

ВЕСТНИК
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

ISSN 2949-5083 (print)

2024 / № 2

ISSN 2949-5067 (online)

серия

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА

Рецензируемый научный журнал. Основан в 1998 г.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» включён в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук» Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации (См.: Список журналов на сайте ВАК при Минобрнауки России) по следующим научным специальностям: 1.3.3. – Теоретическая физика (физико-математические науки); 1.3.8. – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

The peer-reviewed journal was founded in 1998

«Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics» is included by the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation into “the List of reviewed academic journals and periodicals recommended for publishing in corresponding series basic research thesis results for a Ph.D. Candidate or Doctorate Degree” (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation) on the following scientific specialties: 1.3.3. – Theoretical physics (physical-mathematical sciences); 1.3.8. – Physics of the condensed state (physical-mathematical sciences) (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation).

ISSN 2949-5083 (print)

2024 / № 2

ISSN 2949-5067 (online)

series

PHYSICS AND MATHEMATICS

BULLETIN
OF FEDERAL STATE UNIVERSITY
OF EDUCATION

Учредитель журнала

«Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика»

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

Государственный университет просвещения

Выходит 4 раза в год

Редакционная коллегия

Главный редактор:

Бугаев А. С. — д. ф.-м. н., академик РАН, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Заместитель главного редактора:

Кузнецов М. М. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения

Ответственный секретарь:

Чукаловская Е. М. — Государственный университет просвещения

Члены редакционной коллегии:

Беляев В. В. — д. т. н., проф., Государственный университет просвещения;

Боголюбов Н. Н. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Бугримов А. Л. — д. т. н., проф., Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство);

Гладков С. О. — д. ф.-м. н., проф., Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет);

Емельяненко А. В. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Жачкин В. А. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Калашников Е. В. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Осипов М. А. — д. ф.-м. н., проф., Университет Стратклайд (Великобритания);

Рыбаков Ю. П. — д. ф.-м. н., проф., Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы;

Чаругин В. М. — д. ф.-м. н., проф., Московский педагогический государственный университет;

Чигринов В. Г. — д. ф.-м. н., проф., Гонконгский университет науки и технологий (Китай)

ISSN 2949-5083 (print)

ISSN 2949-5067 (online)

Рецензируемый научный журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» публикует статьи по математическим проблемам термодинамики, кинетики и статистической физики; теории конденсированного состояния классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем; изучению различных состояний вещества и физических явлений в них; статистической физике и кинетической теории равновесных и неравновесных систем; теоретическому и экспериментальному исследованию физических свойств неупорядоченных неорганических систем; изучению экспериментального состояния конденсированных веществ и фазовых переходов в них. Журнал адресован ученым, докторантам, аспирантам и всем, интересующимся достижениями физико-математических наук.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия «Физика-математика» зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия. Регистрационное свидетельство ПИ № ФС 77-73344.

Индекс серии «Физика-математика» по Объединенному каталогу «Пресса России» 40723

Журнал включён в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), имеет полнотекстовую сетевую версию в интернете на платформе Научной электронной библиотеки (www.elibrary.ru), с августа 2017 г. на платформе Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (www.cyberleninka.ru), а также на сайте журнала «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» (www.physmathmgou.ru).

При цитировании ссылка на конкретную серию «Вестника Государственного университета просвещения» обязательна. Публикация материалов осуществляется в соответствии с лицензией Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

Ответственность за содержание статей несут авторы. Мнение автора может не совпадать с точкой зрения редколлегии серии. Рукописи не возвращаются.

Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. — 2024. — № 2. — 80 с.

© Государственный университет просвещения, 2024.

Адрес редакции:

г. Москва, ул. Радио, д.10А, стр. 1, офис 98

тел.: (495) 780-09-42 (доб. 6101)

e-mail: info@vestnik-mgou.ru; сайты: www.physmathmgou.ru; www.vestnik-mgou.ru

Founder of journal
«Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics»
Federal State University of Education

————— Issued 4 times a year —————

Editorial board

Editor-in-chief:

A. S. Bugaev – Doctor of Physics and Mathematics, Academician of RAS, Moscow Institute of Physics and Technology

Deputy editor-in-chief:

M. M. Kuznetsov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Federal State University of Education

Executive secretary:

E. M. Chukalovskaya – Federal State University of Education

Members of Editorial Board:

V. V. Belyaev – Doctor of Technical Sciences, Professor, Federal State University of Education;

N. N. Bogolyubov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

A. L. Bugrimov – Doctor of Technical Sciences, Professor, The Kosygin State University of Russia;

S. O. Gladkov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University);

A. V. Emelyanenko – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

V. A. Zhachkin – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Federal State University of Education;

E. V. Kalashnikov – Doctor of Physics and Mathematics, Federal State University of Education;

M. A. Osipov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, University of Strathclyde (Glasgow, UK);

Yu. P. Rybakov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, People's Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba;

V. M. Charugin – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State Pedagogical University;

V. G. Chigrinov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Hong Kong University of Science and Technology (China)

ISSN 2949-5083 (print)

ISSN 2949-5067 (online)

The reviewed scientific journal "Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics" publishes articles on mathematical problems of thermodynamics, kinetics and statistical physics; the theory of the condensed state of classical and quantum, macroscopic and microscopic systems; the study of various states of substance and physical phenomena in them; statistical physics and the kinetic theory of equilibrium and non-equilibrium systems; theoretical and experimental research of physical features of disordered inorganic systems; the study of the experimental state of condensed substances and phase transitions in them. The journal is addressed to scientists, doctoral students, PhD students and everyone interested in the achievements of physical and mathematical sciences.

The series "Physics and Mathematics" of the Bulletin of Federal State University of Education is registered in Federal service on supervision of legislation observance in sphere of mass communications and cultural heritage protection. The registration certificate ПИ № 00 77 – 73344.

Index series «Physics and Mathematics» according to the union catalog «Press of Russia» 40723

The journal is included into the database of the Russian Science Citation Index, and its full texts are available through scientific electronic libraries "eLibrary" (www.elibrary.ru) and "CyberLeninka" (since August 2017; www.cyberleninka.ru), as well as on the site of "Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics" (www.physmathmgou.ru).

At citing the reference to a particular series of «Bulletin of State University of Education» is obligatory. Scientific publication of materials is carried out in accordance with the license of Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

The authors bear all responsibility for the content of their papers. The opinion of the Editorial Board of the series does not necessarily coincide with that of the author. Manuscripts are not returned.

Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics. – 2024. – № 2. – 80 p.

© SUE, 2024.

The Editorial Board address:

10A build. 1 Radio str., office 98, Moscow, Russia

Phone: (495) 780-09-42 (add. 6101)

e-mail: info@vestnik-mgou.ru; sites: www.physmathmgou.ru; www.vestnik-mgou.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Жуков Н. Д., Клецов А. А., Мосияш Д. С., Беляев В. В.

Моделирование атомных конфигураций нанокристаллов на стадии зародышеобразования. 6

Камалов Т. Ф., Евдокимов Н. В., Камалов Ю. Т. Описание квантовой телепортации на основе модели запутанных солитонов 19

Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д. Анализ траектории скорости изменения радиуса сферических капель воды в нестационарном процессе их испарения и вычисление времени жизни таких капель 26

Ельникова Л. В., Кузьменко А. П., Беляев В. В. Эффекты упорядочения в антифрикционных материалах с углеродосодержащими покрытиями (обзор) 45

ТЕОРИЯ И МЕТОДИКА ОБУЧЕНИЯ И ВОСПИТАНИЯ

Хасанов А. С. Расчёт характеристик систем массового обслуживания в компьютерных классах. 60

CONTENTS

PHYSICS

N. Zhukov, A. Kletsov, D. Mosiyash, V. Belyaev. Modelling of Nanocrystals Atomic Configurations at Nuclei Formation.6

T. Kamalov, N. Evdokimov, Yu. Kamalov. Description of Quantum Teleportation Based on Models of Entangled Solitons 19

M. Kuznetsov, M. Kuzmin, Ju. Kuleshova. Analysis of the Trajectory of the Rate of Change of the Radius of Spherical Water Droplets in the Non-Stationary Process of Their Evaporation and Calculation of the Lifetime of Such Droplets 26

L. Elnikova, A. Kuzmenko, V. Belyaev. Ordering Effects in Antifriction Materials with Carbon-Containing Coatings (A Review) 45

THEORY AND METHODS OF TEACHING AND EDUCATION

A. Khasanov. Calculation of the Queuing Systems Characteristics in Computer Classes 60

УДК 538.911

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-2-6-18

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ НАНОКРИСТАЛЛОВ НА СТАДИИ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ

Жуков Н. Д.¹, Клецов А. А.², Мосияш Д. С.¹, Беляев В. В.^{3,4}

¹ Общество с ограниченной ответственностью «НПП Волга»
410033, г. Саратов, пр-т им. 50 лет Октября, д. 101, оф. 31, Российская Федерация

² Саратовский национальный исследовательский государственный университет
им. Н. Г. Чернышевского
410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, Российская Федерация

³ Государственный университет просвещения
141014, Московская обл., г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская
Федерация

⁴ Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Российская Федерация

Аннотация.

Цель. Изучение модели нанокристалла зародышевого размера и выявление его свойств и закономерностей.

Процедура и методы. Построена модель и проведены численные расчёты на примере бинарного полупроводника GaAs, которые показали, что при самопроизвольном образовании нанокристалла формируется кристаллическая решётка с размером элементарной ячейки 0,4–0,5 нм, что больше длины связи атомов галлия и мышьяка при их возможном соединении в молекуле (сумма атомных радиусов 0,273 нм) и меньше постоянной решётки арсенида галлия (0,565 нм). Размер нанокристалла, вычисленный как кубический корень из произведения числа атомов на объём элементарной ячейки, составляет 0,6–1,4 нм. Эти значения достаточно точно соответствуют оценке длины волны де Бройля для электрона объёмного кристалла. Ширина запрещённой зоны уменьшается с увеличением числа атомов, изменяясь от величины электронного сродства материала (4,1 эВ) до ширины запрещённой зоны объёмного кристалла – 1,42 эВ.

Результаты. При размерах нанокристалла более минимального (элементарной ячейки) к нанокристаллу применимы физические модели и подходы, используемые для объёмного кристалла.

Теоретическая и практическая значимость. Разработана модель свойств наноразмерной системы GaAs, легированной Zn, обеспечивающая предсказание новых функциональных возможностей таких материалов.

Ключевые слова: наночастица, квантовая точка, нанокристалл, размерное ограничение, размерное квантование, зародышевый размер, атомные конфигурации, квантово-химическая программа, методы пропагаторов

MODELLING OF NANOCRYSTALS ATOMIC CONFIGURATIONS AT NUCLEI FORMATION

N. Zhukov¹, A. Kletsov², D. Mosiyash¹, V. Belyaev^{3,4}

¹ *Limited Liability Company "NPP "Volga"
prospekt imeni 50 let Oktyabrya 101, office 31, Saratov 410033, Russian Federation*

² *Saratov State University
ulitsa Astrakhanskaya 83, Saratov 410012, Russian Federation*

³ *Federal State University of Education
ulitsa Very Voloshinoi 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation*

⁴ *Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba
ulitsa Miklukho-Maklaya 6, Moscow 117198, Russian Federation*

Abstract.

Aim. Study of the model of nucleus-sized nanocrystal and identification of its properties and patterns.

Methodology. A model was developed and numerical calculations were carried out on the example of the binary semiconductor GaAs, which showed that during the spontaneous formation of a nanocrystal, the crystal lattice with an elementary cell size of 0.4 – 0.5 nm is formed, which is greater than the length of the bond of both gallium and arsenic atoms when they are possible combined in the molecule (the sum of atomic radii is 0.273 nm) and less than the lattice constant of gallium arsenide (0.565 nm). The size of the nanocrystal, calculated as the cubic root of the product of the number of atoms and the volume of the unit cell, is 0.6 – 1.4 nm. These values correspond quite accurately to the estimation of the de Broglie wavelength for the electron of the bulk crystal. The bandgap decreases with the number of atoms, varying from the electron affinity of the material (4.1 eV) to the bandgap of the bulk crystal (1.42 eV).

Results. If the size of the nanocrystal is more than the minimum (unit cell), the physical models and approaches used for the bulk crystal are applicable to the nanocrystal.

Research implications. A model of properties of a nanosized system GaAs doped with Zn has been developed that provides prediction of new functionality of these materials.

Keywords: nanoparticle, quantum dot, nanocrystal, dimensional constraint, dimensional quantization, nucleus size, atomic configurations, quantum-chemical program, propagator methods

Введение

Теоретические и экспериментальные исследования наночастиц (НЧ) и квантовых точек (КТ; Нобелевская премия по химии в 2023 г.) позволили сформировать nanoиндустрию материалов и структур с физическими свойствами, обеспечивающими широкую сферу новых применений [1; 2]. В последние годы развиваются перспективные направления нанoeлектроники как основы становления и развития самых современных направлений цифровых интеллектуальных технологий, например, квантовых компьютеров [3].

Актуальным является направление физики и химии полупроводниковых нанокристаллов как самостоятельного раздела науки и техники [4]. Принципиальное значение имеет получение требуемых физических свойств нанокристаллов через управление параметрами их технологического синтеза. Анализ литературы за последние пять лет (около тысячи наименований) показал, что исследования, в основном, касаются получения конкретных вариантов геометрии и формы нанокристаллов – наностержней, нанополосок, нанопластинок, наноллистов и др. Особо актуальными являются исследования, обобщающие вопросы управляемого синтеза полупроводниковых НЧ и их свойств, в том числе получения нанокристаллов атомарной и кристаллографической точности [5].

Форма и размеры нанокристалла образуются как геометрические суммы транслируемых элементарных ячеек. Строго говоря, предельно минимальные размеры нанокристалла могут быть равны размерам элементарной ячейки, в среднем равным постоянной решётки, а число атомов в нём – числу атомов в элементарной ячейке. Практически при самоорганизованном образовании нанокристаллов в процессе синтеза, например, коллоидного, минимальные размеры зародышей равны нескольким постоянным решётки.

В данном исследовании рассмотрены некоторые теоретические представления об электронных процессах в нанокристаллах (квантовых точках) минимальных размеров, пригодных для их самоорганизованного синтеза, на примере бинарного полупроводника арсенида галлия – одного из самых используемых на практике материалов. Целью является выработка исходных позиций для исследований коллоидных КТ зародышевых размеров – до двух нанометров.

Метод данного исследования (квантовой химии) может быть применён как вариант моделирования атомных конфигураций, проводимый обычно методами молекулярной динамики [6]. Расчёты с использованием компьютерной программы квантовой химии выполнены Клецовым А. А. [7], в том числе в рамках гранта РФФИ 14-07-00255 (научный руководитель – Н. Д. Жуков).

Задачей нашего исследования явилось моделирование свойств наноразмерного GaAs, легированного Zn, с целью предсказания новых функциональных возможностей таких материалов. Свидетельством актуальности данной задачи является большое количество зарубежных статей по данной тематике. В частности, в них изучается зависимость концентрации

дырок от концентрации легирующей примеси (атомов Zn), зависимость ширины запрещённой зоны от уровня легирования и др. [8]. Наша конкретная задача состоит в том, чтобы определить минимальные размеры нанокристалла бинарного состава, после которых можно использовать методы исследований как для объёмного кристалла.

Физическая модель и схема расчёта

Фундаментальным уравнением, описывающим состояние электрона в кристалле, является уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar(d\Psi/dt)=[-(\hbar^2/2m)\Delta + U(x,y,z,t)]\Psi,$$

где: Ψ – искомая волновая функция состояния электрона, $\hbar$ – постоянная Планка, m – масса электрона, U – оператор потенциальной энергии системы кристалла, $\Delta=(d^2/dx^2 + d^2/dy^2 + d^2/dz^2)$ – оператор волнового вектора.

Уравнение Шрёдингера описывает движение одного электрона. Чтобы описать состояние всей электронной системы, необходимо совместно решать столько уравнений, сколько электронов в системе. Для большого кристалла эта задача сводится к одноэлектронной введением параметра эффективной массы электрона. Для квантоворазмерной структуры, в которой мало электронов, приходится решать систему уравнений. Поиск путей решения этой системы логически приводит к использованию модели «большого атома», то есть к использованию теорий, развитых для квантовохимического описания молекулы.

Метод молекулярных орбиталей даёт представление о распределении электронной плотности и объясняет свойства молекул. В этой теории квантовомеханические зависимости для атома распространены на более сложную систему – молекулу. Молекула рассматривается как целое, а не как совокупность сохранивших индивидуальность атомов. В молекуле (как и в атоме) имеются дискретные энергетические состояния отдельных электронов (молекулярные орбитали) с их самосогласованным движением в поле друг друга и всех ядер молекулы. Все электроны данной молекулы (как и в атоме) распределяются по соответствующим орбиталям. Состояние электрона в атоме описывается одноэлектронной волновой функцией Ψ , являющейся решением уравнения Шрёдингера. Волновая функция, зависящая от четырёх квантовых чисел, имеющая конкретный математический вид и удовлетворяющая условию нормировки и однозначности, называется молекулярной орбиталью (МО) (по аналогии с атомной). Каждая орбиталь характеризуется своим набором квантовых чисел, отражающих свойства электронов в данном энергетическом состоянии. В отличие от одноцентровых орбиталей атомов, орбитали молекул многоцентровые, то есть молекулы имеют общие орбитали для двух или более атомных ядер. Каждая молекулярная орбиталь обладает определённой энергией, приближённо характеризующейся соответствующим потенциалом ионизации.

Путём прямого решения уравнения Шрёдингера можно получить точные волновые функции только для водородоподобных атомов. Для более сложных атомов, с несколькими электронами, надо учитывать энергию электростатического отталкивания всех электронов друг от друга. В связи с этим рассматривают приближённые методы, наиболее существенным из которых является метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Идея метода заключается в том, что взаимодействие каждого электрона в атоме со всеми остальными заменяется его взаимодействием с усреднённым полем, создаваемым ядром и остальными электронами.

Для рассмотрения взаимодействия некоторого электрона со всеми остальными электронами атома Хартри ввёл усреднённое (эффективное) поле как суммарное поле всех электронов, кроме данного. Введя это усреднённое поле, Хартри смог разбить уравнение Шрёдингера для волновой функции всех электронов атома на систему одноэлектронных уравнений, которую с помощью применения вариационных методов можно свести к одному уравнению. Решением этого уравнения получают величины, описывающие энергию электрона на i -ой орбитали. Уравнение Хартри является интегро-дифференциальным, решаемым численным интегрированием. В связи с этим волновая функция получается не в аналитической форме, а в виде таблиц числовых значений радиальной функции (или других функций на её основе) в зависимости от координат электронов [9].

Фок усовершенствовал метод Хартри, добавив в его уравнение дополнительный член, учитывающий наличие «обменной энергии». Обменная энергия не связана с кулоновским взаимодействием электронов. Всякое классическое взаимодействие двух одинаковых частиц ведёт к обменной энергии. Обменная энергия не имеет аналогов в классической механике. Открытие её существования является одним из фундаментальных результатов квантовой теории. Когда первый электрон перейдёт в состояние Ψ_A , а второй в Ψ_B – произойдёт обмен состояниями, откуда и берётся название «обменное взаимодействие». Физический смысл обменной энергии заключается в следующем. В соответствии с принципом Паули два электрона с параллельными спинами не могут находиться в одной точке пространства. Следовательно, среднее расстояние между электронами в этом случае будет больше, а электростатическая энергия их отталкивания меньше на некоторую величину, соответствующую обменной энергии.

Традиционный способ решения нелинейных интегро-дифференциальных уравнений Хартри-Фока заключается в простой итерации. Приняв некоторую начальную спин-орбиталь ψ_{i0} , решают систему и находят функции ψ_{i1} следующего шага итераций. Как правило, такой процесс сходится, хотя нередки случаи, когда сходимости достичь не удаётся, что приводит к необходимости применять специальные методы принудительной сходимости. В конечном итоге при такой итерационной процедуре на некотором шаге получаются функции, которые при использовании их в кулоновском и обменном операторах вновь

приводят в качестве решений к тем же функциям (в пределах заданной точности). Достижение подобной ситуации указывает на то, что поле, создаваемое электронами, и орбитальные распределения этих электронов согласованы. Поэтому такое поле является самосогласованным, и метод Хартри-Фока часто называют методом самосогласованного поля (ССП) [9].

Характер распределения электронов по молекулярным орбиталям определяет порядок (кратность) связи, её энергию, межядерные расстояния (длина связи), магнитные свойства молекул и др. Заполнение молекулярных орбиталей подчиняется тем же правилам, что и заполнение атомных: принципу энергетической выгодности, принципу Паули, правилу Хунда, принципу заполнения электронных структур Ауфбау. В общепринятом приближении молекулярная орбиталь рассматривается как линейная комбинация атомных орбиталей. В этой связи логически следует необходимость использования квантовомеханической теории многих тел и понятия пропагаторов – «распространителей» (функции Грина), которые вводятся для нахождения свойств фиктивных частиц (квазичастиц и коллективных возбуждений).

Самый простой способ вычисления пропагатора – разложение его в бесконечный ряд и приближительное его вычисление. Это делается с помощью диаграмм Фейнмана.

Процесс моделирования и изучения свойств данных наночастиц – нанокристаллов (NC) – проводился в 2 этапа.

1. Оптимизация структуры NC.
2. Расчёт и анализ электронных свойств.

Первый этап расчётов заключается в оптимизации структуры нанокристалла и электронных связей атомов в нём. Для этого используется квантово-химическая программа Gaussian, которая, решая уравнения Шрёдингера, находит оптимальное расположение связанных электронами атомов решётки, которому соответствует минимальное значение её потенциальной энергии. Полученные при этом результаты, названные здесь «до оптимизации», не были оптимальными. Для оптимизации использовалась теоретическая модель Хартри-Фока с базисами 6-311g и ub3lyp.

Результаты расчётов приведены в виде структурной модели трёхмерного расположения шариков на рисунках, изображающих: Ga – оранжевым, As – фиолетовым, Zn – синим цветом.

Визуализация структур выполнена с помощью программы GaussView.

На рис. 1 изображена структура NC-GaAs, состоящая из 9 атомов, до (a) и после (b) оптимизации. По этим двум изображениям можно заметить, что расстояние между атомами, образующими верхнюю часть КТ, увеличилось.

На рис. 2 изображена структура NC-GaAs:Zn. Процентное содержание цинка в данном соединении составляет 11% (один атом). На рисунке 2a представлены данные для NC до оптимизации, а на рисунке 2b – после. Глядя на рисунок 2b, может показаться, что атом цинка уже не является частью соединения, но на

самом деле между ним и основной частью NC связь есть, однако она настолько слабая, что программа даже не рисует её.

