

ISSN 0021–3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ

ФИЗИКА

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

ФИЗИКА МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

6·2025

**ИЗДАНИЕ
ТОМСКОГО ГОСУНИВЕРСИТЕТА**

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ISSN 0021–3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ ФИЗИКА

IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

Том 68

Июнь, 2025

№ 6 (811)

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
Основан в 1957 г.

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ
ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ
ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА
ФИЗИКА МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ
ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ
КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОНИКА
ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

Свидетельство о регистрации
ПИ № ФС77-84127 от 28 ноября 2022 г.
выдано Федеральной службой по надзору
в сфере связи, информационных технологий
и массовых коммуникаций

12+

Журнал входит в перечень рецензируемых научных журналов,
включенных в список ВАК, для публикации основных результатов
кандидатских и докторских диссертаций

Учредитель:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Томский государственный университет»

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Шеремет М.А., проф. (гл. редактор), Томск, Россия
Козырев А.В., проф. (зам. гл. редактора), Томск, Россия
Пермякова Л.В. (отв. секретарь), Томск, Россия
Алексеев С.В., акад. РАН, Новосибирск, Россия
Асеев А.Л., акад. РАН, Новосибирск, Россия
Борисов А.В., проф., Москва, Россия
Вараксин А.Ю., чл.-корр. РАН, Москва, Россия
Ворожцов А.Б., проф., Томск, Россия
Войцеховский А.В., проф., Томск, Россия
Гитман Д.М., проф., São Paulo, Бразилия
Демин В.А., проф., Пермь, Россия
Джафаров Р.Г., д.ф.-м.н., Баку, Азербайджан
Дитенберг И.А., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Ивонин И.В., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Кистенев Ю.В., проф., Томск, Россия
Ковалевская Т.А., проф., Томск, Россия
Колобов Ю.Р., проф., Белгород, Россия
Коротаев А.Д., проф., Томск, Россия
Майер Г.В., проф., Томск, Россия
Манка Оронцо, проф., Неаполь, Италия
Месяц Г.А., акад. РАН, Москва, Россия
Неклюдов И.М., акад. НАН Украины, Харьков
Озтоп Хакан, проф., Элязыг, Турция
Ратахин Н.А., акад. РАН, Томск, Россия
Сагхир Зиад, проф., Торонто, Канада
Саранин А.А., чл.-корр. РАН, Владивосток, Россия
Суржигов А.П., проф., Томск, Россия
Суханов Д.Я., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Тао Вен-Куан, академик Китайской академии наук, Сиань, Китай
Углов В.В., проф., Минск, Республика Беларусь
Ушаков В.Я., проф., Томск, Россия
Чайковская О.Н., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Черепанов В.Н., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Чумляков Ю.И., проф., Томск, Россия
Шаповалов А.В., проф., Томск, Россия
Шипилов С.Э., д.ф.-м.н., Томск, Россия

EDITORIAL BOARD

Sheremet M.A. (Editor-in-Chief), Professor, Tomsk, Russia
Kozyrev A.V. (Deputy Editor-in-Chief), Professor, Tomsk, Russia
Permyakova L.V. (Executive Editor), Tomsk, Russia
Alekseenko S.V., Academician RAS, Novosibirsk, Russia
Aseev A.L., Academician RAS, Novosibirsk, Russia
Borisov A.V., Professor, Moscow, Russia
Varaksin A.Y., Corr. Member RAS, Moscow, Russia
Vorozhtsov A.B., Professor, Tomsk, Russia
Voitsekhovskii A.V., Professor, Tomsk, Russia
Gitman D.M., Professor, São Paulo, Brazil
Demin V.A., Professor, Perm, Russia
Jafarov R.G., Professor, Baku, Republic of Azerbaijan
Ditenberg I.A., Professor, Tomsk, Russia
Ivonin I.V., Professor, Tomsk, Russia
Kistenev Y.V., Professor, Tomsk, Russia
Kovalevskaya T.A., Professor, Tomsk, Russia
Kolobov Y.R., Professor, Belgorod, Russia
Korotaev A.D., Professor, Tomsk, Russia
Mayer G.V., Professor, Tomsk, Russia
Manca Oronzio, Professor, Naples, Italy
Mesyats G.A., Academician RAS, Moscow, Russia
Neklyudov I.M., Academician UAS, Kharkov, Ukraine
Oztop Hakan, Professor, Elazığ, Turkey
Ratakhin N.A., Academician RAS, Tomsk, Russia
Saghir Ziad, Professor, Toronto, Canada
Saranin A.A., Corr. Member RAS, Vladivostok, Russia
Surzhikov A.P., Professor, Tomsk, Russia
Sukhanov D.Y., Professor, Tomsk, Russia
Tao Wen-Quan, Academician of the Chinese Academy of Sciences, Xi'an, China
Uglov V.V., Professor, Minsk, Republic of Belarus
Ushakov V.Ya., Professor, Tomsk, Russia
Tchaikovskaya O.N., Professor, Tomsk, Russia
Cherepanov V.N., Professor, Tomsk, Russia
Chumlyakov Y.I., Professor, Tomsk, Russia
Shapovalov A.V., Professor, Tomsk, Russia
Shipilov S.E., Professor, Tomsk, Russia

Журнал «Известия вузов. Физика» выходит 12 раз в год и распространяется по подписке. Подписной индекс 70380 в объединенном каталоге «Пресса России». Полные тексты статей доступны на сайте Научной электронной библиотеки: <https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>. **Публикация статей в журнале – бесплатная.**

КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Адрес: 634050, РФ, г. Томск, пр. Ленина, д. 36
Телефон: +7(3822) 53-33-35, 78-37-02
Сайт: <http://journals.tsu.ru/physics/>
E-mail: physics@mail.tsu.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

Филиппов А.И., Зеленова М.А. Акселерационные эффекты в диссипативных течениях	5
Борзенко Е.И., Гарбузов Д.Н., Ефремов М.А. Влияние конфигурации двухлопастной мешалки на картину течения вязкой жидкости в смесителе	14
Шелехов А.П., Корольков В.А., Богушевич А.Я. Численное моделирование парения малоразмерных БПЛА коптерного типа в турбулентной атмосфере	21

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Шостак Н.А., Самарин М.А. Модель процесса образования конденсатогидратов	30
Глазунова Е.В., Андришина И.Н., Шилкина Л.А., Бобылёв В.А., Лымарь Д.В., Вербенко И.А., Резниченко Л.А. Влияние условий приготовления на формирование кристаллической структуры и микроструктуры мультиферроика манганита-ниобата свинца	38
Муратов Т.Т. Влияние локальных тепловых колебаний на генерацию хемозлектронов в гетероструктурах	47
Лучин А.В., Гуртова Д.Ю., Астафурова Е.Г. Влияние дендритной ликвации на фазовый состав и механизмы деформации многокомпонентного сплава $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$	52
Ахметов А., Смолин И.Ю. Анализ напряженно-деформированного состояния элементов литосферы вдоль геологического профиля «Кварц–1986» на территории Западно-Сибирской плиты	61

