Изменение температуры протекающей по пласту жидкости происходит за счет эффекта Джоуля – Томсона. По мере удаления от работающего интервала, температура в стволе скважины будет выравниваться по геотермическому распределению. Температура на верхнем интервале изменится в ходе смешивания притекающего из этого пласта флюида с восходящим потоком [2], это можно увидеть на рис. 1.

При сравнении результатов реальной практической интерпретации и интерпретации выполненной с помощью нашей математической модели, мы увидим то, что они практически совпадают.

Кроме того, модель позволяет решать обратную задачу. Это позволяет построить профили притока и получить расход пластов.

Модель можно применять на любых скважинах и пластовых системах. Достоинство алгоритма в том, что его можно применить при неполноте данных, а также с целью получения количественных параметров.

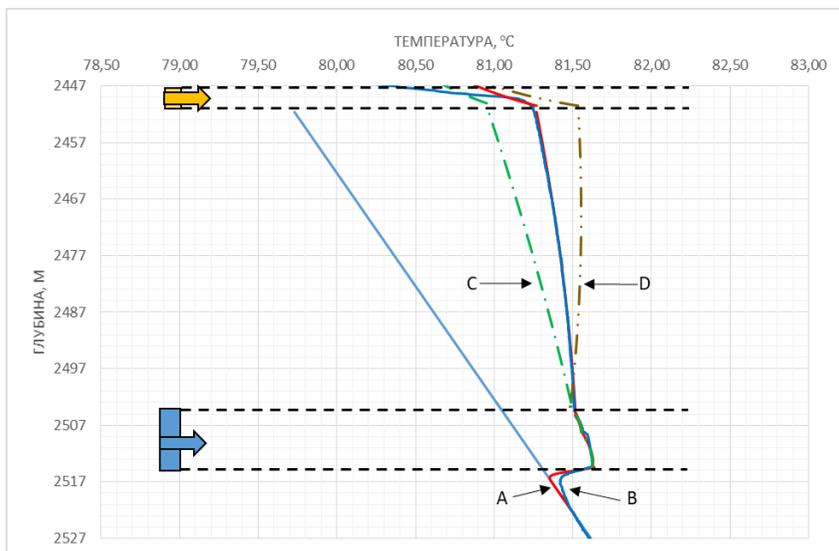


Рис. 1. Термограмма построенная по математической модели: А – распределение по данным скважины; В – реальная термограмма; С – распределение с корректировкой дебита от первоначального в -10%; D - распределение с корректировкой дебита от первоначального в +10%

Литература

1. Валиуллин Р.А., Яруллин Р.К. Геофизические исследования и работа в скважинах: в 7 т. 3. Исследования действующих скважин – Уфа: Информ-реклама, 2010. – 184 с.
2. Валиуллин Р.А., Вахитова Г.Р. Комплексная интерпретация геофизических данных на основе типовых диаграмм. – Уфа: РИО БашГУ, 2004. – 98 с.
3. Рамазанов А.Ш. Теоретические основы скважинной термометрии: Учебное пособие. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2017. – 114 с.

© Мухтаров Р.М., 2021 г.

АВТОМАТИЧЕСКОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ ФАЦИЙ ПО ДАННЫМ ГИС НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Шпар А.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Целью данной работы является создание метода автоматического выделения фаций в разрезе скважин по данным ГИС, а именно по данным каротажа потенциала собственной поляризации и гамма каротажа. Данная задача включает в себя расчёт релевантного набор признаков на основе показаний каротажных кривых и построение модели классификатора, позволяющую получить наилучшее качество прогноза с точки зрения интегральных и дискретных характеристик.

Теоретической основой интерпретации данных геофизических исследований скважин послужили работы, посвящённые реконструкции фациальных условий осадконакоплений по электрометрическим моделям фаций В.С. Муромцевым [1] и О. Серра [2].

В работе описаны выбор способа машинного обучения, подходы к интерпретации данных ГИС для задачи определения фаций, методы машинного обучения и создание признаков.

Основным постулатом построения модели машинного обучения являлось то, что выбор признаков должен основываться на их интерпретируемости, делимости и тесноте линейной связи, что должно решать ряд проблем применения машинного обучения для решения задач в рамках реальных проектов.

В ходе работы удалось создать модель классификатора, которая увеличила точность прогноза типа фаций по сравнению с базовым решением, представленным в более ранних работах по данной тематике, с 71% до 86% на аналогичном наборе исходных данных каротажа и результатах экспертной оценки фаций.

Литература

1. Муромцев В.С. Электрометрическая геология песчаных тел – литологических ловушек нефти и газа. – Ленинград: Недра, 1984. – 260 с.
2. Серра О. Восстановление условий осадконакопления по данным геофизических исследований скважин. – Москва: Schlumberger Limited, 1985. – 366 с.

© Шпар А.С., 2021 г.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ В ПЛАСТЕ С ТРЕЩИНОЙ ГИДРОРАЗРЫВА В РЕЖИМЕ ПОСТОЯННОГО ОТБОРА И ДЕПРЕССИИ

Давлетшин Ф.Ф., Шарафутдинов Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Гидравлический разрыв пласта (ГРП) является широко применяемым методом стимуляции добывающих скважин. Инициация одиночных и множественных гидроразрывов делает возможной эксплуатацию нетрадиционных и трудноизвлекаемых запасов. Однако процесс гидроразрыва является достаточно сложным с точки зрения прогнозирования ориентации созданных трещин, а также параметров их геометрии и фильтрационных характеристик – длины и ширины, высоты, проницаемости (проводимости). В настоящее время активно развиваемым направлением при диагностике параметров гидроразрыва в скважинах различного профиля является нестационарная термометрия [1]. Целью работы является исследование формирования температурного поля жидкости, притекающей в скважину, при различном режиме ее работы. Рассматриваются режимы постоянного дебита (отбора) и депрессии.

Особенности формирования нестационарного температурного поля исследуются на базе численной модели, учитывающий конвекцию и теплопроводность, основные термодинамические эффекты (Джоуля-Томсона и адиабатического охлаждения) [2]. Установлено, что конфигурация кривой изменения температуры во времени изменяется в зависимости от геометрии трещины (ширины и длины), соотношения проницаемости пласта и трещины. Температура притекающей жидкости изменяется немонотонно, причем производная температуры во времени может иметь как положительное, так и отрицательное значение, связанное с действием термодинамических эффектов. Даны рекомендации по применению полученных результатов при проведении промысловых замеров.

Литература

3. Шарафутдинов Р.Ф., Давлетшин Ф.Ф. Численное исследование неизотермической фильтрации сжимаемого флюида в низкопроницаемом пласте с трещиной гидроразрыва // Прикладная механика и техническая физика. 2021. Т. 62, №2. С. 160-173.
4. Рамазанов, А.Ш. Теоретические основы скважинной термометрии: учебное пособие. Уфа: РИЦ БашГУ, 2017. 114 с.

© Давлетшин Ф.Ф., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПЛАСТЕ ПРИ ТРЕХФАЗНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ГАЗИРОВАННОЙ НЕФТИ ВОДЫ И ГАЗА

Хажина Э.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Процесс изучения неизотермической трехфазной фильтрации является важной составляющей при интерпретации данных промыслово - геофизических исследований в условиях разгазирования нефти [2].

Результаты расчета показывают, что наблюдается изменение знака температурной аномалии в зависимости от времени и величины водонасыщенности [3]. Также из зависимостей температуры от времени можно заключить, что квазистационарное распределение температуры устанавливается через 12 часов работы скважины.

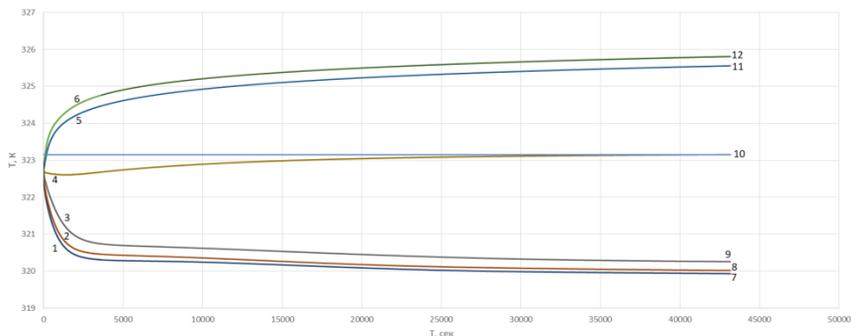


Рис. 1. Зависимость температуры на выходе из пласта от времени, для различных водонасыщенностях. 1,7 – 0; 2,8 – 0.1; 3,9 – 0.3; 4,10 – 0.5; 5,11 – 0,7; 6,12 – 0.8. 1-6 1 час; 7-12 12 часов

На рис.1. видно, что температура падает со временем при низкой водонасыщенности, это происходит за счет охлаждающего эффекта разгазирования нефти. А при высокой водонасыщенности температура растет из-за дроссельного разогрева [1]. При среднем значении водонасыщенности наблюдается, вначале отрицательная аномалия, затем принимает начальную температуру.

Теперь рассмотрим изменение температурного поля от проницаемости, при различных водонасыщенностях. Проницаемость на графике составляет $10^{(-15)}\text{м}^2$.

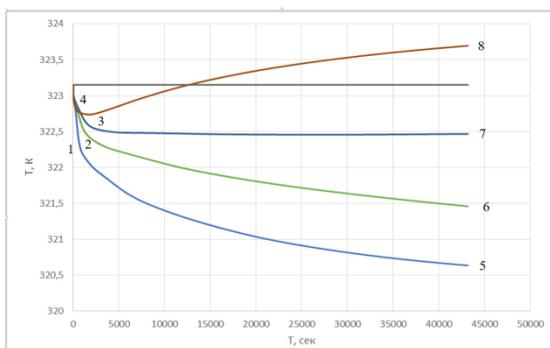


Рис. 2. Изменение температурного поля от проницаемости, при различных водонасыщенностях. 1-4 1 час, 5-8 12 часов; 1 и 5 – 0; 2 и 6 -0.3; 3 и 7 – 0.5; 4 и 8 – 0.7

На рис. 2. наблюдаем смещение вниз от начальной температуры. Так же вначале кривых появляется явная отрицательная температурная аномалия, из-за более сильного влияния охлаждающего эффекта на выходе из пласта.

По рис. 2. можно сделать вывод чем меньше проницаемость, тем больше отрицательная аномалия, из-за влияния охлаждающего эффекта, возникающего при разгазировании, в следствие чего происходит долгое разогревание флюида.

С учетом закономерностей формирования температурного поля под действием термодинамических эффектов, приведенных на примере температурного анализа скважин с условием разгазирования нефти в скважине, можно выполнять решение ряда различных задач на основе данных термогидродинамических исследований скважин.

Результаты в дальнейшем могут быть использованы для составления методических указаний по интерпретации данных термометрии при многофазных потоках, и в низкопроницаемых пластах.

Литература

1. Чекалюк Э.Б. Термодинамика нефтяного пласта. М.: Недра, 2013. -246 с.
2. Гиматудинов Ш.К. Физика нефтяного и газового пласта. М.: Недра, 1971. -312с.
3. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978. -512с.

© Хажина Э.И., 2021 г.

КОНЦЕПЦИЯ МОДЕРНИЗИРОВАННОГО ЛАБОРАТОРНОГО СТЕНДА ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ОЦЕНКИ ВОЗМОЖНОСТИ ЛОКАЛИЗАЦИИ ИСТОЧНИКА ШУМА

Галанов К.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Введение

Использование лабораторного стенда является важной задачей в процессе изучения различных вопросов. Он позволяет смоделировать интересующие нас процессы, зафиксировать данные для их дальнейшего использования.

С их помощью лабораторного стенда, а конкретно практической работы за ним, можно более качественно изучить техническую базу, а также получить практические навыки работы с современными средствами автоматизации и программным обеспечением.

Теория



Рис. 1 Внешний вид лабораторного стенда по изучению характера распространения акустических шумов внутри участка горизонтальной скважины

На рисунке 1 представлен гидродинамический лабораторный стенд, созданный для изучения поведения акустического сигнала в жидкости. Стенд позволяет выяснить, как будет меняться поведение акустического сигнала в скважине, наполненной жидкостью, которой может являться как грунтовая вода, так, например, и промывочная жидкость. Необходимо опытным путем выяснить и установить зависимость. Для сравнения в корпус можно заливать жидкости различных плотностей (пресная вода, буровой раствор, промывочная жидкость, вода с высокой минерализацией).

Еще одной немаловажной задачей является извлечение полезного “белого” шума из общей звуковой дорожки. Для этого мы и установили на торец корпуса динамик с частотным диапазоном 70 Гц - 20 кГц. С помощью подключения к аудионосителю мы можем смоделировать звуковые сигналы, имитирующие звуки течения жидкости. При необходимости есть возможность уменьшения и увеличения громкости. Что позволяет смоделировать поток жидкости в трубах, движение потока по кавернозным и трещиноватым средам, фильтрационный поток и тд.

Лабораторный стенд с возможностью симуляции “сложных” скважинных условий - это новый путь при решении некоторых проблем, с которыми сталкивается геофизика. Максимальное удобство в работе стенда обеспечивается тем, что при необходимости можно подключить измерительные приборы; существует переключение режима регулировок; показания измерений считываются измерительными приборами.

Наш стенд относится к III поколению - то есть представляет собой автоматизированное рабочее место, которое содержит компьютер, подключенный к гидрофону, который используется для записи звуковой дорожки в жидкой среде. Измерительные приборы были заменены датчиками, присоединенными к сопряженному устройству. Функции экспериментатора перешли из области непосредственного управления изучаемым объектом в область функций оператора. В таком случае достоинство - это уменьшение текущих операций и более эффективное использование времени.

Появляется возможность использовать этого лабораторного стенда на лекционных демонстрациях и на лабораторно-практических занятиях, что является прочной основой для подготовки профессионально-компетентного, творческого специалиста, имеющего достаточный уровень фундаментальной, предметной, технико-технологической и общепрофессиональной подготовки.

Выводы

Качественный лабораторный стенд позволяет использовать различные измерительные приборы, которые увеличивают точность измерений и уменьшают время, затраченное на измерения. Такие технологические стенды могут помочь в решение актуальных проблем в геофизике.

Литература

1. Zarnitza, Продукция, [сайт], URL, <https://zarnitza.ru/press-center/blog/uchebno-laboratornye-stendy/>

© Галанов К.И., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ВЫДЕЛЕНИЯ ИСТОЧНИКА ШУМА, ПРИ НАЛИЧИИ ФОНОВОГО ЗАШУМЛЕНИЯ НА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМ СТЕНДЕ

Дунюшкин А.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Шумометрия основана на изучении распределения по глубине скважины интенсивности естественных механических колебаний сред, сопровождающих различные технологические процессы, в которые и входит движение жидкости или газа по пласту, заколонному пространству и т.д. С помощью шумометрии можно выделять места притоков газа и жидкости в скважину, производить оценку дебетов работающих интервалов, также можно определять характер притока (однофазный, двухфазный) и проводить диагностику состояния ствола скважины[1].

Измерения на экспериментальном стенде проводились с помощью эталонного гидрофона. Далее на рис. 1 представлено схематическое изображение лабораторного стенда, собранного нами для экспериментов.

Для удобства проведения эксперимента обозначим цифрами от -30 до 30 расстояние в сантиметрах, принимая за ноль центр трубы. Гидрофон поместим внутрь трубы, чувствительным элементом в нулевой отметке. Измерения проводились по точкам, на расстоянии 10 сантиметров от предыдущего измерения.

Для генерации фонового шума, был задействован динамик, прикрепленный с торца стенда. На него, через усилитель генерировался «белый шум» в диапазоне от 50 Гц до 9 кГц. Источником генерации сигнала выступал смартфон и программа Noise Generator.

Следующим этапом экспериментальных работ, было измерение спектра шумов с подключенным к генератору сигналов пьезокерамическим излучателем. Амплитуду полезного сигнала было решено установить 7 милливольт. Последующие измерения разделились на несколько частей, при одинаковых условиях перемещения излучателя, но с разными частотами генерируемого сигнала. Было решено проводить измерения на частоте 8 кГц, 12 кГц, 16 кГц, 32 кГц. Последовательность действий при измерении была следующая: устанавливаем частоту и амплитуду полезного сигнала, запускаем программное обеспечение ZetLab, которое в течении минуты записывает спектр шумов улавливаемый гидрофоном. Затем повторяем эти операции, перемещая источник полезного сигнала относительно эталонного гидрофона. Были получены следующие данные, представленные в виде графиков на рис.2.

