

2. *Абрамов О.В., Дуго Г.Б., Дуго Н.Б., Катыева Я.В.* Параллельные алгоритмы построения области работоспособности // Информатика и системы управления. – 2004. – №2(8). – С.121-133.
3. *Черноусько Ф.Л.* Оценивание фазового состояния динамических систем. Метод эллипсоидов. – М.: Наука, 1988.
4. *Гусев С.В., Шишкин С.Л.* Алгоритм делящихся эллипсоидов – метод решения систем невыпуклых неравенств // Автоматика и телемеханика. – 1999. – №7. – С.25-33.
5. *Черноусько Ф.Л., Янгин А.А.* Аппроксимация множеств достижимости при помощи пересечений и объединений эллипсоидов // Техническая кибернетика. – 1987. – №4. – С.145-152.
6. *Юдин Д.Б., Горяшко А.П., Немировский А.С.* Математические методы оптимизации устройств и алгоритмов АСУ / под ред. Ю.В. Асафьева, В.А. Шабалина. – М.: Радио и связь, 1982.
7. *Бернацкий Ф.И., Дуго Г.Б., Дуго Н.Б.* Построение области робастных управлений на параллельных процессорах // Информатика и системы управления. – 2003. – №1(5). – С.92-100.
8. *Шор Н.З.* Задачи минимизации матричных функций и недифференцируемая оптимизация // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 1995. – Т. 2, вып. 1. – С. 113-138.
9. *Шор Н.З., Березовский О.А.* Алгоритмы построения инвариантного эллипсоида минимального объема для устойчивой динамической системы // Кибернетика и системный анализ. – 1995. – №3. – С.130-137.
10. *Shor N.Z., Berezovski O.A.* New algorithms for constructing optimal circumscribed and inscribed ellipsoids // Optim. Methods Software. – 1992. – Vol. 1. – P.283-299.

Статья представлена к публикации членом редколлегии О.В. Абрамовым.

УДК 537.226; 538.915

© 2008 г. **И.Е. Еремин**, канд. физ.-мат. наук,

О.В. Жилиндина

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ КОМПОЗИЦИОННЫХ ЭЛЕКТРОКЕРАМИК. I

Рассматривается возможность имитационного моделирования диэлектрических спектров ряда промышленных образцов композиционных электрокерамик, имеющих место в области установления упругой электронной поляризации частиц. В первой части работы описываются математические модели поляризационных процессов, происходящих в отдельно взятых композитах.

Введение

Широкое внедрение современных наукоемких технологий в различные области производства существенно расширило перечень и повысило уровень требо-

ваний, предъявляемых к эксплуатационным параметрам конструкционных, в том числе и электротехнических, материалов. При этом на сегодняшний день все острее становится проблема ограниченности сырьевых, энергетических и временных ресурсов, которая часто затрудняет использование эмпирических способов поиска химических соединений, обладающих желаемыми свойствами. Сложившаяся ситуация объективно обуславливает необходимость развития подходов, базирующихся на выполнении предварительного имитационного моделирования эксплуатационных характеристик подбираемых прототипов, а также прогноза степени их изменения в ходе использования. Очевидно, что эффективность подобных исследований, проводимых в области физики диэлектриков, целиком зависит от адекватности математических моделей, используемых для описания строения диэлектрических систем и происходящих в них поляризационных процессов.

Как известно, упругая электронная поляризация занимает обособленное место среди всего разнообразия физических явлений, вызванных в диэлектрике действием внешнего электрического поля. Во-первых, она свойственна любым диэлектрическим материалам независимо от их структуры и агрегатного состояния. Во-вторых, процессы данного вида обладают наименьшим временем установления по сравнению со всеми другими типами поляризации, что позволяет явно выделить их вклад в общее поляризованное состояние образца. Последнее обстоятельство оказывается весьма существенным с точки зрения достоверности оценок адекватности математических моделей, описывающих механизмы поляризации заряженных частиц.