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

Зарипов Р.Г. Изменения двухпараметрической энтропии Маса в процессе самораспада неэкстенсивных систем	70
---	----

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

Брудный В.Н., Саркисов С.Ю. Разбавленные магнитные полупроводники на основе кристаллической матрицы GaSe с внедренными атомами хрома: полуметаллические электронные свойства и локализованные магнитные моменты	76
Тимофеев В.А., Скворцов И.В., Машанов В.И., Кириенко В.В., Гайдук А.Е., Блошкин А.А., Никифоров А.И., Уткин Д.Е., Хахулин С.А., Фирсов Д.Д., Комков О.С. Фотоотклик $p-i-n$ -фотодиодов GeSiSn/Si, сопряженных с фотонными кристаллами с микрорезонаторами	85

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Третьяков А.К., Кистенёв Ю.В. Модифицированный генетический алгоритм повышенной сходимости для аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекул	95
--	----

CONTENTS

THERMAL PHYSICS AND HYDRODYNAMICS

Filippov A.I., Zelenova M.A. Acceleration effects in dissipative flows	5
Borzenko E.I., Garbuzov D.N., Efremov M.A. Effect of the configuration of a two-blade stirrer on the flow pattern of a viscous liquid in a mixer	14
Shelekhov A.P., Korolkov V.A., Bogushevich A.Ya. Numerical simulation of small-sized UAV hovering in the Dryden turbulent atmosphere	21

CONDENSED-STATE PHYSICS

Shostak N.A., Samarin M.A. A model of the condensate hydrate formation process	30
Glazunova E.V., Andryushina I.N., Shilkina L.A., Bobylev V.A., Lyman D.V., Verbenko I.A., Reznichenko L.A. Effect of preparation conditions on the formation of the crystal structure and microstructure of the multiferroic lead manganite-niobate	38
Muratov T.T. Influence of local thermal vibrations on generation of chemo-electrons in hetero structures	47
Luchin A.V., Gurtova D.Yu., Astafurova E.G. Effect of dendritic liquation on phase composition and deformation mechanisms of a multicomponent $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$ alloy	52
Akhmetov A., Smolin I.Yu. Analysis of the state of the stress and strain of lithosphere elements along the geological profile «Quartz–1986» on the West Siberian plate	61

ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS AND FIELD THEORY

Zaripov R.G. Changes in the two-parametric entropy of Masi in the process of self-decay of non-extensive systems	70
---	----

PHYSICS OF SEMICONDUCTORS AND DIELECTRICS

Brudnyi V.N., Sarkisov S.Yu. Diluted magnetic semiconductors based on GaSe crystal matrix with embedded chromium atoms: half-metallic electronic properties and localized magnetic moments	76
Timofeev V.A., Skvortsov I.V., Mashanov V.I., Kirienko V.V., Gayduk A.E., Bloshkin A.A., Nikiforov A.I., Utkin D.E., Khakhulin S.A., Firsov D.D., Komkov O.S. Photoresponse of GeSiSn/Si <i>p-i-n</i> photodiodes coupled with photonic crystals with microcavities	85

OPTICS AND SPECTROSCOPY

Tretyakov A.K., Kistenev Yu.V. Modified high convergence genetic algorithm for approximation of molecular potential energy surface	95
---	----

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

УДК 532.685

DOI: 10.17223/00213411/68/6/1

Акселерационные эффекты в диссипативных течениях

А.И. Филиппов¹, М.А. Зеленова¹¹ Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, г. Стерлитамак, Россия

На основе сопоставления полученного нестационарного уравнения для скоростей фильтрации с классическим законом Дарси найдена зависимость диссипативной силы от вязкости фильтрующейся жидкости и проницаемости пористой среды, а также установлена взаимосвязь главной компоненты тензора диссипативной силы с этими величинами. Показано, что вклад акселерационной составляющей градиента давления при радиальном течении пропорционален квадрату скорости фильтрации и не зависит от проницаемости. Получено уточненное выражение для закона Дарси при радиальной фильтрации в сильно диссипативной среде с учетом акселерационной составляющей. Установлено, что при малых градиентах давления уточненный закон Дарси согласуется с его классическим выражением.

Ключевые слова: фильтрация, диссипативные силы, закон Дарси, уравнение Эйлера – Жуковского.

Введение

Исследование течений в сильно диссипативных системах [1] представляет практический интерес в связи с приложениями в нефтедобыче, гидрогеологии [2, 3], а также в прикладной аэродинамике [4]. Знаменательным событием в истории развития этого направления явились экспериментальные исследования инженера-гидравлика Анри Дарси [5], в результате которых ему удалось сформулировать основной закон, связывающий скорость фильтрации и градиент давления при одномерном диссипативном течении по трубе. Отметим, что открытие этого закона сопровождалось огромными научными дискуссиями [6], итогом которых явились обобщающие работы М. Маскета [7, 8] и др., позволившие уточнить многие физические закономерности, привести закон к современной формулировке и определить основные направления его использования в подземной гидродинамике и теории нефтегазодобычи.

При диссипативных течениях важную роль играют силы, которые приводят к превращению механической энергии в тепловую [1]. Эти силы являются преобладающими и их анализ очень важен для уточнения физических закономерностей диссипативных течений. Важным примером сильно диссипативных течений является фильтрация нефти и газа в природных коллекторах. Между тем даже в современных работах ведущих научных центров России не ставится вопрос об их оценке и влиянии на процессы течения [9, 10]. Более того, в работе [10] постулируется сопоставление закона фильтрации Дарси с уравнением Навье – Стокса в предположении, что вязкость фильтрующейся среды пренебрежимо мала.

В данной статье предпринята попытка построения выражения для диссипативных сил, которое позволило бы создать новые подходы к исследованию процесса фильтрации. В результате использования данного подхода удалось также установить закономерности влияния инерционных сил, вызванных пространственными компонентами градиента скорости.