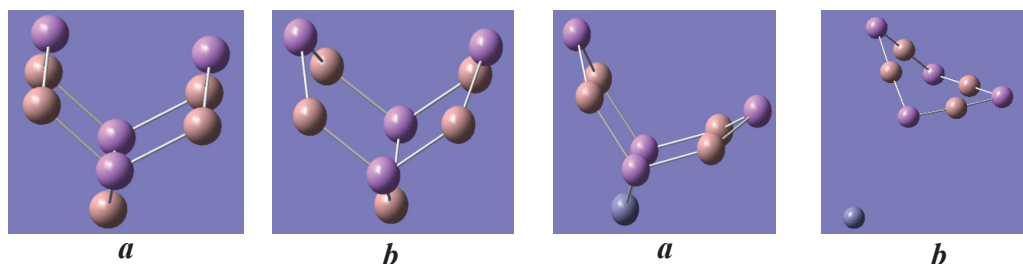


Рис. 1 / Fig. 1. Структура NC-GaAs, состоящая из 9 атомов, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs structure comprising 9 atoms. (a) Before and (b) after optimization

Рис. 2 / Fig. 2. Структура NC-GaAs:Zn, состоящая из 8 атомов Ga-As и одного атома Zn, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs:Zn structure comprising 8 Ga-As atoms and one Zn atom. (a) Before and (b) after optimization

Источник: данные авторов

Расчёты проводились для случаев содержания трёх атомов Zn (33%), 15 атомов Ga и As и т. д. Пропуская результаты промежуточных вариантов, на рис. 3 приводятся результаты расчётов в случае 25 атомов Ga и As; на рис. 4–5 – 24% атомов Zn.

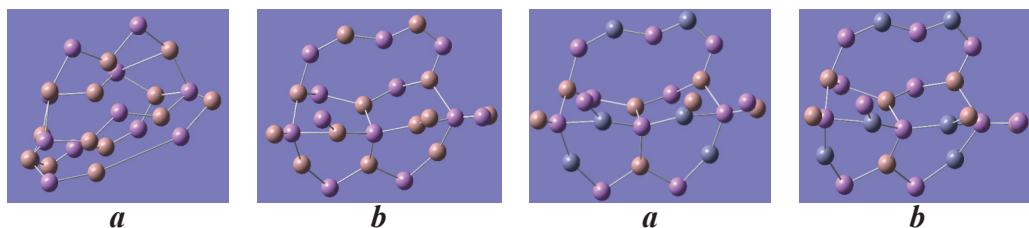


Рис. 3 / Fig. 3. Структура NC-GaAs, состоящая из 25 атомов, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs structure comprising 25 atoms. (a) Before and (b) after optimization

Рис. 4 / Fig. 4. Структура NC-GaAs:Zn, состоящая из 19 атомов Ga – As и 5 атомов Zn, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs:Zn structure comprising 19 Ga-As atoms and one Zn atom. (a) Before and (b) after optimization

Источник: данные авторов

На **втором этапе** расчётов – ширины запрещённой зоны нанокристалла – использовалась теория электронного пропагатора. В квантово-химической программе Gaussian такой расчёт производится с помощью метода OVGF – outer valence Green function.

Программа решает уравнение Дайсона-Швингера для функции Грина двойного времени электрона в молекуле. По завершении расчёта с помощью

OVGF получают значения энергии каждой молекулярной орбитали. Также программа обозначает, какая из орбиталей является HOMO, а какая LUMO. HOMO – highest occupied molecular orbital – высшая заполненная молекулярная орбиталь, значение энергии которой соответствует потолку валентной зоны. LUMO – lowest unoccupied molecular orbital – низшая незаполненная молекулярная орбиталь, значение энергии которой соответствует дну зоны проводимости. Посчитав разницу между значениями энергий этих двух орбиталей, получают значение энергии E_g , которую называют шириной запрещённой зоны NC.

Далее представлены результаты расчётов: значения E_g для различных NC, а также графики, показывающие характер изменения E_g от количества атомов в NC.

В табл. 1 приведена сводка полученных данных. Данные для объёмного монокристалла GaAs взяты из книги О. Маделунга [10].

На рис. 5 и 6 изображены зависимости энергии E_g для разных случаев.

На рис. 7 изображена кривая, характеризующая изменение постоянной решётки при различном количестве атомов в NC.

Таблица 1 / Table 1

Сводка данных по материалам и структурам / Materials and structures data

Материал, структура	Легирование, %	Энергия E_g , эВ	Постоянная решётки, нм	Размер атома или кристалла, нм	Электронное сродство, эВ
Галлий				0.125	
Мышьяк				0.148	
GaAs, собственный	-	1.42	0.565		4.07
GaAs, вырожденный	0.1 – 1	1.26			4.07
GaAs-9atoms	-	4.243	0.400	0.83	
GaAs-15at	-	3.835	0.400	0.96	
GaAs-25at	-	3.273	0.470	1.38	
GaAsZn-9at	11	4.190			
GaAsZn-9at	33	5.559			
GaAsZn-15at	13	3.615			
GaAsZn-15at	26	4.127			
GaAsZn-25at	8	3.067			
GaAsZn-25at	24	3.633			

Источник: данные авторов

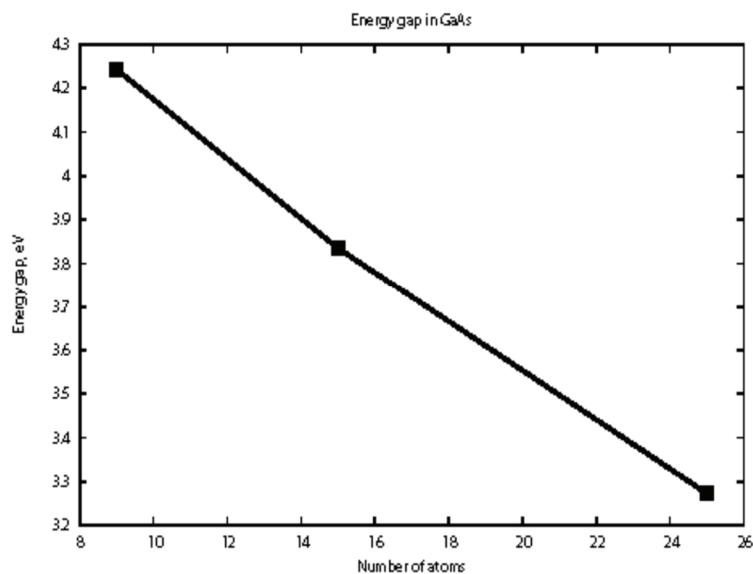


Рис. 5 / Fig. 5. Характер изменения E_g для NC-GaAs при разном количестве атомов /
 E_g change in NC-GaAs at different atoms quantity

Источник: данные авторов

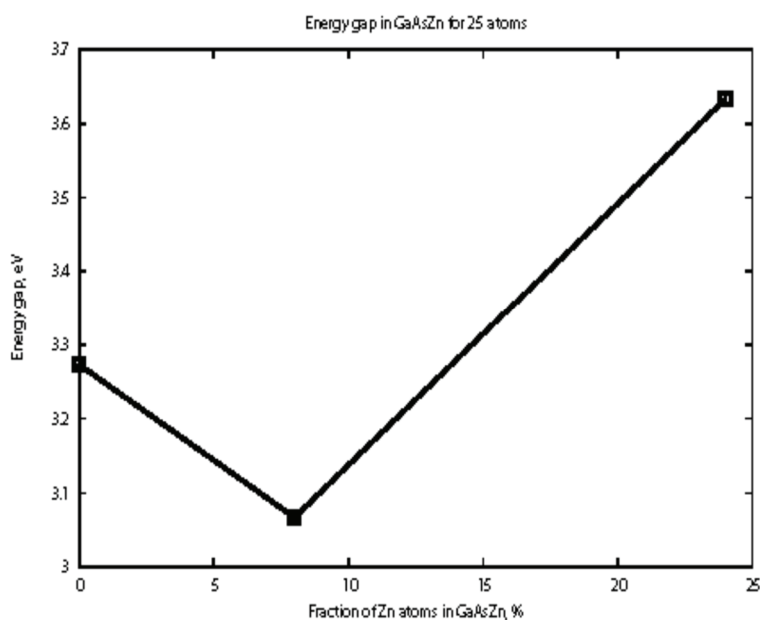


Рис. 6 / Fig. 6. Характер изменения E_g для NC из 25 атомов при разных значениях концентрации легирующей примеси Zn / E_g change in NC comprising 25 atoms at different concentration of Zn dopant

Источник: данные авторов

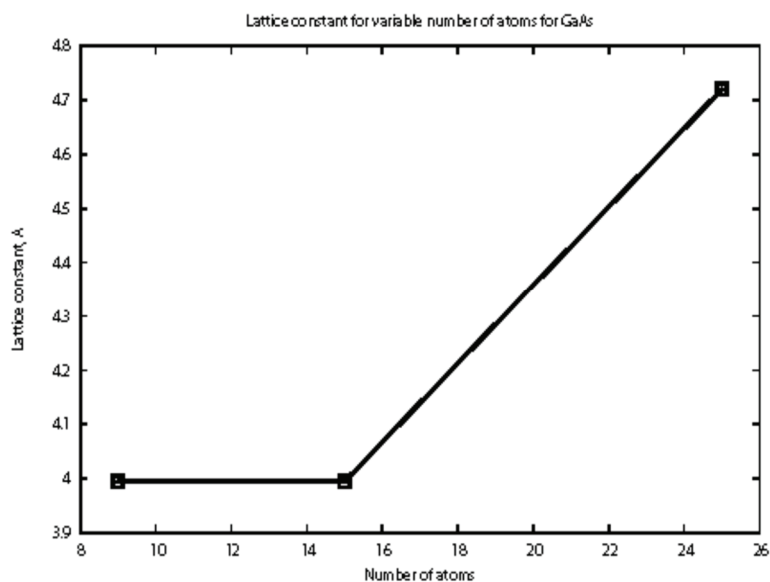


Рис. 7 / Fig. 7. Изменение постоянной решётки при различном количестве атомов в NC / Lattice period change at different atoms quantity in the NC

Источник: данные авторов

Выводы

Данная работа была проделана для ответа на вопрос, можно ли предсказать свойства кристаллической структуры нанокристалла (NC). Этот важный вопрос решает ряд учёных, например, итальянский физик Гавезоти [11]. В отличие от работ других авторов, нами проведены расчёты с учётом влияния атомов примеси – в данном случае к атомам основного материала GaAs добавлен атом Zn. Для объёмного полупроводника GaAs эта примесь является акцепторной, то есть создающей дырочную проводимость за счёт образования в структуре незаполненной электронной связи. Можно предполагать, что добавление этого атома в NC приведёт к образованию такой связи, что отразится на значении электронного сродства. Этот вопрос имеет принципиальное значение при решении проблем взаимодействий NC с внешним электроном, что важно для исследований.

На основе полученных данных расчётов можно сделать следующие важные выводы.

1. Теоретические расчёты показали, что соединение атомов 3 группы галлия (Ga) и пятой группы мышьяка (As) оптимально формирует структуру, подобную кристаллической решётке, то есть с закономерным расположением атомов. При этом размер элементарной ячейки, подобный постоянной решётки, равен 0,4–0,5 нм. Это больше длины связи атомов галлия и мышьяка при их возможном соединении в молекуле (сумма атомных радиусов 0,273 нм) и меньше постоянной решётки арсенида галлия (0,565 нм).

2. Размер нанокристалла, вычисленный как кубический корень из произведения числа атомов на объём элементарной ячейки, 0,6–1,4 нм. Эти значения достаточно точно соответствуют оценке длины волны де Бройля для электрона объёмного кристалла.

3. Энергия E_g уменьшается с увеличением числа атомов (ЧА). Сопоставление с параметрами объёмного монокристалла приводит к выводу, что значение E_g изменяется от величины электронного сродства материала (4,1 эВ) при ЧА-min до ширины запрещённой зоны – 1,42 эВ при ЧА, стремящемся к бесконечности.

4. Энергия E_g зависит от содержания примеси. При малой концентрации от её величины E_g зависит слабо, а при её увеличении – сильно. Это может свидетельствовать о том, что при малых уровнях добавки она работает как примесь в составе из двух элементов Ga/As, мало изменяя E_g , а при больших – как элемент состава из трёх Ga/As/Zn.

5. Проведённый анализ позволяет сделать важный для практики вывод о том, что спектральным составом люминесценции, напрямую связанным с энергией E_g , в НС можно управлять, изменяя их размеры и «легирование».

6. Проведённый анализ позволяет сделать важный для исследований вывод о том, что при размерах нанокристалла более минимального (элементарной ячейки), который мы называли как зародышевый, к нанокристаллу применимы все физические модели и подходы, используемые для объёмного кристалла.

Статья поступила в редакцию 22.02.2024

ЛИТЕРАТУРА

1. Бричкин С. Б., Разумов В. Ф. Коллоидные квантовые точки: синтез, свойства и применение // Успехи химии. 2016. Т. 85. № 12. С. 1297–1312. DOI: <https://doi.org/10.1070/RCR4656>.
2. State-of-the-Art and Trends in Synthesis, Properties, and Application of Quantum Dots-Based Nanomaterials / M. Alizadeh-Ghods, M. Pourhassan-Moghaddam, A. Zavari-Nematabad, B. Walker, N. Annabi, A. Akbarzadeh // Particle & Particle Systems Characterization. 2019. Vol. 36. Iss. 2. P. 1800302. DOI: <https://doi.org/10.1002/ppsc.201800302>.
3. Han M., Karatum O., Nizamoglu S. Optoelectronic Neural Interfaces Based on Quantum Dots // ACS Applied Materials & Interfaces. 2022. Vol. 14. Iss. 18. P. 20468–20490. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsami.1c25009>.
4. Montanarella F., Kovalenko M. V. Three Millennia of Nanocrystals // ACS Nano. 2022. Vol. 16. Iss. 4. P. 5085–5102. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c11159>.
5. Hens Z., De Roo J. Atomically Precise Nanocrystals // Journal of the American Chemical Society. 2020. Vol. 142. Iss. 37. P. 15627–15637. DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.0c05082>.
6. Нанoeлектроника. Теория и практика: учебник для высшей школы / В. Е. Борисенко, А. И. Воробьёва, А. Л. Данилюк, Е. А. Уткина. М.: БИНОМ, 2013. 366 с.
7. Клецов А. А. Квантово-механические основы нанoeлектроники: учебное пособие для студентов. Саратов: Саратовский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, 2013. 102 с.

8. Zn incorporation and band gap shrinkage in p-type GaAs / M. K. Hudait, P. Modak, S. Hardikar, S. B. Krupanidhi // *Journal of Applied Physics*. 1997. Vol. 82. Iss. 10. P. 4931–4937. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.366359>.
9. Dekker C., Ratner M. A. Electronic properties of DNA // *Physics World*. 2001. Vol. 14. No. 8. P. 29–33. DOI: 10.1088/2058-7058/14/8/33.
10. Маделунг О. Физика полупроводниковых соединений элементов III и V групп. М.: Мир, 1967. 468 с.
11. Gavezzotti A. *Molecular aggregation, Structure analysis and Molecular Simulation of Crystals and Liquids*. Oxford: Oxford University Press, 2007. 425 p.

REFERENCES

1. Brichkin S. B., Razumov V. F. [Colloidal quantum dots: synthesis, properties and applications]. In: *Uspekhi khimii* [Russian Chemical Reviews], 2016, vol. 85, no. 12, pp. 1297–1312. DOI: <https://doi.org/10.1070/RCR4656>.
2. Alizadeh-Ghodsi M., Pourhassan-Moghaddam M., Zavari-Nematabad A., Walker B., Annabi N., Akbarzadeh A. State-of-the-Art and Trends in Synthesis, Properties, and Application of Quantum Dots-Based Nanomaterials. In: *Particle & Particle Systems Characterization*, 2019, vol. 36, iss. 2, p. 1800302. DOI: <https://doi.org/10.1002/ppsc.201800302>.
3. Han M., Karatum O., Nizamoglu S. Optoelectronic Neural Interfaces Based on Quantum Dots. In: *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, vol. 14, iss. 18, pp. 20468–20490. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsami.1c25009>.
4. Montanarella F., Kovalenko M. V. Three Millennia of Nanocrystals. In: *ACS Nano*, 2022, vol. 16, iss. 4, pp. 5085–5102. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c11159>.
5. Hens Z., De Roo J. Atomically Precise Nanocrystals. In: *Journal of the American Chemical Society*, 2020, vol. 142, iss. 37, pp. 15627–15637. DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.0c05082>.
6. Borisenko V. E., Vorobyova A. I., Danilyuk A. L., Utkina E. A. *Nanoelektronika. Teoriya i praktika* [Nanoelectronics. Theory and practice]. Moscow, BINOM Publ., 366 p.
7. Kletsov A. A. *Kvantovo-mekhanicheskiye osnovy nanoelektroniki* [Quantum mechanical foundations of nanoelectronics]. Saratov, Saratov State University Publ., 2013. 102 p.
8. Hudait M. K., Modak P., Hardikar S., Krupanidhi S. B. Zn incorporation and band gap shrinkage in p-type GaAs. In: *Journal of Applied Physics*, 1997, vol. 82, iss. 10, pp. 4931–4937. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.366359>.
9. Dekker C., Ratner M. A. Electronic properties of DNA. In: *Physics World*, 2001, vol. 14, no. 8, pp. 29–33. DOI: 10.1088/2058-7058/14/8/33.
10. Madelung O. *Fizika poluprovodnikovyykh soyedineniy elementov III i V grupp* [Physics of semiconductor compounds of elements of groups III and V]. Moscow, Mir Publ., 1967. 468 p.
11. Gavezzotti A. *Molecular aggregation, Structure analysis and Molecular Simulation of Crystals and Liquids*. Oxford, Oxford University Press, 2007. 425 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Жуков Николай Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, генеральный директор Общества с ограниченной ответственностью «НПП Волга»;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Клецов Алексей Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры материаловедения Саратовского национального исследовательского государственного университета им. Н. Г. Чернышевского;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Мосияш Денис Сергеевич – ведущий специалист Общества с ограниченной ответственностью «НПП Волга»;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Беляев Виктор Васильевич – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник управления развития науки, профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; профессор кафедры нанотехнологии и микросистемной техники Российского университета дружбы народов имени Патриса Лумумбы;
e-mail: vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Nikolay D. Zhukov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), General Director, Limited Liability Company NPP Volga;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Aleksey A. Kletsov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Materials Science, Saratov State University;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Denis S. Mosiyash – Leading Specialist, Limited Liability Company NPP Volga;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Victor V. Belyaev – Dr. Sci. (Engineering), Leading Researcher, Science Development Department; Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; Prof., Department of Nanotechnologies and Microsystem Technology, Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba;
e-mail: vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Моделирование атомных конфигураций нанокристаллов на стадии зародышеобразования / Жуков Н. Д., Клецов А. А., Мосияш Д. С., Беляев В. В. // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 2. С. 6–18.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-6-18.

FOR CITATION

Zhukov N. D., Kletsov A. A., Mosiyash D. S., Belyaev V. V. Modelling of nanocrystals atomic configurations at nuclei formation. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 2, pp. 6–18.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-6-18.

УДК 530.145

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-2-19-25

ОПИСАНИЕ КВАНТОВОЙ ТЕЛЕПОРТАЦИИ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ЗАПУТАННЫХ СОЛИТОНОВ

Камалов Т. Ф.^{1,2,3}, Евдокимов Н. В.¹, Камалов Ю. Т.¹

¹ Государственный университет просвещения
141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24,
Российская Федерация

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9,
Российская Федерация

³ Российский биотехнологический университет (РОСБИОТЕХ), Пушкинский филиал (ПушГЕНИ), 142290, Московская обл., г.о. Серпухов, г. Пушкино, пр-т Науки, д. 3,
Российская Федерация

Аннотация

Цель статьи – описать телепортацию информации с помощью запутанных солитонов.

Процедура и методы. Исследовательским методом является модель квантовой телепортации свойств квантовых частиц, например фотонов, на основе описания классических запутанных солитонов.

Результаты. Рассмотренная модель демонстрирует перенос свойств солитонов, аналогичный квантовой телепортации – переносу свойств квантовых частиц.

Теоретическая и практическая значимость заключается в возможности рассмотрения квантовых явлений на таких классических объектах, как солитоны.

Ключевые слова: квантовая телепортация, би-фотоны, иллюзия сверхсветового распространения, солитоны

Благодарности. Авторы благодарны профессору Беляеву В. В. за общее руководство и ценные советы, которые повлияли на написание этой работы.

DESCRIPTION OF QUANTUM TELEPORTATION BASED ON MODELS OF ENTANGLED SOLITONS

T. Kamalov^{1,2,3}, N. Evdokimov¹, Yu. Kamalov¹

¹ Federal State University of Education
ulitsa Very Voloshinoy 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

² Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)
Institutskiy pereulok 9, Dolgoprudny 141701, Moscow Region, Russian Federation

³ Russian Biotechnological University (BIOTECH University), Pushchino Branch (PushchGENI),
prospekt Nauki 3, Pushchino 142290, Moscow region, Serpukhov urban district, Russian Federation

Abstract

Aim. Describe the teleportation of information using the model of entangled solitons.

Methodology. The research method is a model of quantum teleportation of the properties of quantum particles, such as photons, based on the description of classical entangled solitons.

Results. The considered model demonstrates the transfer of solitons properties, similar to the transfer of quantum particles properties, called quantum teleportation.

Research implications. The theoretical and practical significance lies in the possibility of considering quantum phenomena on such classical objects as solitons.

Keywords: quantum teleportation, biphotons, illusion of superluminal propagation, solitons

Acknowledgments. The authors are grateful to Professor V. V. Belyaev for the general guidance and valuable advice that influenced the writing of this work.

Введение

Квантовая телепортация означает операцию по переносу квантового состояния одного квантового объекта другому. Для этого используются два канала, квантовый и классический. Под квантовым каналом подразумевается система из двух квантовых частиц в запутанном состоянии. По классическому каналу передаётся информация об измерении, выполненном на передающей стороне над системой частиц, одна из которых является носителем передаваемого состояния, а вторая – одна из пары запутанных частиц. При этом первоначальное, передаваемое, состояние у частицы изменяется. На приёмной стороне, на основе полученной по классическому каналу информации о совершенных на передающей стороне операциях, со второй из пары запутанных частиц проводится аналогичная операция, что приводит эту частицу в требуемое состояние. Несмотря на то, что запутанность частиц означает постоянную корреляцию их состояний, мгновенной передачи состояния или свойств частицы не происходит, как не происходит мгновенной передачи информации или энергии. Под «телепортацией» подразумевается перенос состояния одной частицы на другую, при том, что первоначальное состояние первой частицы разрушается, то есть изменяется во время произведённых над парой частиц действий.

Ключевым моментом здесь является то, что квантовое состояние телепортируемой частицы не передаётся по классическому каналу связи между отправителем и получателем, а передаётся результат измерения отправителя, и получатель использует этот результат для выполнения операций над своей половиной запутанной пары, чтобы воссоздать телепортированное состояние.

Таким образом, процесс квантовой телепортации не нарушает принцип причинности, поскольку в итоге информация не передаётся быстрее скорости света, так как процедура требует передачи информации по классическому каналу для гарантированного получения телепортированного состояния.

В то же время существуют классические объекты, которые также обладают требуемыми корреляционными свойствами. Таковыми могут быть, например солитоны, которые рассмотрены в данной работе. В отличие от квантовых, свойства

классических частиц не разрушаются при измерении, что позволяет говорить скорее о клонировании, чем о телепортации. Однако ничто не мешает нам принудительно уничтожить исходный объект, чтобы превратить клонирование в телепортацию в том смысле, в котором понимается квантовая телепортация.

