

## *Информатика, вычислительная техника и управление*

### **РАЗРАБОТКА АРХИТЕКТУРЫ ВСТРАИВАЕМОЙ СУБД МАЛЫХ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ**

**Ю.В. Конкин, А.Н. Колесенков**

Рассматривается задача проектирования систем управления базами данных (СУБД) для использования на борту малых космических аппаратов. Целью исследования является разработка структуры бортовой СУБД, описание принципов функционирования ее элементов, а также разработка универсального формата данных. Предложенная архитектура СУБД имеет низкие требования к производительности бортовой вычислительной системы и ресурсам памяти. Рассматриваются особенности работы СУБД с многоуровневой структурой памяти. Выделены компоненты физической структуры базы данных. Анализ методов доступа показывает, что условиям задачи наиболее соответствует метод бинарного выровненного дерева для доступа по первичному, уникальному или внешнему ключу. В целях сокращения объемов используемой памяти предлагается отказаться от индексирования по внешнему ключу и выполнять поиск записи при проверке ссылочной целостности последовательным просмотром таблицы. Для хранения данных в базе разработан формат, описывающий физическую структуру базы данных, который содержит необходимые для загрузки информации параметры. Доступ к данным по значению ключа основан на алгоритме обхода бинарного дерева. Эксперименты по реализации разработанной СУБД проводились на языке программирования C++ с возможностью кросс-платформенного переноса исполняемого кода

Ключевые слова: база данных, СУБД, спутник, предварительная обработка, бортовой

### **ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОЦЕССОВ ОПЕРАТИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ КООРДИНАЦИИ НА ОСНОВЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО ПОДХОДА**

**А.Н. Козлова, М.А. Цуканов, О.А. Божкова**

В статье рассматривается проблема технологической координации и оперативного управления непрерывно-дискретными производственными системами. Приводится декомпозиция задачи оперативного управления производством на этапы слежения за работой отдельных агрегатов, составления и оптимизации производственного расписания, проверки возможности реализации построенного расписания в условиях реального производства, корректировка производственного расписания в режиме on-line в случае возникновения рассогласования фактической и запланированной производственных ситуаций, проверки возможности реализации скорректированного расписания. В качестве задачи исследования рассматривается повышение эффективности решения основной проблемы технологической координации, связанной с проверкой реализации составленного расписания на основе реализации модели производственной системы, представленной последовательностью отдельных технологических агрегатов. Каждый из них дискретный по своему характеру — со своим началом и окончанием, с получением выходных результатов или конечной продукции в каждой операции, однако в динамике работа системы характеризуется как непрерывно-дискретная. Приводится обзор формализмов описания поведения таких систем и выявляются их недостатки. Рассмотрена возможность применения нечеткой модели для описания основных звеньев сложноструктурированной производственной системы при решении задачи планирования на этапах проверки и корректировки производственного расписания. Произведена апробация модели на примере сталеплавильного производства

Ключевые слова: оперативное управление, технологическая координация, оптимизация, нечеткая логика, искусственный интеллект

### **РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ МАРШРУТИЗАЦИИ ТРАНСПОРТА В ГОРОДСКИХ УСЛОВИЯХ**

**С.А. Коваленко, В.Ф. Барабанов, Н.И. Гребенникова**

Несмотря на активное применение информационных технологий, актуальность проблемы решения задачи маршрутизации транспорта в городских условиях не снижается с течением времени, поскольку практика выдвигает все более сложные задачи как по количеству оптимизируемых параметров, так и по количеству ограничений, учитываемых при ее решении.

Представлен рациональный алгоритм поиска оптимального маршрута, учитывающий особенности транспортной схемы города, что позволяет уменьшить количество вычисляемых путей, сокращая размерность исходной задачи, тем самым сокращается и время на ее решение. «Рациональным», а не «оптимальным», алгоритм называется потому, что изменен принцип формирования матрицы смежности: не вычисляются точные значения матрицы, а используются геометрические расстояния между точками.

Достоинством данного подхода является прямая зависимость точности алгоритма от вида графа, поскольку в случае большого количества пунктов назначения алгоритм поиска дает наилучшие результаты с точки зрения вычислительных ресурсов, и решение задачи доставки грузов с использованием транспортных средств в условиях крупного города является рациональным.

