

Министерство образования и науки Украины
Одесский национальный университет имени И.И.Мечникова

Ф и з и ч е с к и й ф а к у л ь т е т

73 - я отчетная
студенческая научная конференция
Одесского национального
университета имени И.И. Мечникова

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Печатается по решению
Ученого Совета физического факультета

Редактор - доктор ф.-м.н. Ваксман Ю.Ф.

24-26 апреля 2017г.

О д е с с а

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

(кафедра экспериментальной физики)

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ОХРАТОКСИНА А ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМ МЕТОДОМ НА POR-SI ПЛАТФОРМЕ

Мельник Ю. С.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. профессор Смынтына В. А.

Технический руководитель – м.н.с. Мындрол В. Б.

Микотоксины: токсины, низкомолекулярные вторичные метаболиты, продуцируемые микроскопическими плесневыми грибами. Среди всех микотоксинов Охратоксин А (ОТА) привлёк внимание так как является опасным для здоровья животных и людей. [1]. Данный микотоксин был классифицирован, как возможный канцероген для человека. [2]. ОТА – это микотоксин, который был обнаружен в продуктах растительного происхождения, в тканях людей и животных. ОТА вырабатывается грибами *Aspergillus* and *Penicillium* [3].

В настоящее время существует несколько максимально допустимых уровней ОТА в различных видах пищевых продуктов. Например, Европейская комиссия (постановление 1881/2006) установила допустимые концентрации ОТА для зерновых культур (5 мкг / кг) и пиво и виноградный сок (2 мкг / кг) [4]. Величины для оценки воздействия ОТА на диетическое питание составляют от 0,13 до 4,6 нг / кг массы тела в день (то есть от 0,91 до 32,2 нг / кг массы тела в неделю). Однако, из-за его присутствия во множестве продуктов питания, невозможно избежать воздействия ОТА. Поэтому разработка новых, чувствительных и дешевых биосенсоров для обнаружения ОТА имеет большое значение для здоровья человека.

В последние годы появилось несколько новых методик и методов для обнаружения ОТА., основанных на хемилюминесцентной резонансной передаче энергии , дифференциальной импульсной вольтамперометрии , емкостного электрохимического биодатчика, электрохимического магнитоиммуносенсора , поверхностный плазмонный резонанс, усиленная металлом флуоресценция, бесклеточный фотоэлектрохимический иммуносенсор, колориметрический аптасенсор и биосензирование флуоресценции / фотолюминесценции.

Среди всех этих методов обнаружение на основе фотолюминесценции (PL) имеет ключевые преимущества перед другими. Он может обеспечить чувствительный, недорогой, быстрый, реальный и довольно простой метод детектирования [5]. В биосенсорах ФЛ контролируется изменение интенсивности люминесценции зонда / материала до и после адсорбции аналита [5]. Свойства PL зонда / материала определяют условия восприятия (длина волны возбуждения и / или длины волны излучения) и чувствительность датчика [6].

Пористый кремний (PSi) стал одним из самых популярных материалов для биосенсорной технологии за последние годы. Биосенсоры на основе PSi широко используются для обнаружения бактерий, вирусов, токсинов, и т.д., с высокой

чувствительностью и достоверностью [7]. Биосенсоры на основе PSi широко используются для обнаружения биомолекул из-за своих уникальных физико-химических свойств. PSi является биосовместимым материалом. PSi создает улучшенное соотношение поверхности к объему, а высокая реакционная способность поверхности позволяет ковалентно связать аналиты с поверхностью. Свойства PL позволяют обнаруживать аналиты через PL.

В настоящем исследовании мы разработали чувствительный, экономически эффективный и сравнительно быстрый метод обнаружения ОТА. Для разработки ФЛ биосенсора для детектирования ОТА с использованием образцов PSi, полученных методом химического неэлектролитического травления (MACE). Впервые было представлена возможность получения кинетики затухания сигнала ФЛ PSi в зависимости от концентрации антител ОТА. PSi PL биосенсор демонстрировал широкий диапазон обнаружения от 0,094 до 100 нг / мл (линейный диапазон от 0,001 до 100 нг / мл) ОТА.

[1] R. Liang, X.L. Shen, B. Zhang, Y. Li, W. Xu, C. Zhao, Y. Luo, K. Huang, Apoptosis Signal-regulating Kinase 1 promotes Ochratoxin A-induced renal cytotoxicity, *Sci. Rep.* 5 (2015) 8078. doi:10.1038/srep08078.

[2] G.G. Schwartz, Hypothesis: Does ochratoxin A cause testicular cancer?, *Cancer Causes Control.* 13 (2002) 91–100. doi:10.1023/A:1013973715289.

[3] J. O’Callaghan, M.X. Caddick, A.D.W. Dobson, A polyketide synthase gene required for ochratoxin A biosynthesis in *Aspergillus ochraceus*, *Microbiology.* 149 (2003) 3485–3491. doi:10.1099/mic.0.26619-0.

[4] S. Quintela, M.C. Villarán, I. López de Armentia, E. Elejalde, Ochratoxin A removal in wine: A review, *Food Control.* 30 (2013) 439–445. doi:10.1016/j.foodcont.2012.08.014.

[5] S.N.A. Jenie, S.E. Plush, N.H. Voelcker, Recent Advances on Luminescent Enhancement-Based Porous Silicon Biosensors, *Pharm. Res.* 33 (2016) 2314–2336. doi:10.1007/s11095-016-1889-1.

[6] J.R. Lakowicz, *Principles of fluorescence spectroscopy*, 2006. doi:10.1007/978-0-387-46312-4.

[7] F.P. Mathew, E.C. Alocilja, Porous silicon-based biosensor for pathogen detection, in: *Biosens. Bioelectron.*, 2005: pp. 1656–1661. doi:10.1016/j.bios.2004.08.006.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ БИОРИТМОВ ГОЛОВНОГО МОЗГА ЧЕЛОВЕКА ОТ ЕГО ФИЗИЧЕСКОГО И ПСИХОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЙ

Проконова Ю.А.

Научный руководитель - ст. преподаватель Пастернак В.А.

Цель работы: исследование зависимости биоритмов головного мозга человека от его физического и психологического состояний

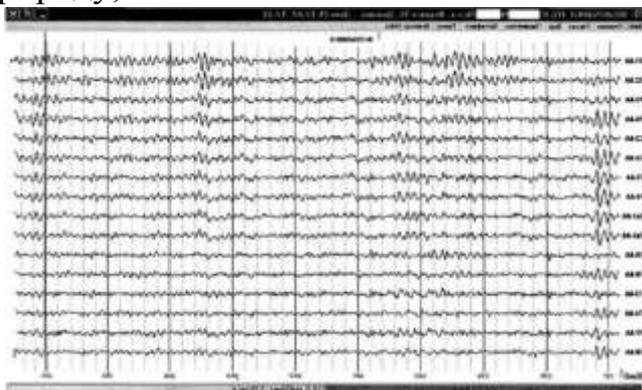
Основные понятия: ЭЭГ-чувствительный метод исследования, он отражает малейшие изменения функции коры головного мозга и глубоких мозговых структур, обеспечивая миллисекундное временно разрешение.

Токи, регистрирующиеся на ЭЭГ, характеризуются различными частотами, пространственным распределением и взаимосвязью с различными состояниями мозга (сон или бодрствование). Такие колебания потенциала представляют собой синхронизированную активность целой сети нейронов.

Преимущества метода:

ЭЭГ позволяет:

- оценить общее функциональное состояние головного мозга с учетом индивидуальных особенностей конкретного пациента;
- выявить наличие и характер нарушений в его работе;
- определить локальные и очаговые повреждения и в ряде случаев установить их природу;



Результат электроэнцефалограммы представляет собой запись на бумаге или в памяти компьютера. На бумаге записываются кривые, которые анализирует врач. Оценивается ритмичность волн на ЭЭГ, частота и амплитуда, выявляются характерные элементы с фиксацией их распределения в пространстве и во времени. Затем все данные суммируются и отражаются в заключении и описании ЭЭГ, которое вклеивается в медицинскую карту. Заключение ЭЭГ основывается на виде кривых, с учетом клинических симптомов, имеющих у человека. Такое заключение должно отражать основные характеристики ЭЭГ, и включает в себя три обязательные части:

1. Описание активности и типической принадлежности волн ЭЭГ. Над обоими полушариями регистрируется альфа-ритм. Средняя амплитуда - 57 мкВ слева и 59 мкВ справа. Доминирующая частота - 8,7 Гц. Альфа-ритм доминирует в затылочных отведениях.

2. Заключение согласно описанию ЭЭГ и его интерпретация. Признаки ирритации коры и срединных структур мозга. Асимметрии между полушариями мозга и пароксизмальной активности не выявлено.

3. Определение соответствия клинических симптомов с результатами ЭЭГ. Зафиксированы объективные изменения функциональной активности мозга, соответствующие проявлениям эпилепсии.

Расшифровка электроэнцефалограммы: В процессе расшифровки обязательно учитывают базальный ритм, уровень симметричности в электрической активности нейронов головного мозга левого и правого полушарий, активность спайки, изменения ЭЭГ на фоне функциональных тестов (открытие – закрытие глаз, гипервентиляция, фотостимуляция).