Телепортация солитонов

Для описания квантовой телепортации на основе модели запутанных солитонов определим вспомогательную комплексную векторную функцию

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nu A + \frac{i}{\nu} \pi \right), \quad \pi = -\epsilon E, \quad (1)$$

где константа $\equiv$ определяется условием нормировки

$$\hbar = \int dz |\varphi|^2, \quad (2)$$

$\hbar$ – постоянная Планка. Стохастическое представление одночастичной волновой функции Ψ_N может быть определено как линейная комбинация функций (1), определённых в N независимых испытаниях:

$$\Psi_N(t, z) = (\hbar N)^{-\frac{1}{2}} \sum_{j=1}^N \varphi_j(t, z) \quad (3)$$

Индекс φ в (3) пробегает по множеству независимых (случайных) испытаний, число которых N должно быть очень большим (частотная гипотеза фон Мизеса). Таким образом, формула (3) даёт стохастическую реализацию волновой функции через объекты-солитоны бесконечной размерности.

Чтобы показать, что Ψ_N играет роль амплитуды вероятности, достаточно вычислить интеграл

$$\rho_N = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V \subset \mathbb{R}^1} dz |\Psi_N|^2 \quad (4)$$

который берётся за малый объём (интервал) $\Delta V \gg V_0$, где $V_0 \sim 1/\kappa$ обозначает собственный объём (размер) солитона. Легко показать, что с вероятностью $P = 1 - \alpha V_0 / \Delta V$, $\alpha \sim 1$, интеграл (4) равен

$$\rho_N = \frac{\Delta N}{N \Delta V}, \quad (5)$$

где ΔN – число испытаний, для которых центры частиц-солитонов оказываются заключёнными в ΔV . Поэтому ρ_N можно отождествить с плотностью вероятности координат. Рассмотрим теперь процедуру измерения некоторой наблюдаемой величины A по теореме Нётер, генератору группы симметрии $\hat{M}_A$. Например, импульс P связан с генератором трансляции пространства $\hat{M}_P = -i\nabla$, угловой момент L связан с генератором вращения пространства $\hat{M}_L = J$ и так далее. В результате можно представить классическую наблюдаемую величину A_j , сначала для φ -го испытания, проведённого в эксперименте с трёхмерной частицей-солитоном, в виде

$$A_j = \int d^3x \pi_j i \hat{M}_A \varphi_j = \int d^3x \varphi_j^* V \varphi_j$$

где π_j – обобщённый импульс в ϕ -ом испытании, а ϕ_j – обобщённая координата. В нашем случае $\mathfrak{J}j$ соответствует A_j , а π_j соответствует $\pi_j = -E_j$. Среднее значение имеет вид:

$$\mathbb{E}(A) \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N A_j = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \int d^3x \phi_j^* \hat{M}_A \phi_j = \int d^3x \Psi_N^* \hat{A} \Psi_N + O\left(\frac{V_0}{\Delta V}\right), \quad (6)$$

где оператор $\hat{A}$ означает $\hat{A} = \hbar \hat{M}_A$. Таким образом, до членов порядка $V_0/\Delta V \ll 1$ мы получаем стандартное квантовомеханическое правило для вычисления средних значений наблюдаемых величин [1; 2]. Аналогичные выражения можно найти для наших одномерных частиц-солитонов. Например, оператор спина имеет стандартный вид

$$(\hat{S}_k)_{lm} = -i\hbar \epsilon_{klm},$$

в виде матрицы вращения в $\mathbb{R}^3$.

Теперь мы рассмотрим двухсолитонные синглетные состояния [3; 4], то есть построим конфигурацию запутанных солитонов с нулевым спином и импульсом:

$$\varphi^{(12)}(t, z_1, z_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_L(t, -z_1) \otimes \varphi_R(t, z_2) - \varphi_R(t, -z_1) \otimes \varphi_L(t, z_2)] \quad (7)$$

Условие нормирования для формулы (7) имеет вид

$$\int dz_1 \int dz_2 \varphi^{(12)*} \varphi^{(12)} = \hbar^2$$

Теперь нетрудно найти выражение для стохастической волновой функции для синглетного двухсолитонного запутанного состояния:

$$\Psi_N(t, z_1, z_2) = (\hbar^2 N)^{-\frac{1}{2}} \sum_{j=1}^N \varphi_j^{(12)}, \quad (8)$$

где $\varphi_j^{(12)}$ соответствует конфигурации запутанных солитонов в ϕ -ом испытании.

В заключение мы выражаем надежду, что этот формализм запутанных солитонов может быть пригоден для моделирования реальных фотонов.

Обсуждая нелокальность квантовых корреляций запутанных состояний для наблюдателей А и В, мы видим, что возникает иллюзия передачи информации из А в В. Иными словами, взаимодействие запутанных состояний квантовых объектов в А и В следует из экспериментально наблюдаемых их корреляций. Таким образом, было бы правильно отрицать сверхсветовое взаимодействие или передачу информации быстрее скорости света. Другими словами, существование квантовой нелокальности и квантовых корреляций означает скорее иллюзию, чем реальность какой-либо передачи информации быстрее скорости света.

Проведём воображаемый эксперимент классического аналога телепортации квантовых поляризационных состояний бифотонов.

Для этого рассмотрим классический аналог телепортации бифотон-поляризационных состояний с квантовой запутанностью. Классический аналог этой ситуации можно рассмотреть на примере запутанных солитонов с коррелированными состояниями в А и В.

Если наблюдатель в пункте А измеряет состояние фотона, то совпадение его состояния с состоянием другого фотона (солитона) в пункте В может быть описано ненулевым коэффициентом корреляции. Это так, потому что информация о измерениях в пунктах А и В коррелирует с ненулевым коэффициентом.

Полное совпадение информации может произойти только при условии, если наблюдатели А и В измерят состояния запутанных фотонов (солитонов).

Если запутанные фотоны (солитоны) разные, но оба с одинаковой поляризацией, то коэффициент корреляции равен единице. Чтобы добиться полного совпадения измерений с коэффициентом корреляции, равным единице, надо наблюдателю А сообщить наблюдателю В, какой фотон (солитон) выбрать.

Поэтому в точках А и В измерения поляризаций фотонов (солитонов) всегда коррелируют.

Заключение

Мы симулировали процесс квантовой телепортации запутанных фотонов между наблюдателями А и В с помощью математической модели запутанных солитонов. В результате становится понятно, что одинаковые состояния поляризации запутанных фотонов выбираются с помощью классического канала передачи информации между наблюдателями А и В. В результате процесс телепортации квантового состояния фотонов является иллюзией передачи квантовой информации из А в В. Эта иллюзия создаётся с помощью классической линии связи. Никакого превышения скорости света в процессе квантовой телепортации состояний фотонов нет.

Статья поступила в редакцию 01.03.2023

ЛИТЕРАТУРА

1. Рыбаков Ю. П., Камалов Т. Ф. Стохастические гравитационные поля и квантовые корреляции // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Физика. 2002. № 10. С. 5–7.
2. Рыбаков Ю. П., Терлецкий С. А. Динамика солитонов во внешних полях и квантовая механика // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Физика. 2004. № 12. С. 88–112.
3. Rybakov Yu. P., Kamalov T. F. Entangled solitons and stochastic q-bits // Physics of Particles and Nuclei Letters. 2007. Vol. 4. No. 2. P. 119–121. DOI: 10.1134/S1547477107020033.
4. Rybakov Yu. P., Kamalov T. F. Probabilistic simulation of quantum states // Proceedings of the SPIE. 2009. Vol. 7023: Quantum Informatics 2007. Article: 702307. DOI: 10.1117/12.801898.

REFERENCES

1. Rybakov Yu. P., Kamalov T. F. [Stochastic gravitational fields and quantum correlations]. In: *Vestnik rossiyskogo universiteta druzhby narodov. Seriya: Fizika* [Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series: Physics], 2002, no. 10, pp. 5–7.
2. Rybakov Yu. P., Terletsky S. A. Solitons' dynamics in external fields and quantum mechanics. In: *Vestnik rossiyskogo universiteta druzhby narodov. Seriya: Fizika* [Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series: Physics], 2004, no. 12, pp. 88–112.
3. Rybakov Yu. P., Kamalov T. F. Entangled solitons and stochastic q-bits. In: *Physics of Particles and Nuclei Letters*, 2007, vol. 4, no. 2, pp. 119–121. DOI: 10.1134/S1547477107020033.
4. Rybakov Yu. P., Kamalov T. F. Probabilistic simulation of quantum states. In: *Proceedings of the SPIE*, 2009, vol. 7023: Quantum Informatics 2007, article: 702307. DOI: 10.1117/12.801898.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Камалов Тимур Фянович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Государственного университета просвещения; доцент кафедры теоретической физики Московского физико-технического института (национального исследовательского университета); доцент факультета цифровых технологий ПушчГЕНИ – филиала университета РОСБИОТЕХ;
e-mail: timkamalov@gmail.com

Евдокимов Николай Валерьевич – аспирант кафедры теоретической физики Государственного университета просвещения;
e-mail: nv.evdokimov@gmail.com

Камалов Юрий Тимурович – аспирант кафедры теоретической физики Государственного университета просвещения;
e-mail: kamalov@gmail.com

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Timur F. Kamalov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Theoretical Physics, Federal State University of Education; Assoc. Prof., Department of Theoretical Physics, Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University); Assoc. Prof., Department of Digital Technologies, PushchGENI – Branch of the Russian Biotechnological University (ROSBIOTECH);
e-mail: timkamalov@gmail.com

Nikolay V. Evdokimov – Postgraduate Student, Department of Theoretical Physics, Federal State University of Education;
e-mail: nv.evdokimov@gmail.com

Yuriy T. Kamalov – Postgraduate Student, Department of Theoretical Physics, Federal State University of Education;
e-mail: kamalov@gmail.com

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Камалов Т. Ф., Евдокимов Н. В., Камалов Ю. Т. Описание квантовой телепортации на основе модели запутанных солитонов // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 2. С. 19–25.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-19-25.

FOR CITATION

Kamalov T. F., Evdokimov N. V., Kamalov Yu. T. Description of quantum teleportation based on models of entangled solitons. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 2, pp. 19–25.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-19-25.

УДК 533.72

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-2-26-44

АНАЛИЗ ТРАЕКТОРИИ СКОРОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ РАДИУСА СФЕРИЧЕСКИХ КАПЕЛЬ ВОДЫ В НЕСТАЦИОНАРНОМ ПРОЦЕССЕ ИХ ИСПАРЕНИЯ И ВЫЧИСЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ТАКИХ КАПЕЛЬ

Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д.

Государственный университет просвещения

141014, Московская обл., г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация

Аннотация

Цель: обобщить имеющиеся аналитические и численные результаты исследования нестационарного испарения капель воды с целью получения общей зависимости времени полного испарения капель от определяющих условий.

Процедура и методы. Применялось операционное исчисление, в частности интегральное преобразование Лапласа.

Результаты. Получено уравнение, позволяющее вычислять время полного испарения капель воды в широком диапазоне условий обтекания капель.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты работы существенны как при проведении фундаментальных исследований по нестационарному испарению капель в физико-химических лабораториях, так и при практическом использовании в ряде отраслей промышленности.

Ключевые слова: нестационарный процесс испарения, сферические капли воды, траектория скорости изменения радиуса, коэффициент поверхностного натяжения, коэффициенты скачков концентрации и температуры, время полного испарения

ANALYSIS OF THE TRAJECTORY OF THE RATE OF CHANGE OF THE RADIUS OF SPHERICAL WATER DROPLETS IN THE NON-STATIONARY PROCESS OF THEIR EVAPORATION AND CALCULATION OF THE LIFETIME OF SUCH DROPLETS

M. Kuznetsov, M. Kuzmin, Ju. Kuleshova

Federal State University of Education

ulitsa Very Voloshinoy 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

Abstract

Aim. The aim is to generalize the available analytical and numerical results of the study of non-stationary evaporation of water droplets in order to obtain a general dependence of the time of complete evaporation of droplets on the determining conditions.

Methodology. Operational calculus was used, in particular the Laplace integral transform.

Results. An equation has been obtained that allows one to calculate the time of complete evaporation of water droplets in a wide range of flow conditions around the droplets.

Research implications. The results of the work are significant both for conducting fundamental research on non-stationary evaporation of droplets in physical and chemical laboratories, and for practical use in a number of industries.

Keywords: non-stationary evaporation process, spherical water droplets, radius change rate trajectory, surface tension coefficient, concentration and temperature jump coefficients, complete evaporation time

Введение

Процессы испарения и конденсационного роста аэрозольных капель играют большую роль в жизни природы и в человеческой деятельности, и капельные аэрозоли находят широкое применение в науке и технике. Подтверждением сказанному служат, например, и публикации, появившиеся в недавнее время [1–7].

Характер протекания процессов испарения и конденсационного роста аэрозольных капель зависит от большого числа факторов. Поскольку, размер капель меняется в течение этих процессов, то эти процессы, строго говоря, не могут быть стационарными. К числу важнейших характеристик нестационарного процесса испарения аэрозольных капель относятся скорость изменения их размера и время полного испарения.

Существуют разные подходы к конструированию формул для описания скорости изменения радиуса испаряющихся аэрозольных капель сферической формы, начиная с подхода, предложенного Максвеллом [8]. Многие из них носят поправочный характер к уже существующим формулам. В предлагаемой статье при получении методом интегральных преобразований Лапласа [9] формул для скорости изменения радиуса аэрозольной капли в нестационарном процессе её испарения использованы довольно общие начальные и граничные условия, а также результаты работ [10; 11], в которых рассмотрены некоторые вопросы теории нестационарного испарения сферических капель с учётом коэффициентов скачков концентрации и температуры и коэффициента поверхностного натяжения вещества капли.

Как известно, интегральное преобразование Лапласа L устанавливает следующую связь между оригиналом $f(t)$ и его изображением $F(p)$, где p – комплексный параметр:

$$F(p) = L\{f(t)\} = \int_0^{\infty} f(t)e^{-pt} dt.$$

С применением этого метода к построению теории нестационарного процесса испарения аэрозольных капель можно ознакомиться по работе [10].

1. Постановка задачи

Приведём основные уравнения, начальные и граничные условия задачи.

Рассмотрим нестационарный процесс испарения неподвижной сферической капли радиуса R , находящейся в двухкомпонентной парогазовой смеси. Первый

компонент в ней образован молекулами вещества капли, а второй компонент – молекулами так называемого несущего газа, причём, этот компонент не испытывает фазовый переход в рассматриваемом интервале температур. При этом концентрация пара у поверхности капли предполагается равной концентрации насыщенного пара при температуре её поверхности, и эта концентрация значительно меньше плотности вещества капли. Имеется в виду медленное испарение капли [12; 13].

Из выше сказанного следует, что рассматривается сферически симметричное испарение в диффузионном режиме [8; 12]. Можно выбрать сферическую систему координат с началом в центре капли. Независимыми переменными в уравнениях нашей задачи будут радиальная координата r и время t . Пусть распределение относительной концентрации пара $c_1(r, t)$ и температуры $T_e(r, t), T_i(r, t)$ соответственно парогазовой смеси и внутри капли удовлетворяют следующей системе уравнений с начальными и граничными условиями [10]:

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c_1}{\partial r} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} = a_e \left(\frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = a_i \left(\frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} \right), \quad (3)$$

$$c_1(r, t)|_{t=0} = c_{10}, \quad c_1(r, t)|_{r \rightarrow \infty} = c_{1\infty} = c_{10}, \quad (4)$$

$$T_e(r, t)|_{t=0} = T_{0e}, \quad T_e(r, t)|_{r \rightarrow \infty} = T_{\infty e} = T_{0e}, \quad (5)$$

$$Dn m_1 q \frac{\partial c_1}{\partial r} \Big|_{r=R} = \left(-\kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial r} + \kappa_i \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) \Big|_{r=R}. \quad (6)$$

В уравнения (1) – (3) соответственно входят: $D = nm_2 D_{12} / \rho_e$, где D_{12} – коэффициент взаимной диффузии компонентов парогазовой смеси; $n = n_1 + n_2$; n_1, m_1 и n_2, m_2 – концентрация и масса молекул первого и второго компонентов соответственно; ρ_e – плотность бинарной смеси; a_e, a_i – коэффициенты температуропроводности соответственно парогазовой смеси и вещества капли. Индексами «e» и «i» здесь и далее будем снабжать величины, характеризующие одно и то же свойство для областей, расположенных вне и внутри капли. В соотношении (6), выражающем условие непрерывности потока тепла через поверхность капли, через q обозначена удельная теплота испарения вещества капли, κ_e, κ_i – коэффициенты теплопроводности.

Введём ещё обозначения

$$c_{1s}(t) = c_1(T_s) = n_1(T_s)/n,$$

где $n_1(T_s)$ – концентрация насыщенных паров вещества капли при температуре её поверхности $T_s = T_s(t)$, далее положим

$$T_s(t)|_{t=0} = T_{s0}, c_{1s}(t)|_{t=0} = c_{1s0}. \quad (7)$$

Будем полагать, что температура капли $T_i(r, t)$ ($0 \leq r \leq R$) кроме уравнения (3) и граничного условия (6) удовлетворяет следующим начальному и граничному условиям:

$$T_i(r, t)|_{t=0} = T_{s0}, T_i(r, t)|_{r=R} = T_s(t). \quad (8)$$

Формулу, определяющую зависимость концентрации насыщенных паров над сферической поверхностью достаточно большой кривизны от коэффициента поверхностного натяжения, температуры поверхности капли и удельной теплоты испарения вещества капли, можно получить с использованием приближенного уравнения Томсона (Кельвина) и приближенного уравнения Клапейрона-Клаузиуса. Искомая формула получена в работе [11]:

$$c_{1s}(t) = \bar{c}_{1s0}(1 + k_\sigma/R)\{1 + k_q[T_s(t) - T_{s0}]\}. \quad (9)$$

В этой формуле и ниже черта над буквой c означает концентрацию насыщенных паров вещества капли на поверхности пренебрежимо малой кривизны при её температуре, то есть

$$\bar{c}_{1s0} = \bar{c}_{1s}(t)|_{t=0}, \bar{c}_{1s}(t) = c_1(T_s),$$

а через k_σ, k_q обозначены выражения:

$$k_\sigma = \frac{2m_1\sigma}{kT_{s0}\rho_i}, k_q = \frac{qm_1 - kT_{s0}}{kT_{s0}^2},$$

в которые входят величины: σ – коэффициент поверхностного натяжения, ρ_i – плотность вещества капли, k – постоянная Больцмана.

Отметим, что $c_{1s0} = \bar{c}_{1s0}(1 + k_\sigma/R)$. Из этой формулы и выражения для k_σ следует, что концентрация насыщенных паров над поверхностью сферической капли существенно зависит от отношения σ/R , поэтому важность учёта коэффициента поверхностного натяжения возрастает с увеличением кривизны её поверхности.

Учёт скачков концентрации и температуры на слое Кнудсена вблизи поверхности капли осуществим с помощью следующих граничных условий [12]:

$$[c_1(r, t) - c_{1s}(t)]|_{r=R} = \left(K_c^{(c)} \frac{\partial c_1}{\partial r} + K_c^{(T)} \frac{1}{T_{s0}} \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{|r=R}, \quad (10)$$

$$[T(r, t) - T_s(t)]|_{r=R} = \left(K_T^{(T)} \frac{\partial T}{\partial r} + K_T^{(c)} T_{s0} \frac{\partial c_1}{\partial r} \right)_{|r=R}, \quad (11)$$

Разности, расположенные в левых частях равенств (11), (12), называют соответственно скачками концентрации и температуры. Коэффициенты $K_c^{(c)}$, $K_c^{(T)}$, $K_T^{(T)}$, $K_T^{(c)}$ называют газокинетическими коэффициентами скачков концентрации и температуры.

При проведении анализа траектории скорости изменения радиуса испаряющихся капель воды в воздушную среду с использованием численных расчётов будем применять в настоящей статье выражения для коэффициентов скачков концентрации и температуры, приведённые в монографии [14], где они получены для случая бинарной газовой смеси обобщением подхода Лоялки, разработанного для однокомпонентного газа. При этом важно заметить, что коэффициенты $K_c^{(c)}, K_T^{(c)}$ зависят от коэффициента испарения α вещества капли, то есть с учётом скачков концентрации и температуры происходит учёт и коэффициента испарения. Отметим, что коэффициенты $K_c^{(T)}, K_T^{(T)}$ не зависят от α .

Соотношениями (1) – (11) определяются основные уравнения, начальные и граничные условия нашей задачи.

2. Приближенные формулы для скорости изменения радиуса аэрозольной капли при малых и больших значениях времени

Согласно работе [8] скорость нестационарного изменения радиуса аэрозольной капли сферической формы определяется формулой

$$\frac{dR}{dt} = \frac{Dnm_1}{\rho_i} \frac{\partial c_1}{\partial r} |_{r=R}, \quad (12)$$

Поскольку мы применяем метод интегральных преобразований Лапласа, то

$$\frac{\partial c_1}{\partial r} |_{r=R} = L^{-1} \left\{ \frac{\partial S}{\partial r} |_{r=R} \right\}, \quad S(r, p) = L\{c_1(r, t)\}. \quad (13)$$

Применяя преобразования Лапласа, мы учитываем, что рассматривается процесс медленного испарения капли, при этом масса капли значительно больше массы вещества, испарившегося с поверхности капли за время исследуемого процесса. В таком случае допустимо считать радиус капли постоянной величиной [15] при проведении некоторых выкладок. Выше зависимость R от t проявилась только в формуле (12). В реальном процессе испарения радиус капли изменяется со временем и $dR/dt < 0$.