Теория

Согласно основному фундаментальному закону классической гидродинамики, поле ускорения в текущей жидкости определяется градиентом давления, внешними массовыми полями $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{r}, t)$ (чаще всего гравитационное поле $\mathbf{g} = \text{const}$) и диссипативными силами

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \text{grad}P + \mathbf{g} + \mathbf{R}. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{w} = \mathbf{w}(\mathbf{r}, t)$ – поле скорости в объеме жидкости; $P = P(\mathbf{r}, t)$ – поле давления; $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$ – плотность жидкости; $\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{r}, t)$ – диссипативная сила, отнесенная к единице массы. Предполага-

Влияние конфигурации двухлопастной мешалки* на картину течения вязкой жидкости в смесителе

Е.И. Борзенко¹, Д.Н. Гарбузов¹, М.А. Ефремов¹

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Проведено численное моделирование течения вязкой жидкости в смесительном аппарате с двухлопастной мешалкой в плоском приближении. Разработана оригинальная методика расчета на основе метода контрольных объемов, реализованного на неструктурированной сетке, позволяющей учитывать геометрические особенности области течения. Рассмотрены различные конфигурации лопастей, исследовано влияние на поток их длины и положения относительно центрального стержня. Для качественного анализа смешения проведены расчеты процесса перераспределения маркерных частиц по потоку и выявлены два режима. С помощью интегральных характеристик неоднородности и вязкой диссипации выполнен сравнительный анализ рассматриваемых конфигураций.

Ключевые слова: смесительный аппарат, вязкая жидкость, конфигурация, математическое моделирование, структура потока, качество смешения.

Введение

Процессы смешения вязких жидкостей реализуются во многих отраслях промышленности с использованием аппаратов различных принципов и конструкций [1, 2]. Широкое распространение получил механический метод перемешивания, который предполагает наличие одной или нескольких вращающихся мешалок (лопастей или лопаток) в смесительном аппарате. Эффективная организация технологического процесса требует детального понимания структуры течения и возможностей влияния на нее. Экспериментальные методы исследования таких течений – трудоемкий и, в некоторых случаях, дорогостоящий процесс. Как следствие, вычислительная гидродинамика стала необходимым инструментом в исследованиях процессов смешения, дающим подробную информацию о гидродинамических, тепловых и физико-химических особенностях потока. Для адекватного описания процесса математические постановки требуют учета многих факторов, таких как неизотермичность процесса, сложная геометрия области течения, многофазность потока и т.п. [3].

В литературе существует большое количество работ, посвященных математическому моделированию течений в мешалках применительно к различным технологиям и учету тех или иных факторов. Результаты численного моделирования процесса диспергирования твердых частиц в вязкой жидкости представлены в [4, 5]. Течения неньютоновских сред исследовались в работе [6]. Современный уровень экспериментальных исследований описан в [7, 8]. Также существует большое количество работ, посвященных моделированию процессов смешения в турбулентном режиме [9, 10]. Однако число исследований течений высоковязких жидкостей, к которым относятся многие полимерные материалы, ограничено.

Цель настоящей работы – исследование течений вязких жидкостей в аппаратах с вращающимися мешалками с помощью оригинальной вычислительной методики, позволяющей учитывать геометрические особенности области течения, а также оценка энергетических затрат на организацию потока, качественный и количественный анализ процесса смешения во времени с использованием ансамбля маркерных частиц в потоке.

Постановка задачи

Движение жидкости в аппарате с вращающейся мешалкой можно разложить на три компоненты: радиальную, тангенциальную и осевую. При достаточно низких значениях числа Рейнольдса ($Re < 10$) в исследуемой области доминирует радиальная и тангенциальная составляющие [11], что позволяет рассматривать задачу смешения в рамках двумерной постановки. Область течения ограничена твердыми непроницаемыми стенками смесительного аппарата, который представляет собой окружность, а в его центре расположена вращающаяся с постоянной угловой скоростью двухлопастная мешалка (рис. 1, а). Жидкость занимает всю область внутри круга за выче-

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-29-00594).

Численное моделирование парения малоразмерных БПЛА коптерного типа в турбулентной атмосфере*

А.П. Шелехов¹, В.А. Корольков¹, А.Я. Богушевич¹

¹ Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск, Россия

Представлены результаты численного моделирования парения квадрокоптера в турбулентной атмосфере Драйдена с использованием динамической модели беспилотного летательного аппарата. Исследовано поведение временных рядов турбулентных флуктуаций скорости ветра для квадрокоптера и эталонного измерителя, изучена методическая ошибка, которая характеризует расхождение между временными рядами, а также представлен анализ спектров и кросс-спектров турбулентности для квадрокоптера и эталонного измерителя.

Ключевые слова: квадрокоптер, атмосферная турбулентность, динамическая модель, модель идеального парения, методическая ошибка, спектр, кросс-спектр.

Введение

Исследование пространственной структуры турбулентности в атмосферном пограничном слое (АПС) и ее временной изменчивости имеет большое фундаментальное и прикладное значение [1]. В последнее время ряд технических достижений поставил перед фундаментальной наукой в области исследования АПС новые проблемы, требующие скорейшего решения. Одно из таких достижений связано с навигацией беспилотных летательных аппаратов (БПЛА) в атмосфере. Прежде всего, для навигации БПЛА требуется проведение исследований в области разработки новых принципов и методов, позволяющих осуществлять мониторинг турбулентных вихрей с высоким пространственным разрешением и с высокой точностью [2–4].

В сравнении с пилотируемой авиацией БПЛА имеют значительно малый вес и форму. Кроме особенностей, связанных с массо-габаритами, траектория полета дрона происходит на малых высотах по сравнению с самолетами и вертолетами, где интенсивность турбулентности высока. На малых высотах подстилающая поверхность оказывает дополнительное воздействие на состояние поля скорости ветра, которое проявляется в усилении интенсивности турбулентности. Таким образом, турбулентная атмосфера в значительной степени усложняет движение БПЛА, а наличие зданий, сложной орографии в городе дополнительно ухудшают его навигацию в среде с беспорядочными пульсациями скорости ветра.

Анализ динамики воздушных судов в турбулентной среде показал, что в отличие от пилотируемой авиации, на безопасность полетов которой влияют крупные высокоэнергичные вихри размером 100 м и более, в случае БПЛА на полет дрона могут оказывать влияние низкоэнергетические вихри размером от 10 см и более. Содары [5, 6], а также радары и лидары имеют невысокое пространственное разрешение, поэтому они позволяют нам эффективно контролировать атмосферную турбулентность для случая полета больших и тяжелых дронов, чьи размеры сопоставимы с эффективным рассеивающим объемом.