На сегодняшний день в производстве современной реакторной техники применяются самые разнообразные материалы, в том числе и диэлектрики. Для проведения изысканий, описываемых в настоящей работе, были выбраны следующие промышленные образцы: высокоглиноземистые керамики – микролит и ГБ-7, а также кордиеритовая керамика Л-24. Рассматриваемые конструкционные материалы являются композиционными диэлектриками, поэтому, учитывая аддитивность анализируемых процессов, имитационное моделирование их соответствующих диэлектрических спектров может быть реализовано на основании использования совокупности моделей поляризации образующих, представленных в чистом виде.

Моделирование поляризационных характеристик базовых композитов

Оценка структурного состава разбираемых электрокерамик [1] показывает (табл. 1), что их основными компонентами являются окислы химических элементов третьего периода таблицы Менделеева, а именно: MgO , Al_2O_3 и SiO_2 , остальные составляющие образцов представлены достаточно малыми массовыми долями. Исходя из данного обстоятельства, в качестве исходных объектов проводимого исследования были выбраны чистые ионные кристаллы магния, алюминия и кремния – соответственно периклаз, корунд и кварц.

Таблица 1

| Содержание окислов, % | Образцы промышленных электрокерамик | | |
|-----------------------|-------------------------------------|--------------|--------------|
| | МК | ГБ-7 | Л-24 |
| B_2O_3 | – | 0,92 | – |
| Na_2O | 0,09 | 0,09 | 0,31 |
| MgO | 0,48 | – | 7,50 |
| Al_2O_3 | 99,34 | 97,09 | 49,50 |
| SiO_2 | 0,05 | 0,92 | 41,50 |
| K_2O | – | – | 0,06 |
| CaO | 0,04 | 0,90 | 0,13 |
| Fe_2O_3 | – | 0,08 | 1,00 |
| Итого: | 100,00 | 100,00 | 100,00 |

В работах [2 – 6] было показано, что наиболее эффективным математическим описанием процесса упругой электронной поляризации идеального ионного кристалла является модель вынужденных колебаний совокупности всех орбиталей отдельных электронных пар составляющих его частиц, которая может быть представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 m_l(t)}{dt^2} + 2b_l \frac{dm_l(t)}{dt} + w_{0l}^2 m_l(t) &= \frac{2e^2}{m_e} E(t), \quad l = \overline{1, L}, \\ \frac{d^2 m_f(t)}{dt^2} + 2b_f \frac{dm_f(t)}{dt} + w_{0f}^2 m_f(t) &= \frac{2e^2}{m_e} E(t), \quad f = \overline{L+1, L+F}, \\ E(t) &= E_0(t) - \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^{L+F} m_i(t) N_i, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mu_l(t)$ и $\mu_f(t)$ – функции, описывающие изменения дипольных моментов электронных пар, соответственно отрицательного и положительного ионов; L и F – количества электронных пар в конфигурации каждого из ионов; β_l , β_f и ω_{0l} , ω_{0f} – коэффициенты затухания и частоты их собственных колебаний; e и m_e – заряд и масса электрона; $E_0(t)$ и $E(t)$ – функции напряженности внешнего и эффективного полей; N_i – концентрации ионов; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума.

Отметим, что вычисление концентраций частиц, составляющих простые (чистые) вещества, не представляет особых затруднений и может быть выполнено на основании значений их физических плотностей, молекулярной массы и химической формулы [7]. Например, для двухатомных ионных кристаллов типа $A_x B_y$, расчетные формулы имеют вид

$$N_A = \frac{r}{(m_A x + m_B y) a e m} x, \quad N_B = \frac{r}{(m_A x + m_B y) a e m} y, \quad (2)$$

где r – плотность кристалла; m_A и m_B – атомные массы его ионов; $a e m$ – величина атомной массы. На основании выражений (1) возникают следующие уравнения комплексной поляризуемости $a_k(j\omega)$ электронных пар и комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon(j\omega)$ образца

$$a_k(j\omega) = \frac{2e^2/m_e}{w_{0k}^2 - w^2 + j2b_k w}, \quad k = \overline{1, L+F}, \quad \epsilon(j\omega) = 1 + \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^{L+F} a_i(j\omega) N_i. \quad (3)$$