Строгое соблюдение сроков поставок при формировании рациональных маршрутов помогает добиться не только минимизации затрат на эксплуатацию, на перевозку людей, но и сократить расходы на хранение товарно-производственных запасов на складах

Ключевые слова: задача маршрутизации транспорта, алгоритм поиска рационального маршрута, оценка алгоритмов

## *Энергетика*

### **АНАЛИЗ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КОМПРЕССОРНОЙ СТАНЦИИ ПО КРИТЕРИЮ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОСТИ**

**Л.В. Булыгина, В.И. Ряжских**

Повышение энергоэффективности компрессорных станций (КС) – актуальная проблема в газовой отрасли. Анализ и расчет технологических режимов работы КС при этом является неотъемлемой частью решения задачи обеспечения энергоэффективности и оптимизации работы КС и всей газотранспортной системы (ГТС) в целом. В статье рассмотрены основные объекты газотранспортной системы: компрессорная станция, линейный участок магистрального газопровода, газовая смесь – природный газ. Также рассмотрен расчет аппарата воздушного охлаждения (АВО) газа (дополнительного объекта ГТС) как пункта редуцирования температуры. Освещены вопросы регулирования работы газоперекачивающих агрегатов и АВО газа.

Исследовано влияние выходных термодинамических параметров (температуры и давления) компрессорной станции на энергоэффективность работы КС. Проведен эксперимент по оценке влияния выходного давления на локальную и системную энергоэффективность КС на примере работы линейной КС с установленными на ней газотурбинными газоперекачивающими агрегатами ГПА-16. Выполнен расчет и анализ режимов работы участка газотранспортной системы с тремя линейными компрессорными станциями по критериям энергоэффективности. В качестве критериев энергоэффективности были приняты показатели годового объема потребления топливного газа на рассматриваемом участке ГТС и значения потребляемой мощности компрессорных станций.

Применение рассмотренных в статье методов расчета режимов работы КС и регулирования выходных термодинамических параметров КС позволит улучшить показатели энергоэффективности КС, уменьшить потребляемую мощность компрессорных станций и снизить затраты топливного газа

Ключевые слова: энергоэффективность, компрессорная станция, газоперекачивающий агрегат, аппарат воздушного охлаждения газа

### **АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ИЗМЕНЕНИЯ УСТАВОК ПО НАПРЯЖЕНИЮ НА ЭЛЕКТРОСТАНЦИЯХ НА ЗНАЧЕНИЯ САЛЬДО-ПЕРЕТОКА АКТИВНОЙ МОЩНОСТИ В СЕЧЕНИИ**

**В.В. Петров, А.А. Альмендеев, В.И. Полищук**

Развитие электроэнергетики, рост генерирующих и потребляющих мощностей, усложнение структуры электрических сетей кратно повышают сложность управления режимами энергосистемы в целом. Повышение эффективности управления электроэнергетическими режимами крупных энергосистем является важнейшей задачей, стоящей перед диспетчерскими службами Системного оператора и ФСК ЕЭС. У используемых в настоящее время методов оперативного управления режимами возникают трудности при возникновении превышения максимально допустимого перетока активной мощности в контролируемом сечении, что может служить причиной отключения потребителей как средствами противоаварийной автоматики, так и в результате проведения оперативных мероприятий. В настоящее время остро стоит задача в расширении арсенала средств управления утяжеленными режимами, способных снизить или полностью исключить подобные ограничения электроснабжения.

В рамках исследований вопроса управления утяжеленными режимами энергосистем использовалась разработанная авторами методика по снижению сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении крупной энергосистемы за счет использования регулирующего эффекта нагрузки по напряжению.

В результате расчетов электрических режимов по разработанной методике были получены данные, позволяющие утверждать, что за счет использования регулирующего эффекта нагрузки по напряжению было достигнуто снижение сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении на 7,4% от исходного значения.

Использование разработанной методики позволяет расширить арсенал мероприятий оперативного управления, используемых при решении задачи предотвращения развития и ликвидации недопустимого превышения сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении энергосистемы. Достоверность полученных результатов подтверждается тождественностью синтезированной модели – моделям, используемым персоналом Системного оператора, а также строгим следованием принятым методикам расчета электрических режимов

Ключевые слова: энергосистема, статические характеристики нагрузки, напряжение, максимально допустимый переток

## **АНАЛИЗ СОСТОЯНИЯ ЭРГОДИЧЕСКОГО ЭЛЕМЕНТА В СИСТЕМАХ УПРАВЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНО ОПАСНЫМИ ПРОИЗВОДСТВАМИ**