Выражения $S(r, p)$, $\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right) |_{r=R}$ в пространстве изображений имеют довольно громоздкую структуру. Способы их нахождения и получение приемлемых для отыскания оригиналов приближений производной $\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right) |_{r=R}$ подробно рассмотрены в работе [10]. Из асимптотических приближений оригинала $\frac{\partial c_1}{\partial r} |_{r=R}$ при малых и больших значениях времени мы выберем следующие (зависящие явно от t):

$$\left(\frac{dR}{dt}\right)_{01} \approx \frac{\varepsilon^{(T)} Dnm_1}{\rho_i \Delta_K} \left[1 - 2 \left(A_1 + \frac{\sqrt{a_i}}{\kappa_i} A_2 \right) \sqrt{\frac{t}{\pi}} \right] (t \rightarrow 0), \quad (14)$$

$$\left(\frac{dR}{dt}\right)_{\infty 2} \approx \frac{\varepsilon_{CT} Dnm_1 \kappa_e}{\rho_i B_0} \left(1 + \frac{g_1}{B_1 \sqrt{\pi t}} \right) (t \rightarrow \infty), \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned}\varepsilon^{(T)} &= \varepsilon_c K_T^{(T)} - \frac{\varepsilon_T K_c^{(T)}}{T_{s0}}, \quad \varepsilon_{cT} = \varepsilon_c - c_{1s0} k_q \varepsilon_T, \\ \varepsilon_c &= c_{10} - \bar{c}_{1s0} (1 + k_\sigma / R), \quad \varepsilon_T = T_{0e} - T_{s0}, \\ \Delta_K &= K_c^{(c)} K_T^{(T)} + K_c^{(T)} K_T^{(c)}, \quad B_0 = g_0 R + g_\chi, \\ g_0 &= k_{q\sigma} + \kappa_e, \quad g_1 = k_{q\sigma} \sqrt{D} + \kappa_e \sqrt{a_e}, \quad g_\chi = k_{q\sigma} \chi_T + \kappa_e \chi_c, \\ A_1 &= \frac{K_c^{(c)} \sqrt{a_e} + K_T^{(T)} \sqrt{D}}{\Delta_K} - \frac{\varepsilon_c \sqrt{a_e}}{\varepsilon^{(T)}}, \quad A_2 = \frac{g_\chi}{\Delta_K} - \frac{\varepsilon_{cT} \kappa_e}{\varepsilon^{(T)}}, \quad B_1 = B_0 \sqrt{D a_e} / R^2, \\ k_{q\sigma} &= \gamma k_q \bar{c}_{1s0} (1 + k_\sigma / R), \quad \gamma = D n m_1 q.\end{aligned}$$

Отметим, что величинами χ_c , χ_T , по существу, определяются скачки концентрации и температуры соответственно. Они называются составными коэффициентами скачков концентрации и температуры [10]. Учёт начальной разницы температур у поверхности капли, представленной в виде $\varepsilon_T = T_{0e} - T_{s0}$, разностью температур внешней и внутренней сторон слоя Кнудсена в начале процесса испарения, заслуживает отдельного рассмотрения, в этой статье мы полагаем, что $\varepsilon_T = T_{0e} - T_{s0} = 0$. Таким образом, выражениями

$$f_1(R, t) = \frac{\varepsilon_c D n m_1 K_T^{(T)}}{\rho_i \Delta_K} \left[1 - 2 \left(A_1 + \frac{\sqrt{a_i}}{\kappa_i} A_2 \right) \sqrt{\frac{t}{\pi}} \right] (t \rightarrow 0), \quad (16)$$

$$f_2(R, t) = \frac{\varepsilon_c D n m_1 \kappa_e}{\rho_i B_0} \left(1 + \frac{g_1}{B_1 \sqrt{\pi t}} \right) (t \rightarrow \infty), \quad (17)$$

имеющими место соответственно для малых и больших значений времени можно достаточно полно описать процесс нестационарного испарения аэрозольных капель сферической формы, поскольку они включают в себя все физические величины, заложенные в начальных и граничных условиях задачи. Скажем ещё раз, что мы рассматриваем процесс медленного испарения капли, поэтому в этих выражениях можно считать, что только радиус капли зависит от времени t . Функциями (16) и (17) будет определяться траектория изменения радиуса нестационарно испаряющейся аэрозольной капли.

Для проведения численного анализа траекторий будем рассматривать нестационарный процесс испарения одиночных капель воды разных размеров в воздушную среду 50% влажности (наиболее реальный случай) при двух значениях температуры среды 293 К, 323 К, когда давление в ней $P = 0,1$ МПа. При этом следует обратить внимание на значения коэффициента испарения воды α при указанных выше температурах. Полагаем их равными соответственно 0,034 и 0,026. При этом мы основываемся на данных, приведённых в книге [16], которые согласуются с результатами более поздних исследований зависимости коэффициента испарения некоторых веществ от температуры, проведённых методом молекулярной динамики [17]. Для

большинства используемых в статье физических величин используем значения, приведённые в справочнике¹.

Введём в рассмотрение ещё выражения

$$f_0(R) = \frac{\varepsilon_c D n m_1 k_T^{(T)}}{\rho_i \Delta_K}, \quad (18)$$

$$f_3(R) = \frac{\varepsilon_c D n m_1 \kappa_e}{\rho_i B_0}, \quad (19)$$

которые переменную t в явном виде не содержат.

3. Анализ выражений, определяющих траекторию изменения радиуса сферических капель воды

Основу исследуемого нами нестационарного процесса составляет диффузионный режим испарения, следовательно, необходимо выполнение условия

$$\varepsilon_c = c_{10} - \bar{c}_{1s0}(1 + k_\sigma/R) < 0. \quad (20)$$

Отрицательная величина (20), определяемая разностью концентраций и связанная с учётом коэффициента поверхностного натяжения вещества капли, входит в явном виде в выражения (18), (19), следовательно, и в выражения (16), (17). Уже по строению выражения (20) получаем подтверждение о зависимости всех выражений (16) – (19) от радиуса капли R . Очевидно, что отрицательная величина ε_c убывает с уменьшением радиуса капли. Поскольку в выражении (18) все другие величины кроме ε_c не зависят от R , то с уменьшением радиуса капли R отрицательная функция $f_0(R)$ будет убывать (хотя весьма медленно).

Учёт коэффициента поверхностного натяжения вещества капли проявляется в значениях выражений (16), (17), (19) и через величины $A_2, B_0, g_1/B_1$ в виде $k_{q\sigma} = \gamma k_q \bar{c}_{1s0}(1 + k_\sigma/R)$. Значит, эти величины зависят и от радиуса капли.

Во избежание превосходящего влияния коэффициента поверхностного натяжения на рассматриваемый процесс испарения в диффузионном режиме приходится ввести ограничение $\bar{c}_{1s0} k_\sigma / R < |c_{10} - \bar{c}_{1s0}|$. Отсюда при температуре среды, равной 293 К или 323 К, когда $c_{10} = \bar{c}_{1s0}/2$, получаем $R > 2k_\sigma$. Так как $k_\sigma \sim 10^{-9}$ (м), то мы будем рассматривать сферические капли воды, начальный радиус которых $R_0 \geq 10^{-8}$ м.

Рассмотрим подробнее выражение (16). В нём величина A_1 не зависит от R . Поскольку

$$A_1 \sim \frac{\sqrt{a_i}}{\kappa_i} A_2 \cdot 10^2, \quad (21)$$

то возрастание положительной величины

$$A_1 + \frac{\sqrt{a_i}}{\kappa_i} A_2 \quad (22)$$

¹ Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 721 с.

при уменьшении радиуса испаряющейся капли происходит весьма медленно. Это возрастание лишь в малой степени компенсирует уменьшение коэффициента ε_c . Попутно заметим, что в выражение (22) входит коэффициент теплопроводности k_i вещества капли, но его влияние на значение этого выражения не существенно в случае водяных капель в силу уже упомянутого соотношения (21).

В отличие от выражений (16), (18), имеющих место для малых значений времени, выражения (17), (19), записанные для больших значений времени, имеют более тесную связь с радиусом капли. В выражении (19) зависимой от R величиной является отношение ε_c/B_0 . Это отношение, принимающее только отрицательные значения, убывает с уменьшением радиуса испаряющейся капли, причём $\lim_{R \rightarrow 0} \frac{\varepsilon_c}{B_0} = -\frac{1}{\gamma k_q \chi T}$, следовательно,

$$\lim_{R \rightarrow 0} f_3(R) = -\frac{\kappa_e}{q k_q \rho_i \chi T}. \quad (23)$$

Последнее выражение достаточно отчётливо показывает важность учёта определённых факторов, влияющих на ход процесса испарения до самого его конца. Следует отметить при этом значительную роль коэффициента теплопроводности среды κ_e .

Наиболее существенную зависимость от R испытывает величина, определяемая отношением g_1/B_1 , имеющим довольно сложное строение:

$$\frac{g_1}{B_1} = \frac{R^2[(\gamma_{qc}/\sqrt{a_e} + \kappa_e/\sqrt{D})R + \gamma_{qc}k_\sigma/\sqrt{a_e}]}{(\gamma_{qc} + \kappa_e)R^2 + [\gamma_{qc}(k_\sigma + \chi T) + \kappa_e\chi_c]R + \gamma_{qc}k_\sigma\chi T}, \quad (24)$$

где $\gamma_{qc} = \gamma k_q \bar{c}_{1s0}$. Очевидно, что $\lim_{R \rightarrow 0} \frac{g_1}{B_1} = 0$.

В рассматриваемом нестационарном процессе испарения капель с учётом скачков концентрации и температуры влияние этого фактора на ход процесса на его разных этапах проявляется по-разному. Появление выражений (16) и (18), записанных для малых значений времени, немыслимо без учёта скачков концентрации и температуры вблизи поверхности капли. С течением времени влияние указанного фактора проявляется посредством величины $B_0 = g_0R + g_\chi$, в которой второе слагаемое представляет собой линейную комбинацию составных коэффициентов скачков концентрации и температуры. Величина B_0 является важным структурным элементом выражений (17), (19). Интересующий нас эффект от учёта коэффициентов скачков концентрации и температуры в рассматриваемом процессе будет определяться соотношением между двумя слагаемыми в выражении B_0 , зависящем от размера испаряющихся капель. Для начального радиуса $R_0 = 10^{-8}$ м в зависимости от температуры среды, равной 293 К и 323 К, значения второго слагаемого в процентах по отношению ко всей величине B_0 составляют 99,32% и 98,92% соответственно. Если брать капли больших размеров, то процентное соотношение между значениями слагаемых выражения B_0 меняется

естественно в пользу $g_0 R$. Для него при $R_0 = 10^{-5}$ м в зависимости от температуры среды 293 К и 323 К соответственно имеем 84,55% и 91,10%. Говоря о крупных каплях [14], следует особо выделить капли с начальным радиусом $R_0 = 10^{-4}$ м, поскольку для них процентное содержание величины g_χ в B_0 при тех же значениях температуры среды составляет всего 1,70% и 1,07%. Тем не менее капли с таким начальным радиусом не исключаем из рассмотрения (они будут пограничными) по той причине, что с уменьшением размера испаряющейся капли влияние учёта коэффициентов скачков концентрации и температуры на процесс увеличивается, становясь более стабильным в конце процесса испарения, о чём можно судить по предельному выражению (23).

Рассматривая зависимость выражений (16) и (17) от времени t в явном виде, отметим, что в выражении (16) значения t ограничены условием отрицательности этого выражения, а выражение (17) станет неопределённым при достаточно малых значениях t .

В итоге можно сказать, что выражения (16) – (19) заметно отличаются по их структуре. Функционально этими выражениями можно определять скорости уменьшения радиуса нестационарно испаряющихся капель соответственно при малых и больших значениях времени. Из-за невозможности определить точной границы между малыми и большими значениями времени для выяснения вопроса о том, каков вклад каждого из этих выражений в общее время жизни испаряющихся капель приходится прибегнуть к численному анализу результатов.

Рассматривая равенство

$$\frac{dR}{dt} = f_1(R, t) \quad (25)$$

как обыкновенное дифференциальное уравнение в некоторой окрестности точки $(0, R_0)$, где R_0 – начальный радиус испаряющейся капли, можно получить его решение $R = R(R_0, t)$. Продолжив это решение, можно найти значение $R_1 = R(R_0, t)|_{t=t_1}$. При $R_0 = 10^{-6}$ м и температуре среды 293 К, положив $t_1 = 14,0825 \cdot 10^{-8}$ с (выбор такого значения времени выяснится чуть позже), находим значение $R_1 = 0,9999955 \cdot 10^{-6}$ м, то есть $R_1 \approx R_0$. Заметим, что если вместо (25) использовать равенство $dR/dt = f_0(R)$, то при аналогичной процедуре получим значение $R_1 = 0,9999936 \cdot 10^{-6}$ м, которое несколько меньше вышеполученного, исходя из уравнения (25), значения R_1 .

Подтверждение того факта, что за некоторый промежуток времени от 0 до t_1 с не происходит заметного уменьшения начального радиуса $R_0 \in [10^{-8} \text{ м}, 10^{-4} \text{ м}]$ нестационарно испаряющейся капли при температуре среды в пределах от 293 К до 323 К, можно получить, используя найденные в статье [18] результаты о времени полного испарения капли $\theta(R_0)$, ибо $5 \cdot 10^{-7} \ll \theta(R_0) \forall R_0 \in [10^{-8} \text{ м}, 10^{-4} \text{ м}]$.

Траекторию скорости изменения радиуса капли на начальном этапе нестационарного процесса испарения можно описать функцией

$z = f_1[R(t), t]$, где t принимает «малые» значения. Если же за промежутков времени $[0, t_1]$ не происходит заметного уменьшения начального радиуса $R_0 \in [10^{-8} \text{ м}, 10^{-4} \text{ м}]$ нестационарно испаряющейся капли, то представление о геометрической картине этой траектории можно получить по графику G_1 функции $z = f_1(R_0, t)$, где $t \in [0, t_1]$. Для этой функции имеем $df_1(R_0, t)/dt > 0$, $d^2f_1(R_0, t)/dt^2 < 0$, следовательно, она возрастает и выпукла на рассматриваемом промежутке. В декартовой системе координат (t, z) ось ординат служит касательной к графику G_1 этой функции в точке $M_0 [0, f_0(R_0)]$.

В силу неопределённости границы между малыми и большими значениями времени для установления связи между частями траектории скорости изменения радиуса капли, отвечающими малым и большим значениям времени, на промежутках незначительного уменьшения начального радиуса капли введём в рассмотрение ещё графики G_2, G_3 соответственно функций $z = f_2(R_0, t)$, $z = f_3(R_0)$. Кривые G_1 и G_2 имеют две точки пересечения, то есть $G_1 \cap G_2 = \{M_1, M_2\}$. При $R_0 = 10^{-6} \text{ м}$ и температуре среды $T_e = 293 \text{ К}$ имеем $M_1(0,4859 \cdot 10^{-8}; -0,4172 \cdot 10^{-4})$, $M_2(9,3378 \cdot 10^{-8}; -0,2874 \cdot 10^{-4})$. Кривая G_1 и прямая G_3 пересекаются в одной точке, которая при $R_0 = 10^{-6} \text{ м}$ и $T_e = 293 \text{ К}$ имеет координаты $M_3(14,0825 \cdot 10^{-8}; -0,2491 \cdot 10^{-4})$. Отметим, что первая координата точки M_3 была использована выше для определения промежутка $[0, t_1]$, на котором уменьшение начального радиуса $R_0 = 10^{-6} \text{ м}$ пренебрежимо мало. Интересующие нас фрагменты линий G_1, G_2 и G_3 представим на рис. 1, используя полученные координаты точек M_0, M_1, M_2, M_3 при $R_0 = 10^{-6} \text{ м}$ и $T_e = 293 \text{ К}$.

Траекторию скорости изменения радиуса нестационарно испаряющейся капли на заключительном этапе рассматриваемого процесса можно определить функцией

$$z = f_2[R(t), t], \quad (26)$$

где t принадлежит некоторому промежутку больших значений времени, заканчивающемуся временем полного испарения капли, обозначим его через $[t_2, \theta]$. Легко выяснить, что в промежутке малого изменения $R_2 = R(t)|_{t=t_2}$ функция $f_2(R_2, t)$ возрастает и выпукла вверх. Часть информации о геометрической форме траектории (26) можно получить по виду явной зависимости функции $f_2(R_2, t)$ от времени t , а часть по поведению этой функции и составляющих её выражений при изменении радиуса капли от R_2 до нуля в процессе испарения. При этом важно выяснить, каково соотношение между графиками функций (26) и $z = f_3[R(t)]$, когда $t \in [t_2, \theta]$. В случае незначительного расхождения между ними на промежутке $[t_3, \theta]$ существенного уменьшения радиуса испаряющейся капли для вычисления времени жизни капли было бы допустимым использовать только довольно простое для интегрирования дифференциальное уравнение

$$\frac{dR}{dt} = f_3(R). \quad (27)$$

Отличие между функциями $f_2[R(t), t]$ и $f_3(R)$ определяется величиной $g_1/B_1\sqrt{\pi t}$, где выражение g_1/B_1 имеет вид (24).

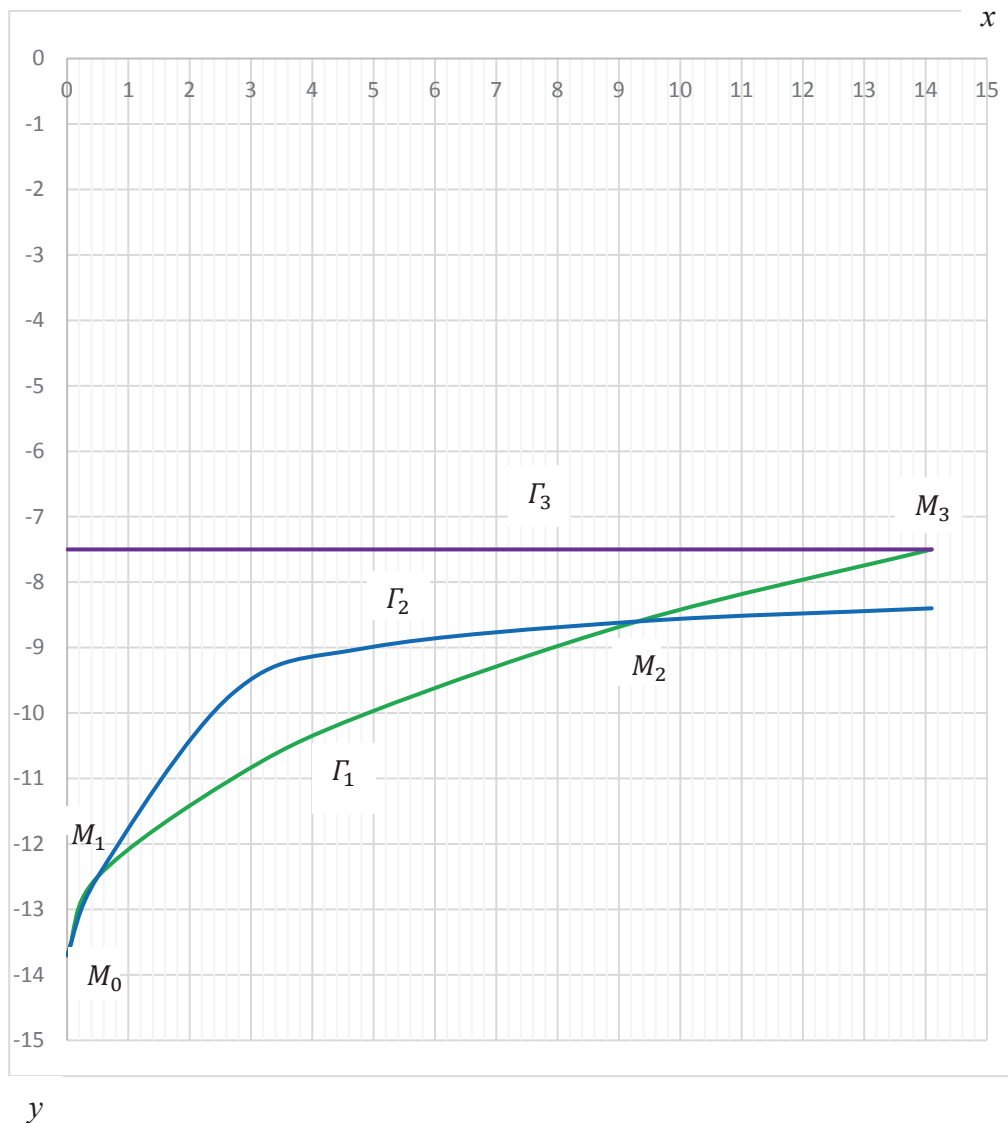


Рис. 1 / Fig. 1. Графики функций, являющихся приближениями траектории скорости изменения радиуса нестационарного испаряющейся капли на начальном этапе этого процесса / Graphs of functions that are approximations of the trajectory of the rate of change of the radius of a non-stationary evaporating droplet at the initial stage of this process

Источник: по данным авторов

Характер изменения величины g_1/B_1 с уменьшением радиуса испаряющейся капли можно выяснить, используя численные значения входящих в её выражение физических величин. При $T_e = 293$ К и $T_e = 323$ К имеем соответственно дроби:

$$\frac{g_1}{B_1|_{T_e=293\text{ K}}} = \frac{2,1292 \cdot 10^2 R + 1,6766 \cdot 10^{-7}}{1 + 1,5552 \cdot 10^{-6} R^{-1} + 1,6068 \cdot 10^{-16} R^{-2}}$$

$$\frac{g_1}{B_1|_{T_e=323\text{ K}}} = \frac{2,0640 \cdot 10^2 R + 1,7516 \cdot 10^{-7}}{1 + 0,9768 \cdot 10^{-6} R^{-1} + 1,9465 \cdot 10^{-16} R^{-2}}$$

Поскольку слагаемые и в числителе, и в знаменателе рассматриваемых дробей расположены в порядке убывания показателей степени R , то с уменьшением радиуса испаряющейся капли значимость этих слагаемых в определении величины g_1/B_1 перемещается от отношения первых слагаемых к отношению последних, то есть при $T_e = 293\text{ K}$ и $T_e = 323\text{ K}$ соответственно к отношениям

$$\frac{1,6766 \cdot 10^{-7}}{1,6068 \cdot 10^{-16} R^{-2}}, \quad \frac{1,7516 \cdot 10^{-7}}{1,9465 \cdot 10^{-16} R^{-2}}$$

из которых следует, что при достаточно малых размерах испаряющейся капли убывание её радиуса на порядок приводит к уменьшению величины g_1/B_1 на два порядка.

Найдём значение времени, при котором относительная погрешность замены траектории (26) на $z = f_3[R(t)]$ равна отношению этого значения времени к времени полного испарения рассматриваемой капли, то есть

$$\frac{f_2[R(t), t] - f_3[R(t)]}{f_2[R(t), t]} = \frac{t}{\theta}. \quad (28)$$

Это равенство приводит к уравнению

$$B_1 \sqrt{\pi} x^3 + g_1 x^2 - g_1 \theta = 0, \quad (29)$$

где $x = \sqrt{t}$. Интересующий нас единственный положительный корень алгебраического уравнения (29) будем обозначать через $\sqrt{t_3}$. Положив $R = 10^{-4}\text{ м}$ при $T_e = 293\text{ K}$ и $T_e = 323\text{ K}$, находим соответственно значения $\sqrt{t_3}$: 0,9827; 0,7887. При этих значениях времени получаем соответствующие значения выражения $g_1/B_1 \sqrt{\pi t_3}$: 0,0120 и 0,0146, которые намного меньше единицы. Относительная погрешность (28) при этих значениях соответственно равна: 1,19% и 1,44%. С уменьшением радиуса испаряющейся капли относительная погрешность (28) уменьшается, при этом график функции (26) всё более тесно будет приближаться к графику заметно простой по строению функции $z = f_3[R(t)]$. Этому способствуют как указанные выше свойства величины g_1/B_1 , так и вид зависимости выражения $g_1/B_1 \sqrt{\pi t}$ от времени t . Отметим, что при $R = 10^{-5}\text{ м}$ и $T_e = 293\text{ K}$ относительная погрешность (18) равна 0,41% и значение выражения $g_1/B_1 \sqrt{\pi t_3}$ намного меньше единицы, оно приблизительно равно 0,0041.