Для мониторинга состояния АПС в целях прогноза полета малоразмерных БПЛА требуется использование методов, основанных на новых физических принципах. К ним относят косвенные методы мониторинга состояния атмосферной турбулентности на основе малоразмерных БПЛА коптерного типа [2, 7–13]. Данные методы позволяют осуществлять мониторинг атмосферной турбулентности с высоким пространственным разрешением не только при решении задач авиационной микрометеорологии БПЛА, но и при решении других научных и прикладных задач, для которых знание состояния турбулентности имеет решающее значение. Это – микрофизика турбулентной атмосферы [1], численный прогноз состояния АПС с адаптивной сеткой с минимальным размером порядка 1 м [3], создание различных технологий, связанных с освоением Арктики [14] или с исследованием атмосферы других планет [15], и др.

Суть косвенных методов диагностики заключается в том, что в интересующую область пространства запускают БПЛА коптерного типа и при достижении требуемой точки пространства с

* Работа выполнена в рамках госзадания ИМКЭС СО РАН.

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 544.344.01

DOI: 10.17223/00213411/68/6/4

Модель процесса образования конденсатогидратов

Н.А. Шостак¹, М.А. Самарин¹¹ Кубанский государственный технологический университет, г. Краснодар, Россия

Представлена математическая модель процесса образования гидратов сжиженных газов, дающая возможность определять термобарические параметры и основные характеристики процесса, а также рассчитывать молекулярные (молярная масса, плотность) и энергетические (образования гидратов в системах сжиженный газ – вода) параметры процесса с учетом особенностей его кинетики. Достоверность представленной модели была проверена сопоставлением рассчитанных параметров с их известными значениями, а ее точность дает возможность практического применения.

Ключевые слова: конденсатогидраты, сжиженные газы, фазовые переходы, энергия образования гидратов.

Введение

История изучения клатратных гидратов насчитывает более 240 лет. Долгие годы их исследование носило сугубо академический характер, что было связано с отсутствием технологической необходимости. С 30-х гг. прошлого века, когда ученые впервые столкнулись с проблемой гидратообразования в системах транспорта и добычи углеводородов, количество исследований стало существенно увеличиваться. Дальнейшее развитие изучения гидратов было посвящено способам технологического применения гидратов: в системах опреснения воды, разделения и концентрирования веществ, получения холода и т.п. Особый вклад в разработку термодинамических моделей гидратов внес Ж.Х. Ван-дер-Ваальс [1–4], а дальнейшее их развитие было продолжено В.Р. Белослудовым [5–8]. Среди современных исследований большое значение имеют работы В.П. Мельникова, А.Н. Нестерова и Б.Д. Иванова (СО РАН) [9–11].

Резюмируя, можно указать, что предупреждение образования и ликвидации техногенных гидратов, а также добыча газа из природных гидратов являются одними из важных проблем нефтяной и газовой промышленности. Их решением и исследованиями в этом направлении в России занимаются научные коллективы: Сибирского отделения РАН, ООО «Газпром ВНИИГАЗ», ФГБОУ ВО «РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина» [12–15], ФГАОУ ВО «Тюменский государственный университет», ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет»; за рубежом: Heriot-Watt University, UK; Sorbonne Universites, France; Universite de Franche-Comte, France; Ecole des Mines de Saint-Etienne, France; Colorado School of Mines, USA; University of Delaware, USA; Osaka University, Japan; National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan; Keio University, Japan; Dalian University of Technology, China; University of KwaZulu-Natal, South Africa; National University of Singapore, Singapore.

На сегодняшнем этапе изучения клатратных гидратов одним из направлений является исследование гидратов сжиженных газов (конденсатогидратов). В этом направлении имеется сравнительно малое количество эмпирических и полуэмпирических зависимостей, а также способов расчета, основанных на уравнениях химической термодинамики. Однако для решения широкого спектра физических задач, связанных с гидратообразованием в конденсированных средах, требуется большая проработка вопроса. В настоящей статье представлена модель образования гидратов в системе фазовых состояний сжиженный газ – вода, находящейся в расслоенном состоянии или в виде эмульсий. Основным преимуществом данной модели от уже существующих является то, что она подходит для большинства известных гидратообразователей в сжиженном состоянии и имеет достаточную степень точности, что повышает ее применимость в области инженерных расчетов.

Влияние условий приготовления на формирование кристаллической структуры и микроструктуры мультиферроика манганита-ниобата свинца*

Е.В. Глазунова¹, И.Н. Андрюшина¹, Л.А. Шилкина¹, В.А. Бобылёв¹,
Д.В. Лымарь¹, И.А. Вербенко¹, Л.А. Резниченко¹

¹ Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,
г. Ростов-на-Дону, Россия

Работа посвящена установлению закономерностей влияния условий приготовления на формирование внутренней структуры – кристаллической, зеренной (микроструктуры), определяющих пути стабилизации макрооткликов мультиферроика манганита-ниобата свинца. На этой основе выбраны оптимальные режимы его получения в виде высокоплотных беспримесных керамик. Сделано заключение о целесообразности использования полученных результатов при разработке подобных материалов и устройств на их основе.

Ключевые слова: мультиферроик, манганит-ниобат свинца, кристаллическая структура, микроструктура, технология.

Введение

Композиции вида $\text{Pb}(\text{Nb}_{1/2}\text{B}_{1/2})\text{O}_3$ с $\text{B} = \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}$ составляют обширную группу тройных оксидов – представителей структурного семейства перовскита с одновременно существующими электрическими и магнитными свойствами, известных как сегнетомагнетики (мультиферроики). Сегнетопьезоактивность и магнетизм, свойственные этим материалам, обеспечивают возможность их применения в широком спектре областей техники и электроники. Но такая возможность ограничивается трудностями их получения, прежде всего, в виде беспримесных высокоплотных керамик.

Таким образом, актуальным представляется установление закономерностей влияния условий приготовления на формирование внутренней структуры – кристаллической, зеренной (микроструктуры), определяющих пути стабилизации макрооткликов вышеуказанных соединений.

В качестве объекта выбран наименее изученный манганит-ниобат свинца $\text{Pb}(\text{Nb}_{1/2}\text{Mn}_{1/2})\text{O}_3$ (PNMn), впервые синтезированный и спеченный в виде керамики в [1] (неоднородный с содержанием, кроме перовскитной фазы, значительного количества пирохлорной примеси) и в [2] (полученный в атмосфере азота, способствующей исключению пирохлорной фазы). В работе [3] впервые сообщено о выращивании этого соединения в виде монокристаллов.

На основании результатов экспериментальных исследований в [3] сделан вывод о том, что при комнатной температуре элементарная ячейка этого соединения является моноклинно искаженной с параметрами $a \sim b \sim c \sim 4.006 \text{ \AA}$ и $\beta = 90^\circ 5'$; при 77 К выявлены интенсивные сверхструктурные линии, которые индексируются в предположении удвоения осей.