**Ю.В. Клепач, С.А. Ткалич, В.Л. Бурковский**

В статье анализируется состояние эргодического элемента в системах безаварийного управления сложными техническими системами. Рассматриваются детерминирующие психологические аспекты деятельности персонала, управляющего потенциально опасными технологическими процессами. Ставится акцент на такие факторы, как человеческий фактор, эмоциональность, мотивация, психологическая восприимчивость средств прогнозирования аварийных ситуаций. Отмечаются причины эмоциональной напряженности и, в частности, избыточная мотивация, порождающая синдром профессионального выгорания. Предлагается способ снижения рабочих факторов стресса за счет рациональной организации труда путем создания автоматизированных средств прогнозирования нештатных ситуаций, способных предугадывать действия оператора и минимизировать риск возникновения состояния паники. Исключение возможности влияния на ход процесса ошибок персонала дает минимизацию воздействия человеческого фактора на вероятность возникновения аварии. Произведена технико-экономическая оценка снижения технического риска для системы прогнозирования за счет минимизации влияния человеческого фактора. Приведен пример расчета ожидаемого экономического эффекта от внедрения системы прогнозирования аварийных ситуаций в химической, фармацевтической и атомной промышленности. Рассмотрены особенности психологической восприимчивости средств прогнозирования с учетом отраслевой направленности подготовки специалистов. Выделена приоритетная задача системы прогнозирования: формирование у персонала психологического протеста эксплуатации аварийных систем. Сформулированы детерминанты положительного психологического восприятия человеком ресурсов системы прогнозирования аварийных ситуаций: доверие ресурсам, удобный интерфейс, простота отображения процессов, органичное звуковое и световое сопровождение, ограничение доступа некомпетентных лиц

Ключевые слова: человеческий фактор, эмоциональность, мотивация, психологическая восприимчивость, аварийная ситуация, система прогнозирования

### ***Радиотехника и связь***

## **ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ УДАРНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАДИОЭЛЕКТРОННЫХ МОДУЛЕЙ ТРЕТЬЕГО УРОВНЯ**

**П.В. Иевлев**

Проведены систематические исследования механических воздействий в виде знакопостоянных одиночных ударных импульсов различной формы на радиоэлектронные модули третьего уровня моделированием в программном комплексе CREO. Для этого была использована верифицированная модель малогабаритного радиоэлектронного шкафа, в котором предусмотрены направляющие различного типа для размещения разъемных и неразъемных вставных модулей более низкого иерархического уровня. Установлен характер зависимости интенсивности отклика конструкции от формы импульса, пикового ускорения, длительности импульса и скорости нарастания ударного ускорения. Показано определяющее влияние крутизны фронта ударного импульса на характер установленных зависимостей и на «жесткость» удара. Установлено, что «жесткость» удара в случае многомодальной системы радиоэлектронного модуля третьего уровня, в основном, определяется крутизной фронта, при этом крутизна среза вносит в процесс незначительные коррективы в тех случаях, когда длительность среза становится сравнимой с длительностью фронта.

Полученные результаты положены в основу создания базы данных для моделирования механических нагрузок на радиоэлектронные модули более низкого уровня (блоки, панели)

Ключевые слова: моделирование, ударные воздействия, радиоэлектронные модули

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНЫХ ИСПЫТАНИЙ В РАДИОЭЛЕКТРОНИКЕ В СООТВЕТСТВИИ С ГОСУДАРСТВЕННЫМИ СТАНДАРТАМИ**

**В.И. Борисов, П.В. Иевлев, А.В. Муратов, Т.Л. Тураева, А.В. Турецкий**

Рассмотрены требования, предъявляемые к физическим и математическим расчетным моделям конструкций, а также возможные варианты упрощения моделей. Приведен краткий обзор физических и математических моделей ударного воздействия, представляющих наибольший практический интерес. Рассмотрены классическая модель ударного воздействия Ньютона, вязко-упругие модели ударной силы Кельвина – Фойгта, Бингема, Максвелла, Герца в исходном и модифицированном вариантах с учетом нелинейности упругой и вязкой составляющих.

Приведены примеры эффективного использования вязко–упругих моделей для решения практических задач ударных воздействий на радиоэлектронные изделия. Названы основные причины несоответствия результатов конечно-элементного моделирования с результатами натурных испытаний.

Представлены результаты модельных испытаний радиоэлектронного модуля (РЭМ) третьего уровня на этапе конструирования тремя последовательными ударами с пиковым ускорением 25g и длительностью 11 мс в соответствии с актуальным государственным стандартом

Ключевые слова: моделирование, ударные воздействия, радиоэлектронные модули

## **АЛГОРИТМ ЦИФРОВОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ДЕМОДУЛЯЦИИ ДВОИЧНЫХ СИГНАЛОВ С ОФМ И ЕГО ПОМЕХОУСТОЙЧИВОСТЬ**

