

- Щепанский В. В., Парцевский А.А. // Черная металлургия. — М. : 1980. — Вып.15. — С. 13—33
4. Гуденау Г. В. Удаление щелочей в доменной плавке / Гуденау Г. В., Йохан Г. П., Маймет Ш. // Черные металлы. — 1997. — №2. — С. 14—22
 5. Типовая технологическая инструкция по доменному производству. — Днепропетровск, 1990. — 164 с.
 6. Производство чугуна в доменном цехе №2. Технологическая инструкция ТИ 228-Д 2-44-2001. — Кривой Рог : 2001. — 79 с.
 7. Приходько Э. В. Теоретические основы физико-химических моделей структуры многокомпонентных материалов. / Э. В. Приходько // Изв. АН СССР. Металлы. — 1991. — № 6. — С. 208—214.
 8. Д. Н. Тогобицкая Физико-химические основы создания системы контроля и управления шлаковым режимом доменной в изменяющихся шихтовых и технологических условиях / Д. Н. Тогобицкая, А. Ф. Хамхотько, А. И. Белькова, П. И. Оторвин // Теория и практика производства чугуна: материалы МНТК, посвященной 70-летию КГГМК «Криворожсталь». — Кривой Рог., 2004 г. — С. 504—508.
 9. Циватая Н. А. Прогнозирование свойств щелочесодержащих доменных шлаков на основе параметров межатомного взаимодействия / Циватая Н. А., Тогобицкая Д. Н., Гладков Н. А. // Металлургические процессы и оборудование. — 2014. №1(35). — С. 19—26
 10. Физическая химия силикатов / Под ред. А. А. Пашенко. — Киев : Вища школа, 1977. — 383 с.

пост.29.05.14

Моделювання поведінки електронів під впливом імпульсного електричного поля у присутності шуму

Д. І. КУЛИК, Ю. С. ОСЕЛЕДЧИК, С. І. ПАВЛИК

Запорізька державна інженерна академія

Методом математичного моделювання вивчається вплив шуму на процеси іонізації з кулонівського потенціалу та потенціальної ями. Визначено, що вплив шуму на іонізацію є значним, що може бути використано для керування квантовими системами.

Методом математического моделирования установлено влияние шума на процессы ионизации из кулоновского потенциала и потенциальной ямы. Установлено, что влияние шума на ионизацию является значительным, что может быть использовано для управления квантовыми системами.

The influence of noise on the processes of ionization from the Coulomb potential and potential wave was given by mathematical simulation method. The considerable influence of noise on the ionization process was obtained that can be used for the control of quantum systems.

Вступ. Багато фізичних ефектів, що мають великі перспективи для використання у науці та промисловості, виникають за рахунок взаємодії електронів з електричним полем сверхкороткого лазерного імпульсу. Подібні явища досліджуються у таких галузях, як оптика надкоротких імпульсів та наноелектроніка, що сьогодні активно розвиваються та мають значний потенціал. Опис роботи нанoeлементів (напр., нанотранзисторів) та вдосконалення їх параметрів потребують врахування динаміки електронів. Також, у процесі генерації електронів з електричним полем лазерного імпульсу накачки є ключовим. Оскільки аналітичний підхід для вивчення цих процесів є в достатній мірі недосконалим, тому що в цих умовах неможливо застосувати теорію

збурень, значні надії пов'язано із математичним моделюванням.

Постановка задачі. Для розуміння більшості нестационарних процесів при взаємодії з зовнішніми полями, досить одноелектронного наближення. При цьому завдання зводиться до вирішення нестационарного рівняння Шредінгера з заданими початковими умовами. У багатьох випадках достатньо проаналізувати одновимірну задачу, щоб отримати уявлення про реальний розвиток подій. Чисельне моделювання нестационарного рівняння Шредінгера – добре вивчена область, тим не менше, певні труднощі виникають для задач при зовнішніх полях зі стохастичною компонентою (шумовою).