Приведённые доводы убеждают нас в том, что в области существенного уменьшения радиуса испаряющейся капли замена выражения $f_2[R, t]$ на выражение $f_3(R)$ действительно не приведёт к большим ошибкам

при вычислении времени полного испарения капли. После получения решения дифференциального уравнения (27) в области больших значений времени, возникает вопрос о правомерности расширения этого решения на малые значения времени, так как $f_3(R)$ является конечным предельным выражением $f_2[R, t]$, то есть $f_3(R) = \lim_{t \rightarrow \infty} f_2[R, t]$, и ещё имеет место отличие значений $f_3(R_0)$ и $f_0(R_0)$, а именно,

$$f_0(R_0) < f_3(R_0) \forall R_0 \in [10^{-8} \text{ м}, 10^{-4} \text{ м}], \quad (30)$$

причём отличие более заметно для крупных капель. Это видно из соотношений

$$\frac{f_0(R_0)}{f_3(R_0)} = \frac{K_T^{(T)}}{\Delta_K} \cdot \frac{\kappa_e}{B_0}$$

с участием выражения B_0 , зависящего от радиуса капли в виде его слагаемого $g_0 R$. Отличие достигает почти до двух порядков величин для капель с радиусом $R_0 = 10^{-4}$ м. Рассматриваемое отличие имеет место только в самом начале процесса испарения. Начиная с нулевого значения времени, как показано выше, траектория $z = f_1[R(t), t]$ круто идёт вверх (см. рис. 1) и при значении времени $t_1 \ll \theta$ графика функции $z = f_3[R(t)]$. Выражение $f_3(R)$ таково, что его значения убывают с уменьшением радиуса испаряющейся капли. В чём легко убедиться, рассматривая представление с использованием численных значений составляющих это выражение физических величин, не зависящих от R . При значениях температуры среды $T_e = 293$ К и $T_e = 323$ К соответственно имеем:

$$f_3(R)|_{T_e=293 \text{ К}} = - \frac{0,6350 \cdot 10^{-10}}{R + 15,5305 \cdot 10^{-7} - 31,9608 \cdot 10^{-16} / (R + 2,1614 \cdot 10^{-9})}, \quad (31)$$

$$f_3(R)|_{T_e=323 \text{ К}} = - \frac{1,1809 \cdot 10^{-10}}{R + 9,7569 \cdot 10^{-7} - 16,0279 \cdot 10^{-16} / (R + 1,8425 \cdot 10^{-9})}. \quad (32)$$

Очевидно, что с уменьшением радиуса капли знаменатели дробей (31) и (32) убывают, следовательно, абсолютные величины этих дробей возрастают. При этом важно отметить, что происходит рост скорости уменьшения размера капли. Легко найти скорости изменения радиуса капель воды в конце нестационарного процесса при указанных значениях температуры среды. Они определяются значениями:

$$\lim_{R \rightarrow 0} f_3(R)|_{T_e=293 \text{ К}} = -8,5418 \cdot 10^{-4} (\text{м/с}),$$

$$\lim_{R \rightarrow 0} f_3(R)|_{T_e=323 \text{ К}} = -11,1775 \cdot 10^{-4} (\text{м/с}).$$

Так как эти предельные значения заметно меньше соответственно значений

$$\min\{f_0(R_0) \forall R_0 \in [10^{-8} \text{ м}, 10^{-4} \text{ м}]\}_{|T_e=293 \text{ К}} = -0,5527 \cdot 10^{-4},$$

$$\min\{f_0(R_0) \forall R_0 \in [10^{-8} \text{ м}, 10^{-4} \text{ м}]\}_{|T_e=323 \text{ К}} = -1,8614 \cdot 10^{-4},$$

то можно сказать, что такое положение является определённой компенсацией положению (30). Заметим, что соотношение (30) есть частный случай более общего неравенства $f_1[R(t), t] < f_3[R(t)]$, где $t \in [0, t_1]$. Было установлено, что на отрезке $[0, t_1]$ уменьшение начального радиуса R_0 испаряющейся капли пренебрежимо мало. Этот факт и другие доводы, приведённые выше, говорят о том, что расширение решения дифференциального уравнения (27) на малые значения времени допустимо и использование такого решения приемлемо для вычисления времени полного испарения капли.

4. Формулы для вычисления времени полного испарения капель воды

Итак, для вычисления времени полного испарения сферических капель воды в исследуемом нестационарном процессе исходным будет соотношение

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\varepsilon_c D n m_1 \kappa_e}{\rho_i B_0}, \quad (33)$$

в котором, полагаем, что только радиус капли R зависит от времени t . Отметим, что такое допустимо при медленном испарении сферических капель. Соотношение (33) будем рассматривать как обыкновенное дифференциальное уравнение с неизвестной функцией $R = R(t)$. Разделением переменных приведём его к виду

$$dt = \frac{q k_q \rho_i \bar{c}_{1s0}}{\kappa_e (c_{10} - \bar{c}_{1s0})} \cdot \frac{(1 + k_D) R^2 + (k_\sigma + \chi_T + k_D \chi_c) R + k_\sigma \chi_T}{R - c_{1\sigma}} dR, \quad (34)$$

$$\text{где } k_D = \frac{\kappa_e}{D n m_1 q k_q \bar{c}_{1s0}}, \quad c_{1\sigma} = \frac{\bar{c}_{1s0} k_\sigma}{c_{10} - \bar{c}_{1s0}}.$$

Проинтегрируем уравнение (34) при выполнении начального условия $R(t)_{t=0} = R_0$.

Используя численные значения физических величин, образующих выражение (34), получаем при $T_e = 293 \text{ K}$ и $T_e = 323 \text{ K}$ соответствующие формулы для вычисления времени жизни сферических капель воды

$$\theta_{|T_e=293 \text{ K}} = 7,8742 \cdot 10^9 [R_0^2 + 3,1061 \cdot 10^{-6} R_0 - 6,3922 \cdot 10^{-15} \ln(1 + 4,6266 \cdot 10^8 R_0)], \quad (35)$$

$$\theta_{|T_e=323 \text{ K}} = 4,2341 \cdot 10^9 [R_0^2 + 1,9514 \cdot 10^{-6} R_0 - 3,2056 \cdot 10^{-15} \ln(1 + 5,4283 \cdot 10^8 R_0)].$$

Вид выражений, расположенных в квадратных скобках формул (35), позволяет сделать определённые выводы о соотношении величин слагаемых в зависимости от начального радиуса капли. Здесь приемлема цитата из статьи [13, с. 770]: «В пределе больших капель наблюдается хорошо известная зависимость времени испарения капли от квадрата радиуса, а в пределе малых капель время испарения линейно зависит от начального радиуса». Выражения, находящиеся под знаком логарифмов, связаны с учётом коэффициента

поверхностного натяжения вещества капли, в нашем случае воды. По отношению численного значения последних выражений в квадратных скобках ко времени жизни капли можно оценить эффект учёта этого фактора. Для крупных и умеренно крупных [14] капель влияние указанного фактора на рассматриваемый процесс весьма незначительно, оно выражается сокращением времени полного высыхания капли меньше, чем на один процент. Для капель с начальным радиусом $R_0 = 10^{-7}$ м в пределах рассматриваемых нами температур среды сокращение времени жизни составляет порядка 5-6%, а при $R_0 = 10^{-8}$ м имеет место более существенное сокращение, примерно на треть.

Отметим, что значения времени полного испарения капель воды, вычисленные по формулам (35), хорошо согласуются как с результатами, полученными в статье [18] другим путём, отличным от предлагаемого в настоящей статье, так и результатами работы [13]. Приведём таблицу значений времени θ (в секундах) полного испарения сферических капель воды, вычисленных по формулам (35). Для сравнения в скобках укажем соответствующие результаты, полученные в статье [18].

Таблица 1/ Table 1

Значения времени полного испарения сферических капель воды / Values of the time of complete evaporation of spherical water droplets

$R_0, \text{ м}$	$T_e = 293 \text{ К}$	$T_e = 323 \text{ К}$
10^{-4}	81,187 (81,182)	43,167 (43,166)
10^{-5}	$10,316 \cdot 10^{-1}$ ($10,317 \cdot 10^{-1}$)	$5,059 \cdot 10^{-1}$ ($5,060 \cdot 10^{-1}$)
10^{-6}	$3,207 \cdot 10^{-2}$ ($3,204 \cdot 10^{-2}$)	$1,242 \cdot 10^{-2}$ ($1,242 \cdot 10^{-2}$)
10^{-7}	$2,374 \cdot 10^{-3}$ ($2,332 \cdot 10^{-3}$)	$0,826 \cdot 10^{-3}$ ($0,815 \cdot 10^{-3}$)
10^{-8}	$1,584 \cdot 10^{-4}$ ($1,586 \cdot 10^{-4}$)	$0,578 \cdot 10^{-4}$ ($0,578 \cdot 10^{-4}$)

Заключение

Проведённый анализ участков траектории скорости изменения радиуса нестационарно испаряющейся сферической капли воды при малых и больших значениях времени показал, что начальный этап траектории существенным образом определяется учётом коэффициентов скачков концентрации и температуры вблизи поверхности капли. Затем скорость изменения радиуса капли резко падает, и в пределах малых значений времени заметного уменьшения радиуса испаряющейся капли не происходит. На этапе перехода от малых значений времени к большим также не происходит существенного уменьшения радиуса капли, но с началом времени «больших» значений происходит сближение траекторий, описываемых нестационарным и квазистационарным выражениями. Продолжение этапа больших значений времени характеризуется существенным уменьшением радиуса испаряющейся капли вплоть до полного её высыхания. В конце процесса, то есть при $R \rightarrow 0$,

происходит совпадение предельных значений нестационарного и квазистационарного выражений.

Результаты проведённого анализа всевозможных этапов траектории скорости изменения радиуса нестационарно испаряющейся капли послужили достаточной аргументацией для того чтобы квазистационарное уравнение выбрать для получения формулы, позволяющей вычислить время жизни сферических капель воды в нестационарном процессе испарения с учётом коэффициента поверхностного натяжения вещества капли и коэффициентов скачков концентрации и температуры вблизи её поверхности.

Кроме того, в статье при исследовании характера скорости изменения радиуса капли на определённых этапах нестационарного процесса испарения выяснена степень важности учёта многих факторов. В результате анализа выражений, полученных для вычисления времени полного испарения капель дана оценка влияния фактора учёта поверхностного натяжения на время жизни капли в зависимости от её начального размера. Установлено, что учёт коэффициентов скачков концентрации и температуры имеет важное значение не только в начале, но и в продолжении, и до самого конца процесса (хотя в несколько ином виде).

Статья поступила в редакцию 17.04.2024

ЛИТЕРАТУРА

1. Прогностическая модель исследования процессов испарения капель воды / Антонов Д. В., Высокоморная О. В., Кузнецов Г. В., Пискунов М. В. // Инженерно-физический журнал. 2019. Т. 92. № 4. С. 936–944.
2. Антонов Д. В., Кузнецов Г. В., Стрижак П. А. Математическое моделирование тепломассопереноса при движении капель жидкости в газовой среде в условиях их интенсивных фазовых превращений // Инженерно-физический журнал. 2020. Т. 93. № 5. С. 1093–1114.
3. Особенности методики экспериментального исследования процесса испарения подвешенных капель жидкости / Бочкарева Е. М., Лей М. К., Терехов В. В., Терехов В. И. // Инженерно-физический журнал. 2019. Т. 92. № 5. С. 2208–2217.
4. Губайдуллин Д. А., Панин К. А., Федоров Ю. В. Акустика жидкости с покрытыми оболочкой каплями при наличии фазовых переходов // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2022. № 4. С. 41–51. DOI: 10.31857/S056852812204003X.
5. Голубкина И. В., Осипцов А. Н. Волны уплотнения с частичной и полной дисперсией в газокapельной среде с фазовыми переходами // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2022. № 3. С. 44–55. DOI: 10.31857/S0568528122030069.
6. Кузнецов Г. В., Стрижак П. А. Испарение капель воды при движении через высокотемпературные газы // Инженерно-физический журнал. 2018. Т. 91. № 1. С. 104–111.

7. Экспериментальное и численное исследования нестационарного испарения капель жидкости / Терехов В. И., Терехов В. В., Шишкин Н. Е., Би К. Ч. // Инженерно-физический журнал. 2010. Т. 83. № 5. С. 829–836.
8. Фукс Н. А. Испарение и рост капель в газообразной среде. М.: Издательство АН СССР, 1958. 91 с.
9. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования / пер. с нем. Г. А. Вольперта. М.: Наука, 1971. 288 с.
10. Кузьмин М. К., Яламов Ю. И. Теория нестационарных фазовых переходов и движения аэрозольных частиц в тепловых полях: монография. М.: МГОУ, 2007. 232 с.
11. Кузьмин М. К. Теория нестационарного процесса испарения сферической аэрозольной капли с учетом зависимости давления насыщенного пара от кривизны ее поверхности // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика – математика. 2012. № 3. С. 39–49.
12. Щукин Е. Р., Яламов Ю. И., Шулиманова З. Л. Избранные вопросы физики аэрозолей: учебное пособие. М.: Московский педагогический университет, 1992. 297 с.
13. Козырев А. В., Ситников А. Г. Испарение сферической капли в газе среднего давления // Успехи физических наук. 2001. Т. 171. № 7. С. 765–774. DOI: 10.3367/UFGN.0171.200107c.0765.
14. Галоян В. С., Яламов Ю. И. Динамика капель в неоднородных вязких средах. Ереван: Луйс, 1985. 208 с.
15. Nix N., Fukuta N. Nonsteady-state theory of droplet growth // The Journal of Chemical Physics. 1973. Vol. 58. Iss. 4. P. 1735–1740. DOI: 10.1063/1.1679418.
16. Амелин А. Г. Теоретические основы образования тумана при конденсации пара. М.: Химия, 1972. 293 с.
17. Zunjing W., Min C., Zengyuan G. Xi'an jiaotong daxue xuebao // Journal of Xi'an Jiaotong University. 2001. Vol. 35. No. 11. P. 1126–1130.
18. Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д. О формуле, приемлемой для вычисления времени полного испарения как мелких, так и крупных сферических капель воды // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика – Математика. 2022. № 2. С. 56–69. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-56-69.

REFERENCES

1. Antonov D. V., Vysokomornaya O. V., Kuznetsov G. V., Piskunov M. V. [Prognosis model for investigating the evaporation of water droplets]. In: *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Journal of Engineering Physics and Thermophysics], 2019, vol. 92, no. 4, pp. 936–944.
2. Antonov D. V., Kuznetsov G. V., Strizhak P. A. [Mathematical simulation of the heat and mass transfer in the movement of liquid droplets in a gas medium under the conditions of their intense phase transformations]. In: *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Journal of Engineering Physics and Thermophysics], 2020, vol. 93, no. 5, pp. 1093–1114.
3. Bochkareva Ye. M., Ley M. K., Terekhov V. V., Terekhov V. I. [Methodological characteristics of an experimental investigation of the process of evaporation of suspended liquid droplets]. In: *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Journal of Engineering Physics and Thermophysics], 2019, vol. 92, no. 5, pp. 2208–2217.
4. Gubaydullin D. A., Panin K. A., Fedorov Yu. V. [Acoustics of a liquid with droplets covered by a shell in the presence of phase transitions]. In: *Izvestiya Rossiyskoy akademii*

- nauk. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 2022, no. 4, pp. 41–51. DOI: 10.31857/S056852812204003X.
5. Golubkina I. V., Osipov A. N. [Partly and fully dispersed compression waves in a gas-droplet mixture with phase transitions]. In: *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 2022, no. 3, pp. 44–55. DOI: 10.31857/S0568528122030069.
 6. Kuznetsov G. V., Strizhak P. A. [Evaporation of water droplets moving through high-temperature gases]. In: *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Journal of Engineering Physics and Thermophysics], 2018, vol. 91, no. 1, pp. 104–111.
 7. Terekhov V. I., Terekhov V. V., Shishkin N. Ye., Bi K. Ch. [Heat and mass transfer in disperse and porous media experimental and numerical investigations of nonstationary evaporation of liquid droplets]. In: *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Journal of Engineering Physics and Thermophysics], 2010, vol. 83, no. 5, pp. 829–836.
 8. Fuks N. A. *Ispareniye i rost kapel v gazoobraznoy srede* [Evaporation and growth of droplets in a gaseous medium]. Moscow, USSR Academy of Sciences Publ., 1958. 91 p.
 9. Doetsch G. *Anleitung zum praktischen Gebrauch der Laplace-Transformation und der Z-Transformation* (Russ. ed.: Volpert G. A., transl. *Rukovodstvo k prakticheskomu primeneniyu preobrazovaniya Laplasya i Z-preobrazovaniya*. Moscow, Nauka publ., 1971. 288 p.).
 10. Kuzmin M. K., Yalamov Yu. I. *Teoriya nestatsionarnykh fazovykh perekhodov i dvizheniya aerol'nykh chastits v teplovykh pol'yakh* [Theory of non-stationary phase transitions and motion of aerosol particles in thermal fields]. Moscow, Moscow State Region University Publ., 2007. 232 p.
 11. Kuzmin M. K. [The theory of nonstationary evaporation of spherical aerosol drop in view of dependence of saturated steam pressure from curvature of its surface]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika – matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2012, no. 3, pp. 39–49.
 12. Shchukin Ye. R., Yalamov Yu. I., Shulimanova Z. L. *Izbrannyye voprosy fiziki aerolei* [Selected Topics in Aerosol Physics]. Moscow, Moscow Pedagogical University Publ., 1992. 297 p.
 13. Kozyrev A. V., Sitnikov A. G. [Evaporation of a spherical droplet in a moderate-pressure gas]. In: *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Physics-Uspekhi (Advances in Physical Sciences)], 2001, vol. 171, no. 7, pp. 765–774. DOI: 10.3367/UFNr.0171.200107c.0765.
 14. Galoyan V. S., Yalamov Yu. I. *Dinamika kapel v neodnorodnykh вязких средах* [Dynamics of drops in inhomogeneous viscous media]. Yerevan, Luys Publ., 1985. 208 p.
 15. Nix N., Fukuta N. Nonsteady-state theory of droplet growth. In: *The Journal of Chemical Physics*, 1973, vol. 58, iss. 4, pp. 1735–1740. DOI: 10.1063/1.1679418.
 16. Amelin A. G. *Teoreticheskiye osnovy obrazovaniya тумана при конденсации пара* [Theoretical Foundations of Fog Formation during Steam Condensation]. Moscow, Khimiya Publ., 1972. 293 p.
 17. Zunjing W., Min C., Zengyuan G. Xi'an jiaotong daxue xuebao. In: *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2001, vol. 35, no. 11, pp. 1126–1130.
 18. Kuznetsov M. M., Kuzmin M. K., Kuleshova Yu. D. [On the formula acceptable for calculating the time of complete evaporation of both small and large spherical water droplets]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika – matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2022, no. 2, pp. 56–69. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-56-69.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Кузнецов Михаил Михайлович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;

e-mail: kuznets-omn@yandex.ru

Кузьмин Михаил Кузьмич – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Государственного университета просвещения;

e-mail: m.kuzmin48@yandex.ru

Кулешова Юлия Дмитриевна – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры высшей алгебры, математического анализа и геометрии, декан физико-математического факультета Государственного университета просвещения;

e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Mikhail M. Kuznetsov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education;

e-mail: kuznets-omn@yandex.ru

Mikhail K. Kuzmin – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Educational and Research Laboratory of Theoretical and Applied Nanotechnology, Federal State University of Education;

e-mail: m.kuzmin48@yandex.ru

Juliya D. Kuleshova – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Higher Algebra, Mathematical Analysis and Geometry, Dean of the Faculty of Physics and Mathematics, Federal State University of Education;

e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д. Анализ траектории скорости изменения радиуса сферических капель воды в нестационарном процессе их испарения и вычисление времени жизни таких капель // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 2. С. 26–44.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-26-44

FOR CITATION

Kuznetsov M. M., Kuzmin M. K., Kuleshova Ju. D. Analysis of the trajectory of changes in the radius of spherical water droplets in the non-stationary process of their evaporation and calculation of the lifetime of such droplets. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 2, pp. 26–44.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-26-44

УДК 621.891:539.2

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-2-45-59

ЭФФЕКТЫ УПОРЯДОЧЕНИЯ В АНТИФРИКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ С УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩИМИ ПОКРЫТИЯМИ (ОБЗОР)

Ельникова Л. В.^{1,2}, Кузьменко А. П.², Беляев В. В.^{3,4}

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
117218, г. Москва, ул. Большая Черемушкинская, д. 25, Российская Федерация

² Юго-Западный государственный университет
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, д. 94, Российская Федерация

³ Государственный университет просвещения
141014, Московская обл., г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24,
Российская Федерация

⁴ Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Российская Федерация

Аннотация

Цель: характеристика применяемых для уменьшения коэффициента трения тонкослойных углеродосодержащих покрытий различных типов и состава, описание принципов их работы в узлах трибосопряжений и эффектов самоорганизации и упорядочения, влияющих на коэффициент трения и износ.

Процедура и методы. Метод анализа литературных источников и классификация исследуемых покрытий по химическому составу, методам нанесения, условиям работы, классификация методов и условий трибологических испытаний, классификация методов характеристики, применяемых к изучаемым покрытиям. Термодинамический анализ фазовых диаграмм по составу углеродосодержащих покрытий.

Результаты. Показано положительное значение легирования углеродных покрытий, применяемых в триботехнических задачах: требуемое уменьшение коэффициента трения и износа. Оценены преимущества и недостатки покрытий с различными типами легирующих элементов (например, металлов IV-V группы, полупроводниковых элементов, водорода) в различных смазочных средах, парах трения и условиях работы. Доказано влияние упорядочения, морфологии частиц и их возможной агрегации за счёт углеродных связей sp^1 , sp^2 , sp^3 и их соотношений в покрытиях на трибологические показатели.

Практическая значимость заключается в раскрытии механизмов влияния легирующих элементов и упорядочения частиц, молекул и агрегатов в покрытиях на коэффициент трения и свойства поверхности трения, вследствие чего возможна оптимизация состава углеродных покрытий для различных технических условий эксплуатации.

Ключевые слова: поверхность конденсированных сред, износ, легирование, присадки, антифрикционные материалы, трение, углеродные покрытия

ORDERING EFFECTS IN ANTIFRICTION MATERIALS WITH CARBON-CONTAINING COATINGS (A REVIEW)

L. Elnikova^{1,2}, A. Kuzmenko², V. Belyaev^{3,4}

¹ *National Research Center "Kurchatov institute"*

ulitsa Bolshaya Cheremushkinskaya 25, Moscow 117128, Russian Federation

² *Southwest State University*

ulitsa 50 let Otyabrya 94, Kursk 305040, Russian Federation

³ *Federal State University of Education*

ulitsa Very Voloshinoi 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

⁴ *Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba*

ulitsa Miklukho-Maklaya 6, Moscow 117198, Russian Federation

Abstract

Aim. Characterization of applied in tribotechnics thin film carbon containing coatings of different types and compositions, describing of principles of their work in tribological units and effects of their self-organization and ordering, which influence on friction coefficient and wear.

Methodology. Methods of analysis of literature data and classification of coatings under study in chemical composition, methods of their deposition, load conditions, classification of the methods and tribological tests conditions, classification of methods of characterization applied to coatings under study. Thermodynamical analysis of phase diagrams for carbon containing coatings on their compositions.

Results. We demonstrated the positive influence of alloying of carbon coatings applying in tribotechnical tasks: a required decreasing of friction coefficient and wear. Advantages and deficiencies of coatings with different types of alloying elements (for instance, metals of IV-B group, semiconductive elements and hydrogen) in different lubricants, friction units and conditions are estimated. An influence of ordering, particle morphology and their possible aggregation at the cost of carbon bounds sp^1 , sp^2 , sp^3 and their combinations in coatings on tribological characteristics is proven.