**А.Н. Глушков, Е.С. Герасименко**

В статье рассмотрена проблема обработки сигналов и создания помехоустойчивой связи. Устойчивость к различным видам искажений, увеличение быстродействия и повышение помехозащищенности являются важными задачами, которые ставят перед разработчиками аппаратуры приема и обработки сигналов. В рамках исследования и предложения решения проблемы рассмотрен модернизированный алгоритм когерентной демодуляции сигналов. В тексте приведена структурная схема и рассмотрен принцип работы предлагаемого алгоритма цифровой когерентной демодуляции двоичных сигналов с относительной фазовой манипуляцией, обозначены его преимущества и недостатки относительно других известных алгоритмов. Произведено статистическое имитационное моделирование устройства, которое будет работать на основе предлагаемого алгоритма цифровой когерентной демодуляции двоичных сигналов с относительной фазовой манипуляцией. Для создания помехоустойчивой связи возможно использовать разработанные алгоритмы и соответствующее устройства когерентной цифровой демодуляции сигналов с двоичной фазовой манипуляцией и относительной фазовой манипуляцией. В результате моделирования проведена оценка помехоустойчивости когерентной демодуляции двоичных сигналов с относительной фазовой манипуляцией, доказано, что предлагаемый цифровой алгоритм демодуляции оказывается оптимальным. Определена вероятность ошибки цифровой демодуляции сигналов с четырехпозиционной относительной фазовой манипуляцией, показана высокая эффективность демодулятора при отсутствии явления «обратной работы»

Ключевые слова: алгоритм, когерентная демодуляция, относительная фазовая манипуляция

## **ИССЛЕДОВАНИЕ РАНГОВОГО АЛГОРИТМА ОБНАРУЖЕНИЯ СИГНАЛА С ППРЧ**

**П.Е. Бизюков, В.П. Литвиненко, Ю.В. Литвиненко**

Рассматриваются ранговый алгоритм обнаружения сигнала с псевдослучайной перестройкой рабочей частоты (ППРЧ) и влияние параметров сигнала на его характеристики. Предлагаемый алгоритм является непараметрическим, базируется на критерии среднего ранга и требует минимальной априорной информации о параметрах обнаруживаемого сигнала. Определены статистические характеристики рангов. В пакете MATLAB разработана программа статистического имитационного моделирования, позволяющая исследовать свойства алгоритма обнаружения и оценивать вероятности ложной тревоги и пропуска сигнала. Приведены графики, иллюстрирующие процедуру нахождения общего минимального среднего ранга. Получены рекомендации по нахождению значения оптимального порога обнаружения сигнала, исследована его зависимость от параметров сигнала. Определено влияние длительности сигнала с ППРЧ на достоверность его обнаружения, показано, что увеличение времени обнаружения приводит к уменьшению вероятности ошибки. Рассмотрено влияние длительности отдельного элемента сигнала с ППРЧ на значения вероятностей ошибок и на величину порога принятия решения. Показано, что ее уменьшение приводит к возрастанию вероятности ошибки и уменьшению величины оптимального порога

Ключевые слова: ранговый алгоритм, псевдослучайная перестройка рабочей частоты (ППРЧ), обнаружение сигналов, моделирование, MATLAB

## **МОДЕЛЬ СОСТОЯНИЙ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ ПРИ ОЦЕНКЕ ОПТИЧЕСКОЙ ЗАМЕТНОСТИ НАЗЕМНЫХ ОБЪЕКТОВ В ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНЕ ДЛИН ВОЛН**

**В.Г. Керков, В.Д. Мочалин, Г.Л. Тюрин**

Статья посвящена исследованию и выявлению закономерностей влияния различных состояний внешней среды на оценку оптической заметности наземных объектов в инфракрасном диапазоне длин волн и обоснованию модели состояний внешней среды, позволяющей проводить оценку максимальных значений абсолютного теплового контраста объекта по совокупности возможных состояний внешней среды.

Разработка данной модели определена необходимостью сокращения объема измерений, обусловленных большим количеством учитываемых параметров и характеристик внешней среды, изменяющихся в зависимости от состояния атмосферы, времени суток и времени года.

Для обоснования минимального количества состояний внешней среды, в которых наблюдаются экстремальные значения разности радиационных температур независимо от значений характеристик объектов, исследованы закономерности влияния различных состояний внешней среды на оптическую заметность наземных объектов в инфракрасном диапазоне длин волн. Выделены четыре группы состояний внешней среды, гарантирующих отыскание экстремумов контраста элементов поверхности объектов на множестве состояний внешней среды. Эта гарантия обеспечивается максимальным, при прочих равных условиях, отличием контраста элементов поверхности объекта при максимальной и минимальной облачности и учетом всех возможных качественных соотношений характеристик внешней среды.