Мета нашої роботи полягає у вивченні процесів іонізації електрону в зовнішньому електричному полі лазерного імпульсу з випадковою складовою. Для того щоб продемонструвати особливості нашого підходу для постановки чисельного моделювання, ми аналізуємо дві окремі задачі: по-перше, вивчаємо процес іонізації електрона із одновимірною кулонівською потенціалу за рахунок взаємодії з імпульсним електричним полем, а по-друге, ставимо аналогічну задачу для електрона в квантовій ямі вміщеній в зовнішнє періодичне поле із стохастичною фазою.

Процес генерації аттосекундного імпульсу може бути описаний за допомогою трьох-крокової моделі [1]. При зростанні фронту лазерного імпульсу, що діє на одиничний атом, значення бар'єрного потенціалу змінюється, що дозволяє електрону тунелювати крізь потенціал в континуум. Опиняючись поза дією ядра, під впливом зростаючого імпульсу, електрон прискорюється у зворотному від ядра напрямку. Коли імпульс сягає піку, електрон зупиняється, та зі зниженням інтенсивності фронту імпульсу, повертається до батьківського іону. При цьому, його надлишкова енергія може бути вивільнена у вигляді короткотривалої емісії гармонік високого порядку.

Вплив шуму на процес генерації високих гармонік було досліджено у [2,3], та показав свою конструктивну роль. Виявилось, що при певних параметрах амплітуди керуючого сигналу та шуму, потік іонізації може підсилюватися на декілька порядків. Це може бути пов'язано з можливим виникненням у такій системі ефекту стохастичного резонансу.

Опис моделі. Якщо частинка рухається у потенціалі $V(\vec{r}, t)$, то часова еволюція хвильової функції $\psi(\vec{r}, t)$ може бути описана нестационарним рівнянням Шредінгера

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t). \quad (1)$$

Усі розрахунки у роботі були використані у системі атомних одиниць, де $\hbar = e = m_e = 1$. Гамільтоніан для електрона в зовнішньому полі виглядає наступним чином:

$$H(x, t) = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x) + x\{F(t) + \xi(t)\}, \quad (2)$$

де $F(t)$, $\xi(t)$ - функції, що описують зовнішні пертурбації, \hat{p} - оператор імпульсу. Потенціал $V(x)$ у початковий момент часу обрано, як кулонівський, що добре описує взаємодію між атомом та електроном, та визначається у моделі, як

$$V(x) = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + a^2}}, \quad (3)$$

де a - параметр, що обмежує глибину потенціалу та необхідний для уникнення нескінченності.

Функція, що описує зовнішнє поле, в даному випадку - лазерний імпульс фемтосекундної тривалості, $F(t)$, описується як

$$F(t) = 2 \exp[-5(\omega_0 t / 2\pi - 1)^4] \sin \omega_0 t, \quad (4)$$

де ω_0 - частота лазерного поля [4].

Для урахування стохастичної складової до Гамільтоніану було включено функцію $\xi(t)$, що описує білий Гаусів шум. Як відомо, середнє значення вибірки

стохастичного процесу за часом $\langle \xi(t) \rangle = 0$. Оцінимо можливий вплив випадкової компоненти на прикладі класичного рівняння руху електрону $m\ddot{x} = -eE \sin(\omega t)$, де e -заряд електрону, m - маса електрону, E - амплітуда напруженості електричного поля, у монохроматичному лазерному полі:

$$m\ddot{x} = -eE \sin(\omega t) + \xi(t) \quad (5)$$

$$m \langle \ddot{x} \rangle = -eE \sin(\omega t),$$

тобто усереднена траєкторія електрону не змінюється.

Але у другому статистичному моменті:

$$m \langle x \ddot{x} \rangle = -eE \sin(\omega t) x + \langle x \xi(t) \rangle \quad (6)$$

де $\langle x \xi(t) \rangle$ - середня оцінка впливу випадкової сили, статистична складова впливає на траєкторію руху частинки. За рахунок цього зростає кінетична енергія частинки, що призводить до зростання іонізаційного потоку. Таким чином, зовнішній шум не впливає на траєкторію центру хвильового пакету, але впливає на швидкість зростання ширини пакету.

В нашій моделі ми моделюємо шумову складову згідно з стандартним підходом [5], в якому

$$\xi(t) = \sqrt{D\zeta} \sqrt{\Delta t} \quad (7)$$

де D - інтенсивність шуму, Δt - обраний крок за часом, ζ - випадкова величина, що обирається згідно з нормальним розподілом.