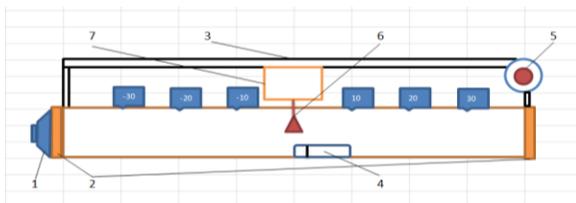


Рис. 1. Схематическое изображение лабораторного стенда; 1- динамик, с помощью которого создается фоновое зашумление; 2- заглушки; 3- направляющая движение каретки; 4- эталонный гидрофон; 5- шаговый двигатель; 6- пьезоэлемент (излучатель полезного сигнала); 7- каретка, куда прикрепляется излучатель сигнала

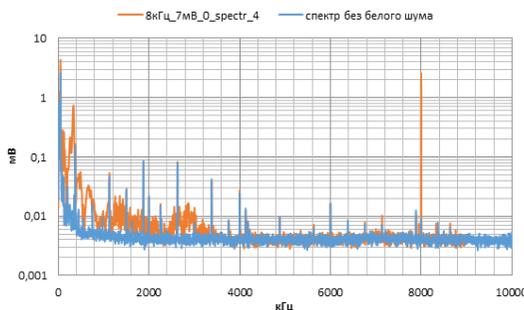


Рис. 2. Спектр шумов при генерации сигналов амплитудой 7 мВ, частотой 8 кГц (нулевая отметка) и спектр при фоновом зашумлении.

На графиках отчетливо видны пиковое значение амплитуды на частоте 8 кГц. Следовательно, по данным, которые пишет гидрофон мы можем отличить полезный сигнал от фоновых зашумлений

Литература

1. Косков К.В., Косков Б.В. геофизические исследования скважин и интерпретация данных ГИС: учебное пособие. // К.В. Косков, Б.В. Косков. Издательство Пермского государственного технического университета, 2007. – 450 с.

© Дунюшкин А.С., 2021 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРОНТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПОПУТНО-ДОБЫВАЕМЫХ ВОД ПРИ ИХ РАЗМЕЩЕНИИ В ГЛУБОКОЗАЛЕГАЮЩИЕ ГОРИЗОНТЫ

¹Бояркин С.А., ²Гимранов И.Р., ²Вагапов В.Р.

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²ООО «РН-БашНИПИнефть», г. Уфа

На сегодняшний день большинство нефтяных добывающих скважин - высоко обводненные (более 90%). Часть попутно-добываемых вод, не используемых в системе поддержания пластового давления, требуют размещения. Одним из оптимальных решений данной задачи является размещение попутно-добываемых вод в глубокозалегающие горизонты.

В настоящее время, при проектировании участков размещения попутных вод, радиус замещения пластовых вод попутно-добываемыми рассчитывается аналитическим методом. Расчет радиуса фронта распространения попутно-добываемых вод вычисляется по формуле [1]:

$$R = k \cdot \sqrt{\frac{Q \cdot T}{\pi \cdot m \cdot n}} \quad (1)$$

где R – радиус распространения закачиваемых вод, м; Q – суммарный суточный объём закачки, м³; T – период эксплуатации, сут; m – эффективная мощность пласта, м; n – пористость пласта, д.ед.; k – коэффициент запаса.

Спрогнозировать фронт распространения попутно-добываемых вод при их размещении в глубокозалегающие горизонты так же можно с помощью гидродинамического моделирования. Данный способ реальнее отражает ситуацию с распространением закачиваемых вод в пласте-коллекторе и позволяет более корректно определить границу распространения закачиваемых вод. Это позволяет сделать достоверный вывод о необходимости корректировки границ лицензионного участка, либо об отсутствии такой необходимости для соблюдения законодательства в сфере недропользования [2].

Литература

1. Грабовников В. А. Гидрогеологические исследования для обоснования подземного захоронения промышленных стоков. – М.: Недра, 1993. – 335 с.
2. Федеральный закон «О недрах» от 3 марта 1995 г. №27-ФЗ (ред. от 08.12.2020).

© Бояркин С.А., Гимранов И.Р., Вагапов В.Р., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ФИЛЬТРАЦИИ НЕФТИ В УПРУГОМ НЕОДНОРОДНОМ ПЛАСТЕ

Ганеева А.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Целью работы является расчет нестационарной температуры притекающей жидкости из упругого радиально-неоднородного пласта **на основе модели давления по** методу последовательной смены стационарных состояний. Решение для температуры получено методом характеристик.

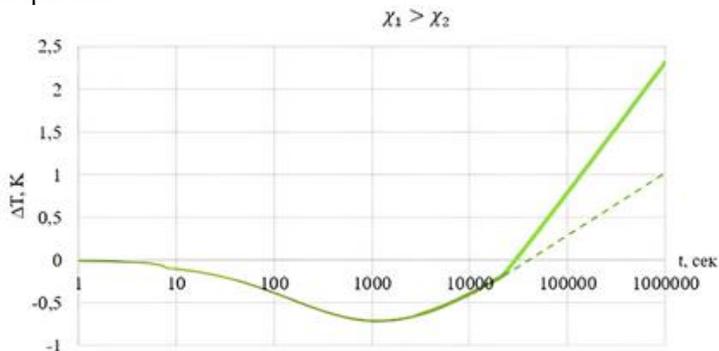


Рис. 1. Нестационарная температура поступающей из неоднородного пласта нефти для случая, когда проницаемость ближней к скважине зоны пласта выше проницаемости дальней зоны

На рис. 1 представлен результат расчетов. Пунктиром обозначено продолжение графика в случае однородного пласта. Для неоднородной же среды наклон прямолинейного участка в полулогарифмических координатах резко меняется, что свидетельствует о том, что радиус термозондирования перешел границу отличающихся по проницаемости зон.

Литература

1. Чекалюк Э.Б. Термодинамика нефтяного пласта. – М.: Недра, 1965. – 238 с.
2. Рамазанов А.Ш. Теоретические основы скважинной термометрии: учебное пособие / Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2017.

© Ганеева А.И., 2021 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕБИТА ПО ТЕРМОГРАММЕ В МАЛОДЕБИТНОЙ СКВАЖИНЕ

Джилилова И.Д.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Введение

Для рациональной разработки и прибыльной добычи нефти, одним из основополагающих параметров, осуществляющих контроль продуктивности коллектора, является дебит. В традиционном представлении измерение скорости потока реализуется фиксированием расхода в скважине. Однако при использовании названного подхода наблюдается ряд недостатков. Среди которых можно отметить снижение информативности данного метода для определения притоков невысокой интенсивности. Такая погрешность приводит к значительному искажению параметров для малодебитных скважин [4].

На данный момент месторождения в России находятся преимущественно на поздних (завершающих) стадиях разработки. При эксплуатации этих скважин мы имеем ряд особенностей: малые дебиты, высокая обводненность, низкие темпы разработки, рост доли трудноизвлекаемых запасов. Продуктивные пласты характеризуются аномально низким коэффициентом проницаемости, что вынуждает использовать более современные и сложные способы вскрытия, но не всегда передовые технологии могут дать ожидаемый результат и эффективность.

Существующие методики, позволяют лишь на качественном уровне оценить дебит, в то время как важны количественные характеристики. Получение таких данных с помощью расходомеров имеет ряд недостатков при работе в малодебитных скважинах [1].

Метод

Используя аналитические модели для расчета температуры в пласте с учетом термодинамических эффектов, в зонах конвективного теплообмена в квазистационарном приближении распределения температуры в стволе скважины при постоянном отборе жидкости и при нагнетании жидкости в скважину полученные для случая постоянного дебита флюида из пласта [2,3]

$$T(z) = T_0 + \Gamma z - (M + \Gamma)B \left(1 - e^{-\frac{z}{B}}\right) + \Delta T_0 e^{-\frac{z}{B}} \quad (1)$$

Выводы

В рамках данной работы была выполнена оценка параметра коэффициента логарифмического декремента (B) методом нелинейной

регрессии и интегральным методом. Было произведено построение, а также сопоставление модельной и расчетной термограмм, определена оценка дебита. Данные были проверены по симулятору Gинего.

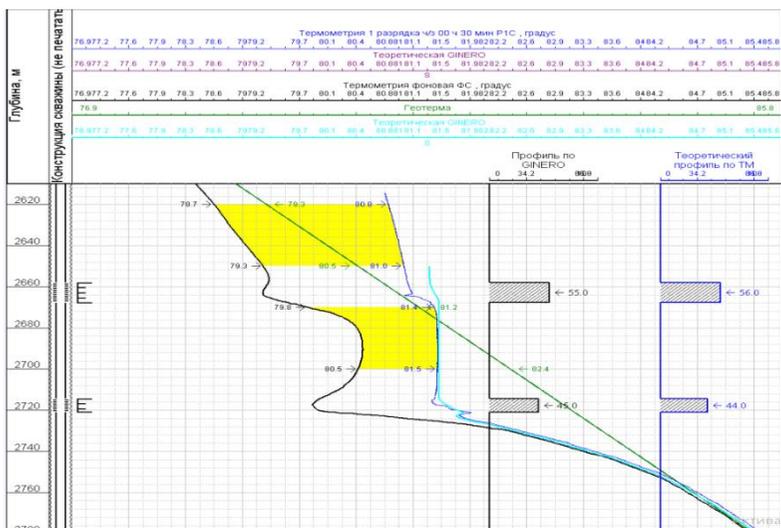


Рис. 1. Результаты моделирования термограмм

Литература

1. Кремлевский П.П. Расходомеры счетчики количества: Справочник. – 4 – е изд., перераб. и доп. – Л.: Машиностроение. Ленингр. отд-ние, 1989. – 701 с.: ил.
2. Э.Б. Чекалюк Термодинамика нефтяного пласта – М.: Недра.1965.- 238с
3. А.Ш.Рамазанов. Теоретические основы скважинной термометрии – РИЦ БашГУ.2017.-113с
4. Валиуллин, Р. А. Яруллин Р. К., Геофизические исследования и работы в скважинах: в 7 т. Т. 3. Исследования действующих скважин. – Уфа: Информреклама, 2010. – 184с., ил. 46.

© Джалилова И.Д., 2021 г.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА КОЛЛЕКТОРОВ МЕТОДАМИ КАПИЛЛЯРОМЕТРИИ

Нугаева Н.М.

Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, г. Уфа, Россия

Знание распределения фильтрующих пор по размерам в породе, играет большую роль в определении проницаемости, остаточной нефтенасыщенности и ряда других свойств пород, позволяющих определить запасы и продуктивность коллектора [1].

Целью данной работы является выявление эффективной методики расчета радиуса пор карбонатных отложений.

$$P_k = f(K_v) \quad (1)$$

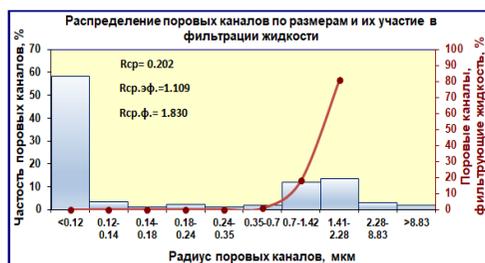


Рис. 1. Распределение поровых каналов по размерам и их участие в фильтрации жидкости

На рис. 1 представлены расчеты среднего радиуса, среднего эффективного и среднего радиуса, фильтрующего жидкость, методом статистических моментов.

В ходе выполнения работы были рассчитаны средние радиусы эффективных и фильтрующих пор по методу статистических моментов, который позволяет исследовать массовые объекты с целью выявления общих закономерностей путем устранения случайных особенностей.

Литература

1. Ратников И.Б., Шульга Р.С., Романов Е.А. Интерпретация данных капиллярных исследований// Горные науки и технологии, 2016.-№4. – С. 24-39.

© Нугаева Н.М., 2021 г.

СЕКЦИЯ «ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА»

УДК 532.5

DOI: 10.33184/fmpve-2021-10-06.152

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИТОКА ЖИДКОСТИ К ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ СКВАЖИНЕ С МГРП

Исхакова А.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Технология бурения горизонтальных скважин с многостадийным гидроразрывом пласта (ГС с МГРП) позволяет добывать углеводород из труднодоступных мест месторождения, а также разрабатывать сложные участки пород, в том числе низкопроницаемые коллектора. Благодаря такому подходу становится возможным выкачивать нефть наиболее быстрым и продуктивным образом. Ежегодно количество таких операций увеличивается. Однако сложное заканчивание скважин затрудняет контроль разработки месторождений. Соответственно проведение гидродинамических исследований (ГДИ) и их анализ и интерпретация вызывают некоторые трудности. Процесс интерпретации в первую очередь осложняется неопределенностями при диагностировании режимов течения за счет большого количества трещин и горизонтального ствола. Выходом из ситуации является численное моделирование и анализ влияния каждого входного параметра.

В данной работе выполнено численное моделирование кривых изменения давления в добывающей горизонтальной скважине с многостадийным ГРП. Проанализированы виды диагностических графиков при изменении полудлины, количества и ориентации трещин относительно ствола скважины. В результате отмечено, что незначительное изменение каждого из параметров влечет за собой существенное изменение производной давления. Также получено, что в случае больших значений полудлин трещин ранний радиальный режим не диагностируется.

© Исхакова А.И., 2021 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИТОКА ЖИДКОСТИ В ГОРИЗОНТАЛЬНУЮ СКВАЖИНУ С РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ ТРЕЩИН ГРП В ПК «РН-КИМ»

Аллагулова А.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

ООО «РН-БашНИПИнефть», г. Уфа, Россия

В настоящее время широкое распространение получило бурение горизонтальных скважин с многостадийным гидравлическим разрывом пласта (ГС с МГРП). ГРП служит одним из наиболее эффективных методов разработки низкопроницаемых коллекторов. Актуальной является задача исследования притока в горизонтальные скважины с различной геометрией трещин ГРП [1]. Для исследования вопроса выполнены многочисленные расчеты в гидродинамическом симуляторе «РН-КИМ» синтетические модели ГС с различными параметрами трещин ГРП.

Рассматривались ГС с длиной 1500 м и трещинами ГРП, которые сонаправлены и перпендикулярны направлению регионального напряженного состояния, а также просчитывались варианты с различным количеством трещин ГРП (от 1 до 11) в ГС, различными длинами и проводимостями трещин ГРП. Для рассмотренных вариантов выполнено сравнение динамики величины притока и накопленной добычи (рис. 1). Результаты моделирования позволяют выявить наиболее оптимальные варианты добычи пластовой жидкости из низкопроницаемых коллекторов.

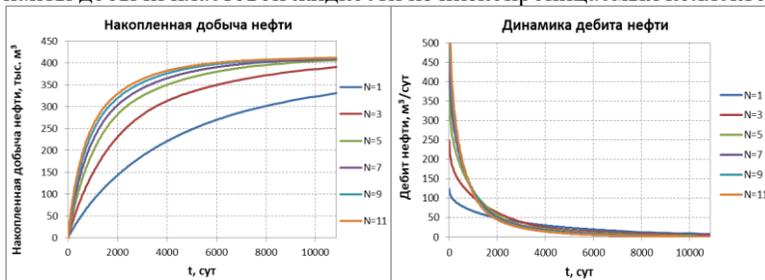


Рис. 1. Динамика накопленной добычи нефти и величины притока в ГС с трещинами ГРП, которые сонаправлены направлению регионального напряженного состояния

Литература

1. Уразов Р.Р., Давлетбаев А.Я., Сеницкий А.И. и др. Анализ добычи и давления по горизонтальным скважинам с многостадийным гидроразрывом пласта // Нефтяное хозяйство. - 2020. - № 10. С.62 – 67.

© Аллагулова А.Г., 2021 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОТЫ ПАРООБРАЗОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПРИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА НЕФТЕМАТЕРИНСКИЕ ГОРНЫЕ ПОРОДЫ

Мухаметова З.С., Мусин А.А., Зиннатуллин Р.Р., Ковалева Л.А.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В [1, 2] авторами изучается влияние электромагнитного воздействия (ЭМВ) на керогенсодержащие горные породы: проведены экспериментальные исследования ЭМВ на образцы, в ходе которых установлено изменение температуры и растрескивание рассматриваемых образцов, получена математическая модель изменения фазового состояния флюида, насыщающего образец.

Изменение фазового состояния (в данном случае испарения) флюида сопровождается поглощением теплоты фазового перехода. Теплоту парообразования, согласно [3], можно определить как разность значений энтальпии насыщенных паровой и жидкой фаз этого вещества при данной температуре T . При использовании уравнения состояния Пенга-Робинсона выражение для расчета энтальпии $h_{p,T}$ имеет вид:

$$h_{p,T} = RT \left\{ z - 1 - \frac{2,078}{T_{пр}} \left(\varphi - T_{пр} \frac{d\varphi}{dT_{пр}} \right) \ln \left(\frac{z + 0,18782 \frac{P_{пр}}{T_{пр}}}{z - 0,03222 \frac{P_{пр}}{T_{пр}}} \right) \right\},$$

где R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); T – температура, К; $T_{пр}$, $P_{пр}$ – приведенная температура и давление соответственно, определяемые как $T/T_{кр}$ и $P/P_{кр}$, $T_{кр}$, $P_{кр}$ – критические температура и давление, φ – поправка, учитывающая температуру для уравнения Пенга-Робинсона [3], z – коэффициент сверхсжимаемости.

Рассчитанная в данной работе величина теплоты парообразования может использоваться для изучения изменения интенсивности нагрева образцов горной породы при электромагнитном воздействии на них.