Исходя из этого и толеранц-фактора $t < 1$, в [3, 4] делается заключение о том, что, по-видимому, поляризованная фаза является антисегнетоэлектрической (АСЭ). Заключение о его температуре Кюри $T_C = 415 \text{ K}$ и антисегнетоэлектричестве сделано и из результатов изучения системы твердых растворов $\text{Pb}(\text{Fe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ – $\text{Pb}(\text{Nb}_{1/2}\text{Mn}_{1/2})\text{O}_3$, описанных в [5]. Здесь автором показано исчезновение петель диэлектрического гистерезиса в этой системе со стороны PNMn.

В работе [6], результируя все имеющиеся библиографические данные, отмечается, что в соединении PNMn обнаружены четыре фазовых перехода при 415, 135, 73 и 11 К. Первый – это переход из пара- в АСЭ-состояние; переходы при 135 и 73 К, выявленные магнитными измерениями, скорее всего, являются переходами из одного АСЭ-состояния в другое. Переход при 11 К трактуется как антиферромагнитный с нескомпенсированным ферромагнетизмом [3].

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности. Проект № FENW-2023-0010/Г30110/23-11-ИФ) с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел» НИИ физики Южного федерального университета.

Влияние локальных тепловых колебаний на генерацию хемоэлектронов в гетероструктурах

Т.Т. Муратов¹

¹ *Ташкентский государственный педагогический университет, г. Ташкент, Республика Узбекистан*

Теоретически исследовано влияние локальных тепловых колебаний кристалла, инициированных воздействием энергии химической реакции адсорбции атомов водорода на поверхности «катализатора», на темп генерации высокоэнергетических электронов. Получены формулы для КПД хемогенератора, уточняющие соответствующие формулы из других работ. Указывается на существенную роль термостимулированных переходов электронов в зону проводимости полупроводника при высоких температурах.

Ключевые слова: поверхность катализатора, аккомодация, фононный канал, энергия Франка – Кондона, барьер Шоттки, КПД хемогенератора.

Введение

Прямое преобразование химической энергии в электрическую может быть реализовано в хемогенераторах электрического тока [1], которые представляют собой полупроводниковые гетероструктуры с различными электронными параметрами. Перспективными материалами считаются полупроводники, поверхность которых обладает выраженными каталитическими свойствами. Каталитические свойства поверхности во многом обусловлены дефектами (мелкими и глубокими примесными центрами), расположенными на поверхности полупроводника и играющими роль «ловушек» для атомов и молекул газовой среды. Поверхность, выступая в качестве катализатора (К) образования (распада) молекул водорода, эффективно «приучает» его атомы, тем самым способствуя снижению энергетического барьера (энергии активации), по сравнению с газовой фазой. Энергия экзотермической гетерогенной реакции: $H + K \rightarrow HK$, $HK + H \rightarrow H_2 + K$ идет на возбуждение (образование) высокоэнергетических электронов, которые под действием электрического поля двойного слоя легко преодолевают потенциальный барьер на гетерогранице [1]. Аккомодация энергии химической реакции может идти по двум конкурирующим каналам: электронному и фононному. Через первый канал передача энергии экзотермической реакции носит ударный характер и непосредственно передается связанному электрону, генерируя тем самым высокоэнергетический электрон; при втором канале избыток энергии химической реакции расходуется на возбуждение высокоэнергетических фононов, которые энергично взаимодействуют с валентными электронами, раскачивая их в такт тепловым колебаниям кристаллической решетки. Адсорбированные молекулы H_2 совершают колебания с частотами, существенно превышающими дебаевские частоты кристалла. Поэтому распад локальных колебаний молекул водорода на фононы затруднен и электронная аккомодация может доминировать над фононной [2]. Однако при высоких температурах, близких к критической, например, при температуре плавления, тепловые флуктуации резко возрастают [3], и возможен термостимулированный выброс валентного электрона в зону проводимости. В этой ситуации фононный канал аккомодации энергии может дать сопоставимый с электронным вклад. Термостимулированный выброс электрона возможен и при более низкой температуре из-за электрон-фононного взаимодействия [4]. В полупроводниках с сильной электрон-фононной связью следует учесть оба канала аккомодации химической энергии.

Цель данной работы – вывод теоретической формулы для КПД хемогенератора с учетом термостимулированного выброса электронов в зону проводимости с последующим анализом частных случаев [1, 5]. Вывод формулы основан на допущении о том, что для генерации хемоэлектронов внешний (оптический) электрон атома должен быть предварительно «раскачен» высокоэнергетическими фононами для разрыва связи с соседними атомами, ибо каждый внешний электрон образует парную химическую связь между ними. В этом смысле, в отличие от [1], $\Theta_{\text{хар}}$ – некоторая часть тепловой энергии Q химической реакции $H + H \rightarrow H_2 + Q\uparrow$, которая идет на «раскачивание» валентного электрона, остальная часть – на его прямое (ударное) возбуждение.

Влияние дендритной ликвации на фазовый состав и механизмы деформации многокомпонентного сплава $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$ *

А.В. Лучин¹, Д.Ю. Гуртова^{1,2}, Е.Г. Астафурова¹

¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

² Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Изучена микроструктура сплава $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$ в литом состоянии, после пластической деформации и рекристаллизационных отжигов при температурах 1373 и 1473 К. Показано, что литой сплав обладает дендритной микроструктурой, а в дендритных областях помимо основной γ -фазы (с ГЦК-решеткой) образуется ϵ -мартенсит охлаждения с ГПУ-кристаллической решеткой. Дендритная ликвация также препятствует деформационному $\gamma \rightarrow \epsilon$ -превращению в междендритных областях. Установлено, что пластическая деформация и отжиг позволяют получить в исследуемом сплаве однородную по химическому составу аустенитную структуру.

Ключевые слова: многокомпонентные сплавы, фазовые превращения, аустенит, мартенсит, микроструктура.

Введение

На протяжении последних двух десятилетий одним из объектов пристального внимания исследователей выступали высокоэнтропийные многокомпонентные сплавы, наиболее ярким представителем которых по праву можно считать сплав Кантора $\text{Fe}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Ni}_{20}$ [1]. Ключевой особенностью таких многокомпонентных систем является способность образовывать однофазные твердые растворы несмотря на то, что входящие в состав сплавов элементы имеют разные типы кристаллических решеток. Число основных компонентов в высокоэнтропийных сплавах должно быть не менее пяти, и они должны находиться в эквиатомном соотношении [1, 2]. Не принимая во внимание величину конфигурационной энтропии, можно было бы ожидать, что такие сплавы будут иметь гетерофазную структуру, включающую множество интерметаллидов. Однако сплав Кантора кристаллизуется с образованием дендритной микроструктуры, состоящей из двух близких по составу аустенитных фаз с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой [1, 3].

