

Міністерство освіти та науки України  
Криворізький державний педагогічний університет  
Запорізький інститут економіки та інформаційних  
технологій

Комп'ютерне моделювання  
та інформаційні технології  
в науці, економіці та освіті

*Збірник наукових праць*

Том 1

Кривий Ріг  
Видавничий відділ КДПУ  
2001

УДК 681.3.001.57+37.01:007

**Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в науці, економіці та освіті:** Збірник наукових праць: В 2-х томах. – Кривий Ріг: Видавничий відділ КДПУ, 2001. – Т. 1. – 305 с.

Перший том збірника містить статті з різних аспектів застосування комп'ютерного моделювання та мережних технологій у наукових дослідженнях. Значну увагу приділено економіко-математичному моделюванню та інформаційним технологіям у ринковій економіці.

Для студентів вищих навчальних закладів, аспірантів, наукових та педагогічних працівників.

Редакційна колегія:

*В.М. Соловійов*, доктор фізико-математичних наук  
*Є.Я. Глушко*, доктор фізико-математичних наук  
*О.І. Олейніков*, доктор фізико-математичних наук  
*Я.В. Шрамко*, доктор філософських наук, професор  
*В.І. Хорольський*, доктор технічних наук, професор  
*О.А. Учитель*, доктор технічних наук, професор  
*І.О. Теплицький*, відповідальний редактор  
*С.О. Семеріков*, відповідальний секретар

Рецензенти:

*В.М. Назаренко* – д-р техн. наук, професор, завідувач кафедри інформатики, автоматики та систем управління Криворізького технічного університету  
*А.Ю. Ків* – д-р фіз.-мат. наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики Південноукраїнського державного педагогічного університету (м. Одеса)

Затверджено Вченою радою Криворізького державного педагогічного університету (протокол №7 від 08.02.2001 р.)

ISBN 966-8302-44-1

# ВРЕМЕННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ СТРУКТУРНО-НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Е.П. Никонова<sup>1</sup>, В.Н. Соловьёв<sup>2</sup>

<sup>1</sup> г. Кривой Рог, Криворожский авиатехнический колледж гражданской авиации

<sup>2</sup> г. Запорожье, Запорожский институт экономики и информационных технологий

## 1. Введение.

Известно, что низкотемпературной теплоемкости с структурно-неупорядоченных материалов – стекол, аморфных веществ – имеет аномалии [1]. Так для температурной зависимости вместо дебаевского закона  $C(T) \approx T^3$  в области температур  $T \leq 1$  К имеет место зависимость  $C(T) \approx T^{1+k}$ , где  $k \sim 0.3 - 0.4$ , а в области температур  $T \sim 10-20$  К наблюдается избыточная по сравнению с дебаевской теплоемкость. Первая аномалия находит объяснение в рамках теории двухуровневых систем (ДУС), возникающих в двухъямных потенциалах [1–3]. Согласно этой теории в рассматриваемых структурах имеют место атомы и группы атомов, которые могут находиться в двух устойчивых положениях равновесия, разделенных барьером. При низких температурах этот барьер преодолевается путем квантово-механического туннелирования.

Если предположить, что плотность ДУС  $n(E)$  постоянна, то имеем  $C \sim T$ . Происхождение зависимости  $C(T) \approx T^{1+k}$  окончательно не выяснено. Пик в зависимости  $C/T^3$  от температуры связан со спецификой плотности высокоэнергетических возбуждений [4, 5] и его обсуждение не входит в цели настоящей работы.

Кроме температурных аномалий  $C$  имеет аномальную зависимость от времени эксперимента [6, 7]. Если  $n(E) = const$ , то  $C(t)$  – слабая логарифмическая зависимость от времени. Эксперимент же указывает на значительно более сложную зависимость (рис. 1).