Research implications. Practical implication of this study is an ascertainment of mechanisms of an influence of the alloying ingredients and ordering of particles, molecules and their aggregates in coatings on the friction coefficient, thereupon, optimization of contents of carbon coatings for different engineering specifications.

Keywords: surface of condensed media, additives, alloyed, carbon coating, friction, lubricating compositions, wear

Введение

Для достижения эффекта уменьшения трения и износа трущихся деталей антифрикционных материалов в узлах трибосопряжений с конца прошлого столетия начали развиваться направления трибологических исследований углеродосодержащих покрытий, их использование позволяет наблюдать

специфические зависимости коэффициента трения в процессе нагружения во времени [1–4].

После открытия $(2d+1)$ аллотропов углерода (графена, фуллерена, нанотрубок и пр.) их стали применять в триботехнике в качестве наполнителей в полимерных и других матрицах смазочных композиций (СК) [3], так как их свойства индуцировать агрегацию, упорядочение и фазообразование в объёме смазочных сред оказывает влияние на трибологические характеристики. Таким образом, влияние аллотропов углерода на процесс смазки имеет термодинамические аналогии с нанесением на детали углеродных покрытий.

Известны алмазоподобные, графитоподобные углеродные плёнки, аморфный углерод, представляющий их смесь и др., классификация основана на видах sp -гибридизации sp^3/sp^2 [1]. Линейные углеродные цепочки sp^1 образуют слои параллельно поверхности подложки и вызывают образование гексагональной решётки, расстояние между отдельными цепочками в узлах решётки составляет 0,49–0,503 нм, а в целом плёнки представляют собой многослойные структуры [5]. Связи sp^2 определяют степени упорядоченности графита от монокристаллического до стеклоуглерода. Алмазоподобные углеродные покрытия (diamond-like carbon, DLC) обладают уникальными свойствами твёрдости, упругости и пластичности, биосовместимости, адгезии, низким коэффициентом температурного расширения и др. [3; 6]. Как известно, в режиме граничной смазки, в котором работают все тяжелонагруженные узлы трения современных машин, покрытия DLC способствуют существенному понижению коэффициента трения [1].

Углеродные покрытия наносятся на поверхности деталей методами химического осаждения из газовой фазы (CVD), атомно-слоевого осаждения (ALD), молекулярного осаждения, импульсного плазменного осаждения из газовой фазы (PACVD) и др. [7–10].

При работе углеродных покрытий в узлах трения происходят различные химические реакции с элементами смазочных сред (например, масел, полимерной матрицы и пр.) и поверхностями трущихся деталей [1], ориентационные эффекты в жидкокристаллических СК, что в целом определяет характер зависимостей коэффициента трения. Включение мезогенных присадок-ориентантов, легирование углеродных покрытий металлами (молибденом, вольфрамом, титаном, кобальтом, никелем, хромом и др.) или полупроводниками (кремнием, фтором, и др.) также влияет на коэффициент трения.

Мы представим краткий обзор исследований углеродных покрытий, в том числе легированных покрытий, их работы в триботехнических устройствах и смазочных средах. Мы продемонстрируем роль самоорганизации углеродных частиц в покрытиях, их влияние на коэффициент трения и износ деталей.

Треугольник составов

В работах [5; 11; 12] описывается тройная фазовая диаграмма (т. н. «треугольник составов», впервые предложенный Якобом и Меллером [5; 13; 14]), на таком треугольнике составов обозначены структурные типы углеродных фаз, которые могут быть реализованы в покрытиях в зависимости от фазового соотношения отношения sp^3/sp^2 и $[H]$ (рис. 1).

Так, в зависимости от доминирующего типа углеродных связей sp , наличия водорода и др. элементов, в алмазоподобных углеродных покрытиях, полученных вакуумным осаждением, покрытия DLC подразделяются на аморфные безводородные ($a-C$), тетраэдрические безводородные покрытия с высокой долей углеродных атомов, образующих sp^3 алмазные связи ($ta-C$), покрытия, легированные металлом ($a-C:Me$), группу водород-содержащих (гидрогенизированных) покрытий ($a-C:H$, $ta-C:H$, $a-C:H:Me$) и покрытия, легированные неметаллическими элементами ($a-C:H:X$, где «X» обозначены элементы Si, N, O, F, B).

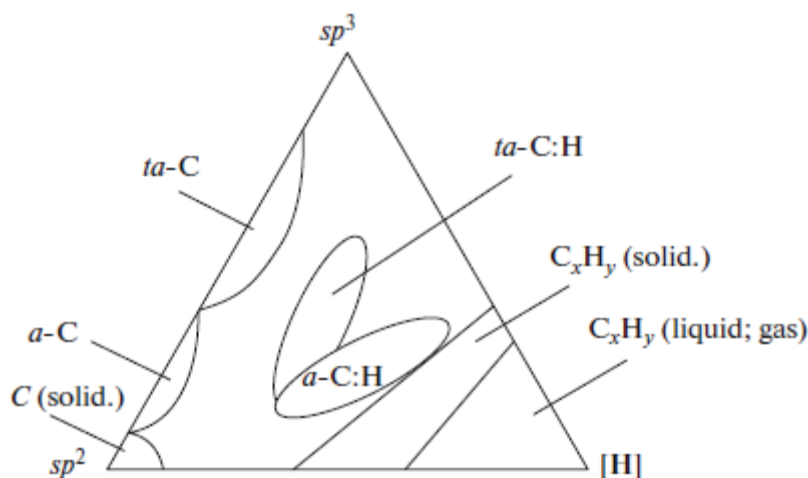


Рис. 1 / Fig. 1. Области сосуществования различных алмазоподобных фаз /
The coexistence regions of different diamond-like phases

Источник: [13].

В обзоре [5] просуммированы данные о модуле Юнга в кристаллографических направлениях $\langle 10\bar{1}0 \rangle$, $\langle 1010 \rangle$, твёрдости, плотности, процентного состава sp^3 для беспримесных покрытий алмаза, фаз $a-C$, $a-C:H$, $ta-C$, $ta-C:H$ и графита. Приведены результаты трибологических испытаний покрытий диаграммы (рис. 1) на стали в режимах граничной, смешанной (полужидкой), гидродинамической и упруго-гидродинамической смазки при различных конфигурациях пар трения («вращающийся диск – неподвижный шар», вращающийся диск – три фиксированных ролика» и пр.).

Для описания трения в различных режимах смазки удобно пользоваться диаграммой Герси-Штрибека [15], которая отображает зависимость

коэффициента трения от величины $\eta v/F$, η – динамическая вязкость масла, v – где скорость относительного смещения трущихся тел, $F = P/l$ – текущая нагрузка на узел трения, P – нагрузка на трибосопряжение длиной l .

Углеродные покрытия, легированные металлами

В работе [16] описываются режимы работы узлов трения с монокристаллическим углеродным покрытием, легированным молибденом. Монокристаллическое покрытие из-за его высокой упорядоченности в процессе работы может служить ориентантом для образования структурно-упорядоченной эпитропной жидкокристаллической (ЖК) фазы углеводородов на подложке [17]. Изучение трибологических свойств покрытий проводилось испытаниями по схеме трения «вращающийся шар – три ролика», покрытие наносилось на ролики. Измерены характеристики: нанотвёрдость, модуль упругости, глубина вдавливания, упругое восстановление. Микроструктура покрытий исследовалась методом электронной дифракции, на просвечивающем аналитическом электронном микроскопе FEI Tecnai G2 F20 с приставкой EDAX, методом просвечивающей электронной микроскопии в режиме сканирования с электронно-зондовым микрорентгеноспектральным анализом элементного состава. Структура покрытия при легировании молибденом меняется с монокристаллической в аморфной матрице на поликристаллический углерод. При этом нанотвёрдость увеличивается на 6%, модуль упругости – на 10%, глубина вдавливания уменьшается на 10%. Коэффициент трения смазочной среды 1% олеиновой кислоты в масле ПАО-4 для пар «сталь-сталь», «сталь – сталь с покрытием», «сталь – сталь с покрытием, легированным Мо» примерно одинаковый, $f=0,15$. Но через 40 минут испытаний для последней пары f снижается до 0,05. В [16] отмечается роль трибохимических реакций в случае покрытия с молибденом только для раствора серосодержащей присадки ДФ11, f снижается с 0,17 до 0,05.

В [18] описаны другие разновидности углеродных покрытий, легированных элементами группы VI-B, в частности, вольфрамом.

Алмазоподобные покрытия для космической техники обсуждались в работе [19]. В данном случае покрытия имеют в своём составе мелкодисперсный порошок MoS_2 , а основной смазочный материал и связующее вещество: фенольные, эпоксидные, кремнийорганические смолы. Твёрдое покрытие практически не испаряется в космической среде, работоспособно в диапазоне температур $-200 \dots 350^\circ\text{C}$, обладает достаточной радиационной стойкостью. Экспериментально установлена оптимальная толщина плёнки покрытия 15 ± 5 мкм. При этом в качестве СК используются пластиковые смазочные материалы ВНИИНП-274Н, ЦИАТИМ-221, НИКА. В [19] исследован характер момента трения и приведённого коэффициента трения от температуры. Также применялись покрытия МДО (нанесённые методом микродугового оксидирования с композиционным материалом на основе углерод-углеродного волокна ЭПАН). В трибоиспытаниях по схемам торцевого нагружения

«кольцо-кольцо» и «вал-штука» вращательного движения в атмосфере воздуха при длительности испытания 120 мин. получены значения коэффициента трения $f=0,006$ при скоростях вращения 0,2 и 1 м/с и удельной нагрузке 0,4 кг/см² для материала МДО-ЭПАН и др. оптимизированные значения [19].

В этом же произведении представлены данные об упрочнении в атмосфере поверхностей с алмазоподобным покрытием, такие поверхности превосходят по износостойкости стальные, включая термообработанные и подвергнутые цементации. Так с покрытием ВНИИП-504 был достигнут $f=0,09-0,1$.

Теоретические расчёты из первых принципов параметров чистых легированных углеродных покрытий на основании модели Хрущёва и Малликена с использованием пакета Quantum Espresso приведены в работе ростовских учёных [20] и ссылка в ней с обзором литературных источников. Это данные расчётов для фаз α -C, c -C:H, DLC, DLC:H, DLC:Ar, DLC:Ti, NDC, алмаз, WC, TiC, VC, ZrC, NbC, TaC, а также для фаз с неметаллическими элементами B₄C, α -SiCN, c -Si₃N₄, C₃N₄, c -BN (см. след. раздел) в плёнках толщиной от 20 до 5000 нм по геометрии связей, износостойкости и твёрдости, с указанием метода синтеза.

В [10] приводятся исследования механических свойств алмазоподобных покрытий DLC-1 (толщина 180 нм), DLC-2 (толщина 430 нм) и DLC-PDMS (с полидиметилсилоксаном, толщина 180 нм) по параметрам нормальной нагрузки 5 мН, твёрдости (измеренной методом склерометрии), модулю упругости и коэффициенту упругого восстановления (методом измерительного динамического индентирования). Покрытия имеют широкие области применений и данные [21], полученные по международным стандартам измерений, могут учитываться в триботехнических углах.

Углеродные покрытия с неметаллическими легирующими примесями

В [22] отмечены улучшенные трибологические характеристики при легировании углеродных покрытий хромом и молибденом, Cr и Mo. Проведены испытания на машине трения КТ-2 (со схемой «диск – 3 ролика») работы узлов трения с покрытиями, работающими в смазочных средах ПАО-4, ПАО-4+сурфактант 1% олеиновая кислота (ОА) и ПАО-4+химически активная присадка 2% ДФ11. Покрытие Cr-DLC наносилось на ролики из стали ШХ-15. В зависимости от времени (до 65 мин.) испытаний коэффициент трения f в узле с покрытием без ПАО повышался до 0,62 на 5 минуте, достигал 0,5 на 65 минуте, для чистого ПАО-4 он был достаточно низким: $\sim 0,15$ без скачков в начале испытаний, а для ПАО-4 с присадками 0,125 (для 1% ОА) и в среднем 0,175 для ПАО-4+ 2% ДФ11.

В режиме «сухого» трения антифрикционный эффект в узлах с покрытием Cr-DLC оказывался ниже ($f=0,5$), чем для случая Mo-DLC, $f=0,38$. Также и диаметр области износа: 483 мкм против 300 мкм (Mo-DLC). Но в присутствии СК оба сплава, Cr-DLC и Mo-DLC, работали с хорошим понижением коэффициента трения и износа. Для покрытия Cr-DLC в [22] исследованы

неоднородности рельефа: покрытие ПАО-4+ДФ11 придаёт поверхности шероховатость (коэффициент трения при этом увеличивается с 0,125 до 0,175), а применение чистого ПАО-4 оставляет её более гладкой.

Трибологические свойства легированных плёнок зависят от химического состава, поликристаллической структуры и морфологии поверхности. В обзоре [13] рассматриваются легирующие примеси Si, F, N, B и O в углеродных плёнках и их влияние на коэффициент трения.

В случае покрытий *a*-CN высокий коэффициент трения связан с тем обстоятельством, что атомы азота изменяют поликристаллическую структуру углеродных плёнок и число доступных для возбуждения фононных мод.

В аэрокосмических приложениях трибологии [23] применяются нанокompозитные покрытия WC/DLC/WS₂. Они наносятся гибридным способом магнетронного распыления и импульсного лазерного напыления. Материал таких покрытий представляет собой аморфную матрицу DLC и внедрённые в неё зерна WC и WS₂ размерами 1–2 нм и 5–10 нм соответственно. Как показали испытания по схеме пары трения «шар-диск» в глубоком вакууме, сухом азоте и влажном воздухе, такие покрытия толщиной примерно 0,5 мкм приводят к низкому трению и износу деталей. Также испытания продемонстрировали кристаллизацию и переориентацию первоначально случайно ориентированных зёрен WS₂, графитизацию аморфной матрицы DLC, обратимое упорядочение состава плёнки, перенесённой на контртело, между WS₂ и графитом в условиях циклической работы при изменении окружающей среды от сухой до влажной, возможные совместные действия DLC/WS₂, обеспечивающие снижение трения в окисляющей среде до значений 0,02–0,05.

Свойства покрытий W–C–S с различным содержанием серы 0, 15 и 29 ат% исследованы методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), а также методом рентгеновской дифракции. При 15 ат% микроструктура изменялась слабо, но при 29 ат% дифракционные и ПЭМ-изображения менялись значительно: ясно различались два типа гексагональных кристаллов WS₂ с различными расстояниями в плоскости (002), а также обнаружены случайно ориентированные зёрна WS₂ размером 5–10 нм. Построены зависимости твёрдости и коэффициента трения при разных содержаниях серы от 0 до 35 ат% в вакууме, сухом азоте и во влажном воздухе [23].

Для исследования износа применялось микрокомбинационное рассеяние (КР) в вакууме. К примеру, гексагональные плоскости WS₂ идентифицировались по пику 400 см⁻¹, также определена ориентация зёрен в процессе трения для 20 ат% WS₂. Однако при содержании серы 20 ат% в WS₂ его гексагональные решётки в контакте не обнаруживались (коэффициент трения высок, 0,5–0,7), но наблюдался аморфный углерод с частичной графитизацией (пики 1380 и 1530 см⁻¹). В воздухе зависимости коэффициента трения усложняются, особенно в интервале концентраций серы 15–20 ат%, из-за трибохимических реакций, окисления и переноса материала с шара. В спектрах КР появлялись пики Fe₂O₃, других оксидов хрома и железа. Тогда при

нагрузках 10–12 ГПа на стали 440С коэффициент трения составлял 0,4–0,5. Но для покрытий с 20 ат% серы он уменьшался до 0,2.

В [24] морфология углеродных покрытий с наночастицами типа «Ni-P-алмаз» изучена методами рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Коэффициент трения с углеродными композитными покрытиями с Ni-P оказался равным 0,18, тогда как для покрытия Ni-P без углерода – 0,47.

Легированные хромом углеродные алмазоподобные покрытия описаны в [6], продемонстрирован их структурный анализ методом СЭМ. Аналогичным покрытиям, Cr-DLC и Cr-H-DLC, наносимым на поверхности трения сплавов AZ91D Mg, посвящена работа [25]. Изучалась микроструктура покрытий, их антикоррозионные свойства в различных средах, коэффициент трения. Испытания проводились при комнатной температуре по схеме трения «шар-диск», контртело шар диаметром 6 мм был выполнен из стали 9Cr18, длина возвратно-поступательного движения составляла 5 мм, время скольжения – 2000 с. в разных средах: во влажном воздухе, деионизированной воде и растворе 3,5 мас.% NaCl, коэффициент трения записывался на компьютер напрямую с трибометра. 2D-бесконтактным оптическим профилометром (KLA-Tencor D-100, USA) исследовался объем износа и профиль поверхности. Методом КР исследованы спектры плёнок чистого DLC, Cr-DLC и Cr-H-DLC на кремниевой подложке. Спектры КР показывают увеличение доли связей sp^3 при возрастании приложенной нагрузки и позволяют судить о хорошей поверхностной адгезии при работе таких покрытий.

Испытаны покрытия DLC [26], работающие на керамических парах трения типа «шар-диск» с контртелом из Si_3N_4 , SiC, WC, ZrO_2 и SiO_2 при разных нагрузках (5, 10, 15 Н) и воздействиях различных внешних сред (например, деионизированной воды, метана), изучалась адгезия, морфология поверхности и пятна износа, проведены оценочные расчёты, получены изображения СЭМ и спектры КР. Найдено, что в присутствии метана 4-5% резко увеличивается коэффициент трения, несмотря на уменьшение размеров зёрен в DLC с небольшим количеством sp^2 связей, которые уменьшают адгезию между подложкой и покрытием. При увеличении концентрации метана (>5%) и увеличении времени испытаний адгезия снижается, а покрытие отваливается и увеличивается остаточный износ.

При наличии шлифовального мусора и воды вода образует плёнку, которая значительно уменьшает шероховатость поверхности покрытия DLC в процессе износа и минимизирует реальную площадь контакта пары трения, т.о. оказалось, что условия водной смазки приводят к снижению коэффициента трения: при сокращении интервала времени от обкатки до стабильного состояния коэффициент трения уменьшается до 0,065 в водной смазке по сравнению с сухим трением 0,107 [26].

Гидрогенизированные углеродные покрытия

Гидрогенизированный аморфный углерод (a -C:H) (на треугольнике составов, рис. 1), в отдельной литературе он также называется «DLC», есть аморфная сетка из атомов углерода и водорода. Эта сетка содержит сильно сшитые углеродные атомы преимущественно из графитоподобных sp^2 и алмазоподобных sp^3 связей [13].

В [27; 28] описана работа покрытий a -C:H. По описанию [27] покрытие нанесено на подложку элемента пары трения из стали марки 100Cr6 методом вакуумного осаждения. Сечение покрытий и морфология их поверхности исследовались методом СЭМ с микроанализатором EDS, а также после трибологических измерений на трибометре применялся конфокальный микроскоп с интерферометрией. В качестве СК использовались ионные жидкости IL1, масло ПАО-6, смазочно-охлаждающие эмульсии с цинковым аспаратом BCCS. Построены зависимости измеренных коэффициентов трения в различных смазочных средах в зависимости от линейного износа и длины скольжения. Наилучший коэффициент трения на протяжении цикла нагружения достигался при использовании в качестве СК ионных жидкостей, $f \sim 0,1$. Сухое трение дало худшие показатели, $f \sim 0,14$, при 400 м пробега контртела, а использование СК BCCS привело значение f к 0,14 на 1 км.

Схемы узлов трения скольжения с возвратно-поступательными механизмами рассмотрены в [28]. Исследовались плёнки толщиной 2 мкм при нагрузке 2 Н при комнатной температуре, относительной атмосферной влажности 50% и схеме трения «шар-диск». Результаты испытаний соотносятся с оценками морфологии поверхности: в начале цикла испытаний высокий коэффициент трения f на DLC-покрытиях отражает первоначальные условия контакта контртел, а при установившемся режиме f снижается, при этом в присутствии продуктов износа, площадь контакта увеличивается. Углеродные связи sp^2 способствуют повышению f и повреждению поверхности материала DLC по сравнению с алмазом в объёме. В [28] проведено сравнение с более низким f у покрытий a -C и ta -C по отношению к водородосодержащему покрытию a -C:H. Для изучения морфологии поверхности контакта для всех разновидностей углеродных покрытий применялись методы КР и атомно-силовой микроскопии. Получены зависимости значения f от числа циклов нагружения 0 ... 20 000: для a -C:H $f \approx 0,15$ от 8000 цикла.

Вдобавок к сказанному в предыдущем разделе, в [25] исследовано влияние водорода на трибологические свойства при работе в составе покрытий Cr-H-DLC.

Заключение

В обзоре на основании анализа совокупности количественных характеристик, приведённых в литературных источниках, исследовано современное состояние актуальной проблемы физики конденсированного состояния – контакта взаимодействующих поверхностей различных

материалов. Установлено положительное назначение легирования углеродосодержащих покрытий, применяемых в триботехнических задачах: требуемое уменьшение коэффициента трения и износа. Оценены преимущества и недостатки покрытий с различными типами легирующих элементов (например, металлов IV-V группы, полупроводниковых элементов, водорода) в различных смазочных средах, парах трения и условиях работы.

Показано влияние упорядочения, морфологии частиц и их возможной агрегации за счёт углеродных связей sp^1 , sp^2 , sp^3 и их соотношений в покрытиях на коэффициент трения и другие трибологические показатели.

Статья поступила в редакцию

ЛИТЕРАТУРА

1. Зеленая трибология: ориентационные свойства углеродных алмазоподобных покрытий трибологических узлов в смазочных средах (обзор) / Левченко В. А., Буяновский И. А., Большаков А. Н., Матвеев В. Н. // Журнал прикладной химии. 2019. Т. 92. № 12. С. 1499–1513. DOI: 10.1134/S0044461819120016.
2. Доценко А. И., Буяновский И. А. Основы триботехники: учебник. М.: НИЦ ИНФРА-М, 2014. 336 с.
3. Tribological and percolation properties of polypropylene/nanodiamond soot composites / Lebedev O. V., Bogdanova O. I., Goncharuk G. P., Ozerin A. N. // Polymers and Polymer Composites. 2020. Vol. 28. Iss. 6. P. 369–377. DOI: 10.1177/0967391119879280.
4. Dağıdır K., Bilen K. Experimental investigation of usage of POE lubricants with Al₂O₃, graphene or CNT nanoparticles in a refrigeration compressor // Beilstein Journal of Nanotechnology. 2023. Vol. 14. P. 1041–1058. DOI: 10.3762/bjnano.14.86.
5. Buyanovskii I. A., Khrushchov M. M., Samusenko V. D. Tribological Behavior of Diamond-Like Carbon Coatings under Boundary Friction: Part I. Structure, Testing Methods, Lubrication by Adsorption Layers // Inorganic Materials: Applied Research. 2022. Vol. 13. No. 4. P. 893–906. DOI: 10.1134/S2075113322040086.
6. Evaluation of bias voltage effect on diamond-like carbon coating properties deposited on tungsten carbide cobalt / Zia A. W., Lee S., Kim J.-K., Kim T. G., Song J. L. // Surface and Interface Analysis. 2014. Vol. 46. Iss. 3. P. 152–156. DOI: 10.1002/sia.5400.
7. Tribological properties of thin films made by atomic layer deposition sliding against silicon / Kilpi L., Ylivaara O. M. E., Vaajoki A., Liu X., Rontu V., Sintonen S., Haimi E., Malm J., Bosund M., Tuominen M., Sajavaara T., Lipsanen H., Hannula S.-P., Puurunen R. L., Ronkainen H. // Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. 2018. Vol. 36. P. 01A122-1–01A122-12. DOI: 10.1116/1.5003729.
8. Семенов А. П. Трибологические свойства и вакуумные ионно-плазменные методы получения алмазных и алмазоподобных покрытий // Трение и износ. 2009. Т. 30. № 1. С. 83–102.
9. Grill A., Patel V. Tribological properties of diamond-like carbon and related materials // Diamond and Related Materials. 1993. Vol. 2. Iss. 5–7. P. 597–605. DOI: 10.1016/0925-9635(93)90190-D.
10. Moriguchi H., Ohara H., Tsujioka M. History and Applications of Diamond-Like Carbon Manufacturing Processes // SEI Technical Review. 2016. No. 82. P. 52–58.