Литература

1. Экспериментальное исследование воздействия электромагнитных полей на нефтяные сланцы. Л. А. Ковалева, Р.Р.Зиннатуллин, Р.Ф. Султангужин, Э.С. Сектаров, Ф.И. Шашков. Вестник Башкирского Университета. 2019, Т. 24 №1. – С. 43-48

2. Математическое моделирование электромагнитного воздействия на нефтематеринские горные породы с учетом фазовых переходов. З. С. Мухаметова, А. А. Мусин, Р. Р. Зиннатуллин, Л. А. Ковалева. Вестник Башкирского университета. 2021. Т. 26. №2.- С. 274-280
3. Брусиловский А. И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. Грааль, Москва, 2002 – 575 с.

*© Мухаметова З.С., Мусин А.А.,
Зиннатуллин Р.Р., Ковалева Л.А., 2021 г.*

АПРОБАЦИЯ МЕТОДА АНАЛИЗА ДАННЫХ ПО РАСХОДАМ И ДАВЛЕНИЯМ В НАГНЕТАТЕЛЬНЫХ СКВАЖИНАХ

Латыпова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

ООО «РН-БашНИПИнефть», г. Уфа, Россия

Метод анализа добычи/расхода и давления (АДД в добывающих скважинах, АДД в нагнетательных скважинах) - исследование на основе непрерывного мониторинга промысловых данных. Традиционные гидродинамические исследования на неустановившихся режимах фильтрации могут дать ограниченную картину модели «скважина – пласт». Метод анализа добычи позволяет охватить гораздо более широкие размеры (радиусы исследования) из-за отсутствия ограничений по длительности исследования. Применение этого метода не требует длительных остановок, и наличие промысловых данных в период работы скважины позволяет получить более информативные исследования, в т.ч. исследовать границы пласта и влияние работы скважин окружения [1].

В данной работе выполнена апробация «малозатратного» метода АДД по нагнетательным скважинам (по аналогии с АДД в добывающих скважинах), чтобы выявить возможность прогнозирования пластового давления (Рпл). Предполагается, что развитие метода анализа данных по расходам и давлениям позволит снизить количество исследований методом регистрации кривой падения давления (КПД) в остановленных нагнетательных скважинах.

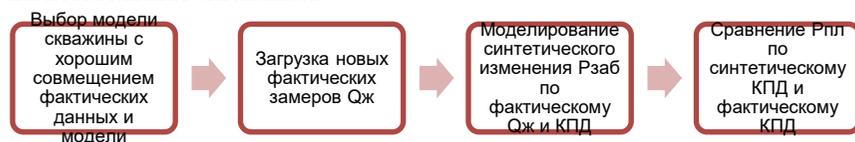


Рис. 1. Алгоритм экспресс-оценки Рпл в нагнетательных скважинах после применения метода АДД

Для определения значения пластового давления на нагнетательной скважине методом АДД проведена интерпретация промысловых данных по схеме (рис.1). Проведено сравнение полученных значений со значениями пластового давления по традиционным ГДИС методом КПД и получено, что относительная погрешность составляет 8 %.

Литература

1. Уразов Р.Р., Давлетбаев А.Я., Сеницкий А.И. и др. Анализ добычи и давления по горизонтальным скважинам с многостадийным гидроразрывом пласта // Нефтяное хозяйство. - 2020. - № 10. С.62 – 67.

© Латыпова Р.Р., 2021 г.

3D МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДЕФОРМИРУЕМЫХ ЧАСТИЦ В МИКРОКАНАЛАХ СО СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ

Фаткуллина Н.Б., Солнышкина О.А., Булатова А.З.

Центр микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Трехмерное моделирование течения вязкой жидкости с дисперсными включениями в микроканалах с гидродинамическими ловушками имеет значение для микрогидродинамики. Например, при конструировании, микрофлюидных устройств для фиксации отдельных частиц в потоке. Эффективность таких устройств во многом зависит от оптимально подобранных геометрических параметров. Целью данной работы является изучение движения деформируемых капель в потоке в микроканалах с гидродинамическими ловушками с использованием ускоренного метода граничных элементов.

Рассматривается динамика деформируемых частиц в плоском микроканале с массивом недеформируемых С-образных ловушек под действием постоянного объемного расхода. Динамика системы описывается уравнениями Стокса со следующими граничными условиями: на границе раздела фаз скорости совпадают, на поверхности ловушек задается условие прилипания.

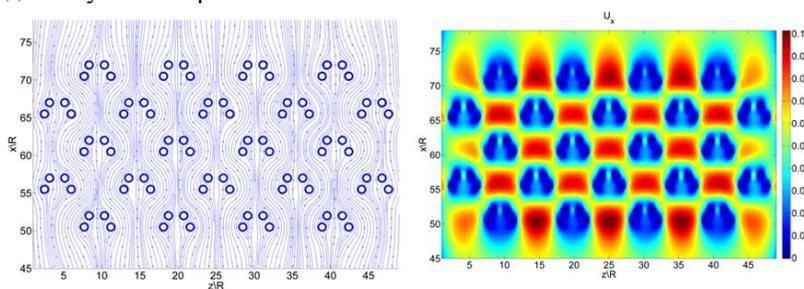


Рис. 1. Линии тока и продольная компонента скорости течения жидкости

На рис. 1 представлены линии тока и продольная компонента скорости течения жидкости в микроканале с шахматным массивом гидродинамических ловушек. До массива ловушек в канале образуется параболический профиль потока. При приближении к ловушкам он меняется, и области с наиболее высокими скоростями наблюдаются в промежутках между ловушками. Рассмотрена динамика множества капель, изначально имеющих сферическую форму, впоследствии деформирующихся и застревающих внутри ловушек.

© Фаткуллина Н.Б., Солнышкина О.А., Булатова А.З., 2021 г.

ЧИСЛЕННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИКИ ДВУХ БЛИЗКОРАСПОЛОЖЕННЫХ ДЕФОРМИРУЕМЫХ КАПЕЛЬ В СДВИГОВОМ ПОТОКЕ

Фаткуллина Н.Б., Солнышкина О.А., Булатова А.З.

Центр микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Поскольку в природе и технологических процессах широко распространены различные типы дисперсных систем, в частности эмульсии и суспензии, то актуальным является изучение их реологических характеристик.

В данной работе исследуется динамика двух близкорасположенных деформируемых капель в объеме вязкой несжимаемой жидкости под действием сдвигового потока. Течение жидкостей описывается уравнениями Стокса. Для решения поставленной задачи применялся трехмерный метод граничных элементов (МГЭ). Исследование проведено для широкого диапазона капиллярных чисел и соотношений вязкостей. Расстояние между центрами капель варьировалось от $1.5 \cdot d$ до $2 \cdot d$, где d – диаметр капли. В начальный момент времени капли имели сферическую форму. С течением времени расстояние между поверхностями капель уменьшалось до минимального значения $h_{min} = 0.05 \cdot d$, коалесценция не происходила. Далее расстояние между поверхностями капель увеличивалось. На рис. 1 представлена зависимость минимального расстояния между поверхностями капель от времени при $\lambda=5$, $Ca = 0.3$.

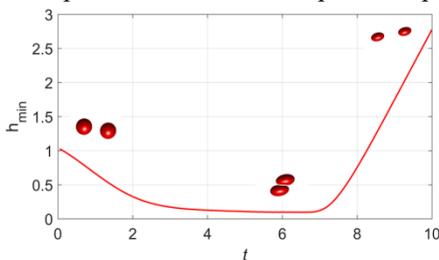


Рис. 1. Зависимость минимального расстояния между поверхностями капель h_{min} от времени при $Ca = 0.3$, $\lambda = 5$.

Проведено параметрическое исследование вклада дисперсной фазы в тензор напряжений всей системы, а также первая и вторая разности нормальных напряжений, в зависимости от времени. Рассмотрено изменение во времени минимального расстояния между поверхностями капель.

© Фаткуллина Н.Б., Солнышкина О.А., Булатова А.З., 2021 г.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТЕЧЕНИЯ ЭМУЛЬСИИ В МИКРОКАНАЛАХ С СИСТЕМОЙ ОДИНОЧНЫХ ЛОВУШЕК ТРЕУГОЛЬНОЙ ФОРМЫ

Искандаров А.И., Солнышкина О.А.

Башкирский государственный университет, г Уфа, Россия

Изучение особенностей течений в микроканалах с шероховатыми стенками и ловушками является актуальной проблемой современной науки, поскольку идеально гладкие микроканалы практически не встречаются в природе. Исследование характеристик потока жидкости и эмульсии в микроканалах имеет значение для разработки и осуществления корректного управления микромеханическими и микрожидкостными устройствами. Данная работа посвящена исследованию влияния шероховатостей и их направления на поведение эмульсии при прохождении её через микроканалы с выступающими структурами. Были созданы несколько чипов из ПДМС с микроканалами с системами одиночных ловушек различной геометрии с применением метода мягкой литографии. Средние ширина и высота каналов, длина участка с ловушками соответственно равны 150 мкм, 10 мкм и 20 мм, в свою очередь длина всего канала была равна 30 мм. Наблюдение картин течений производилось на оптическом микроскопе Olympus IX-71. Для этого в микроканалы с помощью шприцевого насоса подавалась эмульсия воды в вазелиновом масле с процентным содержанием воды 5%, так же добавлялся Span-80 для получения стабильной эмульсии в соотношении 1% к массе масла. В конечном итоге получилась эмульсия со средним размером капель 10-15 мкм. Эксперимент проводился при варьировании направления потока относительно расположения шероховатостей и при различных расходах: 3, 6 и 9 мкл/мин. На рисунке 1а представлен стоп-кадр картины течения эмульсии при расходе 6 мкл/мин, а на рисунке 1б расход составлял 3 мкл/мин.

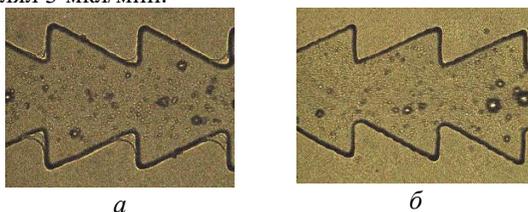


Рис. 1. Эмульсия в микроканале с неровностями

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта No 21-79-10212

© Искандаров А.И., Солнышкина О.А., 2021 г.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТВЕРДОЙ ЭЛЛИпсоИДАЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ И ОСЦИЛИРУЮЩЕГО ПУЗЫРЬКА В АКУСТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Бурмистров М.Е., Питюк Ю.А.

Центр микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Результаты исследований сложных многофазных систем, состоящих из газовых, жидких и твердых фаз, находят применения в многих технологических процессах, например, литотрипсии, флотации, очистки поверхности микрочипов. В данной работе методом граничных элементов моделируется динамика пузырька вблизи твердой эллипсоидальной частицы в потенциальном потоке несжимаемой жидкости под действием акустического поля. Проведено многопараметрическое исследование динамики центра масс частицы и пузырька в зависимости от взаимного расположения объектов и формы частицы. На Рис. 1 представлена зависимость отклонения частицы от ее начального положения, откуда видно, что наклон частицы усиливается при уменьшении расстояния между объектами, а также достигает своего максимума при определенных соотношениях координат центров объектов по вертикальной оси (y).

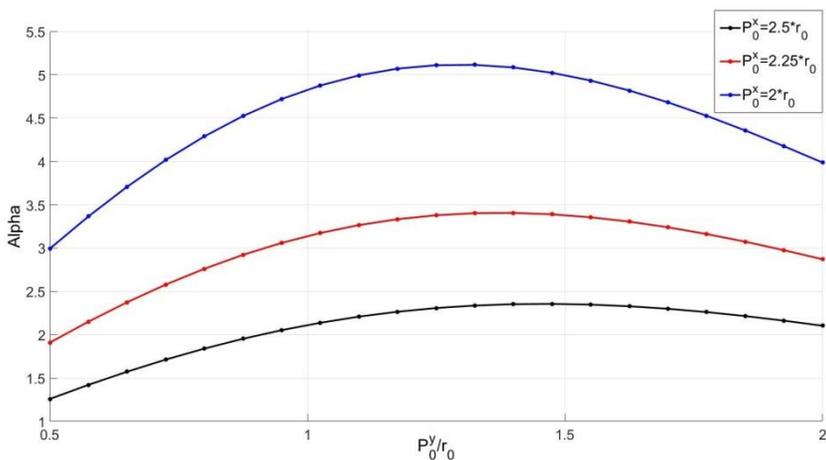


Рис. 1: График зависимости отклонения частицы от ее начального положения

© Бурмистров М.Е., Питюк Ю.А., 2021 г.

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ОДИНОЧНЫХ
ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ В МИКРОКАНАЛАХ**

Булатова А.З., Солнышкина О.А., Фаткуллина Н.Б.

Центр микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Изучение особенностей динамики дисперсных систем в микроканалах позволяет решать широкий ряд задач, возникающих в нефтегазовой отрасли, при производстве композитных материалов и разработке микрофлюидных устройств. Особенности размера и формы канала оказывают существенное влияние на происходящие в нем процессы, поэтому крайне важно исследовать поведение дисперсных частиц на микроуровне.

В настоящей работе приведены результаты по моделированию методом граничных элементов динамики одиночных деформируемых дисперсных включений при течении вязкой несжимаемой жидкости в микроканалах с поперечными сечениями в форме треугольника и дельтоиды. Более подробное описание численного подхода можно найти в [1]. Рассматривалось течение при постоянном и переменном перепаде давлений. Изучено влияние режима потока, а также кривизны канала на подвижность дисперсных частиц, расположенных на центральной оси и вблизи стенок микроканалов.

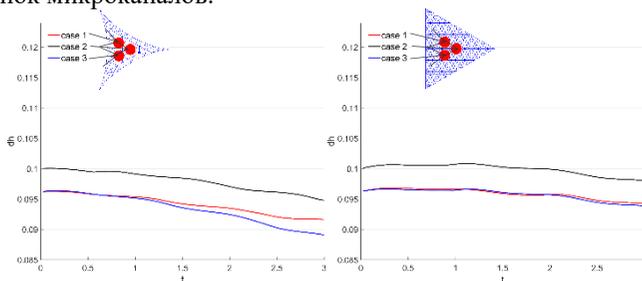


Рис. 1. Изменение во времени положения центра масс частиц радиуса $a = 0.07R$ в микроканалах при переменном перепаде давления.

На рис. 1 представлен характер изменения положения центра масс частиц одинаковых радиусов, расположенных на равном расстоянии от оси канала.

Литература

1. Abramova O. A., Pityuk Yu. A., Gumerov N. A. FMM/GPU Accelerated BEM Simulations of Emulsion Flow in Microchannels // Proc. IMECE 2013 IMECE2013-63193

© Булатова А.З., Солнышкина О.А., Фаткуллина Н.Б., 2021 г.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОДИНОЧНЫХ НЕДЕФОРМИРУЕМЫХ ЧАСТИЦ В СДВИГОВОМ ПОТОКЕ

Булатова А.З., Солнышкина О.А., Фаткуллина Н.Б.

Центр микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Как известно, дисперсные системы широко распространены в природе и участвуют во многих технологических и производственных процессах, поэтому теоретические и прикладные исследования таких систем являются весьма интересными. Компьютерное моделирование дисперсных систем позволяют расширить область теоретических исследований, а также многократно уменьшить расходы на дорогостоящие лабораторные эксперименты. Крайне важным при исследовании дисперсных частиц является изучение их реологических параметров.

Данная работа посвящена трехмерному моделированию динамики одиночных недеформируемых частиц, имеющих форму капсулы, эллипсоида и диска, в сдвиговом потоке вязкой несжимаемой жидкости. Предполагается, что течение жидкости происходит при малых числах Рейнольдса, поэтому течение описывается уравнениями Стокса. Более подробно математическая постановка поставленной задачи описана в [1].

В ходе исследования была получена качественная триангуляция дисперсных включений рассматриваемых форм, построены распределение скорости на поверхности частиц в различные моменты времени, а также изучен их вклад в эффективную вязкость всей системы в зависимости от размера и коэффициента растяжения.

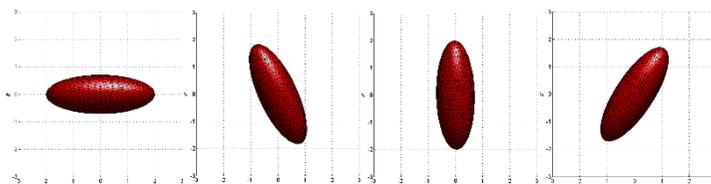


Рис. 1. Динамика эллипсоида в различные моменты времени.

Литература

4. Abramova, O.A., Pityuk, YuA, Gumerov, N.A., Akhatov, ISh: High performance BEM simulation of 3D emulsion flow // Communications in Computer and Information Science (CCIS). – 2017. – V 753. – pp 317–330.

© Булатова А.З., Солнышкина О.А., Фаткуллина Н.Б., 2021 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В НЕФТЕМАТЕРИНСКОЙ ПОРОДЕ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ СВЧ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Гайсин И.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нефтематеринские сланцевые породы содержат кероген и отличаются низкой проницаемостью и для их разработки применяют специальные технологии, в том числе тепловые. На сегодняшний день нагрев сланцевых залежей с помощью СВЧ электромагнитной энергии, является наиболее перспективным методом нагрева [1].