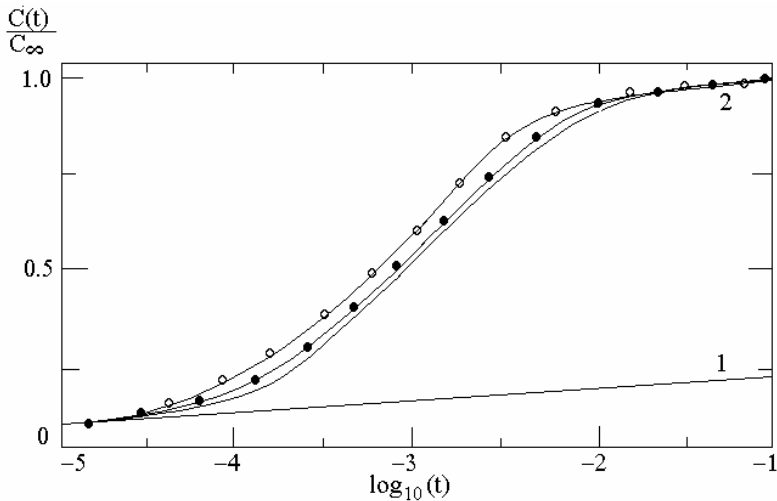


Рис. 1. Изменение низкотемпературной теплоемкости ДУС с течением времени: 1 – в стандартной модели ДУС, 2 – эксперимент, сплошная кривая – данные расчетов.

В настоящей работе аномалии как температурной, так и временной зависимости  $C$  интерпретированы с единых позиций. Если учесть следующую из расчетов [8] энергетическую зависимость плотности ДУС  $n(E) \propto E^k$ , упомянутые зависимости становятся естественными.

## 2. Расчет зависимости теплоемкости от времени.

Рассмотрим систему ДУС с энергетическими расщеплениями (расстояниями между наименьшими уровнями энергии)  $E \equiv E_{12}(\eta, t)$ . Здесь  $\eta$  и  $t$  – случайные некоррелированные величины одномодового разложения потенциальной энергии двухъямного потенциала

$$V(x) = \varepsilon_0 [\eta(x/a)^2 + t(x/a)^3 + (x/a)^4], \quad (1)$$

где  $a$  – характерный атомный объем,  $\varepsilon_0$  – энергия порядка энергии связи атомов стекла. Функции распределения параметров найдены в [9].

На рис. 2 показана поверхность постоянной энергии  $E_{12}(\eta, t)$ , полученная из решения уравнения Шредингера с потенциалом (1). Очевидно, что ДУС распределены неравномерно: состояни-

ям с наименьшим расщеплениями отвечают значения  $\eta$  и  $t$ , реализуемые при  $\eta=0$  и вдоль отчетливо заметных «желобов».

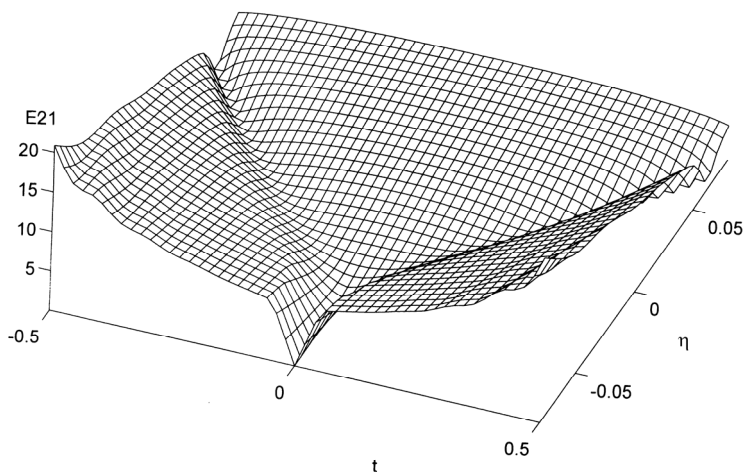


Рис.2. Зависимость энергии ДУС от параметров потенциала  $\eta$  и  $t$ .

Запишем энергию, запасенную системой ДУС в виде

$$E(T, t) = \langle \Phi(\eta) F(t) E(\eta, t) n(E, T, t) \rangle. \quad (2)$$

Усреднение в (2) производится по  $\eta$ ,  $t$  с распределениями  $\Phi(\eta)$  и  $F(t)$ .