11. Bewilogua K., Hofmann D. History of diamond-like carbon films – from first experiments to worldwide applications // *Surface and Coatings Technology*. 2014. Vol. 242. P. 214–225. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2014.01.031.
12. Charitidis C. A., Koumoulos E. P., Dragatogiannis D. A. Nanotribological Behavior of Carbon Based Thin Films: Friction and Lubricity Mechanisms at the Nanoscale // *Lubricants*. 2013. Vol. 1 (2). P. 22–47. DOI: 10.3390/lubricants1020022.
13. Jacob W., Möller W. On the structure of thin hydrocarbon films // *Applied Physics Letters*. 1993. Vol. 63, Iss. 13. P. 1771–1773. DOI: 10.1063/1.110683.
14. Robertson J. Diamond-like amorphous carbon // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 2002. Vol. 37, Iss. 4–6. P. 129–281. DOI: 10.1016/S0927-796X(02)00005-0.
15. Буяновский И. А., Самусенко В. Д. Граничная смазка как защита трибосопряжения от износа и заедания при жестком режиме работы // *Сборка в машиностроении, приборостроении*. 2019. Т. 20. № 8. С. 379–384.
16. Молибденсодержащее углеродное покрытие триботехнического назначения и антифрикционные свойства масел при граничной смазке / Буяновский И. А., Левченко В. А., Большаков А. Н., Самусенко В. Д. // *Проблемы машиностроения и надежности машин*. 2019. № 1. С. 86–91. DOI: 10.1134/S023571191901005X.
17. Роль углеродных покрытий-ориентантов в оптимизации смазочной способности граничных слоев / Левченко В. А., Буяновский И. А., Игнатъева З. Н., Матвеев В. Н. // *Проблемы машиностроения и надежности машин*. 2004. № 2. С. 43–48.
18. Углеродные покрытия-ориентанты, легированные некоторыми элементами VIВ подгруппы Периодической системы, и их влияние на эффективность антифрикционных свойств масел / Буяновский И. А., Большаков А. Н., Левченко В. А., Матвеев В. Н. // *Механизация строительства*. 2017. Т. 78. № 6. С. 18–21.
19. Броневец М. А. Трибология и материалы для космической техники // *Трибология – Машиностроению: труды XII Международной научно-технической конференции, посвященной 80-летию ИМАШ РАН (Москва, 19–21 ноября 2018 г.)* / под ред. И. А. Буяновского, М. В. Прожеги, В. Д. Самусенко. М.-Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2018. С. 87–89.
20. Илясов В. В., Ашканов А. В., Холодова О. М. К вопросу об износостойкости углеродных пленок // *Трибология – Машиностроению: труды XII Международной научно-технической конференции, посвященной 80-летию ИМАШ РАН (Москва, 19–21 ноября 2018 г.)* / под ред. И. А. Буяновского, М. В. Прожеги, В. Д. Самусенко. М.-Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2018. С. 218–220.
21. Усиенов А., Гоголинский К. Механические свойства сверхтонких углеродных алмазоподобных покрытий // *Наноиндустрия*. 2010. № 5. С. 54–57.
22. Effect of diamond-like carbon coatings alloying with chromium and molybdenum on the lubricating properties of oils during friction in pair with steel / Buyanovskii I. A., Khrushchov M. M., Samusenko V. D., Atamanov M. V., Shcherbakov Yu. I. // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 2059: 28th International Conference on Vacuum Technique and Technology (VTT 2021). Article 012004. DOI: 10.1088/1742-6596/2059/1/012004.
23. Voevodin A. A., O'Neill J. P., Zabinski J. S. Nanocomposite tribological coatings for aerospace applications // *Surface and Coatings Technology*. 1999. Vol. 116–119. P. 36–45. DOI: 10.1016/S0257-8972(99)00228-5.

24. Hua Ch., Ying S. H., Qiu J. S. Ni-P-Diamond Composite Coating on Friction Shims // *Advanced Materials Research*. 2013. Vol. 652–654. P. 1862–1865. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.652-654.1862.
25. Structure and Anticorrosion, Friction, and Wear Characteristics of Pure Diamond-Like Carbon (DLC), Cr-DLC, and Cr-H-DLC Films on AZ91D Mg Alloy / Cui X.-J., Ning Ch.-M., Shang L.-L., Zhang G.-A., Liu X.-Q. // *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2019. Vol. 28. P. 1213–1225. DOI: 10.1007/s11665-019-3854-8.
26. Investigation of Friction and Wear Performance of Diamond Coating under Si₃N₄ Friction Pair / Lu F., Wang Y., Li H., Hao T., Fu Z., Yan G. // *Mechanika*. 2021. Vol. 27. No. 5. P. 421–428. DOI: 10.5755/j02.mech.28329.
27. The properties of lubricated friction pairs with diamond-like carbon coatings / Kowalczyk J., Milewski K., Madej M., Ozimina D. // *Open Engineering*. 2020. Vol. 10. No. 1. P. 688–698. DOI: 10.1515/eng-2020-0075.
28. Tribological behaviour of different diamond-like carbon materials / Liu E., Blanpain B., Shi X., Celis J.-P., Tan H.-S., Tay B.-K., Cheah L.-K., Roos J. R. // *Surface and Coatings Technology*. 1998. Vol. 106. Iss. 1. P. 72–80. DOI: 10.1016/S0257-8972(98)00494-0.

REFERENCES

1. Levchenko V. A., Buyanovsky I. A., Bolshakov A. N., Matveenkov V. N. [Green tribology: orientation properties of diamond-like carbon coatings of friction units in lubricating media]. In: *Zhurnal prikladnoy khimii* [Russian Journal of Applied Chemistry], 2019, vol. 92, iss. 12, pp. 1499–1513. DOI: 10.1134/S0044461819120016.
2. Dotsenko A. I., Buyanovsky I. A. *Osnovy tribotekhniki* [Basics of tribotechnics]. Moscow, INFRA-M Publ., 2014. 336 p.
3. Lebedev O. V., Bogdanova O. I., Goncharuk G. P., Ozerin A. N. Tribological and percolation properties of polypropylene/nanodiamond soot composites. In: *Polymers and Polymer Composites*, 2020, vol. 28, iss. 6, pp. 369–377. DOI: 10.1177/0967391119879280.
4. Dağdır K., Bilen K. Experimental investigation of usage of POE lubricants with Al₂O₃, graphene or CNT nanoparticles in a refrigeration compressor. In: *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 2023, vol. 14, pp. 1041–1058. DOI: 10.3762/bjnano.14.86.
5. Buyanovskii I. A., Khrushchov M. M., Samusenkov V. D. Tribological Behavior of Diamond-Like Carbon Coatings under Boundary Friction: Part I. Structure, Testing Methods, Lubrication by Adsorption Layers. In: *Inorganic Materials: Applied Research*, 2022, vol. 13, no. 4, pp. 893–906. DOI: 10.1134/S2075113322040086.
6. Zia A. W., Lee S., Kim J.-K., Kim T. G., Song J. L. Evaluation of bias voltage effect on diamond-like carbon coating properties deposited on tungsten carbide cobalt. In: *Surface and Interface Analysis*, 2014, vol. 46, iss. 3, pp. 152–156. DOI: 10.1002/sia.5400.
7. Kilpi L., Ylivaara O. M. E., Vaajoki A., Liu X., Rontu V., Sintonen S., Haimi E., Malm J., Bosund M., Tuominen M., Sajavaara T., Lipsanen H., Hannula S.-P., Puurunen R. L., Ronkainen H. Tribological properties of thin films made by atomic layer deposition sliding against silicon. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 2018, vol. 36, pp. 01A122-1–01A122-12. DOI: 10.1116/1.5003729.
8. Semenov A. P. [Tribological properties and vacuum ion-plasma methods of application of diamond and diamond-like coatings]. In: *Treniye i iznos* [Journal of Friction and Wear], 2009, vol. 30, iss. 1, pp. 83–102.
9. Grill A., Patel V. Tribological properties of diamond-like carbon and related materials. In: *Diamond and Related Materials*, 1993, vol. 2, iss. 5–7, pp. 597–605. DOI: 10.1016/0925-9635(93)90190-D.

10. Moriguchi H., Ohara H., Tsujioka M. History and Applications of Diamond-Like Carbon Manufacturing Processes. In: *SEI Technical Review*, 2016, no. 82, pp. 52–58.
11. Bewilogua K., Hofmann D. History of diamond-like carbon films – from first experiments to worldwide applications. In: *Surface and Coatings Technology*, 2014, vol. 242, pp. 214–225. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2014.01.031.
12. Charitidis C. A., Koumoulos E. P., Dragatogiannis D. A. Nanotribological Behavior of Carbon Based Thin Films: Friction and Lubricity Mechanisms at the Nanoscale. In: *Lubricants*, 2013, vol. 1 (2), pp. 22–47. DOI: 10.3390/lubricants1020022.
13. Jacob W., Möller W. On the structure of thin hydrocarbon films. In: *Applied Physics Letters*, 1993, vol. 63, iss. 13, pp. 1771–1773. DOI: 10.1063/1.110683.
14. Robertson J. Diamond-like amorphous carbon. In: *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2002, vol. 37, iss. 4–6, pp. 129–281. DOI: 10.1016/S0927-796X(02)00005-0.
15. Buyanovskii I. A., Samusenko V. D. [Boundary lubrication as protection for tribocoupling against wear and scuffing at hard work]. In: *Sborka v mashinostroyenii, priborostroyenii* [Assembling in mechanical engineering and instrument-making], 2019, vol. 20, no. 8, pp. 379–384.
16. Buyanovskii I. A., Levchenko V. A., Bolshakov A. N., Samusenko V. D. [A molybdenum-containing carbon coating for tribotechnical use and antifriction properties of oils under boundary lubrication]. In: *Problemy mashinostroyeniya i nadezhnosti mashin* [Journal of Machinery Manufacture and Reliability], 2019, no. 1, pp. 86–91. DOI: 10.1134/S023571191901005X.
17. Levchenko V. A., Buyanovsky I. A., Ignatyeva Z. N., Matveenkov V. N. [The role of carbon coatings-orientants in optimizing the lubricating ability of boundary layers]. In: *Problemy mashinostroyeniya i nadezhnosti mashin* [Journal of Machinery Manufacture and Reliability], 2004, no. 2, pp. 43–48.
18. Buyanovsky I. A., Bolshakov A. N., Levchenko V. A., Matveenkov V. N. [Carbon coating-orienters, doped with some elements of VIB subgroup of the periodic system, and their impact on the effectiveness of the antifriction properties of oils]. In: *Mekhanizatsiya stroitelstva* [Mechanization of construction], 2017, vol. 78, no. 6, pp. 18–21.
19. Bronovets M. A. [Tribology and materials for space technology]. In: *Tribologiya – Mashinostroyeniye: trudy XII Mezhdunarodnoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii, posvyashchennoy 80-letiyu IMASH RAN (Moskva, 19–21 noyabrya 2018 g.)* [Tribology for Mechanical Engineering: Proceedings of the XII International Scientific and Technical Conference dedicated to the 80th Anniversary of Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences (Moscow, November 19–21, 2018)]. Moscow, Izhevsk, Izhevsk Institute of Computer Research Publ., 2018, pp. 87–89.
20. Ilyasov V. V., Ashkanov A. V., Kholodova O. M. [On the wear resistance of carbon films]. In: *Tribologiya – Mashinostroyeniye: trudy XII Mezhdunarodnoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii, posvyashchennoy 80-letiyu IMASH RAN (Moskva, 19–21 noyabrya 2018 g.)* [Tribology for Mechanical Engineering: Proceedings of the XII International Scientific and Technical Conference dedicated to the 80th Anniversary of Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences (Moscow, November 19–21, 2018)]. Moscow, Izhevsk, Izhevsk Institute of Computer Research Publ., 2018, pp. 218–220.
21. Usienov A., Gogolinsky K. [Mechanical properties of superfine carbon diamondlike coatings]. In: *Nanoidustriya* [Nanoindustry], 2010, no. 5, pp. 54–57.
22. Buyanovskii I. A., Khrushchov M. M., Samusenko V. D., Atamanov M. V., Shcherbakov Yu. I. [Effect of diamond-like carbon coatings alloying with chromium and molybdenum on the lubricating properties of oils during friction in pair with steel]. In:

- Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2059: 28th International Conference on Vacuum Technique and Technology (VTT 2021), article 012004. DOI: 10.1088/1742-6596/2059/1/012004.
23. Voevodin A. A., O'Neill J. P., Zabinski J. S. Nanocomposite tribological coatings for aerospace applications. In: *Surface and Coatings Technology*, 1999, vol. 116–119, pp. 36–45. DOI: 10.1016/S0257-8972(99)00228-5.
24. Hua Ch., Ying S. H., Qiu J. S. Ni-P-Diamond Composite Coating on Friction Shims. In: *Advanced Materials Research*, 2013, vol. 652–654, pp. 1862–1865. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.652-654.1862.
25. Cui X.-J., Ning Ch.-M., Shang L.-L., Zhang G.-A., Liu X.-Q. Structure and Anticorrosion, Friction, and Wear Characteristics of Pure Diamond-Like Carbon (DLC), Cr-DLC, and Cr-H-DLC Films on AZ91D Mg Alloy. In: *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2019, vol. 28, pp. 1213–1225. DOI: 10.1007/s11665-019-3854-8.
26. Lu F., Wang Y., Li H., Hao T., Fu Z., Yan G. Investigation of Friction and Wear Performance of Diamond Coating under Si3N4 Friction Pair. In: *Mechanika*, 2021, vol. 27, no. 5, pp. 421–428. DOI: 10.5755/j02.mech.28329.
27. Kowalczyk J., Milewski K., Madej M., Ozimina D. The properties of lubricated friction pairs with diamond-like carbon coatings. In: *Open Engineering*, 2020, vol. 10, no. 1, pp. 688–698. DOI: 10.1515/eng-2020-0075.
28. Liu E., Blanpain B., Shi X., Celis J.-P., Tan H.-S., Tay B.-K., Cheah L.-K., Roos J. R. Tribological behaviour of different diamond-like carbon materials. In: *Surface and Coatings Technology*, 1998, vol. 106, iss. 1, pp. 72–80. DOI: 10.1016/S0257-8972(98)00494-0.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Ельникова Лилия Вячеславовна – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», старший научный сотрудник Регионального центра нанотехнологий Юго-Западного государственного университета;
e-mail: elnikova@itep.ru

Кузьменко Александр Павлович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Регионального центра нанотехнологий Юго-Западного государственного университета;
e-mail: apk3527@mail.ru

Беляев Виктор Васильевич – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник управления развития науки, профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; профессор кафедры нанотехнологии и микросистемной техники Российского университета дружбы народов имени Патриса Лумумбы;
e-mail: vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Liliia V. Elnikova – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Scientific Researcher, National Research Center “Kurchatov institute”; Senior Researcher, Regional Center of Nanotechnology, Southwest State University;
e-mail: elnikova@itep.ru

Aleksandr P. Kuzmenko – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Leading Researcher, Regional Center of Nanotechnology, Southwest State University;
e-mail: apk3527@mail.ru

Victor V. Belyaev – Dr. Sci. (Engineering), Leading Researcher, Science Development Department; Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; Prof., Department of Nanotechnologies and Microsystem Technology, Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba;
e-mail: vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Ельникова Л. В., Кузьменко А. П., Беляев В. В. Эффекты упорядочения в антифрикционных материалах с углеродосодержащими покрытиями (обзор) // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 2. С. 45–59.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-45-59

FOR CITATION

Elnikova L. V., Kuzmenko A. P., Belyaev V. V. Ordering effects in lubricant media in the presence of carbon-containing coatings (a review). In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 2, pp. 45–59.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-45-59

ТЕОРИЯ И МЕТОДИКА ОБУЧЕНИЯ И ВОСПИТАНИЯ ПО ОБЛАСТЯМ И УРОВНЯМ ОБРАЗОВАНИЯ

УДК 519.217

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-60-78

РАСЧЁТ ХАРАКТЕРИСТИК СИСТЕМ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ В КОМПЬЮТЕРНЫХ КЛАССАХ

Хасанов А. С.

*Российский экономический университет имени Г. В. Плеханова
115054, г. Москва, Стремянный пер., д. 36, Российская Федерация*

Аннотация

Целью данной статьи является рассмотрение алгоритмов расчёта стационарных характеристик систем массового обслуживания в компьютерных классах с использованием табличного процессора Excel.

Процедура и методы. Приводится краткое содержание данной темы. Дается общий подход для расчёта стационарных характеристик систем массового обслуживания. Общий подход конкретизируется для систем массового обслуживания с отказами, с очередью и с неограниченной очередью.

Результаты. Описан один из способов организации занятий в компьютерных классах при изучении систем массового обслуживания.

Практическая значимость работы обусловлена необходимостью проведения занятий по системам массового обслуживания для некоторых направлений подготовки студентов. В условиях жёстких временных ограничений занятия могут быть организованы в компьютерных классах. Предложенный подход может быть использован преподавателями как на занятиях, так и при организации самостоятельной работы студентов, так как использует простейшие инструменты общедоступного табличного процессора Excel.

Ключевые слова: случайный процесс, система массового обслуживания, поток требований, поток обслуживания, граф состояний

CALCULATION OF THE QUEUING SYSTEMS CHARACTERISTICS IN COMPUTER CLASSES

A. Khasanov

Plekhanov Russian University of Economics

Stremyanny pereulok 36, Moscow 115054, Russian Federation

Abstract

Aim of this article is to consider algorithms for calculating stationary characteristics of queuing systems in computer classes using an Excel spreadsheet processor.

Methodology. A summary of this topic is provided. A general approach is given for calculating the stationary characteristics of queuing systems. The general approach is specified for queuing systems with failures, with a queue and with an unlimited queue.

Results. One of the ways of organizing classes in computer classes in the study of queuing systems is described.

Research implications. The practical significance of the work is due to the need to conduct classes on queuing systems for some areas of student training. In conditions of strict time constraints, classes can be organized in computer classes. The proposed approach can be used by teachers both in the classroom and when organizing students' independent work, since it uses the simplest tools of the publicly available Excel spreadsheet processor.

Keywords: random process, queuing system, requirements flow, service flow, status graph

Введение

При решении многих прикладных задач возникает необходимость привлечения теории массового обслуживания. Рассмотрим работу крупного морского порта. В порт прибывают суда из многих стран. Моменты прихода судов и длительности их обслуживания не могут быть точно определены заранее, следовательно, в этом процессе присутствует элемент случайности. Поток судов образует входящий поток требований (заявок), который порту предстоит обслужить. В данном случае порт является примером системы массового обслуживания (коротко СМО), а причалы – примерами каналов обслуживания (приборов) системы. Суда, отходящие от причала, образуют поток обслуживания причала или выходящий поток. Специалист, ответственный за организацию работы порта, нуждается в инструменте анализа функционирования СМО. Таким инструментом, учитывающим случайные колебания в подходе судов и их обслуживания, является теория массового обслуживания.

Структуру СМО определяют четыре элемента:

1. Входящий поток однородных требований, поступающих в СМО в случайные моменты времени (требования ещё называют заявками).
2. Поток обслуживания (поток требований на выходе непрерывно работающего прибора, его ещё называют выходящим потоком).
3. Количество однородных приборов (или каналов) в системе.

4. Число мест ожидания.

СМО с одним прибором называется одноканальным, а СМО с несколькими приборами – многоканальным. Если число мест ожидания в СМО равно нулю, то такая система называется СМО с отказами. В такой СМО требование, поступившее в момент, когда все приборы заняты, получает отказ и покидает систему. Если число мест ожидания больше нуля, то такая система называется СМО с ожиданием. В случае бесконечного числа мест ожидания система называется СМО с неограниченной очередью (в ней ни одно требование не получает отказ).

Функционирование любой системы обслуживания зависит от способа организации обслуживания (дисциплины обслуживания). Дисциплина обслуживания указывает, в каком порядке обслуживаются поступающие в систему требования. Мы будем рассматривать СМО, в которых приборы установлены параллельно и поступившие требования обслуживаются на одном из свободных приборов в порядке их поступления в СМО.

Для повышения эффективности функционирования реальных систем необходимо уметь рассчитывать характеристики их вероятностных моделей. При этом различают нестационарные (для произвольного момента времени) и стационарные (для достаточно удалённого момента времени) характеристики. Мы будем рассчитывать только стационарные характеристики.

Теория массового обслуживания является важным элементом общей математической подготовки специалистов широкого профиля. Подробное изложение этой теории можно найти в работах [1–7]. В условиях жёстких временных ограничений важное значение приобретает организация самостоятельной работы студентов. Как и при организации самостоятельной работы студентов при изучении других предметов [8–11], самостоятельная работа студентов при изучении систем массового обслуживания может быть организована на основе индивидуальных заданий для самостоятельного выполнения студентами.

1. Простейший поток событий

Обозначим через $v(t)$ число требований, поступивших в СМО за временной промежуток $[0, t)$, где $v(0) = 0$. Так как требования поступают в СМО в случайные моменты времени, то $v(t)$ является случайной величиной при $\forall t \in (0, +\infty)$. Это означает, что $v(t)$ является случайным процессом с непрерывным временем $t \in [0, +\infty)$. В результате одного наблюдения за случайным процессом мы получим некоторую функцию от времени (траекторию процесса). Повторяя наблюдения, мы получим различные траектории этого процесса, но все они принимают неотрицательные значения и не убывают, так как число поступивших требований является целым числом и не может убывать с ростом времени. Так мы приходим к понятию потока событий. Говорят, что задан поток событий, если задан случайный процесс $v(t)$ с непрерывным временем $t \in [0, +\infty)$, принимающий целые неотрицательные

значения, траектории которого не убывают и $v(0) = 0$. Значение $v(t)$ имеет смысл числа событий, наступивших за промежуток времени $[0, t)$. Входящий поток требований и поток обслуживания являются частными случаями потока событий. В случае потока обслуживания значение $v(t)$ имеет смысл числа требований, покинувших прибор за промежуток $[0, t)$, а в случае входящего потока – числа требований, поступивших в СМО за временной промежуток $[0, t)$.