При этом значения динамических параметров рассматриваемых процессов могут быть достаточно обосновано рассчитаны по формулам

$$w_{0k}^2 = \frac{Q_k e^2}{4\pi \epsilon_0 m_e r_k^3}, \quad 2b_k = \frac{2e^2 m_0 w_{0k}^2}{6\pi c m_e}, \quad (4)$$

где Q_k – эффективный заряд атомного остатка, влияющий на конкретную электронную пару; r_k – ее радиус; m_0 – магнитная постоянная; c – скорость света в вакууме. В свою очередь, для определения размеров электронных пар предлагается использовать формулу, основывающуюся на уравнении первого боровского радиуса:

$$r_k = n_k^2 \hbar^2 / Q_k e^2 m_e, \quad (5)$$

где n_k – главное квантовое число соответствующей электронной оболочки; \hbar – постоянная Планка.

Таким образом, единственным параметром, требующим дополнительного рассмотрения, оказывается величина эффективного заряда, влияющего на каждую электронную пару. Выделенная задача может быть решена в рамках методики описания атомных орбиталей многоэлектронных атомов Слэтера, модифицированного для внешних электронов иона кислорода O^{-2} с учетом механизма его образования:

$$\begin{aligned} Q_{L-3} &= 8 - \left(\sum_{i=1}^{L-4} z_i s_i + 1 \cdot s^* \right) & Q_{L-2} &= 8 - \left(\sum_{i=1}^{L-4} z_i s_i + 3 \cdot s^* \right) \\ Q_{L-1} &= 8 - \left(\sum_{i=1}^{L-4} z_i s_i + 5 \cdot s^* \right) & Q_L &= 8 - \left(\sum_{i=1}^{L-4} z_i s_i + 7 \cdot s^* \right) \end{aligned} \quad (6)$$

где z_i и s_i – количество внутренних электронов и значения их, экранирующие вклады по Слэтеру; s^* – оптимизированная величина экранирующих вкладов оптических электронов отрицательного иона. При этом для определения значений s^* можно использовать метод сканирования интегральной ошибки между имитационным спектром вещественной частотной характеристики комплексной диэлектрической проницаемости кристалла $\epsilon'(w)$ и ее реальным, физически измеренным аналогом [8].

Наборы исходных данных, необходимых для описанного рассмотрения разбираемых кристаллических образцов, отражены в табл. 2, а итоги имитационного моделирования вещественной частотной характеристики их комплексной диэлектрической проницаемости, полученные для оптимизированных значений экранирующих вкладов внешних электронов аниона, приведены на рис. 1 – 3.

Таблица 2

| Общие сведения о кристаллах | | | Электронная структура ионов | |
|-----------------------------|-----------|-------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| Название | Формула | r , кг/м ³ | анион O^{-2} | $Mg^{+2}, Al^{+3}, Si^{+4}$ |
| Периклаз | MgO | 3580 | $L = 5$ $(1s^2 3s^2 3p^6)$ | $F = 5$ $(1s^2 2s^2 2p^6)$ |
| Корунд | Al_2O_3 | 3960 | | |
| Кварц | SiO_2 | 2650 | | |

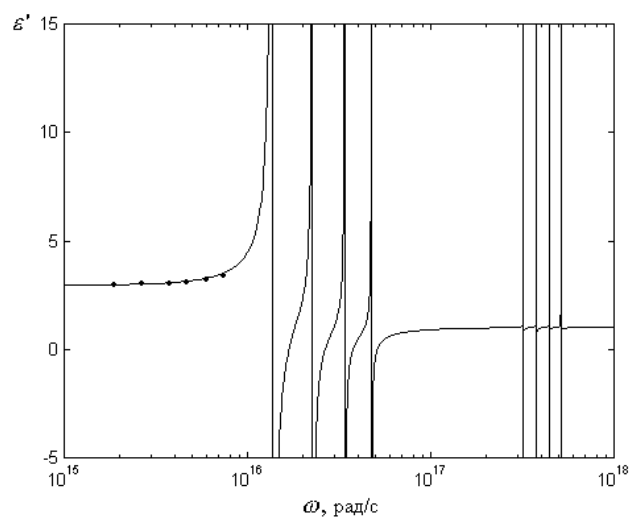


Рис. 1. Имитационный диэлектрический спектр MgO ($s^* = 0,430$).