В работе исследованы распределения температуры в нефтематеринской породе при воздействии СВЧ поля. В качестве объекта исследования был выбран образец сланцевой породы цилиндрической формы длиной 12 см. и диаметром 10 см. С одной из радиальных сторон установлен волновод с магнетроном (2,45 ГГц, 800 Вт). Замер распределения температуры по длине с шагом 1 см. проводился с интервалом 30 секунд при помощи системы термопар и регистратора температуры.

Результаты исследований показали, что в начальный период воздействия поля градиент температуры по длине составляет в среднем $1^{\circ}\text{C}/\text{см}$. С ростом времени воздействия поля и соответственно температуры у волновода градиент температуры возрастает и достигает до $5^{\circ}\text{C}/\text{см}$. Этот факт объясняется тем, что с ростом температуры среды возрастают значения диэлектрических параметров и соответственно поглощение электромагнитной энергии вблизи волновода [2]. Так же показано, что в зоне до 3 см. от волновода интенсивность нагрева сохраняется в пределах погрешности за все время экспериментов (5 мин). Однако, интенсивность нагрева в этой зоне достигает своего максимума при 60°C , что также можно объяснить особенностями температурных зависимостей диэлектрических свойств керна.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-05-00535 А.

Литература

1. Мартемьянов С. М. Моделирование подземного нагрева горючих сланцев : дис. – 2013.
2. Zinnatullin R. R., Sultanguzhin R. F. Studying dielectric properties of oil shale //Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing, 2020. T. 1675. №. 1. С. 012102.

©Гайсин И.В., 2021 г

РАСЧЕТ СРЕДНЕГО ПЛАСТОВОГО ДАВЛЕНИЯ МЕТОДАМИ МЭТТЮЗА-БРОНСА-ХАЗЕРБРУКА И МИЛЛЕРА-ДАЙСА- ХАТЧИНСОНА – ДИТЦА В ДОБЫВАЮЩЕЙ СКВАЖИНЕ

Адельгужина Э.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Знание значения среднего пластового давления является важнейшим фактором продуктивности скважин [1]. Поскольку сейчас большинство запасов являются трудноизвлекаемыми, становится важным развитие методов для расчета среднего пластового давления при любом типе заканчивания скважины.

В связи с этим целью работы является оценка корректности методов определения среднего пластового давления при любом типе заканчивания скважины в низкопроницаемых коллекторах, а именно, расчет среднего пластового давления по вертикальной скважине с ГРП и без, по горизонтальной скважине на модельных и промысловых данных.

Рассматривается квадратная замкнутая область с условием непритекания на границах, в центре которой расположена добывающая скважина.

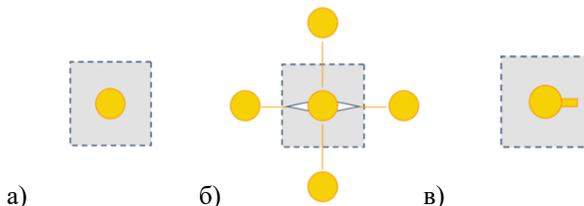


Рис. 1. Схема расчетной области: а) для вертикальной скважины; б) для вертикальной скважины с ГРП со скважинами окружения; в) для горизонтальной скважины

Для определения значения среднего пластового давления методами Мэттьюза-Бронса-Хазербрука (МБХ) и Миллера-Дайса-Хатчинсона (МДХ) – Дитца проведена интерпретация данных, полученных при моделировании по скважинам для трех случаев (рис.1). Проведено сравнение полученных значений с истинным значением среднего пластового давления и получено, что относительная погрешность по обоим методам не превышает 3.5%.

Литература

1. Эрлагер Р. Гидродинамические методы исследования скважин. М, 2006. С. 512.

© Адельгужина Э.М., 2021 г.

СРАВНЕНИЕ ВРЕМЕНИ ПОЛНОГО РАССЛОЕНИЯ МОНОДИСПЕРСНОЙ И ПОЛИДИСПЕРСНОЙ ЭМУЛЬСИЙ

Мухутдинова А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В работе рассматривается процесс гравитационного осаждения обратных монодисперсных и полидисперсных эмульсий типа вода в масле. Математическая модель состоит из уравнения неразрывности и уравнений Навье – Стокса, в которых учитывается сила поверхностного натяжения на поверхности капель [1].

Для численного решения уравнений математической модели используется открытая интегрируемая платформа OpenFOAM.

В результате численного моделирования обнаружено, что время полного расслоения разбавленных (концентрация дисперсной фазы меньше 2%) монодисперсных и полидисперсных эмульсий с каплями одинакового диаметра практически одинаково. Под диаметром капель в случае полидисперсной эмульсии понимается среднеобъемный диаметр капель. При больших концентрациях дисперсной фазы полидисперсная эмульсия расслаивается медленнее, чем соответствующая монодисперсная (Рис. 1). Из Рис. 1 также видно, что для крупнодисперсных эмульсий (диаметр капель 800 мкм) наибольшее время расслоения наблюдается для пятипроцентных эмульсий. При дальнейшем увеличении концентрации интенсифицируется процесс коалесценции капель и время расслоения обоих типов эмульсий уменьшается.

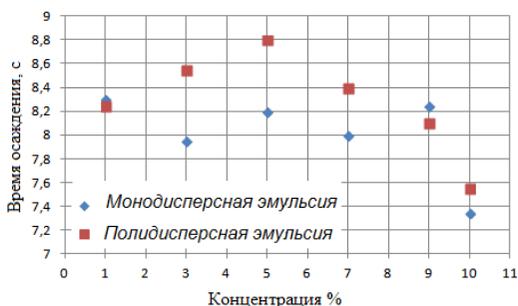


Рис. 1. Зависимость времени осаждения от концентрации эмульсии ($d=800$ мкм)

Литература

1. Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика. М.: Институт компьютерных исследований, 2016. – 708 с.

© Мухутдинова А.А., 2021 г.

**ЧИСЛЕННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ
ЭМУЛЬСИЙ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТРЕХМЕРНОГО МЕТОДА
ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

Киселева А.А. Фахретдинова А.Л. Солнышкина О.А.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Дисперсные системы широко распространены в фармацевтической, пищевой, химической, нефтедобывающей и нефтеперерабатывающей промышленности в виде различных структур и состояний: аэрозоли, суспензии, эмульсии, гели и т.д. Реология дисперсных систем является чрезвычайно важным технологическим параметром. Имея возможность характеризовать поведение дисперсий в потоке и управлять им, можно обеспечить их оптимальную производительность. Модели описания поведения структурированных дисперсных систем не всегда удовлетворяют физическим законам, за исключением поведение единичных частиц и представляют собой эмпирические или полуэмпирические приближения к истинной картине, что объясняется случайными взаимодействиями между частицами и стохастическим характером их поведения.

Реология эмульсий имеет много качественных аналогов реологии дисперсий твердых сферических частиц. Различия возникают из-за деформируемости капель жидкости, что особенно актуально при высоких скоростях сдвига и объемной доле дисперсной фазы. Однако даже при низких скоростях сдвига относительная вязкость эмульсий отличается от вязкости твердых сферических дисперсий. Это происходит из-за циркуляции потока внутри капель, что приводит к деформации внешних линий тока вокруг сфер жидкости, так что поток становится менее возмущенным и вязким рассивание меньше.

Данная работа посвящена численному изучению зависимости реологических параметров эмульсий от дисперсности, объемной концентрации и соотношения вязкостей жидкостей внутри капель и снаружи. Расчет компонент тензора напряжений производился с использованием трехмерного метода граничных элементов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-79-10212.

© Киселева А.А., Фахретдинова А.Л.,
Солнышкина О.А., 2021 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ОТДЕЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ОБЛАСТЯХ С ДЕТЕРМИНИРОВАННЫМ БОКОВЫМ СМЕЩЕНИЕМ

Фахретдинова А.Л., Киселева А.А., Солнышкина О.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В микрофлюидных устройствах происходит управление микро- и нанолитровыми объемами жидкостей: подготовка проб, транспортировка, смешивание, разделение, детектирование и другие операции.

В рамках данной работы проводится трехмерное численное моделирование течения дисперсной системы в микроканале с детерминированным боковым смещением элементов (DLD).

DLD — это метод пассивного разделения частиц. Разделение частиц происходит внутри массива столбов (рис. 1). Выборка, состоящая из разнородной популяции, загружается в массив препятствий. Эти частицы проходят через массив столбов по разным путям в зависимости от их размеров. Так мелкие частицы движутся прямо, следуя за потоком, в то время как крупные частицы смещаются относительно направления потока, а огромные частицы задерживаются на входе в массив.

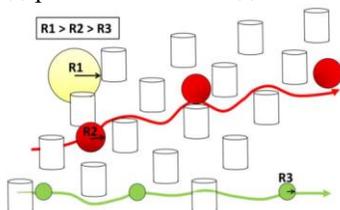


Рис. 1. Разделение частиц по размерам на столбовой решетке.

Источник:

https://www.researchgate.net/publication/321310273_Deterministic_Lateral_Displacement_for_Cell_Sorting

Основу используемой математической модели составляют стационарные уравнения Стокса, которые являются основными гидродинамическими уравнениями при малых числах Рейнольдса ($Re < 1$).

Для численного моделирования будет использоваться метод граничных элементов, суть которого состоит в том, чтобы преобразовать дифференциальное уравнение в частных производных, описывающее поведение неизвестной функции внутри и на границе области, в интегральное уравнение, связывающее только граничные значения, и найти численное решение этого уравнения. Это уменьшение размерности задачи является одним из преимуществ метода.

© Фахретдинова А.Л., Киселева А.А., Солнышкина О.А., 2021 г.

НАПОРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ТРУБОПРОВОДОВ

Галиева К.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для корректного гидравлического расчета трубопроводов необходимо учитывать изменение температуры перекачиваемой жидкости по длине трубопровода [1-2]. В настоящей работе исследуются напорные характеристики неизотермических трубопроводов при различных параметрах перекачки.

Зависимость гидравлического сопротивления неизотермического трубопровода H от расхода перекачиваемой жидкости Q определяется формулой [2]:

$$H = \beta \frac{Q^{2-m} \nu^m}{d^{5-m}} L \frac{e^{m u (T_n - T_0)}}{\rho \cdot L} [Ei(-m u (T_n - T_0)) - Ei(-m u (T_k - T_0))],$$

где β и m – коэффициенты Лейбензона, d и L – внутренний диаметр и длина трубопровода, $\nu = \nu_0 e^{-uT}$ и ρ – кинематическая вязкость и плотность жидкости, u – коэффициент крутизны вискограммы, T_n и T_k – температуры в начале и в конце трубопровода, T_0 – температура грунта, Ei – интегрально-показательная функция.

На Рис. 1 приведены напорные характеристики при различных коэффициентах крутизны вискограммы. Значение $u = 0$ соответствует изотермическому случаю. При увеличении коэффициента крутизны вискограммы при малых расходах в напорной характеристике появляется область немонотонного изменения гидравлического сопротивления.

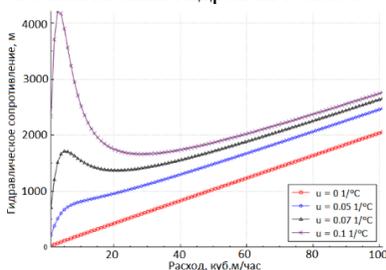


Рис. 1. Напорные характеристики при разных коэффициентах крутизны вискограммы

Литература

1. Черников В.И. Перекачка вязких и застывающих нефтей. – М.: Гостоптехиздат, 1958. – 162 с.
2. Веденев Б.В., Михайлов Н.В. Трубопроводный транспорт горячего битума. – М.: Госстройиздат, 1962. – 218 с.

© Галиева К.Ф., 2021 г.

ПРИМЕНЕНИЕ ПАКЕТА OPENFOAM ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫТЕСНЕНИЯ НЕФТИ В МОДЕЛИ ПОРОВОГО ДУБЛЕТА

Фазлетдинов С.У., Питюк Ю.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В данной работе представлены результаты исследования течений в поровом дублете с применением пакета OpenFoam. Поровый дублет представляет собой канал, разветвляющийся на два капилляра различного диаметра с прямоугольным поперечным сечением, который затем смыкается обратно в один. Построена модель порового дублета с помощью встроенной утилиты blockMesh и используя решатель HybridPorousInterFoam [1] проведена серия расчетов вытеснения нефти водой в поровом дублете в зависимости от скорости закачки вытесняющей жидкости и коэффициента поверхностного натяжения. На рис. 1 представлено распределение фаз воды (красным цветом) и оставшейся нефти (синим цветом) в малом капилляре.



Рис. 1. Двухфазное течение в поровом дублете

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-79-10212.

Литература

1. Francisco J. Carrillo, Ian C. Bourg, Cyprien Soulaire Multiphase flow modeling in multiscale porous media: An open-source micro-continuum approach, Journal of Computational Physics: X (Volume 8, September 2020), <https://doi.org/10.1016/j.jcpx.2020.100073>

© Фазлетдинов С., Питюк Ю.А., 2021 г.

**SIMULATION OF PRESSURE IN A RESERVOIR WITH OIL RIM
AND GAS CAP IN THE
“RN-KIM” HYDRODYNAMIC SIMULATOR**

Kazina L.Z.

Bashkir State University, Ufa, Russia

Determination of pressure is one of the most important tasks in the development of reservoirs with an oil rim. Involving oil rims in development can significantly increase oil production. In this case, there is a need to create and implement new technologies and approaches that will allow us to get the maximum economic effect. Currently, there is no specific methodology for studying and determining the optimal parameters of the development system for gas cap reservoirs. Each object being explored requires an individual approach to simulating.

Some of systems of equations that are used in “RN-KIM” are presented below:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(m \frac{S_w}{B_w} \right) = \nabla (K\lambda_w (\nabla p_w - \rho_w g \nabla D)) - q_{w,sc} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(m \left(\frac{S_o}{B_o} + R_v \frac{S_g}{B_g} \right) \right) \\ & = \nabla \left(K\lambda_o (\nabla p_o - \rho_o g \nabla D) + R_v K\lambda_g (\nabla p_g - \rho_g g \nabla D) \right) \\ & - q_{o,sc} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(m \left(\frac{S_g}{B_g} + R_o \frac{S_o}{B_o} \right) \right) \\ & = \nabla (K\lambda_g (\nabla p_g - \rho_g g \nabla D) + R_o K\lambda_o (\nabla p_o - \rho_o g \nabla D)) \\ & - q_{g,sc} \end{aligned} \quad (3)$$

Fig.1. shows the 2D pressure distributions in the numerical model and the pressure profiles for the upper perforation holes. The graph shows that a depression funnel is formed in the reservoir. This is due to the difference between the initial reservoir and bottom-hole pressures. Since the beginning of its propagation the process of oil displacement starts. Oil is displaced with gas from the gas cap to the bottoms of producing wells.

It's shown (Fig.2.) that when the grid is becoming smaller gas and water breakthroughs occur earlier; when mesh sizes are large breakthroughs may not occur at all or shift in time. Thus, the sizes of the cells in the grid model, all other

things being equal, affect the processes of gas and water breakthrough when simulating oil and gas reservoirs.

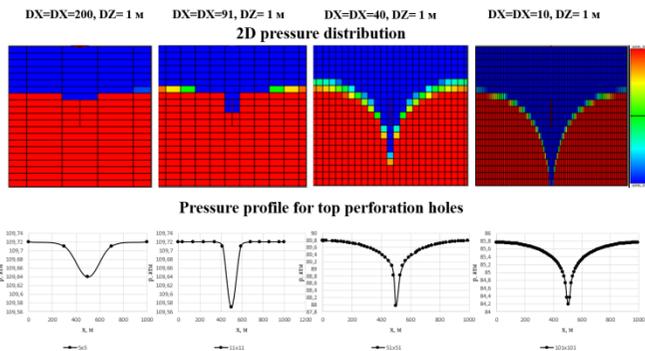


Fig. 1. 2D pressure distribution for different mesh sizes

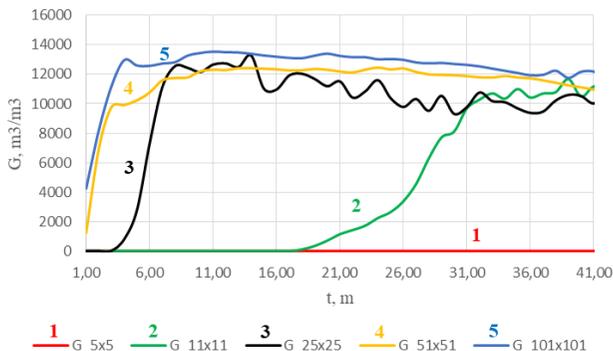


Fig. 2. Dynamics of gas factor for different mesh sizes

To sum up, the smaller the sizes of the cells are in the grid model, the better the moments of gas breakthrough converge; when simulating production with partial perforation of a well in the middle of the formation, there is a breakthrough of gas from the gas cap and water from the underlying aquifer.