Для моделювання іонізації з квантової крапки, Гамільтоніан має наступний вигляд:

$$H(x, t) = \frac{\hat{p}^2}{2} + V_q(x) + F_q(x, t), \quad (8)$$

де V_q - потенціал потенційної ями, що описується, як

$$\begin{cases} V_q = 0 & \text{if } x \leq L \\ V_q = U & \text{if } x > L \end{cases} \quad (9)$$

де L - ширина потенційної ями, U - її глибина. Для спрощення завдання у точці $x=0$ знаходиться непроникна стінка, де значення потенціалу прагне до нескінченності, таким чином гранична умова $\psi(x=0) = 0$. Зовнішній вплив $F_q(x, t)$ було описано, як гармонійний сигнал з випадковою фазою

$$F_q(x, t) = \cos(x + \xi(t)). \quad (10)$$

Рівняння Шредінгера є диференціальним рівнянням другого порядку у часткових похідних та являє собою крайову задачу, у якій необхідно знайти рішення рівняння $\psi(\vec{r}, t)$, якщо відоме її значення у початковий момент часу $t=0$. Для моделювання процесу генерації аттосекундного імпульсу початкове значення хвильової функції визначалося, як:

$$\psi(x, 0) = 0.4 \exp(-x^2 / 2), \quad (11)$$

що відповідає нормальному розподілу, за допомогою якого можна апроксимувати хвильову функцію у кулонівському потенціалі без зовнішнього впливу. У зв'язку з тим, що еволюція вивчається на обмеженому проміжку часу, будь-які ефекти на границях майже відсутні.

Для задачі моделювання іонізації з квантової ями, початкова хвильова функція визначалося, як:

$$\begin{cases} \psi_q = A \sin(kx) & \text{if } x \leq L \\ \psi_q = 0 & \text{if } x > L \end{cases} \quad (12)$$

де $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ – хвильове число. Або, у системі атомних одиниць, $k = \sqrt{2E}$. Параметр A , що відповідає амплітуді коливання, також є параметром нормалізації початкового стану хвильової функції за умовою

$$\int_0^L A^2 \sin^2(kx) dx \approx 1 \quad (13)$$

$$A = \sqrt{\frac{k}{\left(\frac{kL}{2} - \frac{1}{4} \sin(2kL)\right)}} \quad (14)$$

В залежності від глибини та ширини квантової ями, рівні енергії, на яких знаходиться частинка, будуть відрізнятися. Визначити необхідний рівень енергії можна наступним чином. В області, що відповідає квантовій ямі, частинка знаходиться у зв'язаному стані, та хвильова функція такої системи описана як $\psi_I(x) = A \sin(kx)$. З іншого боку, в області, де $V_q = U$ частинка буде знаходитись у вільному стані, та опис у хвильової функції у цій області можна апроксимувати, як $\psi_{II}(x) = B \exp(-\alpha x)$, де $\alpha = 2\sqrt{U - E}$. Виходячи з умов безперервності на границі та безперервності перших похідних, маємо, що $\psi_I(L) = \psi_{II}(L)$ та $\psi_I'(L) = \psi_{II}'(L)$, тобто

$$A \sin(kL) = B e^{-\alpha L} \quad (15)$$

$$A \cos(kL) = B e^{-\alpha L} \cdot (-\alpha) \quad (16)$$

Поділивши (15) на (16) можна отримати наступний вираз:

$$\text{ctg}(x) = \sqrt{a^2 / x^2 - 1} \quad (17)$$

де $x = \sqrt{2EL^2}$, $a^2 = 2UL$.

Рішення рівняння Шредінгера. Для чисельного рішення рівняння Шредінгера було обрано метод скінченних різниць. Він зводиться до того, що на просторовій сітці з кількістю вузлів N , на якій замість безперервної похідної вводиться її скінченно-різницева апроксимація [6]

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi(x+1,t) - 2\psi(x,t) + \psi(x-1,t)}{N^2} \quad (18)$$

Похідна за часом апроксимується, як

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi(x,t+1) - \psi(x,t)}{\Delta t} \quad (19)$$

де Δt – крок за часом.