Внешние факторы (Резонанс Шумана):

Одним из важнейших факторов, влияющих на активность головного мозга является образования стоячих электромагнитных волн низких и сверхнизких частот между поверхностью Земли и ионосферой, так называемый Резонанс Шумана.

Сегодня уже известно, что люди, которые испытывают сильный стресс и большие нагрузки-нуждаются в этих волнах. Кроме того, остро ощущают отсутствие волн Шумана пожилые и вегетативно чувствительные люди, а также хронические больные. Их отсутствие может приводить к головной боли, потере ориентации, тошноте, головокружению и т.д.

На сегодняшний день электромагнитный фон планеты в результате деятельности человека претерпел существенные изменения и загрязнён до такой степени, что волны Шумана, либо сильно искажаются, либо вовсе не доходят до человека. По этой причине НАСА использует генераторы волн для обеспечения нормальной жизнедеятельности своего персонала. Был разработан прибор, излучающий вибрации с частотой 7,8 Гц, успокаивая мозг и приводя его в расслабленное состояние. В качестве перспективы можно разработать такую процедуру и проводить её людям, которые нуждаются в этих волнах.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Гудфеллоу Джон А. - Обследование неврологического больного – ГЭОТАР-Медиа - 2016
2. Volland, H. Atmospheric Electrodynamics. - Springer-Verlag, Berlin

Исследование влияния факторов внешней среды на электрические характеристики наноструктурированных плёнок SnO₂

Н. Симанович – студ. V курса, М. Клочков – студ. IV курса

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доц. А.П. Чебаненко

В настоящее время практическое применение в качестве чувствительного материала для газовых сенсоров резистивного типа находят нанокристаллические оксиды SnO₂. Сигнал газового сенсора резистивного типа представляет собой интегральную величину, которая отвечает содержанию в атмосфере различных газов. Наиболее чувствительными по своим электрическим свойствам и реакционной способности среди оксидных полупроводниковых материалов, меняющих микроструктуру поверхности, являются нанокристаллические оксиды в виде плёнок SnO₂.

Исследуемые нами плёнки диоксида олова получали золь-гель методом с использованием поливинилацетата (ПВА – 1%) в качестве структурирующего вещества и дихлордиацетилацетоната олова (ДХДААО – 10%) в качестве прекурсора. Для измерения электрических характеристик использовались планарные омические контакты из индия, который в виде двух параллельных полосок напылялся в высоком вакууме на поверхность плёнки SnO₂. Межэлектродное расстояние составляло 2 мм.

Исследуемые плёнки SnO₂ проявляли фотолюминесценцию (ФЛ), спектр излучения которой представляет собой широкую полосу с максимумом при длине волны (735 – 765) нм а также слабую полосу с максимумом при длине волны 580 нм. Наблюдаемые полосы ФЛ связаны с излучательными переходами электронов из зоны проводимости SnO₂ на уровни, образованные нейтральными вакансиями кислорода, скоординированными с атомами олова под углами 100° и 130° (V_o 100° и V_o 130°), соответственно.

Температурная зависимость темнового тока показывает, что в области комнатных температур протекание тока контролируется донорными центрами с энергией ионизации (0,21 – 0,26) эВ, которыми согласно литературным данным являются двукратно ионизированные вакансии кислорода V_o^{++} в объёме плёнок SnO₂. При температурах выше (110-115)°С электропроводность определяется примесными центрами с энергией ионизации $E_a = (0,65 – 0,73)$ эВ, природа которых не ясна.

Вольт-амперные характеристики (ВАХ) исследуемых слоев оказались практически линейными, что свидетельствует об омическом характере их проводимости. Однако рассчитанное из вольт-амперных характеристик сопротивление плёнок существенно зависит от состава окружающей среды. Так прогрев плёнки в вакууме до температуры +150° С с последующим её охлаждением вновь до комнатной понижает сопротивление почти на порядок (по сравнению с его значением для плёнки, находящейся в атмосфере сухого воздуха). Последнее связано с тем, что в условиях атмосферного воздуха адсорбированный на поверхности SnO₂ кислород, захватывая из зоны проводимости SnO₂ электроны, приводит к образованию в приповерхностной области полупроводника слоя положительного пространственного заряда и, как следствие, запирающего поверхностного изгиба энергетических зон. Поскольку исследуемые плёнки

являются тонкими, то это обуславливает заметное увеличение их сопротивления. Сопротивление пленок существенно зависит также от присутствия в окружающей атмосфере воздуха паров воды или паров этилового спирта, о чем свидетельствует поведение ВАХ, представленных на рис.1. Повышение электропроводности в парах воды вероятно связано с диссоциативной адсорбцией воды на поверхности исследуемых пленок [1]. Согласно этому механизму на поверхности микрокристалла SnO_2 молекула воды диссоциирует на гидроксильную группу OH^- и протон H^+ . После диссоциации OH^- группа локализуется на поверхностном атоме олова, отдавая электрон в зону проводимости полупроводника. Протон H^+ захватывается адсорбированным на поверхности ионом O^- , образуя нейтральную группу OH . Таким образом, в результате процесса адсорбции, молекулы воды формируются две гидроксильные группы OH и исчезает ион O^- . Это приводит к увеличению проводимости [2].

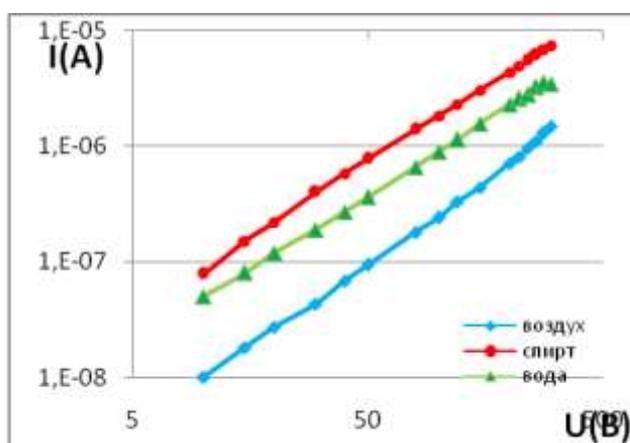
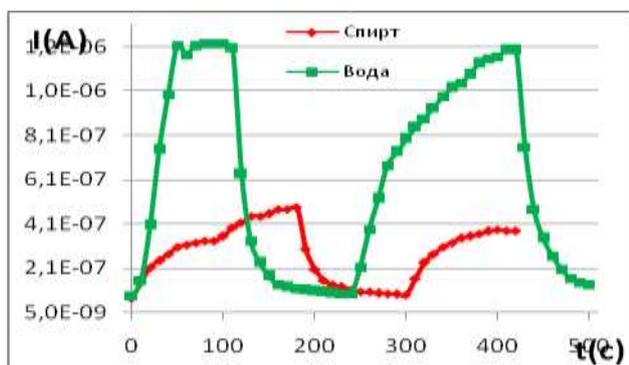


Рис.1 ВАХ пленки SnO_2 , измеренные на воздухе, в парах воды и в парах этилового спирта.

Рис.2 демонстрирует зависимость силы тока, протекающего в пленке SnO_2 , от присутствия (или отсутствия) в измерительной камере паров воды или спирта. Видно, что после напускания в камеру паров воды сила тока за относительно короткий промежуток времени (около 10 секунд) увеличивается более чем на порядок. Причем, после удаления паров воды сила тока приблизительно за тот же промежуток времени уменьшается до первоначального значения, т.е. эффект переключения уровня проводимости является обратимым. Аналогичный результат оказывает воздействие паров этилового спирта (хотя кратность изменения уровня



проводимости при этом меньше, чем при воздействии парами воды). Приведенные результаты свидетельствуют о возможности применения указанных пленок SnO_2 в качестве основы для сенсоров влаги и паров этилового спирта, работающих при комнатной температуре.

Рис. 2. Пояснения в тексте.

Литература:

1. Kalinina M.V. et al. Temperature dependence of the resistivity for metal-oxide semiconductors based on tin dioxide. - Glass physics and chemistry, 2003, Vol.29, № 4, P. 422-427
2. Алмаев А.В., Сергейченко Н.В., Рудов Ф.В. Влияние уровня влажности на характеристики сенсоров водорода на основе тонких плёнок SnO_2 . - Мат. XX Международной научно-практической конф., 2014, Томск, с. 315-317.

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ ZnSe:Al И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Теплякова И.В., Смолянская Т.С.

научный руководитель – доктор ф.м. наук, профессор Ницук Ю.А.

Селенид цинка является широкозонным полупроводниковым материалом, который активно используется в области фотоизлучающих устройств: коротковолновые лазеры, синие лазерные диоды, солнечные фотоэлементы, датчики и оптические записывающие материалы. Изучение нанокристаллов ZnSe вызывает интерес благодаря появлению квантово-размерных эффектов, усиливающих оптические свойства, тем самым расширяющих потенциальную область применения ZnSe.

В представленной работе разработана методика коллоидного синтеза легированных и нелегированных наночастиц ZnSe в матрице поливинилового спирта (ПВС). В качестве источника цинка использовался $ZnCl_2$. Источником селена выступал селеносульфат натрия. Легирование Al, проводилось в процессе химической реакции. Средний размер исследуемых наночастиц определялся в приближении эффективных масс по формуле Вонга, и варьировался от 6 до 50 нм.

