

4. Павельев, А. В. Вычисление спектра резонансной флуоресценции труктурной квантовой системы в подходе стохастического уравнения Шредингера. - Текст : электронный / А. В. Павельев, В. В. Семин // Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2021) – С. 013482

5. Costa-Filho J. I. et al. Enabling quantum non-Markovian dynamics by injection of classical colored noise //Physical Review A. – 2017. – Т. 95. – №. 5. – С. 052126.

6. Chen Z. et al. A survey on terahertz communications //China Communications. – 2019. – Т. 16. – №. 2. – С. 1-35.

7. Kleine-Ostmann T., Nagatsuma T. A review on terahertz communications research //Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. – 2011. – Т. 32. – С. 143-171.

8. Niu Z. et al. The research on 220GHz multicarrier high-speed communication system //China Communications. – 2020. – Т. 17. – №. 3. – С. 131-139.

9. Han C. et al. Terahertz communications (TeraCom): Challenges and impact on 6G wireless systems //arXiv preprint arXiv:1912.06040. – 2019.

10. Rikkinen K. et al. THz radio communication: Link budget analysis toward 6G //IEEE Communications Magazine. – 2020. – Т. 58. – №. 11. – С. 22-27.

11. Под ред. Соифера В. А. Дифракционная компьютерная оптика. – 2007. Павельев Андрей Владимирович, аспирант гр. А402, 44dragon44@rambler.ru

УДК 544.272

МЕТОДЫ ЗАДАНИЯ НАНОСТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА В МОДЕЛЯХ НА БАЗЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Е.А. Ганеева

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

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, потенциал Леннарда-Джонса, взаимодействие газ-твёрдое тело.

Современные технологии и материалы все чаще содержат наноструктуры, которые могут существенно влиять на их свойства и функциональность. Для более точного моделирования таких материалов необходимо использовать методы, позволяющие задавать наноструктуры поверхности твёрдого тела [1]. При этом, создание математической модели поверхности, учитывающую ее нано- и микроструктуру представляет собой достаточно сложную задачу, что связано существенной разницей в размере структур, поведение которых нужно учитывать (единичные вакансии-нанопоры-микропоры). Методы описания поверхности, базирующиеся на приближении сплошной среды, позволяют учесть реальное строение поверхности только введением поправки в интегральные коэффициенты, описывающие систему, например, энергию активации физико-химических

процессов на поверхности. Однако введение таких коэффициентов позволяет учесть изменение только средних параметров системы, не позволяя учесть, например, пространственное распределение частиц по поверхности, распределение времен нахождения в адсорбированном состоянии и влияние на эти параметры локальных «ловушек» на поверхности твердого тела. Такие задачи могут быть решены с помощью имитационных методов, моделирующих поведение отдельных частиц, таких как метод вероятностного клеточного автомата (ВКА), метод Монте-Карло (МК), метод молекулярной динамики (МД) [2-4]. Данная работа посвящена разработке способов задания поверхности с учетом локальных атомарных конфигураций для моделей, базирующихся на методе классической молекулярной динамики.

Одной из основных проблем при задании поверхности является проблема энергообмена между адсорбированной частицей и поверхностью твердого тела. При использовании методов ВКА и МК такой энергообмен учитывается только в статистическом смысле, при этом выявление точных значений вероятностей, которые его определяют, является весьма сложной задачей.

В рамках метода МД задание поверхности также является достаточно сложной задачей, и может быть решено в рамках нескольких подходов:

- «Жесткая» поверхность, использование стохастических подходов к энергообмену, аналогично ВКА или МК;
- «Жесткая» поверхность, состоящая из частиц, занимающих строго определенные позиции;
- «Мягкая» поверхность, состоящая из частиц, взаимодействующих между собой потенциальным образом;
- Комбинированные методы, несколько верхних слоев частиц подвижны, а нижние слои имеют фиксированные позиции;

«Жесткие» варианты реализации поверхности не требовательны к вычислительным ресурсам, однако, имеют проблемы, аналогичные методам ВКА и МК. Реализация поверхности только из подвижных частиц требует очень больших вычислительных ресурсов и используется достаточно редко. Наиболее часто используется комбинированный вариант задания поверхности, когда верхние слои частиц подвижны, а нижние фиксированы и термостабилизированы, при этом взаимодействие между частицами определяется их потенциальным взаимодействием, при этом чистый потенциал Леннарда-Джонса практически не используется, так как не обеспечивает устойчивость поверхности [5-6].

В данной работе на базе комбинированного подхода были построены модели поверхности платины (Pt), проведены численные эксперименты по определению времен нахождения частиц в адсорбированном состоянии для различных вариантов задания поверхности, проведена оценка применимости рассмотренных методов задания поверхности.

Список использованных источников

1. Frenkel D., Understanding molecular simulation: from algorithms to applications / Frenkel D., Smit B. // Academic Press. - 2018.
2. Allen M.P., Computer simulation of liquids / Allen M.P., Tildesley D.J. // Oxford University Press. - 2017.
3. Kresse G., Ab initio molecular dynamics for liquid metals. / Kresse G., Hafner J. // Physical Review B. – 1993. - vol. 47. - no. 1. - P. 558-561.
4. Подрыга В.О., Молекулярно-динамический расчет макропараметров газа в потоке и на границе [Текст] / Подрыга В.О., Поляков С.В. // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. - № 80. - 26 с.
5. Kammara K. K., Development of empirical relationships for surface accommodation coefficients through investigation of nano poiseuille flows using molecular dynamics method / Kammara K. K., Kumar R. // Springer-Verlag. - 2020.
6. Nejad S. M., The Influence of Gas–Wall and Gas–Gas Interactions on the Accommodation Coefficients for Rarefied Gases: A Molecular Dynamics Study / Nejad S. M., Nedeia S., Frijns A., Smeulders D. // Micromachines. - 2020.

Научный руководитель: А.Н. Агафонов, к.т.н., доцент, каф. наноинженерии.
Ганеева Екатерина Алексеевна, студент гр. 6282-030401D, ganeeva170@gmail.com

УДК 681.7.063, 681.7.068, 53.096, 535.31, 535.39

ОПТОВОЛОКОННЫЙ СЕНСОР ТЕМПЕРАТУРЫ НА БРЭГГОВСКИХ РЕШЕТКАХ БЕЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ОПТИЧЕСКОГО АНАЛИЗАТОРА СПЕКТРА

Е.А. Пархоменко, А.М. Герасимов, С.А. Ассельборн, Д.Г. Пихуля,
Д.С. Исаков, Ю.В. Микляев
ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск

Ключевые слова: оптическое волокно, волоконная брэгговская решетка, температурный сенсор.

В настоящее время сенсорные системы на волоконных брэгговских решетках (ВБР) охватывают все больше областей измерительной техники [1]. Высокая скорость, компактность, устойчивость к электромагнитным помехам и радиационному фону [2, 3], химическая и механическая стойкость оптических волокон (ОВ) [4] делает их незаменимым элементом измерительных систем различной сложности.

Предлагаемый метод основан на выборе в качестве источника света монохроматического лазерного пучка, для которого при заданном периоде ВБР Λ условие Брэгга ($k \cdot \lambda_{\text{рез.}} = 2 \cdot \Lambda \cdot n$) будет выполняться только под определенным углом к оси ОВ, возбуждая меридиональные и сагиттальные моды. При обратном распространении отраженного излучения на выходе из ОВ будет наблюдаться кольцеобразная спекл-картина, расходимость (или радиус на определенном расстоянии) которой будет зависеть от параметров