Обов'язковою умовою при виборі схеми рішення рівняння є її унітарність – модуль хвильової функції повинен залишатися постійним при переході від одного моменту часу до іншого. Це може бути досягнуто шляхом використання наступної схеми з ермітовим унітарним оператором у правій частині:

$$\psi(x,t+1) = \left[(1 - i \frac{1}{2} \Delta t \hat{D}) / (1 + i \frac{1}{2} \Delta t \hat{D}) \right] \psi(x,t), \quad (20)$$

де

$$(\hat{D}\psi(x,t)) = -\frac{\psi(x+1,t) - 2\psi(x,t) + \psi(x-1,t)}{2N^2} + V(x,t) \quad (21)$$

Із рівняння (20) отримуємо:

$$\psi(x,t+1) = \left[\frac{2}{1 + i \frac{1}{2} \Delta t \hat{D}} - 1 \right] \psi(x,t) = \chi(x,t) - \psi(x,t) \quad (22)$$

Тоді для знаходження функції $\chi(x,t)$ маємо

$$\begin{aligned} \chi(x,t+1) + \left[-2 + \frac{2i\hbar^2}{\Delta t} - N^2 V(x,t) \right] \chi(x,t) + \\ + \chi(x,t-1) = \frac{4iN^2}{\Delta t} \psi(x,t). \end{aligned} \quad (23)$$

Таким чином, для знаходження значень $\chi(x,t)$ для кожного часового кроку необхідно вирішувати систему з лінійних рівнянь N -го порядку, що є трьохдіагональною. Для рішення такої системи було застосовано метод прогонки.

Результати. Для оцінки поведінки систем було обрано розрахувати потік іонізації, що визначається, як

$$J = \text{Im}(\psi^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}), \quad (24)$$

у обраній точці спостереження x . Оцінка цього параметру може показати характер впливу зовнішніх пертурбацій на іонізацію системи. Для процесу генерації аттосекундних імпульсів з атому було отримано наступні результати (рис.1). Динаміка системи досліджувалася для часу близько одного оптичного періоду зовнішнього імпульсу (70 а.о.).

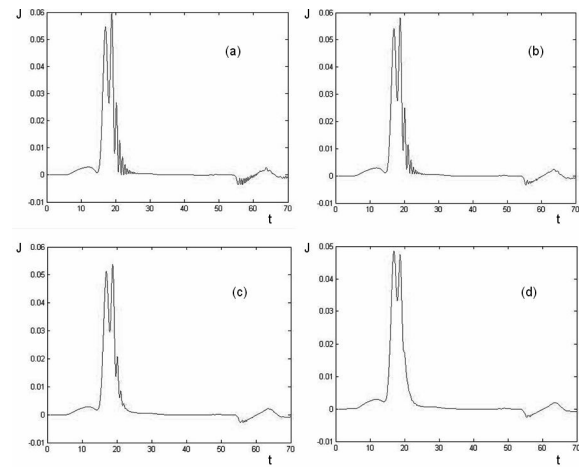


Рис. 1. Потік іонізації J для процесу генерації імпульсу як функція від часу при моделюванні з наступними значеннями амплітуди стохастичної сили: (a) - $\sqrt{D} = 0$; (b) - $\sqrt{D} = 0.5$; (c) - $\sqrt{D} = 1$; (d) - $\sqrt{D} = 1.5$;

На рис. 1(a) зображено залежність потоку іонізації від часу для випадку без урахування стохастичної сили. З графіку можна побачити, що на проміжку часу від 15 до 25 а.о. відбувається інтенсивне зростання значення потоку, що відповідає тунельній іонізації електрону у континуум. Від 25 до 55 атомних одиниць рух відсутній, що пов'язано з динамікою електрону поза атомом. На інтервалі часу 55-68 а.о. відбувається сплеск, який відповідає гальмівному випромінюванню аттосекундної тривалості, що пов'язано з повертанням електрону до атому.

На рис. 1(b-d) зображено результати розрахунку значення потоку при включенні випадкового впливу з різними значеннями інтенсивності, за якими вплив шу-

му на процес генерації одиночного аттосекундного імпульсу не викликає здвигів за часом, але негативно впливає на його середнє значення, тобто послабляє процес іонізації, та, як наслідок, зменшує інтенсивність імпульсу генерації.