Заселенность верхнего уровня ДУС  $n$  найдем из уравнения

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{n - n_0}{\tau}, \quad (3)$$

где  $n_0 = 1/[1 + \exp(E/T)]$  – равновесная заселенность ДУС с расщеплением  $E$  при температуре  $T$ . Время релаксации ДУС за счет однофононных процессов дается выражением [1]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\Delta_0^2 E \gamma^2}{2\pi \rho \hbar^4 v^5} \coth \frac{E}{2T}. \quad (4)$$

В (4)  $\gamma$  – деформпотенциал ДУС,  $\rho$  – плотность стекла,  $v$  – скорость звука.  $\Delta_0$  – так называемое туннельное расщепление, связанное с энергией ДУС и асимметрией двухъямного потенциала  $\Delta$  соотношением  $E = \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0}$ .

Решение (3) запишем в виде

$$n = n_0 + (n(0) - n_0) \exp(-t/\tau), \quad (5)$$

где  $n(0)$  – заселенность верхнего уровня ДУС в момент времени  $t=0$ .

Окончательно искомую зависимость получим из выражения

$$C(T, t) = \frac{\partial}{\partial T} [E(T, t)]. \quad (6)$$

Результаты расчетов и сравнение с экспериментальными данными приведены на рис. 1.

### 3. Обсуждение результатов и выводы.

Основные результаты работы сводятся к следующим утверждениям:

- низкоэнергетический спектр структурно-неупорядоченных материалов можно найти из уравнения Шредингера с потенциалом (1) и функциями распределения параметров  $\eta$  и  $t$ ;
- плотность состояний ДУС не постоянна, а имеет слабую энергетическую зависимость  $n(E) \propto E^k$  ( $k=0,3$ );
- как температурная, так и временная зависимости низкотемпературной теплоемкости определяются энергетической зависимостью плотности ДУС:  $C(T) \approx T^{1+k}$ , а  $C(t)$  – немонотонно меняется со временем.

Таким образом, в рамках единого подхода удается удовлетворительно описать поведение низкотемпературной теплоемкости в стеклах и аморфных структурах.

#### Литература.

1. Phillips W.A. Two-level states in glasses // Rep. Prog. Phys. – 1987. – v.50. – p. 1657-1708.
2. Phillips W.A. Tunneling states in amorphous solids // J. Low. Temp. Phys. – 1972. – v.7, №2. – p. 351-357.
3. Anderson P.W., Halperin B.I., Varma C.M. Anomalous low-temperature thermal properties of glasses and spin glasses // Phil. Mag. – 1972. – v.25, №1. – p. 1-9.
4. Гальперин Ю.М., Карпов В.Г., Соловьев В.Н. О низкотемпературной теплоемкости аморфных веществ. // ФТТ. – 1988. – т.30, в.12. – С. 3636-3642.

5. Kanelhardt J.W., Russ S., Bunde A. Excess modes in the vibrational spectrum of disordered systems and the boson peak // *Phys. Rev. B.* – 2001. – v. 63.
6. Laponen M.T., Dynes R.C., Narayanamurti V., Garno J.P. Measurements of the time-dependent specific heat of amorphous materials // *Phys. Rev. B.* – 1982. – v.25, № 2. – p. 1161-1173.
7. Lasjaunias J.C., Biljakovic' K., Moncean P. Time-dependent specific heat below 1K in spin-density-wave state of  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ . // *Phys. Rev. B.* – 1996. – v.53, №12. – p. 7699-7703.
8. Никонова Е.П., Соловьев В.Н. Низкотемпературные аномалии физических свойств металлических стёкол // *Металлофиз. и новейшие технолог.* – 1999. – т.21, №3. – С. 27-30.
9. Дядына Г.А., Карпов В.Г., Соловьев В.Н. Низкоэнергетические возбуждения в  $\alpha\text{-SiO}_2$ . // *ФТТ.* – 1990. – т.32, в.9. – С. 2661-2666.