References

1. Augustine, A., Junin, R., Jeffrey, G. and Onyenkonwu, M. Exploitation of thin oil rims with large associated gas cap // Int. J. Petroleum Engineering, 2017. - Vol. 3, No. 1, P.14–48.
2. Cosmo C., Fatole O. Challenges of Gas Development: Soku Field Oil Rim Reservoirs // paper SPE 88894, 2004.

© Kazina L.Z., 2021

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВЛИЯНИЯ НИЗКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА РАССЛОЕНИЕ ЭМУЛЬСИЙ ТИПА «ВОДА В МАСЛЕ»

Валиуллина В.И., Муллаянов А.И., Мусин А.А., Ковалева Л.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Экологичная и эффективная деэмульсация эмульсии является сложной проблемой при очистке нефтесодержащих сточных вод. В работе [1] описывается нехимический метод разделения эмульсий. Была предпринята новая попытка улучшить деэмульгирование с использованием комбинации электрического гравитационного поля, такая обработка значительно улучшила производительность разделения по сравнению с гравитационным осаждением или только электрической деэмульсацией. Электрогидродинамические (ЭГД) эффекты могут приводить к миграции мелких капель и увеличению степени их взаимодействия между собой.

В настоящей работе было изучено поведение эмульсий типа «вода в масле» при низкочастотном электрическом воздействии. Объектом исследования была эмульсия типа «вода в масле». Исследования проводились в ячейке, напечатанной на 3D принтере ABS пластиком. На фронтальной и тыльной поверхности установлены прозрачные стекла с вытравленными электродами. На систему электродов подается напряжение от генератора сигналов, усиленное через усилитель. Экспериментальная ячейка подключается к нагревающему и охлаждающему водным термостатам. Процесс конвекции фиксируется на фотоаппарат с макрообъективом (Tamron SP 90mm f=2.8).

В результате цифровой обработки изображений эксперимента были получены зависимости высоты отделившейся воды от времени. Было замечено, что при частоте $f=500\text{кГц}$ в ячейке возникают конвективные потоки за счет инерционных сил. Обнаружено, что чем интенсивнее эти потоки, тем активнее коалесцируют капли воды в эмульсии, тем эффективнее происходит расслоение эмульсии.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект №19-11-00298).

Литература

1. Yang D. et al. The influence and optimisation of electrical parameters for enhanced coalescence under pulsed DC electric field in a cylindrical electrostatic coalescer //Chemical Engineering Science. – 2015. – V. 138. – p. 71-85.

© Валиуллина В.И., Муллаянов А.И., Мусин А.А., Ковалева Л.А., 2021 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КАПЕЛЬ С ОБОЛОЧКОЙ НА АТОМНО-СИЛОВОМ МИКРОСКОПЕ

Замула Ю.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одной из основных проблем в нефтяной промышленности в настоящее время является обводненность продукции разрабатываемых месторождений. Добытая из нефтяного пласта жидкость чаще всего представляет собой водонефтяную эмульсию. Капли воды в таких эмульсиях окружены стабилизирующей оболочкой, состоящей из полярных компонентов нефти. Эта оболочка препятствует коалесценции капель и делает водонефтяные эмульсии чрезвычайно устойчивыми к внешним воздействиям. Расслоение водонефтяных эмульсий является важнейшим вопросом в процессе подготовки нефти к переработке.

В настоящей работе предложена методика определения эффективного поверхностного натяжения на границе раздела фаз между каплей воды со стабилизирующей оболочкой и углеводородной жидкостью с помощью метода силовой спектроскопии на атомно-силовом микроскопе (АСМ).

Объектом исследования в данной работе являлись капли воды устойчивой эмульсии типа «вода в масле» диаметром $20 \div 100$ мкм, помещенные в ячейку АСМ, заполненную тетрадеканом.

Полученные в результате эксперимента зависимости подвергались обработке. На основе теории тонких пленок [1] были построены зависимости эффективного поверхностного натяжения от времени. Эффективное поверхностное натяжение невозмущенных эмульсионных капель воды, покрытых стабилизирующей оболочкой, определялось путем интерполяции кривых полученных зависимостей. В частности, для капли диаметром 80 мкм эффективное поверхностное натяжение составило 0,00173 Н/м.

Работа поддержана грантом РФФ (проект №19-11-00298).

Литература

1. Rusanov A. I., Krotov V. V. Gibbs elasticity of free thin liquid films //Doklady Physical Chemistry. – Kluwer Academic Publishers-Plenum Publishers, 2003. – Т. 393. – №. 4. – С. 350-352.

© Замула Ю.С., 2021 г.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ СУСПЕНЗИИ В КАНАЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ УТЕЧКИ В БОКОВЫЕ СТЕНКИ

Юлмухаметова Р.Р., Мусин А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Течение концентрированных суспензий широко распространено во многих отраслях науки и промышленности, например, при применении гидравлического разрыва пласта. Суть заключается в создании трещины в пласте для обеспечения притока флюида. Несущая жидкость – раствор на водной основе, а расклинивающий материал – проппант, проблема транспортировки которого в трещине связана с утечкой жидкости в пласт.

Рассматривается нестационарное течение суспензии, состоящей из твердых сферических частиц и вязкой несжимаемой жидкости, в канале при наличии утечки жидкости в боковые стенки. Схема расчетной области представлена на рис. 1.



Рис. 1. Расчетная область (вид сверху)

Математическая модель течения суспензии построена в одножидкостном приближении и включает систему уравнений движения смеси и уравнение для переноса концентрации частиц диффузионного типа [1]. Алгоритм решения задачи в трехмерной постановке реализован в программном комплексе OpenFoam.

Проведено исследование динамики заполнения канала твердыми сферическими частицами в зависимости от скорости закачки суспензии и угла наклона относительно горизонта. Полученные результаты могут быть использованы для прогнозирования закупорки трещины.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-90157.

Литература

3. Юлмухаметова Р.Р., Мусин А.А., Ковалева Л.А., численное моделирование ламинарного течения суспензии в плоском канале// Вестник Башкирского университета. 2021. Т. 26. №2. С. 281-286.

© Юлмухаметова Р.Р., Мусин А.А., 2021 г.

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ, ФИЗИКИ»

УДК 378

DOI: 10.33184/fmpve-2021-10-06.173

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ В ЭКОНОМИКЕ

Казанцева А.Э., Подлесная А.Е.

Уральский государственный экономический университет,
г. Екатеринбург, Россия

В статье приводятся примеры задач теории вероятностей, которые могут быть предложены студентами экономических специальностей при изучении дисциплины.

Так как многие экономические показатели зависят от множеств факторов и носят характер случайных отклонений, то в ходе решения экономических задач, применяют методы, основанные на законах теории вероятностей для расчета наиболее выгодного решения. Благодаря оценке шансов того или иного фактора (например, при планировании бюджета предприятия, можно учитывать такие факторы, как пандемия, увеличение налогов и т.п.) можно увидеть какие усилия и на что необходимо прикладывать, что ожидать.

Приведем примеры:

Задача 1. Предприниматель принимает решение об инвестировании денежных средств в производство товара, спрос на который подвержен сезонным изменениям. Он выберет между двумя проектами. Прибыль от проектов распределяется по нормальному, при этом математическое ожидание прибыли для проекта А равно 12 млн. руб., а среднее квадратическое отклонение составляет 0,025. Для проекта В соответственно 11,99 и 0,04. Определить, в какой проект выгоднее инвестировать, чтобы извлечь прибыль от 12,05 млн. до 12,25 млн. руб. [1]

Задача 2. Страховая компания заключила 60000 договоров. Вероятность страхового случая по каждому из них в течение года составляет 4%. Найти вероятность, что таких случаев будет не более 500 [2].

Литература

1. Аскерова Л.Н., Кныш А.А. Роль практико-ориентированных задач в исследовательской деятельности студентов направления 38.03.01 экономика // Вопросы педагогики. 2021. № 5-2. С. 19-22.
2. Сборник задач по высшей математике для экономистов: Учебное пособие / Под ред. В.И. Ермакова. – М.: ИНФРА-М, 2001. – 575 с.

© Казанцева А.Э., Подлесная А.Е., 2021 г.

НА ЗЛОБУ ДНЯ. РПД И ФГОС – НАСКОЛЬКО ОНИ СВЯЗАНЫ?

Абдуллин А.У., Акманова Г.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Сейчас в нашем вузе ряд направлений переходит на ФГОС3++. За аббревиатурой и обилием плюсикулов стоит изменение государственных стандартов по направлениям. ИТСС, ЭНЭ и НМ уже «перебрались» на новые стандарты в прошлом году, и им сейчас нужно внести в рабочую программу дисциплины (РПД) лишь косметические изменения. Другим направлениям этот переход только предстоит в этом семестре.

Насколько этот переход болезненен? Насколько он вообще существенен с точки зрения организации учебного процесса? Так ли важно изменение компетенций для обучения студентов? Нужно ли качественно перекраивать систему обучения по конкретному направлению или можно лишь «переобуться», поменяв в РПД несколько абзацев в пресловутых «картах компетенций»?

Мнением по этим вопросам мы бы хотели обменяться с коллегами в своем докладе. И хотя мы много ворчим и критикуем компетентностный подход [1,2], его необходимость почти ни у кого не вызывает сомнений.

В двух словах, наши ответы таковы: не болезненен, но существенен. И если не ограничиваться «отпиской» в форме РПД, то требует времени и усилий. Возьмем, к примеру, направление «Физика», курс общей физики. Для него характерно формирование общепрофессиональных компетенций (ОПК). В старом стандарте было 8 ОПК, в новом их только три. Конечно, в изучение конкретной дисциплины закладывается только две-три компетенции. Но если много компетенций, то они более конкретны. Если их втрое меньше, то набор компактнее, но от этого они становятся более общими. Хорошо это или плохо? Мы собираемся обсудить в том числе и этот вопрос в своем докладе на примере конкретных компетенций.

Литература

1. Абдуллин А.У., Акманова Г.Р. Компетенции и качество образования: разумный компромисс. // Тезисы докладов XI Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании», г. Уфа, 2020 г. С.219-220.
2. Абдуллин А.У., Акманова Г.Р. Конфликт интересов при реализации компетентностного подхода в вузе: разработчики компетенций и преподаватели – «предметники». // Сборник материалов V Всероссийской научно-методической конференции «Проблемы современного физического образования». г. Уфа, 2019 г. С.6-8.

© Абдуллин А.У., Акманова Г.Р., 2021 г.

ВСЕГО ЛИШЬ КИНЕМАТИКА

Абдуллин А.У.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В своем докладе мы продолжаем обзор трудных, на наш взгляд, мест вузовской механики из курса общей физики [1,2]. Да простит нас автор замечательной одноименной книжки из серии «Библиотечки «Квант» Г.И. Копылов за плагиат в названии ...

Вот чего, на наш взгляд, подчас не хватает первокурсникам при изучении кинематики? Только трех вещей: математики, математики и еще раз математики! Пробелы в школьных знаниях приходится устранять лектору или семинаристу по первому разделу общей физики — курсу «Механика». В моем курсе лекций тема «Математическое введение» уже давно заняла прочное место. Сразу после теории погрешностей. Сначала даю правила расчета погрешностей, чтобы они как можно раньше смогли выполнять и рассчитывать лабы. А потом – математика! Сначала – шаг вперед, потом – шаг назад.

Но, разумеется, кроме ликбеза по школьной математике для изучения кинематики нужны и новые знания. Например, в кинематике вращательного движения необходимо векторное произведение. А при решении некоторых кинематических задач приходится интегрировать простые дифференциальные уравнения. Вот так и получается, что азы аналитической геометрии и математического анализа студенты-физики порой узнают на семинарах по решению задач механики. Например, о методе разделения переменных они точно первый раз слышат в сентябрьском семинаре по механике, а не в двухсеместровом курсе дифференциальных уравнений на втором курсе.

И поэтому, когда после таких математических «дебрей» переходим к динамике, среди студентов всегда раздается вздох облегчения: ура, наконец-то знакомый до боли второй закон Ньютона и его проекции по осям, а не эти ужасные «диффуры»!

Литература

1. Абдуллин А.У. Тензор инерции «первешам». // Тезисы докладов XI Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании», г.Уфа, 2020 г. С.221.
2. Абдуллин А.У. Как разобраться с моментами. // Сборник материалов V Всероссийской научно-методической конференции «Проблемы современного физического образования». г.Уфа, 2019 г. С.202-204.

© Абдуллин А.У., 2021 г.

РАЗРАБОТКА БИОНИЧЕСКОГО ПРОТЕЗА – МАНИПУЛЯТОРА РУКИ

Климов М.Е.¹, Дановский И.В.², Михайлов С.Н.³

¹10 класс, средняя школа № 45, г. Уфа, Россия

²1 курс, МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

¹учитель, средняя школа № 45, г. Уфа, Россия

Операционные манипуляторы позволяют проводить высокоточные операции с минимальными повреждениями, им достаточно прокола. Данные манипуляторы используются в лечении онкологии с целью замещения порченных конечностей и проведение высокоточных операций с минимальными повреждениями

В последнее время в России и за рубежом разрабатывают миелектронные протезы, которые могут очень эффективно заменять конечности. В движение такие протезы приводятся электрическими приводами, такие протезы позволяют выполнять больше действий нежели «Пассивные протезы».

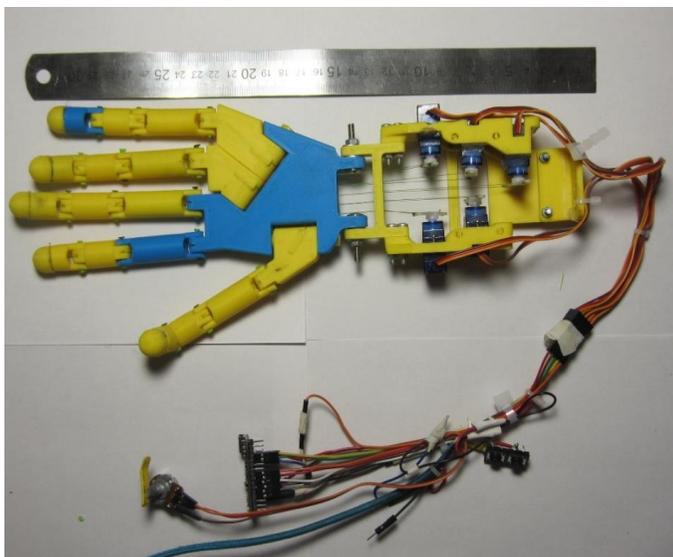


Рис. 1. Вид кисти руки из ABS – пластика

В настоящей работе с использованием STL модели была напечатана на 3Д принтере с использованием ABS-пластика 19 суставов. Суставы

приводились в движение сервоприводами, имеющие усилие на 1.8 кг. Сервоприводы тянут плетенные нити, произведенные из тончайших полимерных волокон. Исходным материалом, которых является высокомолекулярный полиэтилен, имеющие усилие на разрыв 12 кг. Управляется микроконтроллером Arduino nano на микропроцессоре ATmega328, руке можно задать любой алгоритм и управлять множеством датчиков.

На рис. 1 представлен внешний вид кисти из ABS – пластика, в каждой последующей фаланге переплетаются нити.

© Климов М.Е., Дановский И.В., Михайлов С.Н., 2021 г.

ОСОБЕННОСТИ ПРОВЕДЕНИЯ ДИСТАНЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ ПО ФИЗИКЕ И ИНФОРМАТИКЕ ДЛЯ СТУДЕНТОВ МЕДИЦИНСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ

Беленкова Э.И.

Южно-Уральский государственный медицинский университет,
г. Челябинск, Россия

Актуальность разработки методики проведения дистанционных занятий в последние годы обусловлена как развитием информационных технологий [1], так и эпидемиологической обстановкой связанной с распространением коронавируса SARS-CoV-2. Кроме того, переход к дистанционным формам обучения может устранить необходимость ежедневных поездок обучающихся в учебные заведения и тем самым снизить транспортные потоки и улучшить экологическую обстановку в мегаполисах [2]. Анализ результатов дистанционного преподавания физики и информатики студентам медицинских специальностей за последние два года показал, что основной проблемой является отсутствие надежных форм контроля обучающихся. Технические проблемы с плохой связью или отсутствием необходимого оборудования в перспективе могут быть решены. Однако для того чтобы дистанционные формы обучения были такими же эффективными и востребованными как очные, необходима разработка инструментов надежного контроля обучающихся на занятиях и того как они выполняют практические задания. Преподаватель даже при проведении занятий в режиме видеоконференций не может контролировать каждого. Необходимо чтобы функцию контроля взяли на себя специально разработанные программы, функционирующие на основе искусственного интеллекта [1].