С целью установления природы оптических переходов исследовались спектры поглощения и люминесценции нелегированных нанокристаллов ZnSe, и нанокристаллов, легированных Al.

Исследования спектров оптического поглощения в области края фундаментального поглощения показали, что, при переходе от объемных кристаллов к нанокристаллам, наблюдается сдвиг края поглощения в область больших энергий, величина сдвига возрастала при увеличении концентрации ПВС от 2 до 10%, что можно объяснить уменьшением размера наночастиц. Подобная закономерность наблюдается в спектрах краевого излучения, где положение линии экситонного излучения коррелирует с положением края фундаментального поглощения. Температурное смещение края фундаментального поглощения и линии экситонного излучения соответствует температурному изменению ширины запрещенной зоны селенида цинка.

Вместе с тем, легирование Al приводит к смещению вышеуказанных линий в область меньших энергий, по сравнению с их положением в нелегированных нанокристаллах, что объясняется уменьшением ширины запрещенной зоны вследствие межпримесного кулоновского взаимодействия. Подобная картина наблюдалась ранее, в объемных кристаллах селенида цинка, легированных примесями-соактиваторами.

Установлено, что легирование примесью Al приводит к появлению широких интенсивных полос излучения в видимой области спектра, идентичных полосам излучения в объемных кристаллах ZnSe:Al.

Исследование температурной зависимости интенсивности излучения позволило установить природу излучательных переходов в нанокристаллах ZnSe, легированных Al. Показано, что излучение в красно-оранжевой области спектра контролируется ассоциативными дефектами, в состав которых входят донорные центры алюминия Al_{Zn}^+ и неконтролируемые собственные дефекты акцепторной природы, которыми выступают вакансии цинка в зарядовом состоянии -1 и -2.

Ранее, на объемных монокристаллах ZnSe:Al была установлена корреляция фотолуминесцентных и фотоэлектрических свойств. Сходство люминесцентных свойств объемных и нанокристаллов ZnSe:Al в видимом диапазоне позволяет предположить идентичность их фотоэлектрических свойств.

Таким образом, проведенные исследования показали актуальность проведения дальнейших фотоэлектрических исследований нанокристаллов ZnSe:Al, поиска проводящей органической матрицы для замены поливинилового спирта в технологии коллоидного синтеза наночастиц ZnSe:Al и их аналогов, для разработки нового поколения эффективных фотоэлектрических преобразователей и излучающих структур.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ZnSe И ИХ АНАЛОГОВ ДЛЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ ДИАГНОСТИКИ

Смолянская Т.С.

*Научный руководитель – доктор физ.-мат. наук,
доцент Ницук Ю.А.*

Флуоресцентные полупроводниковые нанокристаллы являются перспективным материалом для создания флуоресцентных меток для микроскопии и флуоресцентной томографии. По сравнению с используемыми для данной задачи в настоящее время органическими красителями и флуоресцентными белками полупроводниковые нанокристаллы обладают высокой устойчивостью к фотовыцветанию и узкими спектрами излучения.

В настоящее время успешно реализована технология синтеза полупроводниковых наночастиц на основе сульфида и селенида кадмия, позволяющая получать излучение в видимом и ближнем ИК-диапазоне. Однако недостатком этих квантовых точек является их цитотоксичное действие на организм, которое обуславливается наличием в их составе ионов тяжелых металлов, коллоидной нестабильностью, способностью генерировать активные формы кислорода и неспецифическим взаимодействием с биологическими молекулами.

Использование квантовых точек на основе сульфида и селенида цинка может решить проблему цитотоксичности. Легирование примесями-соактиваторами позволит реализовать эффективное излучение в видимой и ближней ИК-области.

В данной работе выполнен поиск эффективных примесей – активаторов люминесцентного излучения. Синтез наночастиц селенида и сульфида цинка осуществлялся «зеленым» методом низкотемпературного коллоидного синтеза. В качестве источника ионов цинка выступал хлорид цинка. Источником селена выступал селеносульфит натрия, а источником серы – сульфид натрия. Легирование примесями-соактиваторами осуществлялось путем добавления хлоридов соответствующих примесей. Стабилизация роста наночастиц осуществлялась добавлением водного раствора поливинилового спирта. Оценка размеров синтезированных наночастиц осуществлялась по положению края фундаментального поглощения. Вариация технологических условий позволила получить наночастицы размером от 3 до 20 нм.

Нелегированные наночастицы ZnSe характеризуются слабым длинноволновым излучением с максимумом на 1.8 эВ (рис.1, кривая 1). Подобные спектры излучения наблюдались ранее на нелегированных объемных кристаллах ZnSe и обуславливались переходами в пределах донорно-акцепторных пар, в состав которых входят собственные дефекты и неконтролируемые примеси.

Введение примеси железа приводит к появлению серии линий излучения в области 2.4 – 1.6 эВ (рис. 1, кривая 2) и интегральным максимумом излучения на 1.96 эВ. Наблюдаемые элементарные линии излучения обусловлены внутрицентровыми переходами в пределах иона Fe²⁺.

Наиболее интенсивное излучение с максимумом на 1.96 эВ наблюдается в кристаллах селенида цинка, легированных марганцем. Максимальная интенсивность

наблюдается при концентрации марганца 2%. При более высоких температурах наблюдается концентрационное тушение излучения.

Для сравнения были синтезированы нанокристаллы сульфида цинка и сульфида кадмия, легированные марганцем. Максимум излучения в составил 2.11 эВ. Данная линия излучения хорошо изучена в литературе и связывается с внутрицентровыми излучательными переходами в пределах иона Mn^{2+} .

Таким образом, для задач флуоресцентной диагностики *in-vivo* оптимальным является излучение наночастиц

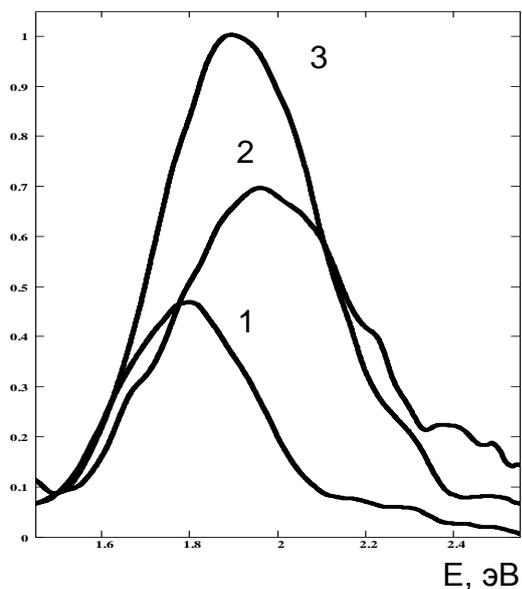


Рис1. Спектр люминесценции кристаллов ZnSe(1), ZnSe:Fe(2), ZnSe:Mn(3). Концентрация

СЕКЦИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (кафедра общей и химической физики) МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТОПЛИВНЫХ СМЕСЕЙ

Якушена Ю.М.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Копейка А.К.

Целью данной работы являлось выяснение закономерностей испарения одиночных капель низших спиртов (этанол - Е, пропанол - Р, бутанол - В) в воздухе. Практический интерес к исследованию этих веществ, относящихся к ряду низших спиртов, обусловлен возможным их применением в качестве добавок к традиционно используемым жидким моторным топливам, что в перспективе позволит получить определенные экологические и экономические преимущества. Исследовалась кинетика испарения подвешенных одиночных капель исследуемых топлив, а в качестве управляющих параметров задачи использовались начальный состав смеси и температура окружающей среды.

Для моделирования процесса испарения капель смесевое жидкое топливо, использовалось приближение «дискретных компонент» смеси, для каждой из которой можно записать уравнение массообмена вида (1), а так же уравнение теплообмена для капли в целом (2):

$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{dm_{tot}}{dt} \varepsilon_i = 2\pi R \rho Sh_i^* \varepsilon_i D_{i,g} \ln 1 + B_{\mu,i} \quad (1)$$

$$\frac{4}{3} \pi R^3 \rho c_p \frac{dT_d}{dt} = 4\pi R^2 h (T_\infty - T_s) - \dot{m}_{tot} L \quad (2)$$

Результатом численного решения системы $(i+1)$ уравнений (здесь i - число компонент смеси) являются зависимости текущих размера, массы, состава и температуры испаряющейся капли смеси от времени. Расчет динамики изменения квадрата диаметра и температуры капли проводился для эквимольной смеси этанола, пропанола и бутанола, а так же для двух других смесей этих топлив, таких как Е60% + В40% + Р20% и Е60% + Р40% + В20% по объёму. Полученные результаты представлены, на рис.1 и 2 для эквимольной смеси (Е+Р+В) при различных температурах окружающей среды.