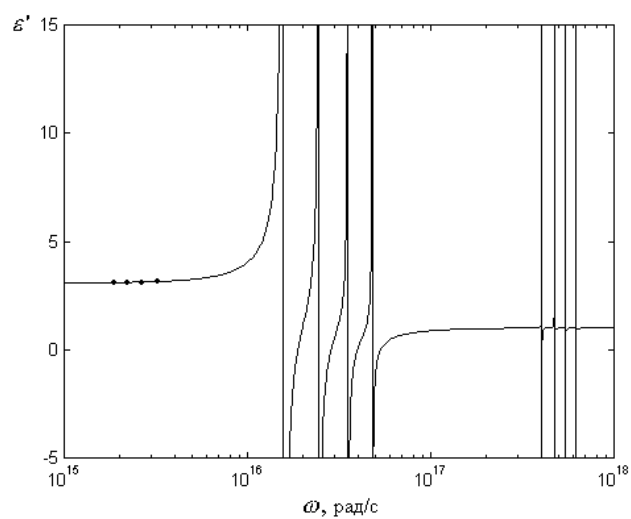


Рис. 2. Имитационный диэлектрический спектр Al_2O_3 ($s^* = 0,400$).

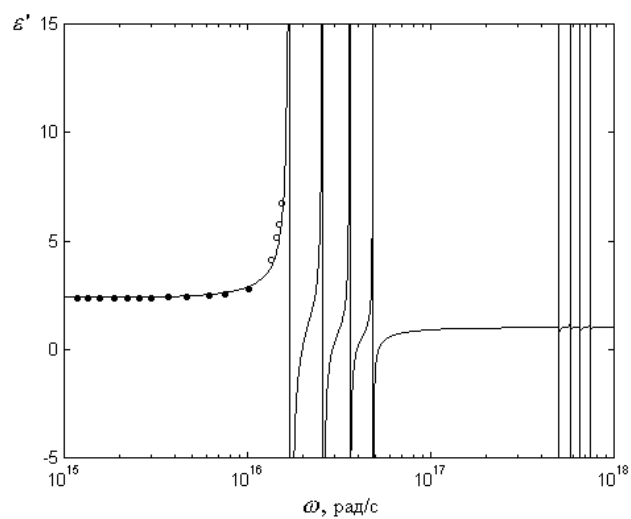


Рис. 3. Имитационный диэлектрический спектр SiO_2 ($s^* = 0,380$).

Анализ полученных результатов показывает, что предлагаемая методика имитационного моделирования диэлектрических свойств чистых кристаллических оксидов в области установления процессов их упругой электронной поляризации оказывается достаточно эффективной. При этом было выявлено изменение величины экранирующих вкладов оптических электронов одного и того же аниона от разновидности соединенных с ним катионов.

Закономерность изменения экранирующих вкладов

Как было показано выше, необходимым условием практической реализации диэлектрических спектров двухатомных ионных кристаллов является наличие исходных сведений об их физико-химических параметрах, а также контрольных данных, позволяющих оптимизировать значение экранирующих вкладов оптических электронов отрицательного иона.

С целью выявления какой-либо закономерности изменения этой величины был проведен ряд вычислительных экспериментов, объектами которых послужили кристаллические оксиды, описанные в табл. 3, а их результаты отражены на рис. 4 – 12.