Рассчитаны значения характеристик внешней среды, обеспечивающие оценки экстремальных по совокупности ее состояний величин контрастов элементов поверхности объекта

Ключевые слова: модель состояний внешней среды, оптическая заметность, тепловой контраст, распределение температур

## ***Машиностроение и машиноведение***

### **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАЛОЖЕНИЯ ВИБРАЦИИ НА ПРОЦЕСС ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ РАЗМЕРНОЙ ОБРАБОТКИ**

**А.И. Болдырев, А.А. Болдырев, В.В. Григораш**

При электрохимической размерной обработке вследствие засоров межэлектродного промежутка довольно часто возникают короткие замыкания, которые ведут к разрушению рабочей части электрода-инструмента. Для стабилизации анодного растворения в промышленном производстве применяются различные технические решения. Однако они не всегда достаточно эффективны, т.к. нередко ведут к снижению производительности и точности обработки.

В работе рассмотрены результаты экспериментальных исследований по устранению засоров межэлектродного промежутка при электрохимической размерной обработке. Предложено уменьшить образование засоров путем наложения на электроды вибрации, которая способствовала бы устранению неоднородности среды, разрывов потока, удалению прианодной пленки из рабочей зоны. Исследования осуществлялись в электрохимической ячейке на экспериментальной установке, где имелась возможность накладывать на электрод-инструмент колебания частотой 20, 40, 80 Гц с амплитудой 0,15 мм. Сравнительные исследования проводились без наложения вибрации на электрод-инструмент.

В результате исследований установлено, что вибрации, наложенные на электрод-инструмент при электрохимической размерной обработке, существенно уменьшают возможность образования засоров в межэлектродном промежутке. Наложение вибрации ведет к некоторому повышению производительности процесса по сравнению с обработкой без вибрации. При этом какого-либо существенного влияния на точность не обнаружено

Ключевые слова: электрохимическая обработка, вибрация, устранение засоров

### **ДОЗИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ УДАРА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ИЗ СТРУЖКИ БРИКЕТОВ ЗАРАНЕЕ НАЗНАЧЕННОЙ ПЛОТНОСТИ**

**И.А. Чечета, А.Е. Чечета**

Показано, что заранее назначенная плотность брикетов, получаемых из металлической стружки высокоскоростным ударом, предопределяется исключительно соблюдением условия о равенстве величин истинной относительной деформации материала стружки и назначенной плотности создаваемого брикета. Упомянутое условие обусловлено сущностью полученного авторами патента на изобретение [4], патентообладателем которого является Воронежский государственный технический университет. Материалы названного патента в совокупности с материалами авторского свидетельства [3], полученного ранее и касающегося дозирования энергии для динамического деформирования образцов из сплошного материала, определили возможность вычислять не только количество требуемой энергии для создания брикета с заранее назначенной плотностью, но и уровень температуры, сопровождающей удар в процессе брикетирования. В свою очередь, в любом случае наличие удара обеспечило необходимость рассматривать процесс динамического деформирования как сложную многозвенную систему, способную к развитию и совершенствованию. В качестве основных составляющих этой системы представилось необходимым выделить три подсистемы: материал, энергия и техническое окружение, в котором реализуется взаимодействие между материалом и вводимой энергией. При этом принято во внимание, что сущность *технического окружения* проявляется тем или иным свойством материи: силовым полем, магнетизмом, температурой, интервалом времени, положительным или отрицательным катализатором

Ключевые слова: энергия, истинная относительная деформация, пористость

## **ДИФфуЗИОННАЯ СВАРКА ТИТАНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАВЛЕНИЯ НА НАЧАЛЬНОМ ЭТАПЕ**

**В.В. Пешков, А.Б. Булков, И.Б. Корчагин, С.М. Ларсов**

В статье рассмотрен технологический процесс диффузионной сварки титановых конструкций. Особенностью рассматриваемой технологии является снятие внешнего сжимающего давления на заключительном этапе сварки для уменьшения накопленной деформации свариваемых заготовок.

Экспериментальные исследования проводились на цилиндрических образцах из сплава ОТ4 с исходной глобулярной микроструктурой. Сварку производили в вакууме 2,6 Па при температурах 850-950 °С и длительности выдержки 10-90 мин под давлением 2 МПа. На второй стадии образцы подвергали изотермическому отжигу в среде аргона в течение 60-180 мин.

Качество соединения оценивали по статической прочности на разрыв. Для выявления механизма формирования зоны соединения исследовались микроструктуры образцов и топографии поверхности разрушения.