## Зміст

<i>А.А. Архипенко, Е.Я. Глушко, Д.В. Дедюлин.</i> Измерение слабых токов в ультрадисперсных средах .....	3
<i>І.В. Бакушевич, В.П. Мартинюк, В.М. Гора.</i> Комп'ютерне моделювання оцінки стану економічної безпеки регіонів України.....	7
<i>О.Г. Белз.</i> Формування стратегій управління підприємством.....	11
<i>В.А. Бельский.</i> Решение прямой томографической задачи при помощи сплайнов .....	17
<i>А.А. Блажко, А.А. Завалин, И.А. Головатюк.</i> Моделирование систем управления асинхронным тиражированием данных.....	20
<i>О.А. Бойченко.</i> Дослідження та розробка систем пошуку інформації .....	26
<i>Н.В. Витюк.</i> Использование мер структурного подобия в анализе связи «структура – свойство (активность)» .....	31
<i>Н.В. Витюк.</i> Анализ связи «структура – вкусовые свойства» производных бензола на основе топологической модели молекулы .....	38
<i>А.А. Витязь, В.П. Логвинчук, В.А. Платоненко.</i> UML как основа построения поля корпоративных знаний .....	46
<i>В.М. Гиковатый.</i> Метод определения синергетического эффекта в задачах управления развитием .....	53
<i>Е.Я. Глушко, С.Л. Легуша.</i> Электромагнитное тушение в 1D фотонных кристаллах: запертые моды и прошедшее излучение ...	58
<i>Е.Я. Глушко, Н.А. Слюсаренко.</i> Спектр электронов сродства в наноглеродном монослое.....	65
<i>И.И. Давыдов, Р.С. Ракша.</i> Приемы компьютерного моделирования нелинейных колебаний узлов и конструкций составных сооружений .....	72
<i>Т.І. Демківська.</i> Алгоритмізація статистичного вибору структури ARIMA моделей .....	78
<i>А.А. Добровольский.</i> Теоретические вопросы стратегического управления банком.....	86
<i>А.М. Дроздов, Е.А. Дроздов.</i> Развитие концепции абсолютного мира.....	92
<i>В.М. Євсіков.</i> Комп'ютерне моделювання математичних більярдів у плоских фігурах.....	94
<i>В.Н. Евтеев.</i> Особенности предельного перехода от конечной к бесконечной модели кристалла.....	95



<i>О.К. Елисеєва, О.В. Пошивалова.</i> Применение системы управления качеством продукции – одно из важнейших условий конкурентоспособности изделий .....	99
<i>А.О. Жолос.</i> Застосування методу нейронних мереж при визначенні напрямку операцій на ринку цінних паперів .....	101
<i>Л.Л. Жукова, І.І. Копайгора, О.О. Федоренко.</i> Моделювання соціального статусу викладача вузу .....	108
<i>Л.М. Карпуков, С.Н. Романенко, А.С. Романенко.</i> Система квазистатического моделирования полосковых структур многослойных интегральных схем СВЧ .....	114
<i>А.Е. Ків, V.N. Solovyov, S.A. Tomilin.</i> Formation of Si precipitates in neutron irradiated Al.....	119
<i>Ю.А. Ковалев, К.В. Зацелкин.</i> О подходе к автоматизации проектирования и моделирования микропрограммных автоматов ...	127
<i>С.М. Коваленко, О.В. Король, В.А. Дяченко, О.Д. Стадник.</i> Імітаційне та математичне моделювання для освітніх і наукових цілей .....	134
<i>С.В. Кукліна, Н.В. Моїсеєнко.</i> Нові інформаційні технології в курсі фізики твердого тіла .....	138
<i>Т.С. Лось.</i> Экономико-математическое моделирование и информационные технологии в рыночной экономике .....	143
<i>Г.Ю. Маклаков, Г.Г. Маклакова.</i> Семиотический подход к компьютерному моделированию структуры литературных и генетических текстов.....	150
<i>О.М. Марченко, С.П. Алексєєвич.</i> Впровадження початків економіко-математичного моделювання на основі інформаційних технологій в середньому навчальному закладі нового типу.....	155
<i>Е.П. Никонова, В.Н. Соловьёв.</i> Временная зависимость низкотемпературной теплоемкости структурно-неупорядоченных материалов.....	160
<i>П.Ф. Овчинников, Г.В. Налева.</i> Содержание и место математического моделирования как предмета в вузе .....	165
<i>И.Д. Павлов, Е.Ю. Антипенко.</i> Вероятностная оценка NPV проекта, основанная на коэффициентах корреляции элементов денежных потоков по периодам выполнения проекта .....	169
<i>И.Д. Павлов, И.А. Арутюнян.</i> Разработка плана организационно-технического развития методом оптимального программирования .....	175