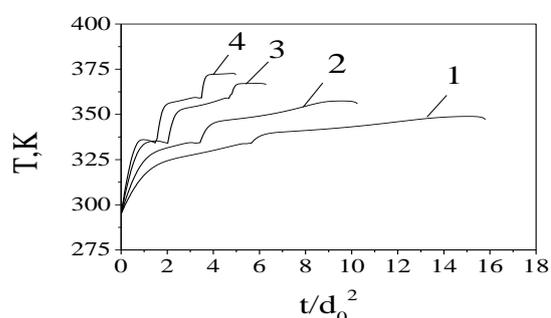
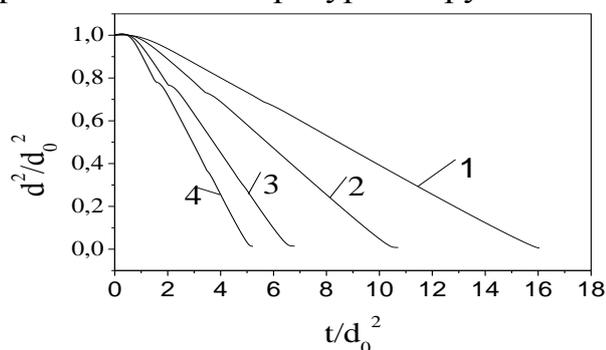


Рис.1 Кинетика испарения капли эквимольной смеси низших спиртов.

Рис.2 Изменение температуры испаряющейся капли эквимольной смеси низших спиртов.

Температура среды T_∞ : 1 – 440K , 2 – 500, 3 – 600K , 4 – 675K

Анализ полученных результатов позволил оценить степень влияния теплофизических свойств исследуемых топлив на процесс испарения топливной смеси.

ПРИМЕНЕНИЕ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ В ЗАДАЧАХ ДИФФУЗИИ

Мурич А.А.

Научный руководитель — д.ф.-м.н., доц. В.Я. Гоцульский

Актуальность. Сложные процессы установления равновесного состояния в водных растворах некоторых неэлектролитов, в частности спиртов, требуют объяснения. Особенности начального этапа выхода в равновесное состояния связаны с диффузионным рассасыванием неоднородностей в растворе, которые возникают как при механической, так и при ультразвуковой диспергации (перемешивании) исходных компонентов раствора. Ранее было показано, что такие пары как вода и глицерин при введении их в контакт в ячейке размером порядка 10 см образуют раствор с непрерывно изменяющейся концентрацией на протяжении месяца! При этом граница раздела областей, соответствующих начальным положениям исходных компонентов раствора остается четкой на протяжении всего временного интервала наблюдений.

Была поставлена задача моделирования процесса рассасывания микроскопической капли растворенного вещества методами клеточного автомата. При этом возможно ввести динамическое изменение коэффициентов диффузии, тем более, что существуют экспериментальные данные о таком эффекте. Первая задача — моделирование рассасывания одинокой капли в бесконечном объеме растворителя, в дальнейшем задача усложняется до рассасывания "объемной решетки" капель растворенного вещества в растворителе с возможностью варьирования таких параметров, как объем капли, объемная концентрация растворенного вещества в растворе и т. п.

Целью работы является: разработка программного обеспечения для реализации моделирования методом клеточного автомата диффузионных процессов установления равновесного состояния двухкомпонентного раствора после его приготовления гомогенизацией до микронных масштабов.

Для решения поставленной задачи были проделаны следующие работы:

1. Проведен обзор современных работ по использованию клеточных автоматов для моделирования физических процессов и в частности диффузионных процессов;
2. Сформулирован набор требований к разрабатываемому приложению;
3. Выбраны и изучены инструментальные средства и сторонние библиотеки;
4. Разработана архитектура приложения.

В результате работы был построен класс приложения CAPSA (CAPSA — Cellular Automata Physics Simulation Application — приложение моделирования физических процессов с использованием клеточных автоматов):

CAPSACellularAutomataLife — клеточный автомат, реализующий игру Джона Конвея "Жизнь" (Рис.1). Он создан для демонстрации работы приложения и тестирования базового кода, так как для "Жизни" существует множество описанных сценариев развития заданных конфигураций. Построенное приложение визуализирует работу клеточного автомата, а также в реальном времени строит график зависимости количества живых клеток от временного шага.

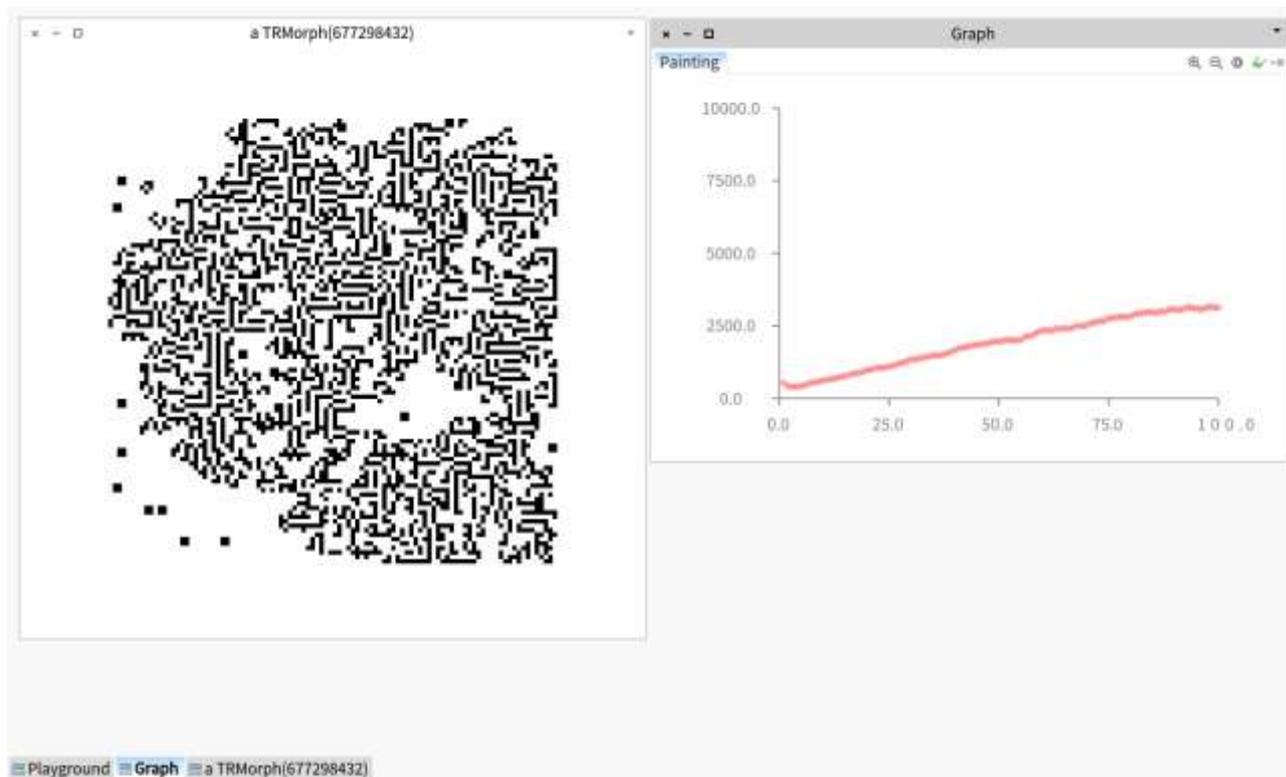


Рис.1. Результат работы построенного приложения

Результаты работы и выводы:

1. Проведен обзор современных работ по использованию клеточных автоматов для моделирования физических процессов и в частности диффузионных процессов;
2. Сформулирован набор требований к разрабатываемому приложению;
3. Выбраны и изучены инструментальные средства и сторонние библиотеки;
4. На примере игры «Жизнь» показано, что разрабатываемое приложение может быть применено для анализа -
до микронным масштабам.

Библиографический список:

- [1] Burks, Arthur (ed.), Essays on Cellular Automata, Univ. 111. Press (1970).
- [2] Wolfram, Stephen, "Statistical mechanics of cellular automata," Rev. Mod. Phys. 55 (1983), 601-644.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. С. 319.
- [4] Тоффоли Т., Марголюс Н. Машины клеточных автоматов. М.: Мир, 1991.

ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ГАЗОВЗВЕСЕЙ ЧАСТИЦ КАРБИДА БОРА

Еремия Т.И.

Научный руководитель – доктор физ.-мат. наук, проф. Шевчук В.Г.

Теплокинетические методы интенсификации воспламенения трудновоспламеняемых горючих основаны на соединении (сплавлении) исходного порошка с легковоспламеняющимися и быстрогорящими веществами. Это, в первую очередь, касается сплавов таких веществ, как Al и B , обладающих большой объемной калорийностью с активными элементами – магнием, литий, углерод и т. д. Закономерности и механизмы воспламенения двухкомпонентных соединений, в которых основной компонент окисляется по параболическому и паралинейному закону, а иницирующий – по линейному таковы, что увеличение процентного содержания иницирующего компонента всегда способствует снижению предела воспламенения. Это обусловлено как тепловым, так и кинетическим влиянием реакции окисления легковоспламеняющегося компонента, которое приводит к уменьшению скорости накопления защитной окиси B_2O_3 или Al_2O_3 .

С целью проверки этого положения были проведены экспериментальные исследования критических условий воспламенения аэрозвеси частиц карбида бора B_4C в зависимости от массовой концентрации горючего и проведено сопоставление критических температур воспламенения B_4C с таковыми для B и C . Опыты проводились по методике “мгновенного впрыска” (время формирования облака намного меньше времени его оседания и задержки воспламенения) исследуемого горючего в контрольный объем нагретого в электропечи воздуха. При заданной температуре масса порошка менялась и определяла область концентраций, в которой положительные и отрицательные результаты воспламенения перекрывались.