Показано, что при диффузионной сварке титановых сплавов с исходной глобулярной (равноосной мелкозернистой) микроструктурой величина накопленной деформации свариваемых заготовок может быть снижена более чем в два раза. Предложено выполнять процесс сварки в интервале температур полиморфного превращения, при этом используя сварочное давление только на первом этапе для образования физического контакта площадью не менее 50 % от номинальной, а затем без давления производить изотермический отжиг. Установлена зависимость длительности изотермического отжига от температуры, позволяющая получить соединение равнопрочное основному материалу

Ключевые слова: титановые сплавы, микроструктура, диффузионная сварка, микрорельеф

### *Физика*

## **ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР $ZnO/Zn_xFe_{1-x}O$**

**И.С. Ильяшев, Ю.Е. Калинин, В.А. Макагонов, С.Ю. Панков, А.В. Ситников**

Методом ионно-лучевого распыления были получены образцы тонких пленок  $ZnO$ ,  $Zn_xFe_{1-x}O$ , а также двухслойных тонкопленочных структур  $ZnO/Zn_xFe_{1-x}O$ . Рентгеноструктурный анализ образцов  $ZnO$  и  $Zn_xFe_{1-x}O$  показал, что полученные пленки характеризуются одной кристаллической фазой с гексагональной решеткой вюрцита (пространственная группа  $R\bar{6}3mc$ ). Для исследования влияния термообработки на электрические свойства тонких пленок  $ZnO$ ,  $Zn_xFe_{1-x}O$  и двухслойных структур  $ZnO/Zn_xFe_{1-x}O$  были проведены термические отжиги в течение 30 минут при температуре 400 °С в вакууме и в воздушной атмосфере. Результаты исследования зависимостей термовольтаического отклика двухслойных структур  $ZnO/Zn_xFe_{1-x}O$  в диапазоне температур 25 – 350 °С показали, что после термообработки в вакууме и на воздухе величина отклика уменьшилась. Термический отжиг ведет к увеличению удельного электросопротивления, что может быть связано как с падением концентрации, так и изменением подвижности носителей заряда. Была проведена оценка энергии активации подвижности носителей заряда в синтезированных структурах, из которой следует, что отжиг в вакууме для всех образцов приводит к увеличению  $\Delta E$ , что может быть связано с увеличением длины прыжка между локализованными состояниями

Ключевые слова: оксидные полупроводники, удельное электрическое сопротивление, термовольтаический эффект, термоэдс, термообработка

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СОРБЦИИ-ДЕСОРБЦИИ МЕТАНА СИЛИКАЛИТОМ**

**Д.С. Куцова, Е.В. Богатиков, А.Н. Шебанов, Д.Г. Куликов, Е.Н. Бормонтов**

Методом молекулярно-динамического моделирования в пакете LAMMPS установлено повышение эффективности десорбции метана из внутрипорового пространства силикалита при использовании осциллирующего нагрева. При молекулярно-динамическом моделировании использовалась динамическая модель каркаса цеолита на основе связывающего потенциала, включающего гармоническое слагаемое и трехчастичный член. Для описания взаимодействий между адсорбентом и цеолитом использовался потенциал Леннарда-Джонса. Такие потенциалы позволяют адекватно воспроизвести как взаимодействие каркаса цеолита с адсорбентом, так и влияние температуры на кинетические процессы в системе цеолит-метан. Получены кинетические зависимости для процессов сорбции и десорбции при различных температурах. Обнаружена область температур, для которой скорость процесса десорбции метана из заполненного цеолита превышает скорость сорбции метана незаполненным цеолитом. Полученный результат позволяет объяснить эффективность осциллирующего нагрева. Решается

уравнение баланса для кинетики процессов сорбции-десорбции. Результаты молекулярно-динамического моделирования используются для нахождения температурных зависимостей параметров уравнения баланса. На основе кинетической модели сорбционно-десорбционных процессов показано, что повышение эффективности десорбции при осциллирующем нагреве действительно обусловлено видом температурной зависимости скоростей сорбции и десорбции. Предложено использование осциллирующего нагрева для регенерации газочувствительного слоя сенсоров на основе силикалита

Ключевые слова: силикалит, метан, сорбция, молекулярно-динамическое моделирование

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКОЙ ЭДС В УСЛОВИЯХ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

**А.В. Сидоров, В.М. Грабов, А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов, Д.А. Нарциссов**

В работе на основе сравнения результатов вычислительного и натурального эксперимента проводится исследование термоэлектродинамического эффекта: перекрестного эффекта, формирующегося в вязких электропроводящих средах при участии трех термодинамических сил, описываемого в рамках термодинамики необратимых процессов. Обосновывается математическая модель явления, которая представляет собой систему нелинейных, нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных, записанных для непрерывной электропроводящей среды из уравнений баланса массы, энергии и электрического заряда. Формулируется алгоритм расчета термоэлектродинамической ЭДС (ТЭК ЭДС), на основе построенной модели проводится вычислительный эксперимент. В ходе вычислительного эксперимента рассчитывается величина ТЭК ЭДС для различных значений подвижностей и теплот переноса ионов электропроводящей среды, ее температуры и концентрации, оценивается вклад сопутствующих эффектов. Сравнение полученных расчетных зависимостей с имеющимися в литературе экспериментальными позволяет сделать вывод, что построенная модель адекватно описывает основные качественные закономерности термоэлектродинамического эффекта. Дальнейшее усовершенствование модели позволит на основе количественного сравнения результатов лабораторного и вычислительного эксперимента уточнить важные характеристики электропроводящей среды и детально установить микроскопический механизм формирования новых, недавно открытых термоэлектродинамических явлений