Литература

1. Беленкова, Э.И. Перспективы эволюции общества в контексте развития нанотехнологий, технологий блокчейна и искусственного интеллекта // В сборнике: Коэволюция техники и общества в контексте цифровой эпохи. Сборник докладов. Под общей редакцией А.Л. Андреева, З.К. Селивановой, В.И. Герасимова. 2020, С. 75-77.
2. Беленкова, Э.И. Формирование экологического сознания студентов медицинских специальностей при преподавании дисциплины "Физика" // В сборнике: Актуальные вопросы экологии человека: социальные аспекты. Сборник научных статей участников Международной научно-практической конференции. В 3-х томах. Ответственный редактор Г.М. Хасанова. 2017, С. 82-85.

© Беленкова Э.И. 2021 г.

О ЧЕТЫРЕХ ПЕРИОДАХ В РАЗВИТИИ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ НЕФТЕДОБЫЧИ

Башмаков Р.А., Коробчинская О.Г., Махота А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Отследим роль механики в изучении реальных процессов и решении инженерно-технических задач. Выделим четыре основных периода, отличающихся по методам и подходам к решению практических задач.

В **первом периоде** применение математики ограничивалось лишь применением к техническим расчетам конструкций.

Во **втором периоде** рассматривались задачи, описывающие процессы, связанные с механическими явлениями, происходящими в пластах. Были найдены приложения методов комплексного анализа, теории аналитических функций, функционального анализа и других абстрактных разделов математики.

Третий период можно охарактеризовать переходом от аналитических методов прикладной математики, как недостаточно эффективных и трудоемких, к численным и статистическим методам с использованием компьютеров, как достаточно эффективным при практическом применении, и отрицанием, а иногда и пренебрежением классической теории.

Накопление большого количества статистических данных, необходимость прогнозирования, невозможность проведения экспериментов для проверки создаваемых компьютерных моделей, необходимость решения новых задач подготовили почву для перехода к **четвертому периоду** – периоду возвращения к аналитическим математическим моделям. Новые задачи связаны с разработкой шельфовых и сланцевых месторождений, применением новых методов гидроразрыва пласта, новых материалов, использованием газовых гидратов и т.п. Фактически возник «ренессанс» методов математики, применительно к вопросам механики нефтегазоносного пласта.

Литература

1. Нигматулин Р.И. Механика сплошной среды. Кинематика. Динамика. Термодинамика. Статистическая динамика. М.: ГЭОТАР-Медиа. 2014. 640 с.

© Башмаков Р.А., Коробчинская О.Г., Махота А.А., 2021 г.

ПРИМЕР ОРГАНИЗАЦИИ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СТУДЕНТОВ НА ЛЕКЦИИ ПО ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Кныш А.А.

Уральский государственный экономический университет,
Уральский государственный федеральный университет,
г. Екатеринбург, Россия

Научно-исследовательская деятельность студентов можно рассматривать как одну из форм организации учебной работы, которая связана с решением исследовательской задачи [1].

Рассмотрим пример, который можно привести на лекции по теории вероятностей.

Тема лекции «Геометрическая вероятность».

В начале лекции лектор предлагает студентам вспомнить классическое определение вероятности. После этого предлагает решить следующую задачу:

Имеется отрезок АВ. Выберем на этом отрезке точку С и будем бросать случайным образом на отрезок АВ другую точку D. Какова вероятность, что точка D попадет в точку С?

Исходя из своих знаний и опыта, студенты пытаются решить данную задачу с помощью классического определения вероятности. В основном рассуждения студентов таковы: вероятность данного события равна отношению единицы (число исходов, благоприятных для данного события) к бесконечности (так как отрезок состоит из бесконечного количества точек, то общее число несовместных, единственно возможных и равновероятных исходов рассматриваемого события равно бесконечности), то есть равна нулю. Событие попадания точки D в точку С становится невозможным. Студенты понимают, что рассматриваемое событие возможно. Все приходят в недоумение, так как пришли к противоречию.

Преподаватель предлагает найти студентам выход из сложившейся ситуации самостоятельно. Внимание студентов обращено на формулу. Приходит понимание, что формула классического определения вероятностей применима не для всех типов задач.

В предложенном примере к противоречию привел знаменатель дроби, стремящийся к бесконечности. Студентами делается вывод, что классическая вероятность определена для конечного числа исходов и

необходимо введение новой формулы вычисления вероятности с учетом бесконечного числа исходов.

Литература

1. Ипполитова Н.В., Стерхова Н.С.. Виды и формы организации исследовательской деятельности студентов педвуза // Вестник шадринского государственного педагогического института. 2015. №1 (25). С. 41-49.
2. Письменный Д.Т. Конспект лекций по теории вероятностей, математической статистике и случайным процессам / Д.Т. Письменный. – 6-е изд. –М.: Айрис-пресс, 2013. – 288 с.

© *Кныш А.А., 2021 г.*

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

Пыжьянова П.О.

Уральский государственный экономический университет,
г. Екатеринбург, Россия

Понятие оптимизации находит применение в любой области человеческой деятельности. Оптимизация – это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при наличии множества альтернативных при определенных условиях [2]. Оптимизационной называется задача определения наилучших структуры или значений параметров объектов.

Для решения оптимизационных задач составляется математическая модель. Для составления данной модели вводятся переменные задачи, составляется система ограничений и задается целевая функция [1].

Выделим методы оптимизации, классифицируем.

1. Одномерная и многомерная оптимизация;
2. По типу целевой функции: линейная и нелинейная.

Линейное программирование - это случай оптимизации, посвященный теориям и методам нахождения экстремальных значений некоторых линейных функций, параметры которых ограничены линейными уравнениями и неравенствами.

Нелинейное программирование - это оптимизации, в котором целевая функция или ограничение является нелинейной функцией.

Методы решения оптимизационных задач.

Оптимизационные задачи решаются с помощью специальных программ, Microsoft Excel и Mathcad [3].

Литература

1. Кандоба О.И., Кныш А.А., Новак И.В., Онохина Е.А. Методы оптимальных решений: учеб. Пособие / О.И. Кандоба, А.А. Кныш, И.В. Новак, Е.А. Онохина; М-во образования и науки Рос. Федерации, Урал. гос. экон. ун-т. – Екатеринбург: [Изд-во Урал. гос. экон. ун-та], 2016. – 80 с.
2. Каштаева С.В. Методы оптимизации : учебное пособие / С.В. Каштаева; Министерство сельского хозяйства Российской Федерации, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пермский аграрно-технологический университет имени академика Д.Н. Прянишникова». – Пермь : ИПЦ «Прокрость», 2020. – 84 с ; 21 см – Библиогр.: с.83.

3. Куликова О.В., Кныш А.А., Миронов Д.С. Анализ экономического приложения задач линейного программирования с помощью ИКТ: учеб. пособие / О.В. Куликова, А.А. Кныш, Д.С. Миронов; М-во образования и науки Рос. Федерации, Урал. гос. экон. ун-т. – Екатеринбург: [Изд-во Урал. гос. экон. ун-та], 2018. – 85 с.

© *Пыжьянова П.О., 2021 г.*

МАТЕМАТИКА В ЭКОНОМИЧЕСКОМ ВУЗЕ

Волкова Е.С., Савинова Е.А.

Уральский государственный экономический университет,
г. Екатеринбург, Россия

В статье рассматриваются вопросы связи математики с экономикой, а именно в какой форме математика предстает перед нами в данной сфере, какие экономические процессы мы можем описать с помощью математики и какие проблемы решаются с помощью математики. Данные вопросы рассматриваются с позиции преподавания математики в экономическом вузе.

Связь математики с экономикой вызывает особый интерес у студентов, обучающихся по направлению 38.03.01 Экономика. Студенты данного направления изучая дисциплину Математика осваивают математический анализ, линейную алгебру, аналитическую геометрию, методы оптимальных решений, теорию вероятностей, которые выступают основой для современных методов анализа при изучении процессов, протекающих в экономике, в финансовой сфере и бизнесе. Студенты на занятиях обретают навыки в применении математического аппарата, являющегося инструментом экономического анализа, организации и управления.

Применение математики в экономике реализуется через экономико-математическое моделирование. С помощью экономико-математической модели можно описать протекающий экономический процесс.

Наиболее интересным с точки зрения практического применения математики в экономике становится раздел - линейное программирование [2]. Здесь студенты учатся составлять математические модели вводя переменные задачи, составляя ограничения из уравнений и неравенств, описывающих рассматриваемый процесс и составляя функцию цели [4]. В данном разделе мы видим и обобщение всего выше изученного. А именно: функция цели – функция нескольких переменных, встречается понятие градиента, линии уровня и т.п.

Во всех рассматриваемых разделах математики можно продемонстрировать применение математического аппарата в экономике. Примеры задач с экономическим смыслом можно встретить в следующих источниках [1, 3, 5].

Литература

1. Аскерова Л.Н., Кныш А.А. Роль практико-ориентированных задач в исследовательской деятельности студентов направления 38.03.01 экономика // Вопросы педагогики. 2021. № 5-2. С. 19-22.

2. Кандоба О.И., Кныш А.А., Новак И.В., Онохина Е.А. Методы оптимальных решений: учеб. Пособие / О.И. Кандоба, А.А. Кныш, И.В. Новак, Е.А. Онохина; М-во образования и науки Рос. Федерации, Урал. гос. экон. ун-т. – Екатеринбург: [Изд-во Урал. гос. экон. ун-та], 2016. – 80 с.
3. Кремер Н. Ш. Высшая математика для экономического бакалавриата: учебник и практикум / Н. Ш. Кремер, Б. А. Путко, И. М. Тришин, М. Н. Фридман; под ред. Н. Ш. Кремера. — 4-е изд., перераб. и доп. — М.: Издательство Юрайт; ИД Юрайт, 2012. — 909 с.
4. Куликова О.В., Кныш А.А., Миронов Д.С. Анализ экономического приложения задач линейного программирования с помощью ИКТ: учеб. пособие / О.В. Куликова, А.А. Кныш, Д.С. Миронов; М-во образования и науки Рос. Федерации, Урал. гос. экон. ун-т. – Екатеринбург: [Изд-во Урал. гос. экон. ун-та], 2018. – 85 с.
5. Сборник задач по высшей математике для экономистов: Учебное пособие / Под ред. В.И. Ермакова. – М.: ИНФРА-М, 2001. – 575 с.

© Волкова Е.С., Савинова Е.А., 2021 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИТ-ТЕХНОЛОГИЙ В ОБУЧЕНИИ МАТЕМАТИКЕ

Ляликова А. А.

Уральский государственный экономический университет,
г. Екатеринбург, Россия

Под информационными технологиями в обучении будем понимать совокупность технологий, позволяющих с использованием технических и программных средств мультимедиа продуцировать, обрабатывать, хранить, передавать информацию, представленную в различных форматах с использованием интерактивного программного обеспечения [2].

Возможности технологий мультимедиа: выбор сценария пользователем; выбор представления информации; аудио сопровождение визуальной информации; интерактивный диалог обучающегося с программой и т.п.

ИТ- технологии могут представлять собой:

- Набор готовых программ, которые могут быть использованы в процессе обучения высшей математике. Например, преподаватель может использовать MS Excel в процессе прохождения линейной алгебры и линейного программирования, что позволяет быстро находить решение задач с большим количеством переменных.

- Разработку преподавателя. Например, разработанный преподавателем электронный образовательный курс, содержащий видеолекции, интерактивные презентации, электронный учебник, систему тестовых заданий и т.п.

- Разработку проектов, подготовленных обучаемыми. Например, студенты могут написать программу с помощью одного из языков программирования для решения систем линейных уравнений, нахождения симметричной точки данной относительно прямой, транспортной задачи и т.п. [1]

Литература

1. Кныш А.А. Использование технологий мультимедиа в процессе обучения высшей математике // В сборнике: Развитие системы непрерывного образования в условиях Индустрии 4.0. Материалы Международной научно-практической конференции. 2019. С. 92-94.
2. Яковлева Н. Ф. Проектная деятельность в образовательном учреждении : учеб. пособие. — 2-е изд., стер. — М. : Флинта, 2014. — 144 с.

© Ляликова А.А., 2021 г.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ В РЕСТОРАННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Мустафина А.Р.

Уральский государственный экономический университет,
г. Екатеринбург, Россия

Гостеприимство играет огромную роль и большое значение на рынке услуг. Это место создано для трапезы, наслаждения комфортным и красивым интерьером, дружелюбным обслуживанием и вкусной едой из разных уголков планеты.

Одним из важных критериев для эффективного ведения деятельности является контроль за изменениями и корректировкой посещаемости заведения. Например, среднее количество гостей за одним столом в день. Данный показатель позволяет понять, сколько людей посетило заведение. Рассчитать его можно разделив общее число гостей ресторана за период на число столов в заведении и на число дней в выбранном периоде.

Следующий показатель, средний выход по меню. Чаще всего, полноценный обед складывается из салата, супа, горячего блюда и напитка. Все блюда приведены к одному-двум стандартам выхода килокалорий. Перед тем как приступить к суммированию килокалорий необходимо понять какой средний выход всех блюд. После этого сложить полученные данные, исходя из определения полноценного обеда.

Таким образом, информация, данная выше, полученная с помощью вычислений, может помочь повысить посещаемость и рейтинг заведения общественного питания.

Задания аналогичные данным можно предлагать студентам, обучающимся на экономических специальностях.

Литература

1. Кацерикова, Н. В. Ресторанное дело : учебное пособие / Н. В. Кацерикова ; ред. Н. В. Шишкина. – 2-е изд., перераб. и доп. – Кемерово : Кемеровский технологический институт пищевой промышленности, 2010. – 332 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=141509> (дата обращения: 22.09.2021). – ISBN 978-5-89289-603-0. – Текст : электронный.

© Мустафина А.Р., 2021 г.

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ «КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ И ТЕОРИЯ ФУНКЦИЙ»

- Салимова А.Е.** 3
РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕОРЕМЫ МАЛЬЯВЕНА-РУБЕЛА
НА КОМПЛЕКСНЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ С iR -
УСЛОВИЕМ ЛИНДЕЛЁФА
- Кужаев А.Ф.** 4
О БИОРТОГОНАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ФУНКЦИОНАЛОВ К
СИСТЕМЕ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ МОНОМОВ

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОПЕРАТОРОВ»

- Ахмадуллина Р.Р.** 5
ГАМИЛЬТОНОВИТЬ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ
ЗАДАЧ НЕБЕСНОЙ МЕХАНИКИ
- Белова А.С.** 7
УСТОЙЧИВОСТЬ СИСТЕМЫ ДВУХ СВЯЗАННЫХ
ОСЦИЛЛЯТОРОВ
- Яндыбаева И.Г.** 8
АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЯДРА ОПЕРАТОРА
ПРОЕКТИРОВАНИЯ НА СОБСТВЕННОЕ ПОДПРОСТРАНСТВО,
СООТВЕТСТВУЮЩЕЕ СОБСТВЕННЫМ ЗНАЧЕНИЯМ
ДВУМЕРНОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА В
ПОЛОСЕ
- Садриева Р.Т., Сидельникова Н.А.** 10
ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРЦИАЛЬНЫХ ВОЛН С
БЫСТРО ОСЦИЛЛИРУЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ
- Усманова Д.Р., Шабалина А.В.** 11
МОДЕЛЬ КОЛМОГОРОВА И КОНСЕРВАТИВНЫЕ МОДЕЛИ В
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ

СЕКЦИЯ «МЕХАНИКА»

- Ковалева Л.А., Мухарьмова Г.И.** 12
АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ОБРАБОТКИ НА
РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЫРОЙ НЕФТИ
ТАЙЛАКОВСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ
- Пангаева А.О., Галиакбарова Э.В.** 14

ЗАДАЧИ ОЧИСТКИ И ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В ТЕХНОЛОГИЯХ
ПОДГОТОВКИ И ХРАНЕНИЯ НЕФТИ

Шамматова А.А., Башмаков Р.А. 15
ИЗМЕНЕНИЕ РАСХОДА И ДАВЛЕНИЯ ПРИ ПЕРЕМЕННЫХ
РЕЖИМАХ РАБОТЫ СКВАЖИНЫ

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

Павленко В.А. 16
КВАНТОВАНИЕ» ОДНОЙ ИЗ ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ
КИМУРЫ

Хакимова А.Р. 17
ОБОБЩЕННЫЕ ИНВАРИАНТНЫЕ МНОГООБРАЗИЯ И ИХ
ПРИЛОЖЕНИЯ

Гришова-Будылева П.А. 18
ИССЛЕДОВАНИЕ БИФУРКАЦИЙ РОЖДЕНИЯ СЕМЕЙСТВ
СОЛИТОНОВ В СИСТЕМЕ СВЯЗАННЫХ УРАВНЕНИЙ
ГРОССА-ПИТАЕВСКОГО

СЕКЦИЯ «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТАТИСТИКА»

Kozacheck V.V., Klevets Ph.N., Yarygina E.A. 19
ANALYSIS OF THE MAGNETIZATION PROCESS WITH NEURAL
NETWORKS APPROACH

Антонов Г.И., И. Левашова, Степанов С.В. 21
СТРУКТУРА И ДИНАМИКА МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ В СТО
БОЛЬШОГО ДИАМЕТРА ПРИ КОМБИНИРОВАННОМ
ВОЗДЕЙСТВИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ И СПИН
ПОЛЯРИЗОВАННОГО ТОКА