Таблица 3

| Общие сведения о кристаллах | | | Электронная структура ионов | |
|-----------------------------|----------|-------------------------|-----------------------------|--|
| Название | Формула | r , кг/м ³ | анион O^{-2} | катионы |
| Бромеллит | BeO | 3010 | $1s^2 3s^2 3p^6$ | $1s^2$ |
| Оксид кальция | CaO | 3400 | | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6$ |
| Куприт | Cu_2O | 6000 | | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^{10}$ |
| Цинкит | ZnO | 5700 | | |
| Оксид германия | GeO_2 | 4280 | | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^{10}$ $4s^2 4p^6$ |
| Оксид стронция | SrO | 4700 | | |
| Оксид иттрия | Y_2O_3 | 4840 | | |
| Бадделеит | ZrO_2 | 5680 | | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^{10}$ $4s^2 4p^6 4d^{10}$ |
| Касситерит | SnO_2 | 7010 | | |

Отметим, что единственным критерием выбора рассмотренных образцов было наличие контрольных данных о результатах физических измерений их диэлектрических или оптических свойств в исследуемой области частот оптического спектра.

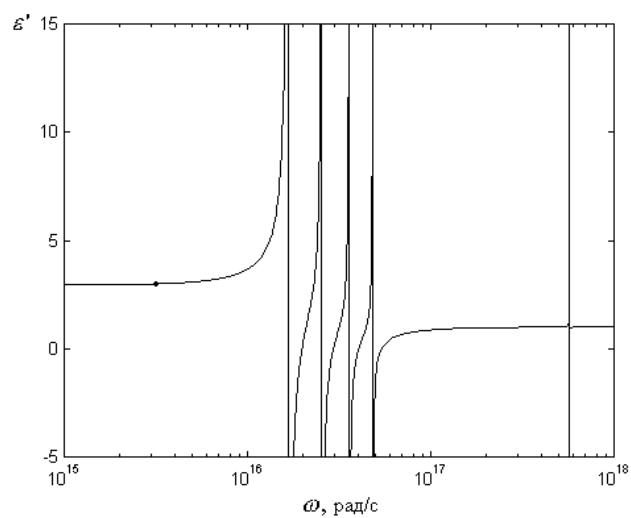


Рис. 4. Имитационный диэлектрический спектр BeO ($s^* = 0,385$).

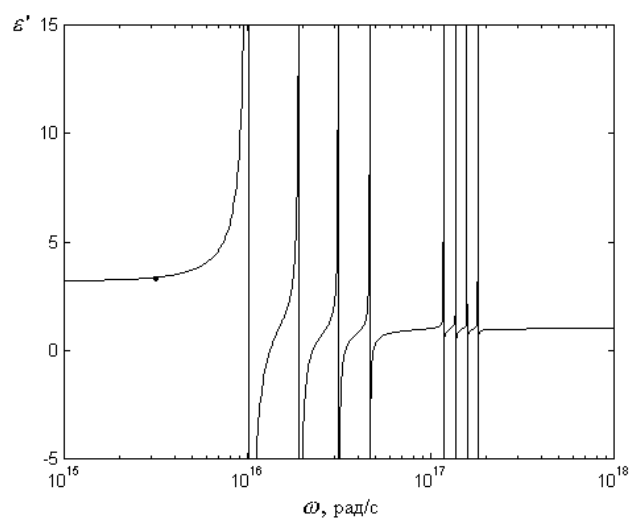


Рис. 5. Имитационный диэлектрический спектр CaO ($s^* = 0,490$).

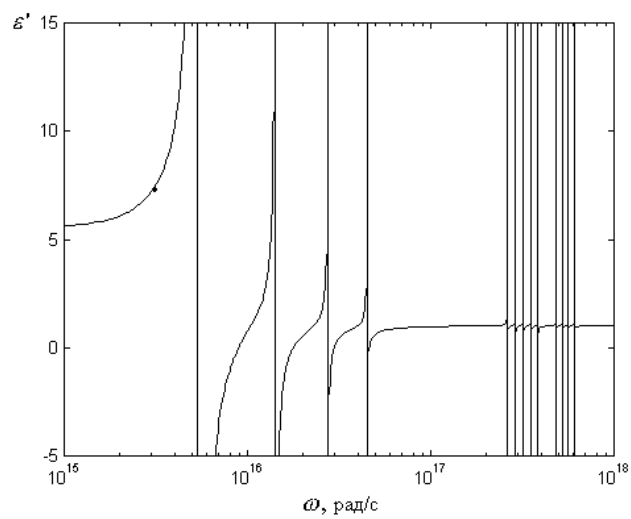


Рис. 6. Имитационный диэлектрический спектр Cu_2O ($s^* = 0,590$).