Результаты экспериментов приведены на Рис.1.

Температура воспламенения частиц карбида бора лежит между температурами воспламенения аэрозвеси равновеликих частиц бора и углерода в аналогичных условиях. Однако она остается близкой к бору, что свидетельствует о том, что ведущим механизмом (как и для бора) является кинетика диффузии кислорода через жидкую B_2O_3 пленку, покрывающую соединение. Небольшое иницирующее влияние углерода можно объяснить параллельным образованием оксидов углерода, слегка “разрыхляющим” сплошное защитное покрытие.

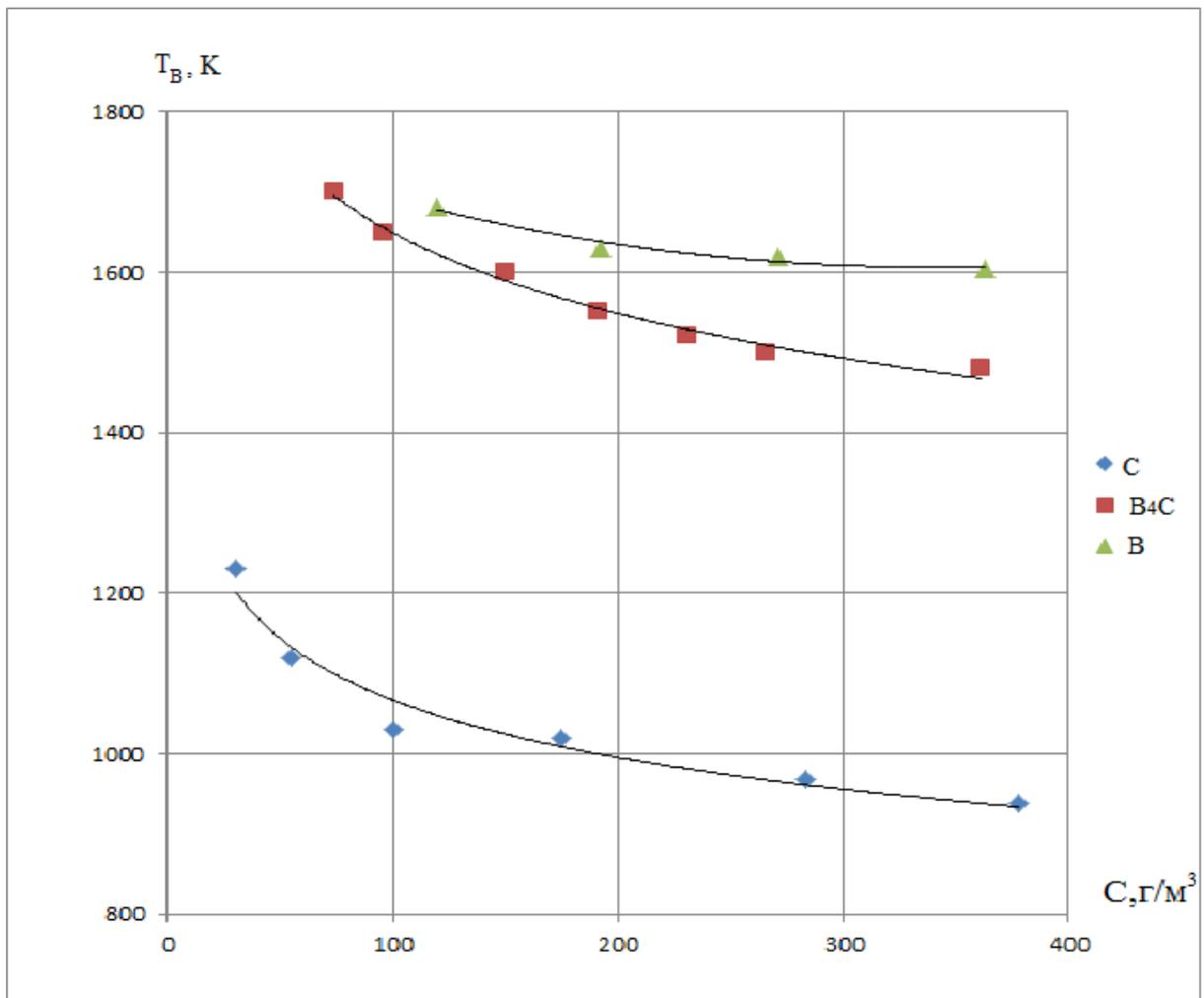


Рис.1. Зависимость температуры воспламенения аэровзвеси частиц бора ($\bar{d} = 6 \mu\text{м}$), карбида бора ($\bar{d} = 6,7 \mu\text{м}$) и углерода (AP-3, $\bar{d} = 0 \div 10 \mu\text{м}$) от массовой концентрации

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ (кафедра ФТТ и ТТЭ)

Структурные параметры граничных фаз гомологов немезогенов на твердых подложках.

Рагус Д.Д.

Научный руководитель - д. ф.-м. н. Б. А. Алтоиз

Прикладное значение представляет изучение эпитропно-жидкокристаллических ЭЖК слоев алканов (основных компонентов моторных масел), определяющих трибологические характеристики смазки в триадах трения [2]. Исследовался один из их гомологов – *n*-гексадекан. Его молекулы имеют вид (рис.1) «стержней» длиной $l \approx 21,9 \text{ \AA}$.



Рис. 1. Стюарт-Бриглевская модель (с учетом вандерваальсовых радиусов атомов) молекулы *n*-гексадекана

Методика. Установление температурной зависимости толщины $d_{0s}(T)$ ЭЖК слоя *n*-гексадекана на металлизированной поверхности и параметра ориентационного порядка $s(T)$ в нем проводилось методом примесного поглощения «гость-хозяин». «Гостем» служил судан красный ($\lambda_{\max} = 0,472 \text{ мкм}$) с высокой растворимостью и значительной экстинкцией. Стекла кюветы металлизировались напылением полупрозрачного слоя нихрома. Клиновидный зазор (с установленным профилем) рабочей кюветы заполнялся *n*-гексадеканом, и проводилось измерение зависимости $D = f(d)$ оптической плотности его прослойки от толщины.

Отклонение этой зависимости от линейной формы свидетельствует о гетерофазности прослойки [1]. Для гомеотропной ориентации молекул в пристенных ЭЖК слоях *n*-гексадекана эта зависимость имеет вид вогнутой ломаной [2], что позволяло аппроксимировать ее двумя линейными зависимостями так, чтобы выполнялся критерий минимума общей дисперсии. Одна из них в области малых d соответствует поглощению пристенного ЭЖК слоя, другая – *n*-гексадекану в «объеме».

Результаты и их обсуждение

Из таких $D(d, \Delta T)$ установлены температурные зависимости структурных параметров d_{0s} , ΔT и $q(\Delta T)$ ЭЖК слоя *n*-гексадекана. Одна из зависимостей $D(d)$, измеренная при температуре $\Delta T = 293.7 - 291.2 = 2.5 \text{ К}$, представлена на рис. 2.

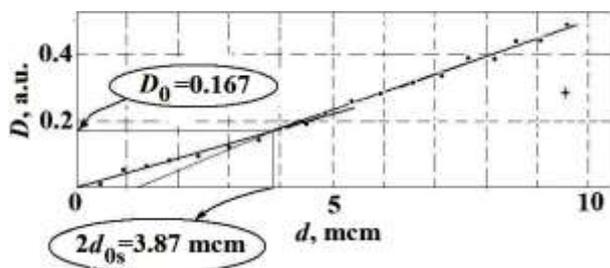


Рис.2. Толщинная зависимость оптической плотности D примесного поглощения прослойки *n*-гексадекана ($\Delta T = 2.5 \text{ К}$)

Из рис.2 следует, что при $\Delta T=2,5$ К равновесная толщина слоя ЭЖК составляет $d_{0s} = 3.87 / 2 \sim 1.9$ мкм, линейные коэффициенты примесного поглощения ЭЖК слоя и изотропного «объемного» препарата равны соответственно $\mu_s \sim 4.3 \cdot 10^{-2}$ мкм⁻¹ и $\mu_{iso} \sim 5.5 \cdot 10^{-2}$ мкм⁻¹. Эти значения коэффициентов поглощения света соответствуют величине параметра порядка примесных молекул в ЭЖК слое $q \sim 0.22$. Результаты определения характера изменения с температурой толщины d_{0s} ЭЖК слоя *n*-гексадекана представлены на рисунке 3.

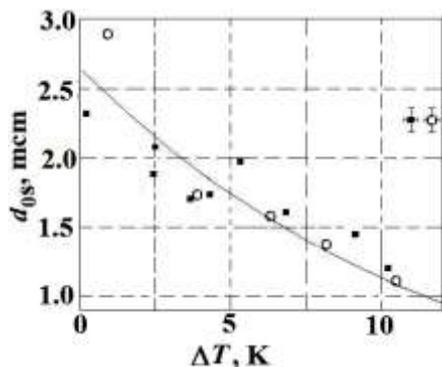


Рис. 3. Температурная зависимость равновесной толщины ЭЖК слоя *n*-гексадекана по данным оптических измерений. ■ – получены методом измерения примесного дихроизма, ○ – получены методом измерения ДЛП.