Супрун Г.И. 23
ИССЛЕДОВАНИЕ И ПОСТРОЕНИЕ СТОХАСТИЧЕСКИХ
ФРАКТАЛОВ

Муртазаев А.К., Бадиев М.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А. 24
ФРУСТРИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА
ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**Харитонов В.Н., Намсараев Ж.Ж., Огнев А.В., Самардак А.С.,
Бризицкий Р.В.** 25

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ТРЕКИНГА НА ОСНОВЕ ДАТЧИКОВ
МАГНИТНОГО ПОЛЯ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ПАЦИЕНТОВ С
БОЛЕЗНЬЮ ПАРКИНСОНА

Гильманов А.Я., Шевелёв А.П. 27

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРОЦИКЛИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПЛАСТ С УЧЁТОМ КОНВЕКТИВНЫХ ПОТОКОВ	
Шарипов Р.А.	28
ОБ УПРОЩЁННОЙ ВЕРСИИ ПРОБЛЕМЫ АДАМАРА	
Курбанова Д.Р., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К.	29
Магомедов М.А.	
МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРУСТРИРОВАННОЙ ЧЕТЫРЕХВЕРШИННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА	
Полупанова А.Д.	30
ПРИМЕНЕНИЕ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ RYTHON И СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ БИБЛИОТЕК В БИОЛОГИИ	
Исмагилов Р.Ф., Хамидуллина З.А.	31
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ИЗ ГРАФА ВОЛЬПЕРТА	
Галлямов В.В., Полупанов Д.В.	32
БУСТИНГОВЫЕ АНСАМБЛИ И МЕТА-АНСАМБЛИ В ЗАДАЧЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ БАНКРОТСТВ	
Гарипова А.Г., Полупанов Д.В.	33
НЕЙРОСЕТЕВЫЕ МЕТОДЫ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЁМА ПОРАЖЕНИЯ ЛЁГКИХ ПРИ КОРОНАВИРУСНОЙ ИНФЕКЦИИ	
Комлев А.С., Макарьин Р.А., Перов Н.С.	34
МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ МАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В СПЛАВЕ FeNi	
Аскерова Л.Н.	35
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ RYTHON ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ	
Макарьин Р.А., Шипкова Е.Д., Карпенков Д.Ю.	37
ПОСТРОЕНИЕ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МЕТАМАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА В СОЕДИНЕНИЯХ $La(Fe, Si)_{13}$	
Идиатуллин Д.Р., Ефимов А.М.	38
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ ПРИ ОБРАБОТКЕ ТЕКСТОВОЙ ИНФОРМАЦИИ	
Пруссакова Е.О., Абдюшева С.Р.	39
МНОГОФАКТОРНЫЙ КОРРЕЛЯЦИОННО-РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ ПОКАЗАТЕЛЯ РОЖДАЕМОСТИ	
Важенина Л.Д., Абдюшева С.Р.	40
АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ УРОВНЯ РОЖДАЕМОСТИ В РЕСПУБЛИКЕ БАШКОРТОСТАН РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ	

СЕКЦИЯ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

Yarygina E.A., Matunina Ya.Yu., Klevets Ph.N. PHASE STATES OF SPIN-1 ISING-LIKE MAGNETIC WITH STRONG SINGLE-ION ANISOTROPY OF THE EASY-PLANE TYPE	41
Мухамадеева В.В., Степанов С.В., Саломасов А.М. ДИНАМИКА И ТРАНСФОРМАЦИЯ МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ В МУЛЬТИСЛОЙНЫХ ПРОВОДЯЩИХ НАНОЦИЛИНДРАХ МАЛОГО ДИАМЕТРА	43
Маркова А.В., Асфандиаров Н.Л. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВАКАНТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ 2-КУМАРАНОНА И БЕНЗОФУРАН-3(2H)-ОНА	44
Самсонов К.Ю., Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В., Екомасов Е.Г. ДИНАМИКА НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОНА С ТРЕМЯ ПРИТЯГИВАЮЩИМИ ПРИМЕСЯМИ	46
Синицын В.Е., Овчинников А.С., Бострем И.Г., Екомасов Е.Г. ТЕМНЫЕ БРИЗЕРНЫЕ МОДЫ В КИРАЛЬНОМ ГЕЛИМАГНЕТИКЕ: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	49
Вахитов Р.М., Ахметова А.А., Солонецкий Р.В., Филиппов М.А. ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ МАГНИТООДНООСНЫХ ПЛЁНОК С КОЛУМНАРНЫМ ДЕФЕКТОМ В ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОМ ПОЛЕ	51
Низямова А.Р., Вахитов Р.М., Солонецкий Р.В., Фомин В.В. ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ 180 ГРАДУСНОЙ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ В МАГНИТНЫХ ПЛЕНКАХ С ФЛЕКСОМАНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ЭФФЕКТОМ	53
Баймухаметова З.А., Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р. НЕОДНОРОДНЫЙ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В (001) – ОРИЕНТИРОВАННОЙ ПЛЕНКИ ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ	55
Клявлиня А.И., Галиахметова Л.Х. ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИЙ В ГРАФЕНЕ	56
Бердюгина Е.А., Нерадовский Д.Ф., Самсонов К.Ю. МЕТОД УСРЕДНЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО УРАВНЕНИЯ sin-ГОРДОНА	57
Загребин М.А., Матюнина М.В., Соколовский В.В., Бучельников В.Д. ВЛИЯНИЕ AL НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ FE-GE: ИССЛЕДОВАНИЯ <i>AB INITIO</i>	58
Кадыров А.В.	60

УСКОРЕНИЕ ШАГА АЛГОРИТМА МЕТРОПОЛИСА ДЛЯ ДВУХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА	
Юсупова Р.М., Мухтарова Г.Р., Исмаилов Р.Н.	62
ПРЕДЕЛ СВЕТИМОСТИ ЭДДИНГТОНА ДЛЯ БЕЗМАССОВЫХ КРотовых НОР СО СКАЛЯРНЫМ ПОЛЕМ	
Мироскина О.Н., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.	64
ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Fe-Ni-Al	
Тулеганова Г.Ю.	65
ЗАДЕРЖКА ШАПИРО В МОДЕЛИ ГРАВИТАЦИИ БАМБЛБИ	
Исмаилов Р.Н., Каримов Р.Х., Имаев И.И.	66
НИЗКОЛЕЖАЩИЕ ЧАСТОТЫ КВАЗИНОРМАЛЬНЫХ МОД ЧЕРНОЙ ДЫРЫ ТАУБ-НУТ ДЛЯ СКАЛЯРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ	
Ахтарьянова Г.Ф., Айгишева Э.Э., Исмаилов Р.Н.	67
СВОЙСТВА ОТРАЖАТЕЛЬНО-АСИММЕТРИЧНЫХ КРотовых НОР ГМГТС-ШВАРЦШИЛЬДА	
Юлдашева А.Р.	69
МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НА ИНТЕРФЕЙСЕ В СВЕРХРЕШЕТКАХ МУЛЬТИФЕРРОИКОВ	
Закирьянов Ф.К., Семерикова М.А.	70
ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В ПОЛИНУКЛЕОТИДНЫХ ЦЕПОЧКАХ	

СЕКЦИЯ «РАДИОФИЗИКА»

Лопатюк А.В., Зиганшина А.Р., Кнеккужина Н.У.	71
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ ВОЛНЫ ОТСЕЧКИ ДЛЯ ОДНОМОДОВОГО РЕЖИМА ВОЛНОВОДА	
Лопатюк А.В., Селовсянова Л.З., Буале Эбиоле	73
ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЦИФРОВОЙ КОЛЬЦЕВОЙ СЕТИ В КРУПНОМ ГОРОДЕ	
Лопатюк А.В.	75
МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОКАНАЛЬНОГО ПЛАНАРНОГО РАЗВЕТВИТЕЛЯ ДЛЯ ЦИФРОВЫХ СИСТЕМ ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ	
Шайхетдинов Р.З., Шахмаев Р.Р.	77
ЭЛЕКТРОГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ЖИДКИХ ДИЭЛЕКТРИКАХ	
Кудояров Д.Ш., Шарипов Т.И., Гарафутдинов Р.Р.	80
СЗМ-ИССЛЕДОВАНИЯ СИНТЕТИЧЕСКИХ ОДНОЦЕПОЧЕЧНЫХ ДНК С ГОМОНУКЛЕОТИДНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬЮ	

Кузьмин Г.В., Шарипов Т.И.	82
РАЗРАБОТКА УСТРОЙСТВА СБОРА И ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ С ДАТЧИКОВ ТЕМПЕРАТУРЫ И ВЛАЖНОСТИ НА ЖК ДИСПЛЕЙ	
Ахметов Р.Р.	84
ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ВРЕМЕНИ ПРОГРЕВА РАСТВОРА ДНК НА КАЧЕСТВО ПОЛУЧАЕМЫХ АСМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ	
Захаров Ю.А., Гоц С.С., Бахтизин Р.З., Шарипов Т.И.	86
ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ДЕГРАДАЦИОННЫХ И ФЛУКТУАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В МЕТАЛЛАХ	
Некрасова Т.В., Шарипов Т.И.	87
ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ КОНЦЕНТРАЦИИ РАСТВОРА АСФАЛЬТЕНОВ НА РАЗМЕРЫ ПОЛУЧАЕМЫХ КЛАСТЕРОВ	
Исхакова В.Ш., Шарипов Т.И.	89
СЗМ-ИССЛЕДОВАНИЕ ТОПОГРАФИИ ПОВЕРХНОСТИ ВЫСОКООРИЕНТИРОВАННОГО ПИРОЛИТИЧЕСКОГО ГРАФИТА	
СЕКЦИЯ «НАНОЭЛЕКТРОНИКА И НАНОМАТЕРИАЛЫ»	97
Беленков М.Е., Чернов В.М.	91
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ГРАФЕНА, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ГИДРОКСОГРУППАМИ	
Алтыншина Г.Р., Лачинов А.Н.	92
ВЫСОКАЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ПЛЕНОК ПММА/ПММА	
Котов Л.Н., Ласёк М.П., Харитонов А.И., Калинин Ю.В., Ситников А.В.	94
ИССЛЕДОВАНИЕ СВЧ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК $(Co_{0,51}Fe_{0,49})_x(MgO_2)_y$	
Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н.	96
ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И РАСЧЕТ ПОДВИЖНОСТИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛЕВЫХ ТРАНЗИСТОРАХ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК PANI	
Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н.	97
ВОЛЬТАМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛЕВЫХ ТРАНЗИСТОРОВ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК C60	
Бадретдинов Б.Р., Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б.	98

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЛАЖНОСТИ ВОЗДУХА СЕНСОРАМИ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК PANI	
Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р., Зиннатулина А.А.	99
СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИАНИЛИНА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ПАРАМИ АММИАКА	
Салихов Р.Б., Муллагалиев И.Н., Салихов Т.Р.	100
ФОТОТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ФУЛЛЕРЕНА: РАСЧЕТ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ	
Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б., Андрианова А.Н.	101
ПОЛЕВЫЕ ФОТОТРАНЗИСТОРЫ С АКТИВНЫМ СЛОЕМ ПОЛИИНДОЛА: РАСЧЕТ ПОДВИЖНОСТИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА	
Зиннатулина А. А., Салихов Р.Б.	102
УПРАВЛЕНИЕ МИКРОКЛИМАТОМ В СМАРТ-ТЕПЛИЦАХ	
Остальцова А.Д., Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б.	103
ФОТОТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК НОВЫХ ФУЛЛЕРЕН ПРОИЗВОДНЫХ	
Юльяхшин А.С., Салихов Р.Б.	104
ОРГАНИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА – ТЕХНОЛОГИЯ БУДУЩЕГО	
Юмалин Т.Т., Абдрахманов В.Х., Салихов Р.Б.	105
BLUETOOTH LOW ENERGY ДЛЯ РАЗРАБОТКИ СИСТЕМЫ ОБМЕНА ДАННЫМИ НА ОСНОВЕ NRF52832	
Полякова П.В., Пухачева Ю.А.	107
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ АТОМОВ АЛЮМИНИЯ И ТИТАНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	
Хасанов И.И., Корнилов В.М.	109
ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛАЗЫ МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ	
Исламгулов А.Р., Корнилов В.М.	111
ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ АТОМНО- СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ С ПРОВОДЯЩИМ ЗОНДОМ	
Шипкова Е.Д., Комлев А.С., Перов Н.С.	113
МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ КОНСТАНТЫ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ	
Ханафин И.И., Харрасов Р.Р., Салихов Р.Б.	114
ГАЗОВЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ	
Козин К.Д., Султанов Д.И., Салихов Р.Б.	115
ОРГАНИЧЕСКИЕ ДАТЧИКИ НА NO _x	

Абдрахманов В.Х., Харрасов Р.Р., Ханафин И.И. УМНЫЙ СВЕТОФОР	116
Сапожников М.А., Салихов Р.Б. ОСНОВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ТОНКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЁНОК ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ	117
Сапожников М.А., Абдрахманов В.Х. СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ СЕРВЕРНОЙ	118
Аюпов А. Ф., Абдрахманов В.Х. ПРОЕКТИРОВАНИЕ РАДИОМОДУЛЯ ДЛЯ GPS-ТРЕКЕРА	120
Мансурова Д.Д., Абдрахманов В.Х. РАЗРАБОТКА УСТРОЙСТВА ГОЛОСОВОГО УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ УМНОГО ДОМА	122

СЕКЦИЯ «ЭЛЕКТРОНИКА НАНОСИСТЕМ»

Апкадилова Н.Г., Крылова К.А. ЗАВИСИМОСТЬ СОРБЦИОННОЙ ЕМКОСТИ СКОМКАННОГО ГРАФЕНА ОТ СТЕПЕНИ ДЕФОРМАЦИИ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	123
Арутюнов К.Ю. ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА НА ЛОКАЛЬНЫЕ И ИНТЕГРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КВАЗИОДНОМЕРНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА	126
Киан М.Ф., Лачинов А.Н. ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПОДГОТОВКИ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ/ПОЛИМЕР/МЕТАЛЛ НА ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ	127
Сафронов А.М., Рахмеев Р.Г. АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ БЕНЗОФУРАН-3(2Н)-ОНА	129
Таюпов М.М., Галеев Р.В. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ РЕЗОНАНСНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВИБРАЦИОННОГО МЕХАНИЗМА РАСПОЗНОВАНИЯ ОДОРАНТОВ	131
Панова Н.А. Юсупов А.Р. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ДВУХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК	133
Таюпов М.М., Галеев Р.В.	135

АНОМАЛЬНО МЕТАСТАБИЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ В СПЕКТРЕ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ КУМАРИНА	
Михайлова Т.В., Михайлова В.А., Иванов А.И., Бондарев С.Л., Райченко Т.Ф., Тихомиров С.А., Козлов Н.Г.	137
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ПРОИЗВОДНЫХ АКРИДИН-ДИОНА ИЗ СТАЦИОНАРНЫХ СПЕКТРОВ	
Сафронов А.М., Рахмеев Р.Г.	140
МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА 4,7-ДИГИДРОКСИКУМАРИНА	
Алипова К.А., Кошкина А.С., Лапин Т.Е., Озерова Н.А., Переладова Н.А., Сахно А.В., Фадеев Р.Ю.	142
МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ МОРСКОГО ЛЬДА ДЛЯ ГЛОБАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ ПЛАВ	
Сафронов А.М., Пшеничнюк С.А.	144
РЕЗОНАНСНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ КУМАРИН-3-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ	
Маркова А.В., Асфандиаров Н.Л.	146
ПОДБОР ПАРАМЕТРА ДЛЯ ОЦЕНКИ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ ПО ДАННЫМ О СРЕДНИХ ВРЕМЕНАХ ЖИЗНИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ АНИОНОВ	
Селезнёв Д.В., Пугач Н.Г., Екомасов Е.Г.	148
ОБРАТНЫЙ ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В НАНО-СТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНИТНЫЙ ДИЭЛЕКТРИК	
Пугач Н.Г.	149
СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СПИНОВЫЕ ВЕНТИЛИ - ЭЛЕМЕНТЫ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СПИНТРОНИКИ	
Маркова А.В., Рахмеев Р.Г.	150
ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО РЕЗОНАНСНОМУ ЗАХВАТУ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПРИМЕРЕ МОЛЕКУЛ 2-КУМАРАНОНА	
Михайлова В.А., Минакова Е.Н.	151
ВЕРОЯТНОСТЬ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА НА ПАРАМАГНИТНЫЙ ЦЕНТР	
Байбулова Г.Ш., Алтыншина Г.Р., Лачинов А.Н.	154
НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА	
Скуратов М.И., Пугач Н.Г.	155
НЕЙРОННЫЕ СЕТИ: ТЕКУЩЕЕ ПОЛОЖЕНИЕ И ВОЗМОЖНОЕ БУДУЩЕЕ	
Квашнина Е.О., Ильин И.П., Якупова Р.Р., Михлисова Д.И.,	156