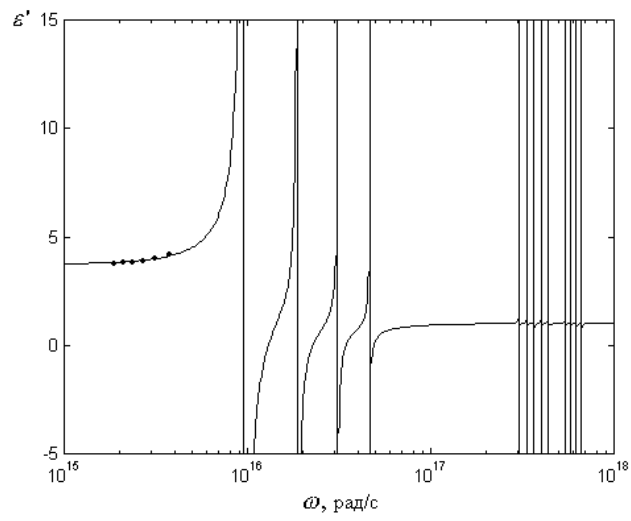


Рис. 7. Имитационный диэлектрический спектр ZnO ($s^* = 0,500$).

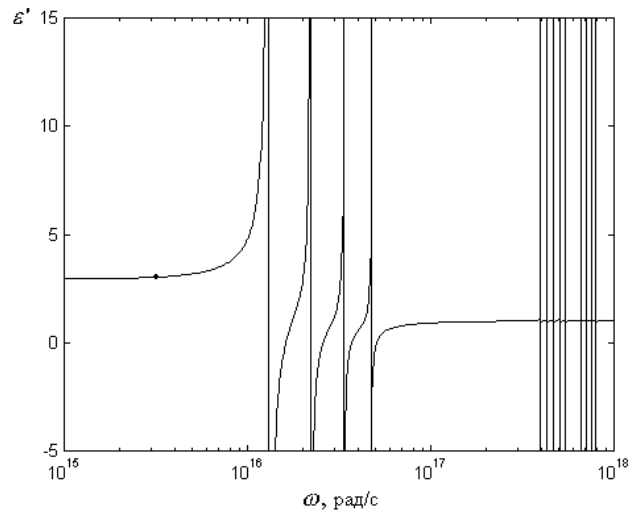


Рис. 8. Имитационный диэлектрический спектр GeO_2 ($s^* = 0,435$).

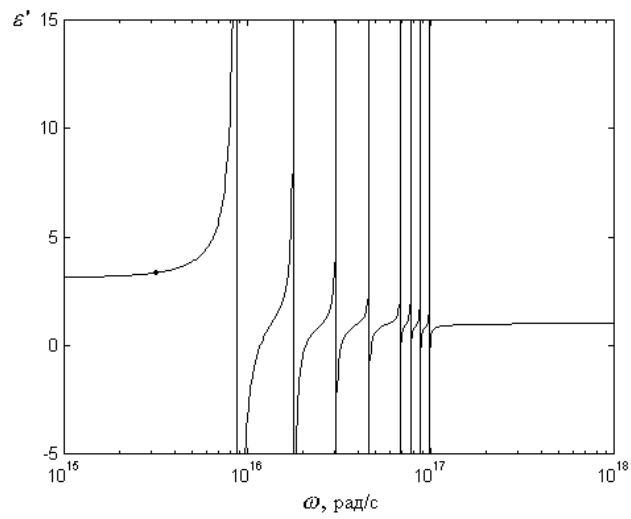


Рис. 9. Имитационный диэлектрический спектр SrO ($s^* = 0,515$).