Результаты измерения температурной зависимости q ΔT представлены на рис.4 (с линией аппроксимирующей их экспоненциальной зависимости). Найденное значение ориентационного параметра порядка молекул «гостя» позволяет оценить параметр порядка ЭЖК упорядоченной матрицы *n*-гексадекана, в которой растворены молекулы примеси красного судана (концентрация раствора $C \sim 2.37$ весовых процента).

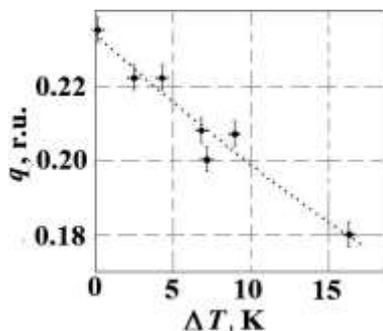


Рис. 4. Температурная зависимость равновесного значения ориентационного параметра порядка ЭЖК слоя *n*-гексадекана по данным измерений дихроизма

Выводы

Оптические измерения дихроизма прослоек *n*-гексадекана позволили установить характер температурной зависимости равновесной толщины его ЭЖК слоя и удовлетворительно коррелирует с «предельной» (при отсутствии течения) зависимостью d_{0s} ΔT , полученной в реологических исследованиях.

1. Алтоиз Б. А., Поповский Ю. М. Физика приповерхностных слоев жидкости. Одесса: Астропринт, 1996.
2. Кириян С.В., Алтоиз Б.А., Шатагина Е.А. Влияние жидкокристаллической присадки на структурные характеристики приповерхностных ориентационно-упорядоченных слоёв вазелинового масла//Инженерно-физический журнал. 2013. том 86, №2

РАДІАЦІЙНА ДЕГРАДАЦІЯ МЕЖІ ПОДІЛУ ДІЕЛЕКТРИК-НАПІВПРОВІДНИК

Ковалюк С. В.

Науковий керівник кандидат фіз.-мат. наук, доцент Солошенко В.І.

Планарні багатошарові системи кремнію - оксид, які є базовими в сучасній мікроелектроніці, мають високу чутливість до режимів отримання та наступних технологічних обробок, а також до умов функціонування готових приладів. В ході численних досліджень було встановлено можливість модифікації параметрів приладів сучасної електроніки завдяки використанню радіаційного опромінювання різної природи.

В роботі досліджується зміна електрофізичних характеристик SiO_2 та межі поділу $\text{Si} - \text{SiO}_2$ під впливом рентгенівського опромінювання. Досліджувались МДН структури $\text{Al} - \text{SiO}_2 - \text{Si}$, виготовлені на основі кремнію р-типу з концентрацією легуючих домішок $N=2.14 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Шар SiO_2 товщиною 1950 ангстрем створювався термічним окисленням поверхні кремнію в сухому кисні з добавкою хлорвміщуючої компоненти. Зразки опромінювались на рентгенівському апараті УРС - 55. Поглинена доза, оцінювалась за допомогою дозиметра ДРГЗ - 02, з відповідним послаблювачем. З урахуванням послаблення та розсіювання в повітрі рентгенівських квантів розраховувалась поглинена доза, яка для 20 хвилин опромінення складала $1.6 \cdot 10^4$ мрад.

Спектри поверхневих станів (ПС) досліджуваних структур визначали за допомогою низькочастотного (НЧ) та високочастотного (ВЧ) С-У-методів.

Опромінення приводить до зміщення ВЧ С-V-характеристики вздовж осі напруг , що свідчить про те , що в діелектрику накопичується об'ємний заряд. Утворення позитивного рухливого заряду у шарі SiO_2 підтверджується також наявністю гістерезису ВЧ С-V-характеристики. Однак величина рухливого позитивного заряду (утвореного після опромінення) порівняно невелика. Зміна нахилу ВЧ С-V - характеристики, тобто збільшення ємності МДН структури, вказує на збільшення поверхневого заряду на межі поділу $\text{Si} - \text{SiO}_2$; на НЧ С - V - зменшується область модуляції низькочастотної ємності . Причому, чим більша доза опромінення, тим слабше модулюється квазістатична крива. Це свідчить про суттєве зростання густини ПС.

З приведених даних випливає, що основний внесок у збільшення ємності МДН структур після опромінення дають поверхневі стани , локалізовані на межі поділу $\text{Si}-\text{SiO}_2$.

Зростання густини ПС в результаті дії іонізуючого випромінювання можна пояснити на основі таких міркувань .

Як відомо, для зменшення впливу дефектів на процеси переносу носіїв та деградацію приладів широко використовується їх термічна обробка в атмосфері водню . Останній, проникаючи у діоксид кремнію , насичу обірвані зв'язки , зменшуючи тим самим густину дефектних станів в забороненій зоні (зменшуючи , в тому числі, і густину поверхневих станів).

Можна припустити, що генеровані в результаті дії іонізуючого випромінювання високоенергетичні електрони можуть виривати атоми Н з обірваних зв'язків , збільшуючи там самим густину ПС. Обірвані зв'язки кремнію пов'язують з так званими $p_b \text{H} + \text{H} \rightarrow p_b + \text{H}_2$, що теж призводить до збільшення густини ПС.

Крім того , під дією іонізуючого випромінювання можливий розпад SiOH комплексів в окислі , в результаті якого виділяється водень , який дифундує в область межі поділу $\text{Si} - \text{SiO}_2$.

СЕКЦИЯ ТЕПЛОФИЗИКИ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

(кафедра теплофизики) ДИСПЕРСНЫЙ АНАЛИЗ АЭРОЗОЛЯ С ЖИДКОЙ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗОЙ

Заярная Т.И.

Научный руководитель: доц., к.ф.-м.н. Черненко А.С.

Качество распыливания жидкости имеет большое значение во многих областях техники: двигатели, топки, химические аппараты, медицина, сельское хозяйство и др. При этом используют различные физико-химические способы. Для определения дисперсного состава капель можно использовать экспериментальный подход, включающий аппаратную и методическую реализацию идеи измерения, или выбор или теоретическое обоснование функции распределения капель по соответствующему их свойству. В данной работе внимание уделялось следующим двум методикам: методу парафинового моделирования и методу исследования солевого остатка.

Метод парафинового моделирования. Вместо жидкости распыляют расплавленный парафин, свойства (плотность, вязкость, поверхностное натяжение) которого можно промоделировать в некоторых пределах, нагревая его до определенной температуры. Вылетающие частицы быстро охлаждаются, при этом влияние испарения минимально, поэтому все их можно уловить. Из-за своей сложности его повседневное применение ограничено, но может считаться эталонным.

Метод реализован в генераторе монодисперсного аэрозоля с вибрирующей иглой. Парафин расплавляется в небольшой ванне, куда помещается вибрирующая игла. Вылетающие монодисперсные частицы собираются на предметном стекле.

Метод исследования солевого остатка. Определяется размер остатка при распылении раствора NaCl в среду с относительной влажностью 50% с последующим испарением капель и формированием кристаллов соли. Далее расчет истинных размеров капель осуществляется через диаметры частиц сухого остатка, зная первоначальную концентрацию раствора.

Для этого был создан центробежный распылитель жидкости, основу которого составляет быстро вращающийся диск. Сверху в его центр подается через тонкую трубку регулируемый поток жидкости. Частицы улавливаются на стеклянные подложки, смазанные тонким слоем парафином и расположенные на разном расстоянии от распылителя. Дисперсный анализ капель проводился методом цифровой оптической микроскопии.

ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМОВ БЕСПЛАМЕННОГО ГОРЕНИЯ ГАЗОВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ С ПРИМЕСЯМИ ГОРЮЧИХ ГАЗОВ

Сикорский М. В. – студент 4 курса

Научный руководитель: проф. Калинин В.В.

Из распространенных ныне в промышленной практике твердых катализаторов окисления получили металлы платиновой группы и их сплавы. Они применяются в виде частиц и нитей для создания чувствительных элементов каталитических газоанализаторов, а также для исследования кинетики гетерогенно-каталитических реакций и беспламенного горения газозвушных смесей с примесями горючих газов (водород, аммиак, оксид углерода, диоксид серы и углеводороды) на частицах и нитях катализатора. Механизмы гистерезисных зависимостей температуры и скорости беспламенного горения от температуры газозвушного потока и концентрации горючего газа, явление самоподдерживающего горения при отключении нити катализатора от источника питания в настоящее время изучены недостаточно.

Знание механизмов взаимовлияния процессов теплообмена, адсорбции и кинетики экзотермических реакций газообразных реагентов на поверхности нити (частицы) катализатора необходимо для целенаправленного выбора режимных параметров, обеспечивающих необходимый температурный уровень и скорость беспламенного горения газозвушных смесей также скорость выхода целевого газообразного продукта [1, 2]. В частности эти исследования необходимы для разработки теплофизических основ каталитических газоанализаторов, первичный преобразователь которых, выполнен на основе нити (частицы) из металлов платиновой группы [1].