Внимание к семейству сплавов Кантора обусловлено их превосходными механическими свойствами при пониженных и криогенных температурах, прежде всего высокой пластичностью. Относительное удлинение эквиатомного сплава Кантора при $T = 77$ К может достигать 100%, а предел прочности – превышать 1 ГПа [4]. Такие превосходные низкотемпературные свойства объясняются специфическим сочетанием механизмов деформации: скольжением и «нанодвойникованием», которое реализуется при пониженных температурах благодаря низкой энергии дефекта упаковки материала ($\text{ЭДУ} = 25$ мДж/м² при 298 К) [5–7]. При этом величина ЭДУ не обеспечивает развития деформационных фазовых переходов в сплаве Кантора даже при криогенной деформации растяжением [6]. Именно действие двойникования в качестве механизма деформации, дополнительного к скольжению дислокаций, обеспечивает высокую прочность и пластичность сплава при пониженных температурах [5–8]. При комнатной температуре (293 К) предел текучести сплава Кантора относительно низкий: от 180 до 350 МПа при размере зерен соответственно от 160 до 5 мкм, а основным механизмом деформации сплава выступает дислокационное скольжение [5, 8].

Понижение ЭДУ в сплавах системы FeMnCoCrNi обеспечивает проявление значительных TWIP- и TRIP-эффектов при деформации материала (Twinning Induced Plasticity – пластичность, вызванная двойникованием, Transformation Induced Plasticity – пластичность, вызванная фазовым превращением) [9, 10]. TWIP- и TRIP-эффекты способствуют увеличению пластичности, деформационного упрочнения и прочности сплавов [10, 11]. D. Wei с соавторами [9] показали, что уменьшение ЭДУ в сплаве системы FeMnCoCrNi за счет увеличения концентрации Co и Cr сопровождается изменением механизма деформации от преимущественно дислокационного скольжения в классическом сплаве Кантора к комплексному упрочнению за счет дислокационного скольжения и TWIP/TRIP-эффектов в неэквиатомных сплавах. С точки зрения использования такого подхода к улучшению механических свойств сплавов системы FeMnCoCrNi вызывает интерес неэквиаомный

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-19-00261, <https://rscf.ru/project/20-19-00261>.

Анализ напряженно-деформированного состояния элементов литосферы вдоль геологического профиля «Кварц–1986» на территории Западно-Сибирской плиты*

А. Ахметов¹, И.Ю. Смолин¹

¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Данная статья посвящена исследованию напряженно-деформированного состояния участков литосферы на территории Западно-Сибирской плиты. В качестве объекта исследования выбраны регионы Западной Сибири, богатые нефтью и газом и через которые проложен геологический профиль «Кварц–1986». Созданы двумерные структурные модели участков литосферы разной мощности на основе геолого-геофизических данных, рассчитано напряженно-деформированное состояние литосферы и верхних слоев земной коры. Выявлено, что в районах Сургутского и Вартовского сводов, Юганской впадины локализованы области неупругой деформации и зоны сдвиговых напряжений в верхних слоях земной коры, частично соответствующие местоположениям ловушек углеводородов и залежей нефти и газа.

Ключевые слова: земная кора, верхняя мантия, блочно-слоистая структура, упругопластическая среда, численное моделирование.

Введение

В последние годы наблюдается активное развитие разных областей науки с использованием компьютерных технологий. Стало возможным оценивать большое количество данных, решать фундаментальные и прикладные задачи, помогающие пониманию законов природы и развитию промышленности.

Одной из перспективных задач горной науки является оценка распределения напряжений и деформаций участков литосферы. Такая задача может быть решена на основе подходов механики деформируемого твердого тела и численного моделирования с использованием большого количества геолого-геофизических данных. При этом с развитием компьютерных технологий стало возможным создавать подробные двумерные и трехмерные компьютерные модели, с помощью которых можно оценить и проанализировать внутреннюю структуру земной коры и верхней мантии, прояснить природу возникновения землетрясений, оползней, обвалов и т.д., а также образования месторождений полезных ископаемых [1–3].

Цель данной работы – оценка напряженно-деформированного состояния участков литосферы разного масштаба вдоль геологического профиля «Кварц–1986», проходящего по территории Западно-Сибирской плиты, содержащих в том числе ловушки углеводородов и залежи нефти и газа.

1. Описание задачи и ее решения

1.1. Физическая постановка задачи

В 80–90-х годах XX века на территории Западно-Сибирской плиты были проведены геологические и геофизические исследования недр Земли в ходе выполнения проекта «Комплексное освоение земных недр СССР» [4]. На рис. 1 показано местоположение геологического профиля «Кварц–1986», полученного методом глубинного сейсмического зондирования. Черным прямоугольником выделена часть геологического профиля, в котором выявлены основные залежи нефти и газа в Западной Сибири [5].

На рис. 2, а представлены геофизические данные профиля «Кварц–1986», которые состоят из структурных элементов (слои и блоки) земной коры с разными значениями скоростей продольных и поперечных волн (также указаны на схеме) и верхней части мантии [5]. В структуре литосферы выделяют границу Мохо между земной корой и мантийным слоем и границу между осадочным чехлом и кристаллическим фундаментом в верхней части земной коры.

* Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-71-01086 (<https://rscf.ru/project/23-71-01086/>).

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 536.75

DOI: 10.17223/00213411/68/6/9

Изменения двухпараметрической энтропии Масы
в процессе самораспада неэкстенсивных системР.Г. Зарипов¹¹ *Институт механики и машиностроения – структурное подразделение ФИЦ «Казанский научный центр
Российской академии наук», г. Казань, Россия*

Рассматриваются свойства двухпараметрической энтропии Масы. Находится равновесное распределение. Показано совместное увеличение энтропии и уменьшение новой информации различия при переходе к термодинамическому равновесию. Формулируется Н-теорема.

Ключевые слова: энтропия, информация различия, равновесие, неэкстенсивность.