Ключевые слова: математическое моделирование, перекрестные эффекты, термодинамика необратимых процессов, теплообмен

## **ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОБСТВЕННОЙ СПИНОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И РАЗМЕРНОГО МАГНЕТИЗМА В УЛЬТРАКОРОТКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ (0,9)**

**Г.И. Глушков, А.В. Тучин, Е.Н. Бормонтов**

Рассмотрены проблемы и основные параметры для поиска новых материалов спиновой электроники - спинтроники. В качестве решения, удовлетворяющего критериям воспроизводимости, существованию спонтанной спиновой поляризации, селективности проводимости по отношению к спине, предложены ультракороткие углеродные нанотрубки. Установлено, что в узком интервале длин нарушается правило 3к, и трубка проявляет полупроводниковые свойства, причем зазор между граничными орбиталями зависит от спина носителя. Анализ электронной структуры основного и возбужденного состояний подтверждает зависимость проводимости от спина носителя. Исследована возможность модуляции спиновой поляризации приложением внешних электрических полей и легирования металлическими примесями. Во внешних полях наблюдается увеличение спиновой поляризации до двух раз и рост разности проводимости для электронов с противоположными спинами. Впервые описан эффект инверсии спиновой поляризации, заключающийся в смене спина электронов основного канала проводимости. Расчетная приведенная энергия связи говорит о высокой стабильности структур во всем исследованном интервале длин. Дана оценка вклада примеси в общий магнитный отклик структур: допирование металлическими примесями приводит к росту спиновой поляризации, однако существует весомый вклад и чистой углеродной структуры в эффективный магнитный момент. Таким образом, ультракороткие углеродные нанотрубки удовлетворяют критериям применимости для разработки функциональных устройств спиновой электроники

Ключевые слова: спин, спиновая поляризация, спинтроника, углеродная нанотрубка

## **ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ $Rb_2ZnCl_4 - SiO_2$**

**Т.Н. Короткова, Л.С. Стеклёнова, Е. Рысьякиевич - Пасек, Л.Н. Коротков**

Путем внедрения сегнетоэлектрика с несоизмерной фазой  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  из насыщенного водного раствора в пористые стеклянные матрицы со средним диаметром сквозных пор около 320 и 160 и 23 нм приготовлены матричные нанокомпозиты системы  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4 - \text{SiO}_2$ . Рентгенофазный анализ показал, что кристаллизовавшийся в порах материал имеет такую же кристаллическую структуру, что и объемный  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Проведено сравнительное исследование температурных зависимостей диэлектрической проницаемости ( $\epsilon$ ) приготовленных композитов и объемного монокристалла  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  в интервале температур 120 – 350 К. В окрестностях температур  $T_i$  и  $T_C$ , соответствующих структурным переходам из параэлектрической в несоизмерную и из несоизмерной в сегнетоэлектрическую фазу, на зависимостях  $\epsilon(T)$  наблюдаются максимумы. Показано, что в широком интервале температур, лежащем выше  $T_C$ , зависимости  $\epsilon(T)$  следуют закону Кюри – Вейсса. В случае композитов  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4 - \text{SiO}_2$  вблизи  $T_C$  кривые  $\epsilon(T)$  более точно описываются «квадратичным законом Кюри – Вейсса». Обнаружено некоторое возрастание температуры  $T_i$  во внедренных частицах  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  по сравнению с объемным материалом. Наряду с этим переход из несоизмерной в сегнетоэлектрическую фазу в ультрадисперсном  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  становится размытым, а его температура значительно понижается

Ключевые слова: несоизмерная фаза, нанокомпозит, пористое стекло, сегнетоэлектрический фазовый переход, диэлектрическая проницаемость