Методика поставленного эксперимента — сравнение характеристик воздуха с примесью горючего газа с обычным воздухом. Это предполагает жесткий контроль параметров, задающих состояние системы с газом, таких как сила тока, протекающего по проволочке, темп его изменения, концентрацию газа и т.п. Для сравнения данных требуется возможность запоминания как минимум двух результатов измерений (множество значений величин для случая инертного воздуха и воздуха с примесью) с целью выявления различий в поведении системы.

Экспериментальная установка. Экспериментальное исследование зависимости точек самовоспламенения и погасания от концентрации примеси горючего вещества в воздухе на тонкой платиновой нити проводилось с помощью измерения протекающего через проволочку тока и температуры и нити. Такие измерения физически объективны, но требуют, как и все температурные измерения, строго учета всех факторов, влияющих на тепловой процесс. Для этого была создана экспериментальная установка, включающая в себя: 1) экспериментальный стенд, 2) система для создания и подачи газо-воздушной смеси; 4) вспомогательное оборудование.

Экспериментальный стенд включает в себя: 1. лампу ПМТ-2 (платиновая проволока (диаметром 0,095мм и длиной 56 мм и хромель-копелевая термопара, соединенная теплопроводящей перемычкой с центральной частью платиновой нити); 2. Источник тока, с возможностью стабилизации силы тока, или напряжения.

Система для создания и подачи газо-воздушной смеси состоит из сообщающихся сосудов, трубок, расходомера, осушителя воздуха, и сосуда для горючего вещества с нагревателем.

Вспомогательное оборудование состоит из лабораторного амперметра, вольтметра, реостата, камеры, и кабелей.

Методика измерений разрабатывалась, исходя из следующих требований:

1. изменение температуры платиновой нити проводится в результате ее нагрева постоянным током медленно по строго заданному закону;

ОСОБЕННОСТИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ГАЗОВЗВЕСЕЙ УГЛЕРОДНЫХ ЧАСТИЦ

Лисянская М.В

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук. С.Г. Орловская

Целью данной работы являлось изучение характеристик высокотемпературного теплообмена газовзвесей углеродных частиц – двухфракционных и монодисперсных для определения рациональных режимов их сжигания.

Для расчетов выбрана двухфракционная газовзвесь с диаметрами частиц: мелкой фракции - $d_{b1}=50\text{мкм}$, крупной фракции - $d_{b2}=100\text{мкм}$ и равными массовыми концентрациями фракций. Определялись характеристики: период индукции, время и температура горения частиц, критические температуры и диаметры, определяющие воспламенение и потухание.

Был проведен сравнительный анализ (таблица 1) характеристик высокотемпературного теплообмена двухфракционных и монофракционных газовзвесей мелких и крупных частиц с той же массовой концентрацией, что и двухфракционная система ($C_{mb}=0,0244\text{ кг/м}^3$). В условиях двухфракционной газовзвеси воспламенение крупных частиц происходит раньше, чем в условиях монозвеси, и эффект тем значительнее, чем больше диаметр частиц. Уменьшение периода индукции частиц крупной фракции в двухфракционных системах по сравнению с периодом индукции монозвеси частиц этого же размера происходит благодаря повышению температуры газа в результате выгорания мелкой фракции.

Время горения (t_{bur}) частиц в условиях двухфракционной системы для мелкой фракции существенно уменьшается, а для крупной фракции несколько увеличивается по сравнению со временем горения частиц этих же размеров в виде монозвесей с той же массовой концентрацией. Значительное уменьшение времени горения мелких частиц в условиях двухфракционной системы объясняется тем, что в химической реакции на начальном этапе горения задействована только половина топлива (мелкая фракция), температура частиц крупной фракции еще недостаточная для протекания химических реакций. Поэтому окислителя на этой стадии больше, чем в условиях монозвеси, что приводит к увеличению скорости горения, и, как следствие, уменьшению времени горения. Потухание мелких частиц в двухфракционной системе имеет четко выраженный характер, а в монодисперсных газовзвесах является вырожденным, в связи с повышением температуры газа и уменьшением разницы температур частиц и газа.

Таблица 1.

Характеристики	Монодисперсная газовзвесь		Двухфракционная газовзвесь	
	50	100	50-100	
$d_b, \text{мкм}$	50	100	50-100	
$t_{ind}, \text{с}$	0,026	0,054	0,025	0,045
$t_{bur}, \text{мс}$	0,075	0,278	0,047	0,308
$d_E, \text{мкм}$	6,6	8,9	13,3	8,9
$T_{max}, \text{К}$	2473	2356	2509	2386

Анализ таблицы 1 показывает, что максимальная температура горения (T_{max}) двухфракционной газовзвеси выше, чем монофракционной той же массовой концентрации, как для крупных, так и мелких частиц. Диаметры частиц при потухании (d_E) практически одинаковы, за исключением диаметра потухания монозвеси мелких частиц.

Таким образом, доказано, что уменьшение периода индукции частиц крупной фракции в случае двухфракционной газовзвеси относительно периода индукции монозвеси частиц этого же размера происходит благодаря повышению температуры газа в результате выгорания мелкой фракции. Существенное увеличение времени горения мелких частиц в условиях монодисперсных газовзвесей объясняется уменьшением концентрации окислителя на стадии воспламенения частиц.

ОСОБЕННОСТИ ЗАЖИГАНИЯ И ГОРЕНИЯ УГОЛЬНОЙ ПЫЛИ В ФУРМЕННОМ ОЧАГЕ

Кичук С. Н., Заярная Т.И.

Научный руководитель: доц., к.ф.-м.н. Черненко А.С.

Пылеугольное топливо (ПУТ) получают путем размола до мелкодисперсного состояния ($r_{90} < 70$ мкм) и перед подачей в фурменный очаг его подогревают вместе с несущим инертным газом.

При размоле угля значительная часть внешней золы и частично внутренней, которая имеет вид зерен различных размеров, отделяется от угля. Полученные частицы золы, масса которых близка к исходной доле золы в угле, в фурменном очаге не реагируют, но нагреваются.

Выход летучих и дальнейшее их горение для мелких частиц угля происходит одновременно с прогревом коксовой частицы. Поэтому использование эмпирических формул Бабия [1] для расчета отдельно длительности прогрева, горения летучих и горения коксового остатка в данном случае неприменимы. Предварительный подогрев угольной пыли до 1200 – 1500 К способствует активному выходу летучих их угольной пыли. Таким образом, в фурменную зону поступает мелкая коксовая пыль с механической примесью зольных частиц и воздух, обогащенного кислородом и летучими газами.

Для реализации устойчивого горения мелкой угольной пыли в фурменном очаге необходимо определить условия их зажигания, а также исследовать характеристики высокотемпературного теплообмена и горения совокупности угольных частиц при различных массовых концентрациях частиц.

Так показано, что возможно осуществить зажигание угольных частиц в нагретой азотно-кислородной смеси. При этом времена индукции горения частиц сравнительно малы. Это позволяет сэкономить на нагреве большого количества газа. В зависимости от массовой концентрации пыли в исходной смеси можно регулировать полноту сгорания угольной пыли и газовый состав на заданном расстоянии от места смешения пыли с обогащенным кислородом нагретым воздухом. Так, получение целевого продукта для доменной плавки (угарного газа) в значительном количестве уменьшает полноту сгорания пыли. Гомогенная реакция окисления угарного газа является важным фактором, влияющим на процесс горения частицы. Так при малых концентрациях пыли эта реакция дополнительно способствует более полному выгоранию частиц, при высоких – к выгоранию кислорода и началу восстановления углерода частиц.

СЕКЦИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ (кафедра теоретической физики и астрономии)

ВПЛИВ МІКРОСТРУКТУРИ МАТРИЦІ НА ЕЛЕКТРИЧНУ ПРОВІДНІСТЬ КОМПОЗИТНИХ ПОЛІМЕРНИХ ЕЛЕКТРОЛІТІВ

Бабій К. А.

Науковий керівник – канд. ф.-м. наук Сушко М. Я.

Мікроструктура речовини відіграє ключову роль у формуванні електричної провідності гетерогенних систем. Правильне врахування її особливостей має важливе значення для проектування і створення штучних матеріалів із заданими електричними характеристиками, зокрема полімерних композитів – систем, отримуваних диспергуванням нано- або мікророзмірних (10нм – 10μм) частинок у полімерну матрицю [1]. Актуальним питанням є розробка нових теоретичних підходів для аналізу ефективних електричних провідностей гетерогенних систем, що урахували б поляризаційні і кореляційні ефекти вищих порядків.

На базі методу компактних груп неоднорідностей [2] запропоновано нову мезоскопічну модель для визначення ефективної квазістатичної електричної провідності твердих дисперсних систем зі складною мікроструктурою. Композит моделюється як дисперсна система твердих частинок, оточених проникними неоднорідними шарами аморфізованого полімеру та диспергованих у квазікристалічну полімерну матрицю. Припускаючи, що локальне значення комплексної діелектричної проникності визначається відстанню до центра найближчої частинки, для ефективної провідності отримано замкнене рівняння, яке пов'язує її з геометричними та електричними параметрами компонентів моделі:

$$(1 - \varphi_M) \frac{\sigma_0 - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_0} + c \frac{\sigma_1 - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_1} + \sum_{j=2}^M (\varphi_j - \varphi_{j-1}) \frac{\sigma_j - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_j} = 0.$$

Тут індекси 0, 1, j при σ позначають провідності відповідно матриці, частинок і M – 1 підшарів; c – об'ємна концентрація частинок; φ_j – об'ємна концентрація частинок разом з прилеглими j аморфними шарами.