Введение

В настоящее время статистическая механика и термодинамика с негауссовыми и негиббсовыми распределениями в тепловом равновесии интенсивно развиваются, охватывая различные направления и находя применения в новых приложениях для неэкстенсивных систем. Основные методы и принципы, основанные на параметрических мерах энтропии и информации различия, даются в [1–4]. Большинство работ используют однопараметрические функционалы, которые вытекают из двухпараметрической энтропии Шарма – Миттала [5]

$$S = \frac{k}{r-1} \left[1 - \left(\sum_i^n p_i^q \right)^{\frac{r-1}{q-1}} \right], \quad \left(\sum_i^n p_i = 1 \right). \quad (1)$$

В частности, имеют место следующие меры:

$$S = \frac{k}{1-q} \ln \left(\sum_i^n p_i^q \right), \quad r=1, \quad (2)$$

$$S = \frac{k}{r-1} \left\{ 1 - \exp \left[(1-r) \sum_i^n p_i \ln p_i \right] \right\}, \quad q=1, \quad (3)$$

$$S = \frac{k}{q-1} \left[1 - \sum_i^n p_i^q \right], \quad q=r, \quad (4)$$

$$S = \frac{k}{1-q} \left[1 - \left(\sum_i^n p_i^q \right)^{-1} \right], \quad r=2-q. \quad (5)$$

Здесь (2) – энтропия Реньи [6], (3) – энтропия Гаусса [7], (4) – энтропия Хаврда – Чарват – Дароши [8, 9], (5) – энтропия Ландсберга – Ведрала [10]. При $q=r=1$ получим энтропию Больцмана – Гиббса – Шеннона

$$S = -k \sum_i^n p_i \ln p_i. \quad (6)$$

В работе [11] вводится новая двухпараметрическая энтропия. Цель настоящей работы – подробное изучение свойств энтропии Масы и новой информации различия и изменение этих мер в процессе самораспада систем при эволюции к тепловому равновесию.

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 538.9

DOI: 10.17223/00213411/68/6/10

Разбавленные магнитные полупроводники на основе кристаллической матрицы GaSe с внедренными атомами хрома: полуметаллические электронные свойства и локализованные магнитные моменты*В.Н. Брудный¹, С.Ю. Саркисов¹¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Выполнен расчет спин-поляризованных электронных свойств разбавленных магнитных полупроводников на основе кристаллов GaSe, содержащих атомы Cr в части катионных узлов. Согласно полученным результатам, $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Se}$ при $x = 0.042$ обладает выраженной полуметаллической электронной структурой при ферромагнитном упорядочении магнитных моментов, локализованных на атомах Cr.

Ключевые слова: GaSe, разбавленный магнитный полупроводник, плотность электронных состояний, теория функционала плотности, полуметаллическая электронная структура.

Введение

Разбавленные магнитные полупроводники (РМП) являются одним из классов материалов, которые активно исследовались в рамках поиска структур для применений в спинтронике. В таких структурах может быть получена, в частности, электронная структура полуметалла [1], приводящая к проводимости за счет носителей заряда только со спинами одного направления. Следует отметить, что экспериментальные реализации ферромагнитных (и, в частности, антиферромагнитных) полуметаллов долгое время отсутствовали. Первые экспериментальные демонстрации были достигнуты для 2D-структур. В настоящее время большие ожидания в этой области связаны со структурами перовскитов.

В настоящей работе были выполнены расчеты электронных свойств РМП на основе кристалла GaSe с внедренными атомами переходного металла (ПМ) четвертого периода таблицы Менделеева (Cr). Как известно, селенид галлия является типичным слоистым соединением, пригодным для образования буферных эпитаксиальных слоев и квазидвумерных структур [2–4]. Кроме того, слоистая структура приводит к возможности внедрения атомов примесей в межслоевое пространство (интеркаляции). Основное применение кристаллы GaSe находят в нелинейной оптике, в качестве среды для преобразования частоты лазерного излучения в ИК- и терагерцовый диапазоны частот [5]. Ввиду нелинейно-оптических свойств селенида галлия при создании объемных и нанослойных РМП на его основе возможно прогнозировать получение в них интересных фото-магнито-электрических эффектов.

В основном ранее выполненные исследования РМП были направлены на алмазоподобные полупроводники: элементарные полупроводники четвертой группы (Si, Ge) [6], их двойные (A^2B^6 и A^3B^5 полупроводники со структурой цинковой обманки) [7] и тройные (халькопириты $\text{A}^1\text{B}^3\text{C}_2^6$ и $\text{A}^2\text{B}^4\text{C}_2^5$) [8] аналоги, легированные ПМ четвертого периода. Для многих из них была предсказана электронная структура полуметалла и достигнуто достаточно глубокое понимание электронных и магнитных свойств (закономерности изменения величины локализованных магнитных моментов при переходе от одной структуры к другой, магнитное упорядочение, обменные механизмы, значения температур Кюри). В связи с перспективными оптическими свойствами существенным отличием кристаллической структуры от структуры ранее изученных алмазоподобных полупроводников и отсутствием расчетов электронной структуры с разрешением по спинам для объемных РМП на основе кристалла GaSe настоящее исследование представляется актуальным.

* Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № FSWM-2025-0014.

Фотоотклик $p-i-n$ -фотодиодов GeSiSn/Si, сопряженных с фотонными кристаллами с микрорезонаторами*

В.А. Тимофеев¹, И.В. Скворцов¹, В.И. Машанов¹, В.В. Кириенко¹,
А.Е. Гайдук¹, А.А. Блошкин¹, А.И. Никифоров¹, Д.Е. Уткин^{1,2},
С.А. Хахулин³, Д.Д. Фирсов³, О.С. Комков³

¹ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»,
г. Санкт-Петербург, Россия

Были разработаны $p-i-n$ -фотодиоды GeSiSn/Si, сопряженные с фотонно-кристаллическими структурами с массивом микрорезонаторов в виде суперъячеек (3×3) и (5×5) . Методами численного моделирования исследованы электромагнитные характеристики микрорезонаторов в полупроводниковом волноводном слое. В спектре отражения периодического массива микрорезонаторов типа (3×3) наблюдаются множественные асимметричные резонансные особенности типа Фано, обусловленные возбуждением волноводных мод. Показано, что на основных резонансных частотах происходит локальное усиление электрического поля в центральной части микрорезонаторов. Рассчитаны коэффициенты интегральной интенсивности электрического поля в двумерной задаче рассеяния фотонно-кристаллической моды на микрорезонаторах типа (3×3) и (5×5) . Показано, что в ближнем инфракрасном диапазоне происходит усиление на частотах, соответствующих собственным модам микрорезонатора, вплоть до 7 раз по сравнению с исходным фотонным кристаллом без микрорезонаторов. В спектре фототока для структуры с суперъячейкой (5×5) наблюдается узкая линия шириной 1 нм на длине волны 1.55 мкм, соответствующая возбуждению моды микрорезонатора. Также наблюдалось усиление сигнала фотолюминесценции по сравнению с исходной эпитаксиальной структурой, достигавшее для структур с суперъячейками (3×3) и (5×5) до 4 и до 8 раз соответственно.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия, квантовые точки, фотонный кристалл, микрорезонатор, фотодиод.