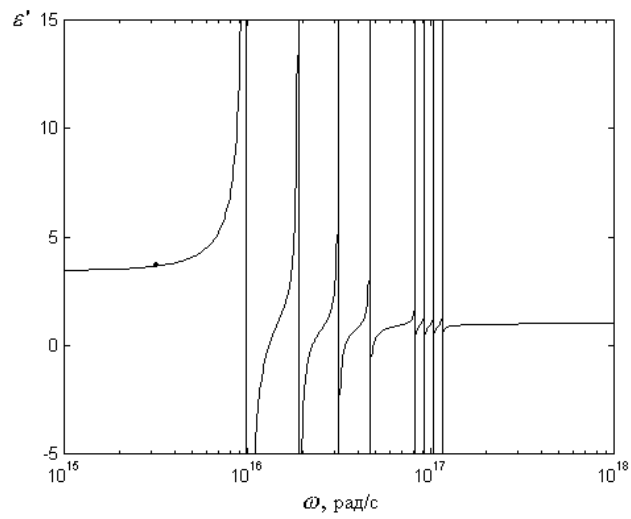


Рис. 10. Имитационный диэлектрический спектр Y_2O_3 ($s^* = 0,495$).

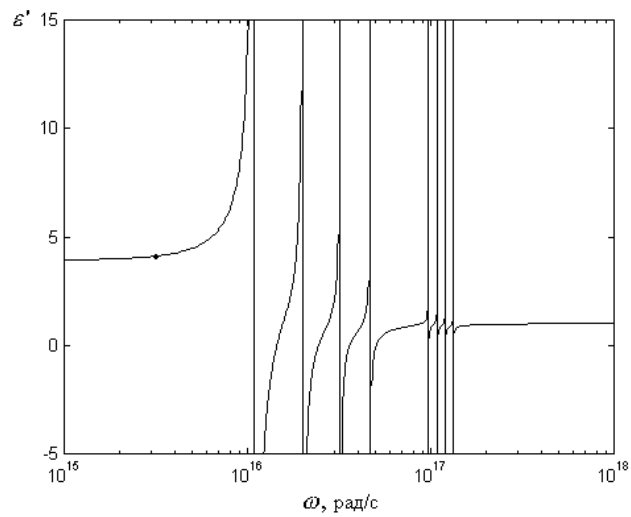


Рис. 11. Имитационный диэлектрический спектр ZrO_2 ($s^* = 0,475$).

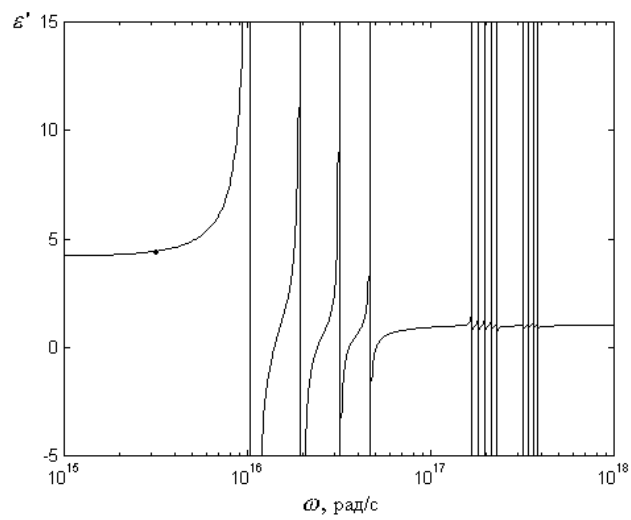


Рис. 12. Имитационный диэлектрический спектр SnO_2 ($s^* = 0,485$).

Обобщенные данные для оптимизированных значений экранирующих вкладов S^* оптических электронов иона кислорода при его химических соединениях с различными видами катионов, полученные в результате всех проведенных экспериментов, отражены в табл. 4.

