

Воспользуемся известной формулой  $D_p = \lambda / (2\pi k)$ , где  $k$  – комплексная часть показателя преломления. Значения действительной  $n$  и комплексной  $k$  частей показателя преломления для  $Z$ -среза кристалла были взяты из литературы [3].

Согласно расчетам, коротковолновое излучение диапазона 190..260 нм проникает в кристалл ниобата лития на глубину десятки нанометров по уровню  $1/e$ . Следовательно, метод спектроскопии отражения применим для кристаллов толщиной десятки – сотни микрометров. В заключение следует отметить простоту и надежность рассмотренного метода определения знака полярной поверхности по спектру (интенсивности) отражения в ультрафиолетовом диапазоне. Для измерения подходит практически любой стабилизированный источник излучения с длиной волны  $\lambda \leq 260$  нм. Метод является качественным и не предъявляет особых требований к ширине спектра и поляризации излучения источника.

Список использованных источников

1. Кузьминов, Ю.С. Электрооптический и нелинейно-оптический кристалл ниобата лития [Текст]/ Ю.С. Кузьминов. – М.: Наука, 1987. – 264с.
2. Сидоров, Н.В. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны [Текст]/ Н.В. Сидоров, Т.Р. Волк, Б.Н. Маврин. – М.: Наука, 2003. – 255 с.
3. Palik, E.D. Handbook of Optical Constants of Solids/ E.D. Palik. – Maryland: Academic Press, 1997. – 3224 p.

УДК 538.93

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МИКРО И НАНОПОРАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

А. Н. Агафонов, А.В. Еремин

г. Самара, «Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королёва»

Задача комплексного моделирования процессов переноса на микро- и мезоуровнях с учетом адсорбционных явлений является актуальной для таких направлений, как микро- и наносенсорика, катализ и т.д. Использование традиционных (макроскопических) подходов к моделированию физико-химических процессов, в микро- и мезосистемах в большинстве случаев не позволяет получить удовлетворительных результатов, в связи с чем возникает необходимость применения имитационных методов, в частности молекулярной динамики (МД) [1]. Одной из актуальных проблем является проблема моделирования физико-химических процессов на границе раздела газ/твердое тело, в

частности, теплообмена между фазами на молекулярном уровне. Т.к. данный процесс участвует во многих физико-химических взаимодействиях, исключение его из рассмотрения дает существенное снижение точности полученных данных и границ применимости метода в целом.

В рамках данной работы на базе метода классической молекулярной динамики разработана модель массопереноса в газовой фазе с учетом влияния физической адсорбции.

Для интегрирования уравнений движения частиц применена схема Верле в скоростной форме. Для учета теплового взаимодействия граница твердого тела представлена в виде набора независимых осцилляторов, совершающих автоколебания.

Разработано программное обеспечение, реализующее предложенную модель с решением систем уравнений на GPU с использованием технологии CUDA. Данная технология позволяет за реальные промежутки времени (порядка нескольких часов) проследить кинетику системы состоящей из  $\sim 10^4$  частиц на интервале времени  $\sim 10^{-7} \dots 10^{-6}$  секунды.

Проведены численные эксперименты, направленные на проверку адекватности предложенной модели. Для модельных случаев построены кинетические кривые адсорбции, изотермы адсорбции (Ленгмюра, некоторые типы изотермы БЭТ). Полученные зависимости на качественном уровне согласуются с теоретическими.

На следующих этапах работы планируется расчет значений параметров, необходимых для моделирования конкретных веществ, что позволит провести численное сравнение результатов моделирования с литературными данными.

Список использованных источников

1. Товбин, Ю.К. Метод молекулярной динамики в физической химии [текст] / Под ред. Ю.К. Товбина // М.: Наука, 1996. – 334 с.
2. Frenkel, D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications [текст] / Frenkel D., Smit B. // San Diego, Academic Press, 2002 - p. 638

УДК 621.373.826

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СХЕМЫ СТАБИЛИЗАЦИИ ОПТИЧЕСКОЙ МОЩНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ЛАЗЕРА ДЛЯ ПРИБОРОВ БИСПЕКТРОФОТОМЕТРИИ**

М.С. Василькин, П.И. Бахтинов

г. Самара, «Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королёва»

При разработке многоканального прибора для неинвазивного определения гемоглобина крови методом лазерной спектрофотометрии