Введение

Актуальной задачей на пути развития электронно-фотонных интегральных схем является получение новых материалов, совместимых с кремниевой технологией, позволяющих расширить рабочий спектральный диапазон устройств, а также продвинуться в направлении их миниатюризации, повышения быстродействия и энергоэффективности. Для решения проблемы интеграции электронных и фотонных устройств на едином кремниевом кристалле требуется разработка новой элементной базы твердотельной фотоники, включающей оптические вычислители, модуляторы, фильтры, устройства передачи сигнала, источники и приемники излучения. Класс материалов Ge-Si-Sn является одним из наиболее перспективных для решения вышеобозначенных задач [1–4]. Элементарные полупроводники Ge и Si являются непрямозонными и характеризуются низкой эффективностью излучательной рекомбинации носителей заряда, что ограничивает их применение в устройствах фотоники, в том числе в элементах интегральной фотоники, системах полностью оптической обработки информации, системах формирования изображения и волоконно-оптических линиях связи нового поколения. Добавление Sn в матрицу GeSi позволяет контролируемо управлять зонной структурой исходного материала, уменьшая ширину запрещенной зоны. Это дает возможность регулировать рабочую длину волны устройств нанофотоники на основе материалов GeSiSn в ближнем и среднем инфракрасном диапазоне от 1.55 до 8 мкм [5–7], тогда как рабочая длина волны устройств на основе Ge ограничена ближним инфракрасным (ИК) диапазоном. Было показано, что показатель поглощения $\text{Ge}_{0.98}\text{Sn}_{0.02}$ больше показателя поглощения Ge в телекоммуникационной С-зоне (1.53–1.56 мкм) в 10 раз и в L-зоне (1.56–1.62 мкм) в 20 раз [8]. Материалы на основе соединений GeSiSn могут быть прямозонными при определенных составах твердого раствора [9–11]. На сегодняшний день продемонстрирован прямозонный материал GeSn с содержанием Sn 12.5% и деформацией сжатия 0.55%, что подтверждается измерениями кинетики фотолюминесценции [12]. Поскольку Sn является изовалентным элементом по отношению к Si и Ge, а также не создает глубоких примесных уровней в запрещенной зоне [13], класс материалов

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-79-10092).

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.194

DOI: 10.17223/00213411/68/6/12

**Модифицированный генетический алгоритм повышенной сходимости
для аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекул***А.К. Третьяков¹, Ю.В. Кистенёв¹¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Представлен модифицированный генетический алгоритм повышенной сходимости (ГАПС) для решения нерегуляризованной, глубоко параметризованной и невыпуклой задачи. Основная особенность ГАПС – частичная оптимизация генома особей с помощью алгоритма Левенберга – Марквардта. Введена модельная функция (МФ), характеристичная для задачи аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекул. С помощью МФ проведен сравнительный анализ ГАПС, генетического алгоритма, алгоритмов Левенберга – Марквардта и Adam.

Ключевые слова: поверхность потенциальной энергии, машинное обучение, генетический алгоритм, алгоритмы оптимизации, итерационные алгоритмы.

Введение

Аппроксимация точек поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул, как правило, осуществляется с помощью параметризованной аналитической модели на основе физически подкрепленных функций. Параметрами этих функций являются молекулярные параметры (МП), к примеру, силовые константы, параметры геометрии и ППЭ молекулы и т.д. Аппроксимация дискретных значений ППЭ предоставляет аналитическую, гладкую функцию ППЭ, которая в дальнейшем используется для определения или уточнения физических свойств молекулы, получения колебательного, вращательного и электронного спектров. Задача определения МП путем аппроксимации ППЭ исследуемой молекулы в общем случае является многопараметрической, нерегуляризованной и невыпуклой. Для аппроксимации ППЭ широко используются итерационные алгоритмы: градиентного спуска, наискорейшего спуска, Ньютона, Гаусса – Ньютона, Левенберга – Марквардта (ЛМ) [1, 2] в сочетании с целевой функцией, к примеру: средней абсолютной ошибкой, относительной ошибкой, среднеквадратичной ошибкой (Root Mean Square Error, RMSE) и т.д. Характер описываемой задачи обуславливает высокую чувствительность конечных значений целевой функции к начальным и граничным условиям. При использовании итерационных методов это приводит к неудовлетворительной точности аппроксимации, к необходимости использовать более комплексные подходы, такие как понижение размерности задачи, оценка граничных условий и поиск оптимальных начальных условий.

В качестве альтернативы, для решения обозначенной задачи могут быть применены методы машинного обучения (МО). В силу свойства стохастичности данные методы способны совершить поиск глобального экстремума за меньшее количество итераций и/или со сравнимой или большей точностью, а также без применения более комплексной логики в решении обозначенной задачи. Отметим, что методы МО широко применяются в рамках исследований на тематику квантово-химических расчетов [3–9]. Успешное использование МО в различных вариациях продемонстрировано как для расчета дискретных значений ППЭ, так и для оптимизации модели ППЭ [10–12]. Для решения задачи аппроксимации ППЭ многоатомных структур используются методы МО, такие как нейронные сети, регрессия гауссовского процесса и генетический алгоритм (ГА) [3–5, 9, 13–15]. В рамках аппроксимации ППЭ чаще применяются методы, не требующие обучающих данных, что обусловлено ограниченным количеством рассчитанных точек ППЭ.

Adam (Adaptive Moment Estimation) представляет собой алгоритм адаптивной оптимизации [16]. Изначально разработан для глубокого обучения нейронных сетей. Основные отличительные

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-557 от 25.04.2024 г.).

Ежемесячный научный журнал

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА
IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

2025. Т. 68. № 6

Адрес редакции и издателя:
634050, РФ, г. Томск, пр. Ленина, д. 36,
Томский государственный университет,
редакция журнала «Известия вузов. Физика»

Старший редактор *Л.А. Пивоварова*
Выпускающий редактор *Л.В. Пермякова*
Редактор-переводчик *И.А. Бобровникова*
Оригинал-макет *Д.В. Фортеса*

Подписано к печати 05.06.2025. Выпуск в свет 24.06.2025. Заказ № 6361.
Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс». Печать цифровая.
Усл. п. л. 12.09. Уч.-изд. л. 13.54. Тираж 50 экз. Цена свободная.

Отпечатано на полиграфическом оборудовании
Издательства Томского государственного университета,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, тел. (3822) 531-528, 529-849.
<http://publish.tsu.ru>; e-mail: rio.tsu@mail.ru