Таблица 4

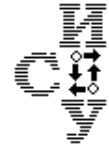
| Периоды | Ряды | Группы элементов | | | | | | | |
|---------|------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---|----------------|-----|------|
| | | I | II | III | IV | V | VI | VII | VIII |
| 1 | I | | | | | | | | |
| 2 | II | | ⁴ Be 0,385 | | | | ⁸ O | | |
| 3 | III | | ¹² Mg 0,430 | ¹³ Al 0,400 | ¹⁴ Si 0,380 | | | | |
| 4 | IV | | ²⁰ Ca 0,490 | | | | | | |
| | V | ²⁹ Cu 0,590 | ³⁰ Zn 0,500 | | ³² Ge 0,435 | | | | |
| 5 | VI | | ³⁸ Sr 0,515 | ³⁹ Y 0,495 | ⁴⁰ Zr 0,475 | | | | |
| | VII | | | | ⁵⁰ Sn 0,485 | | | | |
| 6 | VIII | | | | | | | | |
| | IX | | | | | | | | |
| 7 | X | | | | | | | | |

Анализ совокупности представленных величин позволяет констатировать следующие обстоятельства. Во-первых, с увеличением номера периода таблицы Менделеева для исходных атомов катионов в пределах одной и той же группы наблюдается рост значения экранирующих вкладов оптических электронов иона O^{-2} . Во-вторых, при увеличении номера группы в пределах одного и того же ряда имеет место уменьшение S^* .

Таким образом, в рамках системной модели упругой электронной поляризации ионного кристалла выявлена закономерность изменения экранирующих вкладов оптических электронов аниона, находящаяся в прямой зависимости с периодическим законом изменения химических свойств атомов.

Заключение

Рассмотренная модель упругой электронной поляризации, несмотря на ее максимальную приближенность к классическим трактовкам, позволяет моделировать диэлектрические спектры ионных кристаллов, практически адекватные их



наблюдаемым свойствам. При этом предлагаемая вычислительная методика является детально проработанной и достаточно универсальной. Таким образом, с одной стороны, она представляет собой вполне надежную научно-исследовательскую технологию, позволяющую расширить знания о механизмах вынужденной электрической поляризации разбираемых материалов; с другой стороны, эта методика может быть использована на прикладном (инженерном) уровне для решения задач прогнозирования эксплуатационных характеристик композиционных диэлектриков с заданным химическим составом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Выдрик Г.А., Костюков Н.С. Физико-химические основы производства и эксплуатации электрокерамики. – М., 1971.
2. Костюков Н.С., Еремин И.Е. Кибернетическая модель процесса упругой электронной поляризации диэлектрика // Электричество. – 2004. – № 1. – С. 50-54.
3. Костюков Н.С., Еремин И.Е., Оверчук В.А. Системная модель упругой электронной поляризации кристалла фторида лития // Перспективные материалы. – 2006. – № 2. – С. 33-38.
4. Еремин И.Е., Цаплина С.А. Моделирование характеристик упругой электронной поляризации флюорита. I // Информатика и системы управления. – 2006. – № 2 (12). – С. 7-16.
5. Еремин И.Е., Цаплина С.А. Моделирование характеристик упругой электронной поляризации флюорита. II // Информатика и системы управления. – 2007. – № 1 (13). – С. 3-11.
6. Еремин И.Е., Цаплина С.А. Моделирование электронной поляризации кристаллических соединений фтора // Информатика и системы управления. – 2007. – № 2 (14). – С. 67-78.
7. Ефимов А.И. и др. Свойства неорганических соединений. Справочник. – Л.: Химия, 1983.
8. Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. – Л.: Химия. 1984.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.Д. Плутенко.

УДК 532:537.311.32

© 2008 г. **В.В. Еремина**, канд. физ.-мат. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

ИМИТАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ РЕЛАКСАЦИОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ВОДЫ. I

Рассматривается возможность эффективного имитационного моделирования поляризационных свойств жидкого полярного диэлектрика, практически адекватных их физическим аналогам. В первой части работы рассмотрены виртуальные модели кластеров и конгломератов молекул H_2O , переориентация которых лежит в основе явлений релаксационной поляризации элементарного объема обыкновенной воды.