Карамов Д.Д.
ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

- Титов В.В., Муллаянов А.И., Гундерова С.Д., Гундеров Д.В.** 157
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБЪЕМНОГО
МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА Vit-105, ПОДВЕРГНУТОГО
ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЮ
- Ерагер К.Р., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.** 158
ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ
МОДУЛИРОВАННЫХ СТРУКТУР СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Ni-Mn-
In
- Сафина Л.Р., Баймова Ю.А.** 159
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА ГРАФЕН-
НИКЕЛЬ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
- Басырова Р.А., Халикова Г.Р., Трифонов В.Г.** 161
СТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ АЛЮМОМАТРИЧНЫХ
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ
МЕТОДАМИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ
ДЕФОРМАЦИИ
- Ахметгалиев Б.М., Палымбетов Р. Ш., Сахабаева С.,
Балапанов М. Х.** 162
РЕНТГЕНОФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ
СКАНИРУЮЩАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУЛЬФИДОВ МЕДИ $K_xCu_{1,97}S$ ($0 < x < 0.05$)
- Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф.** 164
ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ В
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КОБАЛЬТЕ
- Байшева А.Х., Палымбетов Р.Ш., Сахабаева С.М., Балапанов
М.Х.** 166
ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
СУЛЬФИДАХ МЕДИ $K_xCu_{1,85}S$ ($0 < x < 0.05$)
- Саносян А.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.** 168
СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ
ГЕЙСЛЕРА Co-Ni-Sn
- Ким К.А., Чуракова А.А., Гундеров Д.В.** 169
ВЛИЯНИЕ РКУП С КАНАЛОМ ДИАМЕТРОМ 10 ММ НА СПЛАВ
Ti18ZR15NB

Колесникова А.Е., Беленков Е.А.	170
АВ INITIO РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ	
Подоплелова Е.А., Беленков Е.А.	171
ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕФЕКТЫ В ГРАФЕНЕ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ	
Ряшенцев Д.С., Беленков Е.А.	172
НОВАЯ СТРУКТУРНАЯ РАЗНОВИДНОСТЬ СЛОЕВОГО НИТРИДА БОРА BN-L _{4-6-8c}	
Шишкунова М.А., Аксенов Д.А., Асфандияров Р.Н.	173
ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ХРОМА В СПЛАВЕ СИСТЕМЫ Cu-Cr НА СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ И СВОЙСТВА ПРИ РКУП И КИНЕТИКУ СТАРЕНИЯ	
Титова А.А., Гундеров Д.В. Шарафутдинов А.В. Чуракова А.А.	175
ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ СПЛАВА Ti18Zr15Nb	
Загитов Р.Р., Ситдииков О.Ш., Автократова Е.В., Маркушев М.В.	176
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ИЗМЕЛЬЧЕНИЕ ЗЕРЕН В МОДЕЛЬНОМ СПЛАВЕ СИСТЕМЫ Al-Cu	
Афанасьев М.О., Гундерова С.Д., Гундеров Д.В.	177
АМОРФНЫЕ СПЛАВЫ И ВЛИЯНИЕ НА НИХ ИПД	
Юрьева Е.К, Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Ильясов Р.Р.	178
ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ КРИОГЕННОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ТВЕРДОСТЬ НИКЕЛЯ	
Нуриева Ю.Р., Аксенов Д.А., Асфандияров Р.Н.	179
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЛАБОРАТОРНОГО ОБРАЗЦА КОНТАКТНОГО ПРОВОДА ИЗ СПЛАВА СИСТЕМЫ CU-CR	
Vorobiev E.V., Churakova A.A.	181
ANALYSIS OF THE STRUCTURE OF THE TINI ALLOY UNDER THERMAL CYCLIC LOADING IN A FREE STATE	
Ильясов Р.Р., Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Крымский С.В., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.	183
ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И ТВЕРДОСТЬ КРИОДЕФОРМИРОВАННОГО АЛЮМИНИЯ	
Ильясов Р.Р., Валеев И.Ш., Валеева А.Х., Крымский С.В., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.	184

ПОЛУЧЕНИЕ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ МЕДИ КРИОГЕННОЙ ПРОКАТКОЙ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКОЙ	185
Цыганкова Л.В., Биккулова Н.Н., Акманова Г.Р., Сафаргалиев Д.И.	
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СЕЛЕНИДОВ МЕДИ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ДАВЛЕНИЯ	187
Грешняков В.А.	
СТРУКТУРНЫЕ РАЗНОВИДНОСТИ АЛМАЗОПОДОБНЫХ БИСЛОЕВ 5-7	188
Кузнецов А.С.	
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПОЛИМОРФА АЛМАЗА, ПОЛУЧАЕМОГО ИЗ ГРАФЕНА 5-7-α	189
Зубкова В.А.	
РАСЧЕТ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ КРЕМНИЯ 14/МММ	190
Сахабаева С.М., Ахметгалиев Б.М., Кубенова М.М., Балапанов М.Х.	
ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУЛЬФИДОВ МЕДИ $K_xCu_{1.85}S$ ($0 < x < 0.05$)	192
Сафаргалиев Д.И., Курбангулов А.Р., Акманова Г.Р.	
ИЗУЧЕНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ СЕЛЕНИДА МЕДИ	194
Юлмухаметова А.Ю.	
РАСЧЁТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ХАЛЬКОГЕНИДОВ МЕДИ И СЕРЕБРА	

СЕКЦИЯ «ГЕОФИЗИКА»

Бояркин С.А.	195
ПРИМЕНЕНИЮ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАКОНОВ И ФОРМУЛ ДЛЯ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ	
Корытников А.А.	198
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СНГК В НЕФТЯНЫХ И ГАЗОВЫХ СКВАЖИНАХ С ЦЕЛЬЮ УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА СКВАЖИННОГО МАТЕРИАЛА	
Кашапов А.И.	200
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СГК ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ДОСТОВЕРНОСТИ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ НЕФТЕГАЗОВЫХ СКВАЖИН	
Касимов А.М.	201

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДА СНИЖЕНИЯ РАЗМЕРНОСТИ T-SNE В КОНТЕКСТЕ ПРИМЕНИМОСТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ГИС	
Кофонова С.Р., Низаева И.Г.	203
О ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ ГИДРАТОНАСЫЩЕННОГО ПЛАСТА	
Шайбекова Г.Ф.	204
ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ И ИНТЕРВАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ В ОТЛОЖЕНИЯХ ТЕРЕГЕННЫХ ПЛАСТОВ НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ	
Косаева С.И, Вахитова Г.Р.	206
ИЗУЧЕНИЕ КОЛЛЕКТОРОВ СЛОЖНОГО ГЕОЛОГИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИНТЕРПРЕТАЦИИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО ГАММА-КАРОТАЖА	
Шафиков Д.С.	207
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ПОТОКА ЖИДКОСТИ В НАГНЕТАТЕЛЬНОЙ СКВАЖИНЕ С УЧЕТОМ ИНЕРЦИОННОСТИ ДАТЧИКА ТЕРМОАНЕМОМЕТРА ПРИ ПЕРЕМЕННОЙ СКОРОСТИ ДВИЖЕНИЯ ПРИБОРА	
Ракипова К.В.	209
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАКОЛОННЫХ ПЕРЕТОКОВ ПО ИННК	
Дементьева Д.В.	211
АНАЛИЗ ПРИЧИН НЕЭФФЕКТИВНОЙ ЗАКАЧКИ	
Мухтаров Р.М.	213
МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ РЕАЛЬНОЙ СКВАЖИНЫ В СИСТЕМЕ ДВУХ ПЛАСТОВ	
Шпар А.С.	215
АВТОМАТИЧЕСКОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ ФАЦИЙ ПО ДАННЫМ ГИС НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ	
Давлетшин Ф.Ф., Шарафутдинов Р.Ф.	216
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ В ПЛАСТЕ С ТРЕЩИНОЙ ГИДРОРАЗРЫВА В РЕЖИМЕ ПОСТОЯННОГО ОТБОРА И ДЕПРЕССИИ	
Хажина Э.И.	217
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПЛАСТЕ ПРИ ТРЕХФАЗНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ГАЗИРОВАННОЙ НЕФТИ ВОДЫ И ГАЗА	
Галанов К.И.	219
КОНЦЕПЦИЯ МОДЕРНИЗИРОВАННОГО ЛАБОРАТОРНОГО СТЕНДА ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ОЦЕНКИ ВОЗМОЖНОСТИ ЛОКАЛИЗАЦИИ ИСТОЧНИКА ШУМА	
Дунюшкин А.С.	221

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ВЫДЕЛЕНИЯ ИСТОЧНИКА ШУМА, ПРИ НАЛИЧИИ ФОНОВОГО ЗАШУМЛЕНИЯ НА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМ СТЕНДЕ	
Бояркин С.А., Гимранов И.Р., Вагапов В.Р.	223
МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРОНТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПОПУТНО-ДОБЫВАЕМЫХ ВОД ПРИ ИХ РАЗМЕЩЕНИИ В ГЛУБОКОЗАЛЕГАЮЩИЕ ГОРИЗОНТЫ	
Ганеева А.И.	224
ИССЛЕДОВАНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ФИЛЬТРАЦИИ НЕФТИ В УПРУГОМ НЕОДНОРОДНОМ ПЛАСТЕ	
Джиллилова И.Д.	225
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕБИТА ПО ТЕРМОГРАММЕ В МАЛОДЕБИТНОЙ СКВАЖИНЕ	
Нугаева Н.М.	227
ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА КОЛЛЕКТОРОВ МЕТОДАМИ КАПИЛЛЯРОМЕТРИИ	

СЕКЦИЯ «ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА»

Исхакова А.И.	228
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИТОКА ЖИДКОСТИ К ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ СКВАЖИНЕ С МГРП	
Аллагулова А.Г.	229
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИТОКА ЖИДКОСТИ В ГОРИЗОНТАЛЬНУЮ СКВАЖИНУ С РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ ТРЕЩИН ГРП В ПК «РН-КИМ»	
Мухаметова З.С., Мусин А.А., Зиннатуллин Р.Р., Ковалева Л.А.	230
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОТЫ ПАРООБРАЗОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПРИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА НЕФТЕМАТЕРИНСКИЕ ГОРНЫЕ ПОРОДЫ	
Латыпова Р.Р.	232
АПРОБАЦИЯ МЕТОДА АНАЛИЗА ДАННЫХ ПО РАСХОДАМ И ДАВЛЕНИЯМ В НАГНЕТАТЕЛЬНЫХ СКВАЖИНАХ	
Фаткуллина Н.Б., Солнышкина О.А., Булатова А.З.	233
3D МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДЕФОРМИРУЕМЫХ ЧАСТИЦ В МИКРОКАНАЛАХ СО СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ	
Фаткуллина Н.Б., Солнышкина О.А., Булатова А.З.	234
ЧИСЛЕННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИКИ ДВУХ БЛИЗКОРАСПОЛОЖЕННЫХ ДЕФОРМИРУЕМЫХ КАПЕЛЬ В СДВИГОВОМ ПОТОКЕ	
Искандаров А.И., Солнышкина О.А.	235

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТЕЧЕНИЯ ЭМУЛЬСИИ В МИКРОКАНАЛАХ С СИСТЕМОЙ ОДИНОЧНЫХ ЛОВУШЕК ТРЕУГОЛЬНОЙ ФОРМЫ	
Бурмистров М.Е., Питюк Ю.А.	236
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТВЕРДОЙ ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ И ОСЦИЛИРУЮЩЕГО ПУЗЫРЬКА В АКУСТИЧЕСКОМ ПОЛЕ	
Булатова А.З., Солнышкина О.А., Фаткуллина Н.Б.	237
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ОДИНОЧНЫХ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ В МИКРОКАНАЛАХ	
Булатова А.З., Солнышкина О.А., Фаткуллина Н.Б.	238
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОДИНОЧНЫХ НЕДЕФОРМИРУЕМЫХ ЧАСТИЦ В СДВИГОВОМ ПОТОКЕ	
Гайсин И.В.	239
ИССЛЕДОВАНИЕ РАССРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В НЕФТЕМАТЕРИНСКОЙ ПОРОДЕ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ СВЧ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ	
Адельгужина Э.М.	240
РАСЧЕТ СРЕДНЕГО ПЛАСТОВОГО ДАВЛЕНИЯ МЕТОДАМИ МЭТТЮЗА-БРОНСА-ХАЗЕРЬБУКА И МИЛЛЕРА-ДАЙСА-ХАТЧИНСОНА – ДИТЦА В ДОБЫВАЮЩЕЙ СКВАЖИНЕ	
Мухутдинова А.А.	241
СРАВНЕНИЕ ВРЕМЕНИ ПОЛНОГО РАССЛОЕНИЯ МОНОДИСПЕРСНОЙ И ПОЛИДИСПЕРСНОЙ ЭМУЛЬСИЙ	
Киселева А.А. Фахретдинова А.Л. Солнышкина О.А.	242
ЧИСЛЕННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ ЭМУЛЬСИЙ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТРЕХМЕРНОГО МЕТОДА ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ	
Фахретдинова А.Л., Киселева А.А., Солнышкина О.А.	244
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ОТДЕЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ОБЛАСТЯХ С ДЕТЕРМИНИРОВАННЫМ БОКОВЫМ СМЕЩЕНИЕМ	
Галиева К.Ф.	244
НАПОРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ТРУБОПРОВОДОВ	
Фазлетдинов С.У., Питюк Ю.А.	245
ПРИМЕНЕНИЕ ПАКЕТА OPNFOAM ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫТЕСНЕНИЯ НЕФТИ В МОДЕЛИ ПОРОВОГО ДУБЛЕТА	
Kazina L.Z.	246
SIMULATION OF PRESSURE IN A RESERVOIR WITH OIL RIM AND GAS CAP IN THE	

“RN-KIM” HYDRODYNAMIC SIMULATOR	
Валиуллина В.И., Муллаянов А.И., Мусин А.А., Ковалева Л.А.	248
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВЛИЯНИЯ НИЗКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА РАССЛОЕНИЕ ЭМУЛЬСИЙ ТИПА «ВОДА В МАСЛЕ»	
Замула Ю.С.	249
ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КАПЕЛЬ С ОБОЛОЧКОЙ НА АТОМНО-СИЛОВОМ МИКРОСКОПЕ	
Юлмухаметова Р.Р., Мусин А.А.	250
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ СУСПЕНЗИИ В КАНАЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ УТЕЧКИ В БОКОВЫЕ СТЕНКИ	
СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ, ФИЗИКИ»	
Казанцева А.Э., Подлесная А.Е.	251
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ В ЭКОНОМИКЕ	
Абдуллин А.У., Акманова Г.Р.	252
НА ЗЛОБУ ДНЯ. РПД И ФГОС – НАСКОЛЬКО ОНИ СВЯЗАНЫ?	
Абдуллин А.У.	253
ВСЕГО ЛИШЬ КИНЕМАТИКА	
Климов М.Е., Дановский И.В., Михайлов С.Н.	254
РАЗРАБОТКА БИОНИЧЕСКОГО ПРОТЕЗА – МАНИПУЛЯТОРА РУКИ	
Беленкова Э.И.	256
ОСОБЕННОСТИ ПРОВЕДЕНИЯ ДИСТАНЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ ПО ФИЗИКЕ И ИНФОРМАТИКЕ ДЛЯ СТУДЕНТОВ МЕДИЦИНСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ	
Башмаков Р.А., Коробчинская О.Г., Махота А.А.	257
О ЧЕТЫРЕХ ПЕРИОДАХ В РАЗВИТИИ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ НЕФТЕДОБЫЧИ	
Кныш А.А.	258
ПРИМЕР ОРГАНИЗАЦИИ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СТУДЕНТОВ НА ЛЕКЦИИ ПО ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ	
Пыжьбянова П.О.	260
МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ	
Волкова Е.С., Савинова Е.А.	262
МАТЕМАТИКА В ЭКОНОМИЧЕСКОМ ВУЗЕ	
Ляликова А. А.	264

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИТ-ТЕХНОЛОГИЙ В ОБУЧЕНИИ
МАТЕМАТИКЕ
Мустафина А.Р.
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ В РЕСТОРАННОЙ
ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

265

Научное издание

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ:
спутник Международной научной конференции
«Уфимская осенняя математическая школа-2021»**

*Тезисы докладов
XII Международной школы-конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых,
посвященной 100-летию профессора БашГУ
Фарзтдинова Миркашира Минигалиевича
(г. Уфа, 6 – 9 октября 2021 г.)*

*За достоверность информации, изложенной в статьях,
ответственность несут авторы.
Статьи публикуются в авторской редакции*

*Лицензия на издательскую деятельность
ЛР № 021319 от 05.01.99 г.*

Подписано в печать 04.10.2021 г. Формат 60х84/16.
Усл. печ. л. 16,33. Уч.-изд. л. 17,04.
Тираж 300 экз. (1-й завод 28 экз.). Изд. № 69. Заказ 303.

*Редакционно-издательский центр
Башкирского государственного университета
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.*

*Отпечатано на множительном участке
Башкирского государственного университета
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.*