## **СОВРЕМЕННЫЕ НАКОПИТЕЛИ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

**А.В. Звягинцева, А.О. Артемьева**

В статье демонстрируется процесс разработки и исследования системы гидридного хранения водорода, отвечающего требованиям безопасного хранения при сравнительно малых эксплуатационных расходах. Впервые исследовалась способность электрохимических систем к поглощению водорода. Для экспериментального подтверждения предположения, что в электрохимических системах интерметаллиды металлов могут являться структурной ловушкой для атомов водорода, демонстративно выбрана система, которая согласно литературным данным традиционно не склонна к поглощению водорода и образованию металл-гидридной фазы - электрохимический композит Ni-In. Описываются пути исследования и методология синтеза структур электрохимических композитов  $\text{Ni}_x\text{-In}_y\text{-H}_z$  на основе никеля с намеренно увеличенной степенью дефектности. Для электрохимических систем впервые в практике изучения сорбции и термодесорбции водорода для исследований в качестве тестового газа использовался дейтерий. Изготовлены образцы с различным содержанием индия. Экспериментальным путем был подобран оптимальный режим нанесения никелевых образцов: плотность катодного тока, температура электролита. Синтезирован электрохимический композит Ni-In с фазовым составом -  $\text{Ni}_{70}\text{In}_{30}$ , который обладает структурой, обеспечивающей удержание допированного дейтерия (водорода). Показывается, что содержание водорода в экспериментальных образцах композита  $\text{Ni}_x\text{-In}_y\text{-H}_z$  определенное методом термодесорбции, составляет до 8 мас. %, что подтверждает: гальванически полученный композит обладает способностью к накоплению водорода и дальнейшему сохранению его в форме металлических гидридов

Ключевые слова: никель, индий, интерметаллиды индия, ионная имплантация, аккумулялирование водорода

## **БАРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 2D СЛОИСТЫХ СТРУКТУР С РАЗНЫМ ТИПОМ МЕЖСЛОЙНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**

**А.В. Тучин, Ю.В. Каспер, Т.В. Куликова, Л.А. Битюцкая, Е.Н. Бормонтов**

Сочетание высокой подвижности электронов и дырок, теплопроводности и термодинамической стабильности обусловило высокую исследовательскую активность в изучении графена и поиска новых графеноподобных слоистых материалов, таких как 2D карбид кремния. Актуальной задачей является определение способов управления свойствами 2D слоистых материалов внешними воздействиями, такими как электромагнитные поля и давление. Целью работы является теоретическое исследование особенностей перестройки электронной структуры многослойных структур графена и карбида кремния с числом слоев от 1 до 3, подверженных одноосному сжатию. После оптимизации геометрии структур рассчитывались параметры внутрислойных и межслоевых связей, эффективный заряд, ширина запрещенной зоны. Выявлена стабилизация структур при их послойном росте. Установлена линейная барическая зависимость эффективного заряда двух- и трехслойного мультиграфена. Обнаружено пороговое изменение электропроводности для двух- и трехслойного графена при критических давлениях 20 и 30 ГПа, что определяется формированием межслоевых каналов проводимости. Установлена прямо пропорциональная зависимость ширины запрещенной зоны SiC от давления. Термодинамическая стабильность многослойных структур графена и карбида кремния, чувствительность их электронной структуры к внешнему давлению открывают возможность управления их электрофизическими свойствами внешними механическими воздействиями

Ключевые слова: слоистые материалы, мультиграфен, карбид кремния, электронная структура, давление



## **НЕЛИНЕЙНЫЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК В НАНОСТРУКТУРИРОВАННОМ ТИТАНАТЕ БАРИЯ**

**О.И. Сысоев, Т.Н. Короткова, В.В. Запорожский, Д.А. Лисицкий, Л.И. Янченко,  
Н.А. Емельянов, Л.Н. Коротков**

Путем компактирования нанопорошка титаната бария ( $\text{BaTiO}_3$ ) с последующим отжигом на воздухе при температуре  $1200\text{ }^\circ\text{C}$  получены образцы наноструктурированного титаната бария со средним размером кристаллитов около  $50\text{ нм}$ . На основании результатов рентгенофазного анализа и исследований температурных зависимостей диэлектрической проницаемости в интервале температур  $20 - 200\text{ }^\circ\text{C}$  установлено, что материал при температуре  $T_C \approx 140\text{ }^\circ\text{C}$  претерпевает сегнетоэлектрический фазовый переход первого рода. Изучена реверсивная диэлектрическая нелинейность материала в интервале электрических полей  $0 - \pm 4\text{ кВ/см}$ . Обнаруженная в параэлектрической фазе нелинейность диэлектрической проницаемости качественно соответствует предсказаниям феноменологической теории сегнетоэлектрических фазовых переходов первого рода. Наряду с этим обосновано предположение о наличии существенно выше  $T_C$  областей сегнетоэлектрической фазы, стабилизированных, предположительно, дефектами кристаллической решетки. Анализ формы, наблюдаемой в полярной фазе электрополевой зависимости диэлектрической проницаемости, указывает на существование в исследуемом материале доменной структуры

Ключевые слова: наноструктурированный сегнетоэлектрик, фазовый переход, диэлектрическая нелинейность, доменный механизм