На основі запропонованої моделі проаналізовано вплив геометричних і електричних параметрів міжфазного шару на характер концентраційної залежності ефективної провідності, швидкість її зростання та спадання з концентрацією частинок, положення та висоту максимуму в цій залежності. Окремо досліджено вплив на неї неоднорідного розподілу провідності у міжфазному шарі. Теоретичні результати порівняно з експериментальними даними для полімерних композитів θ -Al₂O₃-(PEO)₁₀NaI та SiO₂-(PEO)₁₀NaI і продемонстровано застосовність моделі для опису ефективної провідності реальних полімерних композитів.

Список бібліографічних джерел:

- [1] С. Sequeira, D. Santos. Polymer electrolytes. Fundamentals and applications, Woodhead Publishing, Oxford, 2010.
- [2] М. Ya. Sushko, A. K. Semenov, Condens. Matter Phys. **16** (2013) 13401 (10p).

ЗЕНО-ПАРАМЕТРИ ПОТЕНЦІАЛУ БЕКИНГХЕМА ТА КРИТИЧНІ ТОЧКИ МЕТАЛІВ

Катц Андрій

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, вул. Дворянська, 2, Одеса,
Одеська область, 65000

У роботі розвивається підхід Глобального Ізоморфізму, що був запропонований у роботах [1,2] для розрахунку критичних точок речовин, взаємодія між частинками яких може бути описана на основі потенціалу Бекингхема:

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{\varepsilon}{1 - 6/\alpha} \left[\frac{6}{\alpha} \exp\left(\alpha \left[1 - \frac{r}{r_m}\right]\right) - c \left(\frac{r_m}{r}\right)^6 \right], & r \geq r_{max} \\ \infty, & r \leq r_{max} \end{cases} \quad (1)$$

Цей випадок представляє інтерес в рамках застосування узагальненого принципу відповідних станів для опису таких різних систем як благородні гази та рідкі метали. Критичні точки останніх (особливо легких металів типу літію або калію) як правило недосяжні або фіксуються із недостатньою точністю, у зв'язку із тим, що лежать у високотемпературній області. У роботі пропонується уніфікація даних за критичними точками подібних систем рамках узагальненого принципу на основі співвідношень Глобального Ізоморфізму. Показано, що на відміну від відомих підходів з побудови Зено-лінії, що визначається як множина станів з одиничним фактором стисливості

$$Z = \frac{p}{nT} \Rightarrow \frac{T}{T_b} + \frac{n}{n_b} = 1. \quad (2)$$

У запропоновану підході виконується універсальне співвідношення між параметрами Зено-елемента та критичними точками

$$T_c = \frac{T_*}{3}, \quad n_c = \frac{n_*}{3}. \quad (3)$$

Останні є безпосереднім наслідком Глобального Ізоморфізму[1,2]. Параметри Зено-елементу визначаються другим і третім віріальними коефіцієнтами і відрізняються від параметрів Зено-лінії. Згадані віріальні коефіцієнти були розраховані нами для потенціалу Бекингхема. Отримані параметри порівнюються з відомими чисельними експериментами [3] по визначенню критичних точок потенціалу (1). Ми сподіваємось, що отримані результати дозволять нам оцінити критичні точки лужних металів.

[1] V. L. Kulinskii, The Journal of Chemical Physics, 133, 034121 (2010)

[2] V. L. Kulinskii, J. Phys. Chem. B 114, 2852 (2010)

[3] J. R. Errington and A. Z. Panagiotopoulos, J. Chem. Phys., 109, 1093 (1998)

АКСІАЛЬНО-СИММЕТРИЧНА ТЕЧІЯ САМОРУШІЙНОЇ РІДИНИ

Кушнерик Павло

[Одеський національний університет імені І.І. Мечникова](#), вул. Дворянська, 2, Одеса,
Одеська область, 65000

Головна мета роботи – моделювання динаміки системи саморушійних частинок в обмеженому об'ємі, які взаємодіють згідно з правилом Вічека [1]. Виконано комп'ютерне моделювання для вивчення профілей густини та поля швидкостей в круговій системі з відбиваючими стінками (аксіально-симметрична течія). Результати комп'ютерного моделювання порівнюються з рішенням гідродинамічного рівняння для ідеальної рідини Ейлера-Вічека.

Для вивчення поведінки таких систем пропонується ряд моделей, які базуються на різних механізмах передачі інформації частинці від її оточення [2]. В роботі [3] в рамках методу функціоналу густини для таких моделей було отримано гідродинамічне рівняння для ідеальної рідини само рушійних частинок типу Ейлера:

$$\frac{du}{dt} = -\frac{\nabla p_0}{\rho} + p_0 u \quad (1)$$
$$\text{де, } p_0 = \frac{\rho}{2(1 - u^2)}$$

В даній роботі знаходиться нестационарний розв'язок рівняння (1) в аксіальній геометрії (коловій області). Асимптотичний розв'язок рівняння (1) має вигляд:

$$u_\varphi(r) = \frac{C}{1 - r^2} \quad (3)$$

де C- нормуючий множник



На рисунку зображено порівняння аналітичного розв'язку з результатами моделювання багаточастинкової динаміки.

[1] Vicsek T. et al. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles //Physical review letters. – 1995. – Т. 75. – №. 6. – С. 1226.

[2] Parrish J. K., Hamner W. M. Animal groups in three dimensions: how species aggregate. – Cambridge University Press, 1997.

[3] //Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2014. – Т. 415. – С. 493-502.

Рух речовини гейзерів Енцелада

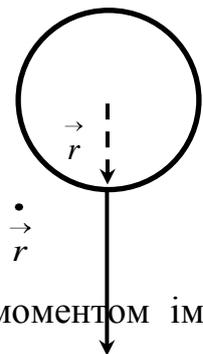
Костюк Вадим Миколайович

Науковий керівник – Базей Олександр Анатолійович

З 2004 року в системі Сатурну працює апарат «Кассіні». Ним було виявлено велику кількість тепла на супутнику Енцеладі, яке суттєво перевищує значення, що випливають з умови теплової рівноваги сонячного опромінення.

Енцелад - це геологічно активний супутник: одне з трьох небесних тіл у зовнішній Сонячній системі (разом із супутником Юпітера Іо і супутником Нептуна Тритоном), на якому спостерігалися активні виверження речовини в простір (1). Аналіз викидів вказує на те, що вони вибиваються з підповерхневого рідкого водяного океану в південній полярній області супутника (2).

Ціллю роботи є динамічне дослідження руху речовини гейзерів Енцеладу, яка є основним джерелом Е кільця Сатурну, обчислення приливного прискорення та порівняння з приливними прискореннями інших фізично схожих супутників планет-гігантів. Було визначено характерні траєкторії частинок, що вивергаються з гейзерів Енцеладу в різних напрямках. Рух речовини повністю визначається початковим вектором стану $(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ та масою Енцеладу.



Траєкторія руху визначається механічною енергією та моментом імпульсу частинки відносно Енцеладу. Якщо момент імпульсу $\vec{h} = \vec{r} \times \dot{\vec{r}}$ дорівнює нулю ($\vec{r} \parallel \dot{\vec{r}}$), то траєкторія руху – пряма, що проходить через початок системи відліку.

За визначенням орбітальний параметр пов'язаний з моментом імпульсу $p = \frac{h^2}{\mu}$, де $\mu = Gm_{\text{Енц}}$, і великою піввіссю (a) конічного перерізу $p = a(1 - e^2)$. Якщо $h = 0$, то $p = 0$, а значить при русі по прямій ексцентриситет $e = 1$ при будь-яких початкових

положеннях і швидкостях. При цьому орбіта не є парабола. Це вироджений випадок. Згідно цим даним написана програма, яка, маючи початкові координати та швидкість, вираховує їх через задані проміжки часу спочатку в енцеладцентричній, а потім в сатурноцентричній системі координат. Моделювання руху виверженої речовини здійснювалось методом сфер дії. Сфера дії це – об'єм простору, який оточує планету, в межах якого частинка рухається по планетоцентричній орбіті, а за її межами частинка рухається по міжпланетній геліоцентричній орбіті (3). Радіус сфери дії Енцелада відносно Сатурна - 488 км. Радіус сфери дії Сатурна відносно Сонця - 56800000 км.

В результаті вивержень з гейзерів Енцеладу, після подолання сфери дії супутника, частинки потряпляють в сферу дії Сатурна та формують E кільце.

Список літератури:

1. Rothery, David A. (1999). *Satellites of the Outer Planets: Worlds in their own right.* Oxford University Press.
2. Numerically modelling tidal dissipation with bottom drag in the oceans of Titan and Enceladus//Hay, Hamish C. F. C.; Matsuyama, Isamu
3. Рух по орбітам – А. Рой, 1981, 544 ст.
4. Небесна механіка – У. М. Смарт.