<i>И.Д. Павлов, Д.Ю. Мамотенко.</i> Управление проектами универсальным алгоритмом на основе сетевого моделирования .....	180
<i>И.Д. Павлов, М.Д. Терех.</i> Моделирование оптимального сопротивления теплопередаче ограждающих конструкций зданий в новых экономических условиях .....	188
<i>А.В. Погорілецька.</i> Моделювання у дослідженні соціальних явищ .....	193
<i>С.С. Поливцев.</i> Экспериментально-статистические модели физико-механических свойств дегтебетона .....	197
<i>А.П. Полищук, С.А. Семериков.</i> Некоторые особенности программной реализации методов экспериментальной идентификации линейных процессов .....	202
<i>В.М. Порохня, Ю.В. Головка.</i> Математична модель оптимізації зміни тарифів за послуги, що надаються організаціям та населенню .....	211
<i>Н.А. Рашевский.</i> Вычислительный эксперимент в теоретических исследованиях (о проблеме Фробениуса) .....	216
<i>Н.О. Ризун.</i> Экспертная система планирования работы горно-транспортного комплекса железорудного карьера .....	218
<i>Н.І. Соколянська.</i> Моделювання автоматизації документообігу з позицій корпоративного менеджменту .....	225
<i>В.Н. Соловьев, С.А. Семериков, И.А. Теплицкий.</i> Особенности компьютерного моделирования в социально-гуманитарных науках .....	230
<i>В.Н. Соловьев, С.А. Томилин.</i> Эмпирические потенциалы для моделирования разупорядоченных структур .....	237
<i>С.П. Сонько, А.А. Попов, І.О. Єрмілов.</i> Електронна картографічна модель як перший крок до створення багатозальної ГІС Кривбасу .....	241
<i>В.Н. Стаценко.</i> Проблемы формализации социально-экономических процессов .....	245
<i>А.Н. Сташатов.</i> Компьютерная реализация экспертной системы подготовки и планирования производства в визуальной объектно-ориентированной среде программирования .....	250
<i>О.Б. Стефановський, Є.В. Сніжко.</i> Алгоритмізація розробки нагрівачів робочого газу спрощених модифікацій двигунів Стирлінга .....	257
<i>Э.В. Терещенко, В.А. Терещенко.</i> Задачи анализа скрытых зако-	

номерностей эмпирических данных .....	262
<i>О.В. Федорова.</i> Комп'ютерне моделювання хімічної дифузії..	267
<i>Е.А. Черкас.</i> Моделирование структуры межфазного слоя волокнистого металлокомпозита .....	272
<i>В.Ф. Шапо.</i> Построение и анализ вычислительных сетей на основе сетевой технологии Wideband .....	276
<i>Е.Я. Швец, Ю.С. Оселдчик, Т.Н. Точилина, Н.В. Свитанько.</i> Виртуальный лабораторный практикум по общей физике .....	281
<i>Я.В. Шрамко.</i> Онтологическая модель истинностных значений .....	287
<i>Т.А. Щербак.</i> Моделювання процесу формування планових завдань виробництва готової продукції підприємства в умовах ринку .....	298

Наукове видання

**Комп'ютерне моделювання  
та інформаційні технології  
в науці, економіці та освіті**

**В 2-х томах**

**Том 1**

Підп. до друку 12.04.2001  
Бумага офсетна №1  
Ум. друк. арк. 16,08

Формат 80x84 1/16.  
Зам. №4-1107  
Наклад 500 прим.

Видавничий відділ Криворізького державного педагогічного університету  
КДПУ, 50086, Кривий Ріг-86, пр. Гагаріна, 54

---

E-mail: cc@kpi.dp.ua