Для сохранения поляризованного состояния TGS применяют несколько методов. Это — облучение γ-квантами образца, помещенного в электрическое поле; нанесение на образец различных управляющих электродов; введение в процессе выращивания кристаллов активных примесей типа внедрения и замещения.

Модифицированные кристаллы TGS получены путем частичного замещения глициновой группы на аминокислоту L - лейцин (L-L), содержание которого составляло до 10 мол.% в растворе. Кристаллы L-LTGS выращены при постоянных температурах роста в сегнетоэлектрической фазе.

Выполнены комплексные исследования пироэлектрических и поляризационных свойств новых сегнетоэлектрических кристаллов L-LTGS по наиболее развитым пирамидам роста.

Исследования показали, что применение лиганда L — лейцина существенно влияет на параметры пирокачества y/ϵ, M_2 и на поляризационные характеристики P_s. $E_($, $E_{см}$ и др.

Дано сравнение пироэлектрических и поляризационных параметров кристаллов L-LTGS и TGS, L-VTGS .

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ ПО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

Д.В. Гапанюк

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор ***В.С. Вихренко***

Белорусский государственный технологический университет

Диффузия является одним из наиболее распространенных явлений, контролируемых перераспределение компонентов в системе и, поэтому, играющим важнейшую роль во многих производственных процессах. Согласно феноменологической теории необратимых процессов [1-2], потоки компонентов пропорциональны градиентам соответствующих химических потенциалов, а коэффициенты пропорциональности называют кинетическими коэффициентами диффузии. С другой стороны, согласно закону Фика, потоки компонентов пропорциональны градиентам концентрации, и в эти выражения входят коэффициенты химической диффузии. Перерасчет коэффициентов диффузии осуществляется с помощью производных химических потенциалов по концентрациям компонентов.

Моделирование динамики частиц в системе производилось по методу Монте-Карло. Алгоритм моделирования [3] модифицирован к особенностям исследования двухкомпонентных систем с межчастичным отталкиванием. Для системы N частиц сортов A и B на периодической двухмерной решетке исходными условиями моделирования являлись температура T, концентрация компонентов c_A и c_B , потенциалы взаимодействия между ближайшими соседями $J_{AA}=-J$, $J_{BB}=J_BJ$ и $J_{AB}=J_{AB}J$ на квадратной решетке размером $L\times L$ (L=32) узлов с периодическими граничными условиями, которые позволяют существенно уменьшить влияние конечных размеров моделируемой системы на результаты моделирования. Начальное состояние системы генерировалось путем случайного выбора узла решетки с координатами (α,β) ($1\leq\alpha\leq L$, $1\leq\beta\leq L$, где α и β – целые числа), в который помещалась частица. Заполнение решетки производилось до числа частиц $N = L \times L(c_A + c_B)$.

Моделирование динамики частиц осуществлялось случайным выбором узла (α,β) решетки, занятого частицей любого сорта. Затем разыгрывался переход этой частицы в один из четырех ближайших узлов. Если узел не был занят, то вычислялась вероятность перехода частицы P_1. Эта вероятность сопоставлялась со случайной величиной $0\leq P\leq 1$. При $P\leq P_1$ переход частицы принимался, в противоположном случае состояния узлов оставались прежними, и осуществлялся переход к анализу следующего узла. Один шаг процедуры Монте-Карло (МКШ) состоял из числа попыток перемещения частиц, равного числу частиц в системе. Типичная длина траектории составляла 50000 МКШ, и усреднение производилось по 10^3 траекторий. Как и следовало ожидать, зависимость среднего квадрата перемещения частиц от времени близка к линейной. Аппроксимировав полученные кривые линейными зависимостями, находим соответствующие кинетические коэффициенты диффузии.

Моделирование было выполнено в области изменения концентраций компонентов от 0 до 0,95 при значении приведенной температуры T/T_c=1,5, выраженной в единицах критической температуры компонента A ($k_B T_c$=0,567J). Параметры взаимодействия приняты положительными и равными J_B=1,44, J_{AB}=1,2 ($J_{AB}=\sqrt{J_B}$), что соответствует межчастичному отталкиванию.

Ввиду межчастичного отталкивания интенсивнее взаимодействующие частицы сорта B более подвижны. Однако при увеличении концентрации частиц сорта A ситуация изменяется и подвижность частиц обоих сортов выравнивается. Такое поведение обусловлено взаимным распределением частиц в системе. При низких концентрациях пары частиц сорта B мало вероятны и коэффициенты диффузии определяются взаимодействием частиц разных сортов или сорта A.

Литература

1. Bokun G. S., Groda Ya.G., Uebing C., Vikhrenko V.S. // Physica A. – 2001. – V. 296.
2. Де Гроот С.Р. и Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1974.
3. Бокун Г.С., Вихренко В.С., Гапанюк Д.В. // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. XI. -2003. -С. 63.

КОМПЛЕКСНЫЕ КВАЗИПОЛИНОМИАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Р.И. Гаранин, Н.Н. Кравченко

Научный руководитель – к.ф.- м.н., доцент ***Ю.В. Трубников***

Витебский государственный университет им. П. Машерова

Целью исследования является нахождение комплекснозначных решений уравнения Шредингера, при этом метод разделения переменных не используется. В результате получены комплексные квазиполиномиальные решения.

Рассмотрим движение двумерного изотропного осциллятора, у которого $\omega_1=\omega_2=\omega$. Потенциальная энергия U такого осциллятора выражается формулой $U=\frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2)$. Уравнение Шредингера соответственно имеет вид

$$\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{m\omega^2}{2}\left(x^2+y^2\right)\right]\psi=0. \tag{1}$$

Покажем, что функция

$$\psi(x,y)=(x+iy)^n e^{-a(x^2+y^2)} \quad (n=0,1,2,...)$$

при $a=\frac{m\omega}{2\hbar}$ является решением уравнения (1). Действительно,

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=n^2(x+iy)^{n-2}e^{-a(x^2+y^2)}-n(x+iy)^{n-2}e^{-a(x^2+y^2)}-4nax(x+iy)^{n-1}e^{-a(x^2+y^2)}-$$
$$-2a(x+iy)^n e^{-a(x^2+y^2)}+4a^2x^2(x+iy)^n e^{-a(x^2+y^2)};$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-n^2(x+iy)^{n-2}e^{-a(x^2+y^2)}+n(x+iy)^{n-2}e^{-a(x^2+y^2)}-4inay(x+iy)^{n-1}e^{-a(x^2+y^2)}-$$
$$-2a(x+iy)^n e^{-a(x^2+y^2)}+4a^2y^2(x+iy)^n e^{-a(x^2+y^2)}.$$