Значення потоку, в залежності від часу, для визначення параметрів іонізації з квантової ями показано на *рис. 2*.

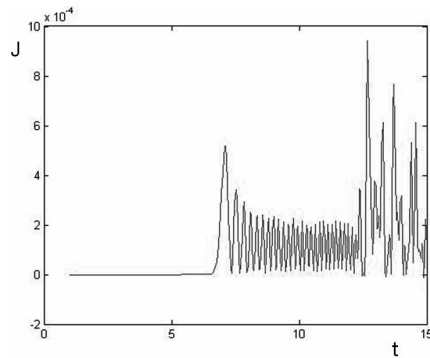


Рис. 2. Потік іонізації J для процесу іонізації з квантової ями як функція від часу.

Виходячи з отриманих даних на *рис. 2* можна оцінити час от кліку системи на зовнішній вплив, що склав близько 6.5 а.о. Досліджування впливу шуму з амплітудою $\sqrt{D} = 0.1$ на систему показало, що середнє значення потоку збільшилось на величину, близько 10^{-4} а.о., що свідчить про конструктивний вплив шуму в цих умовах.

Висновки

За результатами чисельного моделювання процесу іонізації було отримано результати відносно впливу шуму на іонізацію з атому та генерацію аттосекундного імпульсу, та іонізацію з квантової крапки. Згідно з отриманими результатами, іонізаційний потік при іонізації з квантової крапки було підсилено при додаванні стохастичної компоненти у зовнішню силу. Таким чином, цей ефект може бути використано для підвищення току у системі, а також її керуванням, та потребує подальшого дослідження.

На відміну від результатів, отриманих у [2,3] для моделювання процесу на великих значеннях часу (багато оптичних періодів), при оцінці впливу стохастичної компоненти на іонізацію атому на одному оптичному періоді, були встановлено, що значення потоку іонізації з ростом амплітуди шуму зменшується.

ЛІТЕРАТУРА

1. Corkum P B Phys. Rev. Lett. **71**, 1994 (1993).
2. Singh K P and Rost J M Phys. Rev. A **76** 063403 (2007).
3. I Yavuz, Z Altun and T Topcu J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **44** 135403 (2011).
4. А.В. Ким, М.Ю. Рябикин, А.М. Сергеев УФН **169**, 58 (1999).
5. Desmond J. Higham SIAM REVIEW **43**, № 3, p. 525–546 (2011).
6. Поршнев С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. — М. : Горячая линия. — Телеком. 2003. — 592 с.

пост.03.06.14

Динамика охлаждения при литье легко стеклующихся расплавов в металлическую изложницу

А. Б. ЛЫСЕНКО, О. Л. КОСИНСКАЯ, С. В. ГУБАРЕВ, Д. В. СОЛОВКОВ

Днепродзержинский государственный технический университет

Предложена математическая модель процессов теплопереноса, с помощью которой выполнен расчетный анализ скорости охлаждения легко стеклующихся расплавов на основе системы Zr-Cu при литье в металлическую изложницу. Установлен эффект перехода различных зон расплава к регулярному режиму охлаждения. Обоснован выбор единой динамической характеристики процесса v_m . Определены основные и второстепенные факторы, влияющие на величину v_m .

Запропоновано математичну модель процесів теплоперенесення, за допомогою якої виконано розрахунковий аналіз швидкості охолодження розплавів, що легко аморфізуються, на основі системи Zr-Cu при литті в металеву виливницю. Встановлено ефект переходу різних зон розплаву до регулярного режиму охолодження. Обґрунтовано вибір єдиної динамічної характеристики процесу v_m . Визначені основні і другорядні чинники, що впливають на величину v_m .

The mathematical model of heat transfer processes by which estimated analysis of the cooling rate for easy vitrify melts based on Zr-Cu system during casting in metal mold are proposed. The transition effect of different zones of the melt to the regular cooling mode are established. The choice of single dynamic characteristics of the process v_m are grounded. The main and secondary factors influencing on the value v_m are evaluated.