Поток называется стационарным, если сдвиг начала отсчёта по оси времени не влияет на вероятностные характеристики потока, т.е. для $\forall c > 0$ с вероятностной точки зрения поток $v(t + c) - v(c)$ эквивалентен потоку $v(t)$. Интенсивностью стационарного потока называется «математическое ожидание числа событий, наступивших за единицу времени». Эту величину мы будем обозначать через a .

Поток $v(t)$ называется потоком с независимыми приращениями, если для любых значений $t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots$ из множества $T = [0, +\infty)$ соответствующие приращения $v(t_1) - v(t_0), v(t_2) - v(t_1), \dots$ являются независимыми случайными величинами. Такие потоки называют ещё потоками без последствия.

Поток называется ординарным, если вероятность наступления за малый промежуток времени h двух и более событий пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью наступления одного события. Это можно записать в эквивалентной форме через условную вероятность:

$$P(v(h) \geq 2 | v(h) \geq 1) \rightarrow 0 \text{ при } h \rightarrow 0. \quad (1)$$

В данной работе мы будем рассматривать только те потоки, которые удовлетворяют условиям стационарности, ординарности и отсутствия последствия – их называют простейшими. Можно доказать, что $v(t)$ имеет распределение Пуассона с параметром at :

$$P(v(t) = k) = \frac{(at)^k}{k!} e^{-at}, \text{ где } k = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Простейший поток с интенсивностью a будем называть пуассоновским и обозначать через $v(a, t)$. Пуассоновский поток $v(a, t)$ обладает следующим определяющим свойством: после наступления события следующее событие ожидается через случайное время $t_{ож}$, распределённое по показательному закону с параметром a . Действительно, из формулы (2) следует, что $P(v(t) = 0) = e^{-at}$. Эта вероятность равна вероятности того, что за временной промежуток $[0, t)$ не появится ни одно событие потока, т.е. вероятности события $\{t_{ож} \geq t\}$. Но тогда $P(t_{ож} \geq t) = e^{-at}$, а $P(t_{ож} < t) = 1 - e^{-at}$.

В дальнейшем будем считать, что входящий поток и поток обслуживания являются пуассоновскими потоками с интенсивностями λ и μ . Тогда время ожидания следующего входящего требования (время между последовательными моментами поступления требований) $t_{вх}$ и время ожидания выхода следующего требования из непрерывно работающего

прибора $t_{об}$ (время обслуживания) распределены по показательному закону с параметрами λ и μ . Из свойств показательного распределения следуют формулы для математических ожиданий случайных величин $t_{вх}$, $t_{об}$: $Et_{вх} = 1/\lambda$, $Et_{об} = 1/\mu$. Эти формулы используются для оценивания значений параметров λ и μ (их оценки также обозначим буквами λ и μ). Если $\bar{t}_{вх}$, $\bar{t}_{об}$ – оценки математических ожиданий $Et_{вх}$, $Et_{об}$, полученные на основе наблюдений случайных величин $t_{вх}$ и $t_{об}$, то

$$\lambda = 1/\bar{t}_{вх}, \quad (3)$$

$$\mu = 1/\bar{t}_{об}. \quad (4)$$

При заданном уровне значимости проверка гипотезы о том, что промежуток времени между последовательными моментами поступления требований $t_{вх}$ и время обслуживания $t_{об}$ распределены по показательному закону, осуществляется по стандартной схеме на основе статистических данных. Нами рассмотрены только те СМО, в которых $t_{вх}$ и $t_{об}$ распределены по показательному закону. В противном случае анализ СМО усложняется.

Пуассоновский поток обладает ещё одним естественным свойством: объединение двух независимых пуассоновских потоков с параметрами a_1 и a_2 даёт пуассоновский поток с параметром $a_1 + a_2$. Отсюда следует, что n независимо работающих приборам соответствует пуассоновский поток обслуживания с интенсивностью $n\mu$.

Пуассоновский поток $\nu(a, t)$ является примером марковских процессов, т. е. процессов, поведение которых после момента t при фиксированном состоянии в момент времени t не зависит от поведения процесса до момента t , а зависит только от состояния этого процесса в момент времени t (значения процесса называются его состояниями).

Пуассоновский поток обычно обозначают буквой M . Как было сказано во введении, структура СМО определяется входящим потоком, потоком обслуживания одного прибора, количеством приборов в системе (обозначается буквой n), числом мест ожидания (обозначается буквой m). Мы ограничимся рассмотрением трёх типов СМО: $M|M|n|0$ – система с отказами (входящий поток и поток обслуживания прибора являются пуассоновскими, имеются n приборов, мест ожидания нет), $M|M|n|m$ – система с очередью (имеются m мест ожидания), $M|M|n|\infty$ – система с неограниченной очередью.

2. Предельные вероятности состояний

Пусть $L(t)$ – число требований, находящихся в СМО в момент времени t . Некоторые требования находятся на обслуживании, а некоторые – в очереди. Значения $L(t)$ назовём состояниями СМО, а множество состояний системы обозначим через S . В СМО типа $M|M|n|0$ могут пребывать не более n требований и $S = \{0, 1, 2, \dots, n\}$, а в СМО типа $M|M|n|m$ $S = \{0, 1, 2, \dots, n, n+1, \dots, n+m\}$. В СМО типа $M|M|n|\infty$ множество S состоит из всех неотрицательных чисел: $S = \{0, 1, 2, \dots, n, \dots\}$. В общем случае, если $L(t)$

является марковским процессом, то система называется марковской. Все рассматриваемые нами типы СМО с пуассоновскими входящими и выходящими потоками являются марковскими СМО. Из свойства (1) входящего потока и потока обслуживания можно сделать вывод, что для $L(t)$ в состоянии $i \in S$ за малый промежуток времени h возможны переходы только в соседние состояния (на основании свойства (1) остальными переходами можно пренебречь). Такие процессы являются важным классом марковских процессов и называются процессами гибели и размножения. Название этих процессов связано с рядом биологических задач, где они служат математической моделью изменения численности биологических популяций: переход $i \rightarrow i + 1$ соответствует рождению одного члена популяции, а переход $i \rightarrow i - 1$ – гибели. Для $L(t)$ переход $i \rightarrow i + 1$ означает поступление нового требования, а переход $i \rightarrow i - 1$ происходит тогда, когда одно из требований после обслуживания покидает прибор.

Воспользуемся методами анализа процессов гибели и размножения. При анализе $L(t)$ удобно пользоваться геометрической схемой – так называемым графом состояний. Переходы из состояния в соседние состояния будем изображать стрелками с указанием интенсивностей потоков, под воздействием которых этот переход совершается. В любом состоянии i переход $i \rightarrow i + 1$ происходит за счёт входящего потока с интенсивностью λ , а переход $i \rightarrow i - 1$ – за счёт суммарного потока обслуживания работающих в этом состоянии приборов. Интенсивность суммарного потока обслуживания зависит от числа работающих приборов. Как уже было сказано выше, если заняты k приборов, то суммарный поток имеет интенсивность $k\mu$. Ниже приведены графы состояний в зависимости от структуры СМО.

1. СМО типа $M|M|n|0$. В такой системе в состоянии i работают i приборов:

$$0 \xrightleftharpoons[\mu]{\lambda} 1 \xrightleftharpoons[2\mu]{\lambda} 2 \xrightleftharpoons[3\mu]{\lambda} 3 \xrightleftharpoons[4\mu]{\lambda} 4 \xrightleftharpoons[5\mu]{\lambda} \dots \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} n. \quad (5)$$

2. В СМО типа $M|M|n|m$ во всех состояниях $i \in [n + 1, n + m]$ работают n приборов, а $i - n$ требований образуют очередь:

$$0 \xrightleftharpoons[\mu]{\lambda} 1 \xrightleftharpoons[2\mu]{\lambda} \dots \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} n \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} n + 1 \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} \dots \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} n + m \quad (6)$$

3. В СМО типа $M|M|n|\infty$ также во всех состояниях $i \geq n + 1$ работают n приборов, а $i - n$ требований образуют очередь:

$$0 \xrightleftharpoons[\mu]{\lambda} 1 \xrightleftharpoons[2\mu]{\lambda} \dots \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} n \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} n + 1 \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} n + 2 \xrightleftharpoons[n\mu]{\lambda} \dots \quad (7)$$

В любой фиксированный момент времени $t \in [0, +\infty)$ СМО находится в одном из своих состояний. Пусть $P_i(t)$ – вероятность состояния i , т. е. вероятность того, что в момент времени t система будет находиться в состоянии i (если $i \notin S$, то $P_i(t) = 0$). Ясно, что

$$\sum_i P_i(t) = 1, \forall t \in [0, +\infty). \quad (8)$$

Обозначим через $\lambda_{i,j}$ интенсивность потока, переводящего систему из состояния i в соседнее состояние j (если $i \notin S$ или $j \notin S$, то $\lambda_{i,j}=0$). Можно доказать, что для среднего состояния i , в котором возможны оба перехода $i \rightarrow i-1$ и $i \rightarrow i+1$, справедлива формула для производной $P'_i(t)$:

$$P'_i(t) = \lambda_{i-1,i}P_{i-1}(t) + \lambda_{i+1,i}P_{i+1}(t) - (\lambda_{i,i-1} + \lambda_{i,i+1})P_i(t). \quad (9)$$

В крайних состояниях некоторые потоки отсутствуют, т. е. некоторые интенсивности равны нулю, что упрощает формулу (9). Для левого крайнего состояния 0 (переход $i \rightarrow i-1$ невозможен):

$$P'_0(t) = \lambda_{1,0}P_1(t) - \lambda_{0,1}P_0(t), \quad (10)$$

а для правого крайнего состояния N (переход $N \rightarrow N+1$ невозможен):

$$P'_N(t) = \lambda_{N-1,N}P_{N-1}(t) - \lambda_{N,N-1}P_N(t). \quad (11)$$

Уравнения (9)–(11) называются дифференциальными уравнениями Колмогорова. Добавим к ним начальные условия $P_0(0) = 1, P_i(0) = 0, \forall i \geq 1$, связанные с условием $v(0) = 0$.

Интерес представляют вероятности $P_i(t)$ в предельном режиме при $t \rightarrow +\infty$. Эти вероятности называются предельными вероятностями состояний и обозначаются через P_i :

$$P_i = \lim_{t \rightarrow +\infty} P_i(t), \text{ где } i \in S. \quad (12)$$

Для СМО типа $M|M|n|0$ и $M|M|n|m$ (в них число состояний конечно) всегда существуют положительные предельные вероятности состояний. Переходя к пределу в соотношении (8), получим уравнение:

$$\sum_i P_i = 1. \quad (13)$$

В случае СМО типа $M|M|n|\infty$ не всегда существуют положительные предельные вероятности. Пусть

$$\gamma = \frac{\lambda}{n\mu}. \quad (14)$$

Будем считать, что для СМО типа $M|M|n|\infty$ выполнено следующее условие:

$$\gamma < 1. \quad (15)$$

Можно показать, что в этом случае предельный режим существует.

Так как $P_i = \text{const}$, то $P'_i = 0$. Переходя к пределу при $t \rightarrow +\infty$ в уравнениях (9)–(11), мы получим уравнения для предельных вероятностей P_i . Для левого крайнего состояния 0:

$$\lambda_{1,0}P_1 = \lambda_{0,1}P_0. \quad (16)$$

Для среднего состояния i :

$$(\lambda_{i,i-1} + \lambda_{i,i+1})P_i = \lambda_{i-1,i}P_{i-1} + \lambda_{i+1,i}P_{i+1}. \quad (17)$$

Для правого крайнего состояния N (если оно существует):

$$\lambda_{N,N-1}P_N = \lambda_{N-1,N}P_{N-1}. \quad (18)$$

Уравнения (16)–(18) можно объединить в одно уравнение:

$$\lambda_{i,i-1}P_i = \lambda_{i-1,i}P_{i-1} \text{ при } \forall i \in S, i \geq 1. \quad (19)$$

Учитывая, что все $\lambda_{i-1,i}$ в уравнении (19) равны λ (см. графы состояний (5)–(7)), и добавляя к ним уравнение (13), получим следующую систему уравнений относительно предельных вероятностей состояний:

$$\begin{cases} P_i = \frac{\lambda}{\lambda_{i,i-1}} P_{i-1}, \forall i \geq 1, i \in S, \\ \sum_i P_i = 1. \end{cases} \quad (20)$$

Под системой для предельных вероятностей состояний мы будем иметь в виду систему (20). Последовательно выражая по первой формуле системы (20) $P_1, P_2, \dots$ через P_0 и подставляя эти выражения во вторую формулу системы (20), можно найти сначала P_0 , а затем и $P_1, P_2, \dots$. Из системы (20) могут быть получены общие формулы для $P_0, P_1, P_2, \dots$. Эти формулы, а также нахождение вероятности $P_{оч}$ наличия очереди в СМО, вероятности занятости всех приборов π , вероятности отказа $P_{отк}$ и средней длины очереди N мы обсудим на этапе рассмотрения конкретных типов СМО.

Зная предельные вероятности, можно найти другие характеристики СМО. Вероятность отказа $P_{отк}$ имеет конкретный смысл: она равна доле среднего времени пребывания системы в состоянии полной занятости (нет свободных приборов и мест ожидания). Другими словами, если система работала в течение единицы времени, то в среднем в течение времени $P_{отк}$ система была полностью загружена. За это время полной занятости в среднем поступило $\lambda P_{отк}$ требований, и они получили отказ. Так как за единицу времени поступают в среднем λ требований, то величина $P_{отк}$ соответствует доле требований, получивших отказ, а $1-P_{отк}$ – доле требований, принятых на обслуживание. Величина $1-P_{отк}$ называется относительной пропускной способностью системы и обозначается через Q :

$$Q = 1 - P_{отк}. \quad (21)$$

Как было сказано выше, по определению интенсивности потока, за единицу времени в среднем в систему поступают λ требований и из них λQ требований будут обслужены, а $\lambda P_{отк}$ требований получают отказ. Величина λQ называется абсолютной пропускной способностью системы и обозначается через A :

$$A = \lambda Q. \quad (22)$$

Эта величина равна среднему количеству требований, принятых системой на обслуживание в единицу времени. Можно показать, что в предельном режиме среднее число находящихся в системе требований L равно произведению абсолютной пропускной способности системы A на среднее время пребывания в системе одного требования V :

$$L = AV. \quad (23)$$

Эта формула называется формулой Литтла. Также справедливы следующие аналоги формулы Литтла:

$$N = AW, \quad (24)$$

где N – средняя длина очереди, W – среднее время ожидания в очереди,

$$\bar{k} = A/\mu, \quad (25)$$

где $\bar{k}$ – среднее число занятых каналов в системе.

Коэффициент занятости прибора $Q_{зан}$ – это отношение среднего числа занятых каналов к общему числу каналов:

$$Q_{зан} = \frac{\bar{k}}{n}. \quad (26)$$

Зная среднюю длину очереди N , величину среднего времени ожидания в очереди W можно найти по формуле (24):

$$W = N/A. \quad (27)$$

Среднее время пребывания в системе одного требования V складывается из среднего времени ожидания в очереди W и среднего времени обслуживания $1/\mu$:

$$V = W + 1/\mu. \quad (28)$$

Среднее количество требований в системе L складывается из средней длины очереди N и среднего количества требований, находящихся в занятых каналах, т. е. $\bar{k}$:

$$L = N + \bar{k}. \quad (29)$$

Мы привели общий подход для нахождения предельных вероятностей состояний и для расчёта некоторых характеристик СМО. Перейдём к реализации этого подхода в случае конкретных типов СМО.

3. СМО с отказами

Исходными данными для расчётов являются величины значения λ , μ и n . Множеством состояний системы $M|M|n|0$ будет $S = \{0, 1, 2, \dots, n\}$, граф состояний имеет вид (5). Пусть

$$\rho = \lambda/\mu. \quad (30)$$

Величина ρ называется интенсивностью нагрузки канала. Так как $\lambda_{i,i-1} = i\mu$ в этом типе СМО, то система (20) имеет вид:

$$\begin{cases} P_i = \frac{\rho}{i} P_{i-1}, \forall i \geq 1, i \in S, \\ \sum_i P_i = 1. \end{cases} \quad (31)$$

Последовательно выражая $P_1, P_2, \dots, P_n$ через P_0 из первой формулы системы (31), получим следующую формулу:

$$P_i = \frac{\rho^i}{i!} P_0, \text{ где } i = 0, 1, \dots, n. \tag{32}$$

Подставляя эти выражения для $P_1, P_2, \dots, P_n$ во вторую формулу системы (31), приходим к следующей формуле:

$$P_i = \frac{\rho^i}{i!} S^{-1}, \text{ где } S = \sum_{i=0}^n \frac{\rho^i}{i!}, i = 0, 1, \dots, n. \tag{33}$$

Пусть $\lambda = 3,1746$, $\mu = 1,2183$ и $n=5$. В Excel заполним следующую таблицу (см. табл. 1). В ячейке A1 приведено название таблицы. В ячейках A2:D2 приведены обозначения λ , μ , n и ρ . В ячейки A3:C3 выведем значения исходных величин λ , μ и n . Для вычисления значения ρ в ячейку D3 введём формулу =A3/B3. В ячейке A4 находится обозначение i для состояний системы. В ячейках B4:G4 расположены состояния системы (их можно ввести, используя автозаполнение), а в ячейке H4 – обозначение суммы S из формулы (33). В ячейке A5 находится обозначение слагаемых s_i суммы S , а в ячейках B5:G5 вычисляются их значения. Для этого в ячейку B5 введём значение, равное единице, а затем в ячейку C5 введём формулу =B5*\$D\$3/C4 и скопируем эту формулу для всех ячеек D5:G5. В ячейке H5 вычислим значение суммы S , для чего курсор установим в ячейке H5 и с помощью кнопки Σ найдём сумму значений ячеек B5:G5. В ячейке A6 приведено обозначение вероятности состояния P_i . В ячейках B6:G6 получим предельные вероятности состояний. Для этого в ячейку B6 введём формулу =B5/\$H\$5 и скопируем эту формулу для всех ячеек C6:G6. Если формулу в ячейке H5 скопировать в ячейку H6, то получим сумму предельных вероятностей состояний, т. е. единицу. Результаты округлены до четырёх знаков после запятой.

Таблица 1 / Table 1

Предельные вероятности состояний для СМО с отказами / Limit probabilities of states for queueing systems with failures

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Таблица 1							
2	λ	μ	n	ρ				
3	3,1746	1,2183	5	2,6058				
4	i	0	1	2	3	4	5	S
5	s_i	1	2,6058	3,3950	2,9489	1,9210	1,0011	12,8717
6	P_i	0,0777	0,2024	0,2638	0,2291	0,1492	0,0778	1

Источник: составлено автором.

В СМО типа $M|M|n|0$ требование получит отказ, если все приборы заняты, что соответствует состоянию n . Таким образом, для вероятности отказа $P_{отк}$ и вероятности занятости всех приборов π имеем формулы:

$$P_{отк} = P_n, \tag{34}$$

$$\pi = P_n. \tag{35}$$

Так как в СМО типа $M|M|n|0$ нет мест ожидания, то вероятность очереди $P_{оч}$ и средняя длина очереди N равны нулю:

$$N=0, \tag{36}$$

$$P_{оч}=0. \tag{37}$$

В Excel заполним новую таблицу (см. табл. 2). В ячейке A8 приведено её название. В ячейках A9:K9 приведены обозначения характеристик. В ячейках A10:K10 вычисляются их значения. В ячейку A10 введём нулевое значение (см. формулу (37)). Так как $n = 5$, то $\pi = P_5$ и $P_{отк} = P_5$ (см. формулы (34)–(35)). В ячейки B10 и C10 введём формулу = G6, так как в ячейке G6 находится значение P_5 . В ячейку D10 введём нулевое значение (см. формулу (36)). В ячейки E10:H10 введём следующие формулы: =1–C10 – в E10 (см. формулу (21)), =A3*E10 – в F10 (см. формулу (22)), =F10/B3 – в G10 (см. формулу (25)), = G10/C3 – в H10 (см. формулу (26)). Так как очереди нет, то среднее время ожидания в очереди $W = 0$ и в ячейку I10 введём нулевое значение (см. формулу (27)). Так как $W = 0$, то в ячейку J10 введём формулу =1/B3 (см. формулу (28)). Так как $N = 0$, то в ячейку K10 введём формулу = G10 (см. формулу (29)). В табл. 2 результаты округлены до двух знаков после запятой.

Таблица 2 / Table 2

Стационарные характеристики для СМО с отказами / Stationary characteristics for queueing systems with failures

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
8	Таблица 2										
9	$P_{оч}$	π	$P_{отк}$	N	Q	A	$\bar{k}$	$Q_{зан}$	W	V	L
10	0	0,08	0,08	0	0,92	2,93	2,40	0,48	0	0,82	2,40

Источник: составлено автором.

4. СМО с очередью

Множеством состояний в системе $M|M|n|m$ будет $S = \{0,1,\dots,n,\dots,n+m\}$. Граф состояний такой системы имеет вид (6). Так как $\lambda_{i,i-1} = i\mu$ при $1 \leq i \leq n$ и $\lambda_{i,i-1} = n\mu$ при $n+1 \leq i \leq n+m$, то в этом типе СМО система (20) имеет вид (γ определяется по формуле (14)):

$$\begin{cases} P_i = \frac{\rho}{i} P_{i-1}, \text{ если } 1 \leq i \leq n, \\ P_i = \gamma P_{i-1}, \text{ если } n+1 \leq i \leq n+m, \\ \sum_i P_i = 1. \end{cases} \tag{38}$$

Из системы (38) следует, что

$$P_i = \frac{\rho^i}{i!} P_0, \text{ где } i = 0, 1, \dots, n. \quad (39)$$

$$P_i = \frac{\rho^n}{n!} \gamma^{i-n} P_0, \text{ где } i = n + 1, \dots, n + m. \quad (40)$$

Подставляя эти выражения в третью формулу системы (38), получим, что

$$P_0 \sum_{i=0}^n \frac{\rho^i}{i!} + P_0 \frac{\rho^n}{n!} \sum_{i=n+1}^{n+m} \gamma^{i-n} = 1. \quad (41)$$

Второе слагаемое в формуле (41) равно сумме вероятностей состояний, в которых есть очередь и, следовательно, равно вероятности наличия в системе очереди $P_{оч}$. Из формул (39)–(41) следует, что

$$P_0 = S^{-1}, \text{ где } S = \sum_{i=0}^n \frac{\rho^i}{i!} + \frac{\rho^n}{n!} \sum_{i=n+1}^{n+m} \gamma^{i-n}, \quad (42)$$

$$P_i = \frac{\rho^i}{i!} S^{-1}, \text{ где } i = 0, 1, \dots, n, \quad (43)$$

$$P_i = \frac{\rho^n \gamma^{i-n}}{n!} S^{-1}, \text{ где } i = n + 1, \dots, n + m, \quad (44)$$

$$P_{оч} = S^{-1} \frac{\rho^n}{n!} \sum_{i=n+1}^{n+m} \gamma^{i-n}. \quad (45)$$

Все приборы заняты в состоянии n и в состояниях, в которых есть очередь. Для вероятности занятости всех приборов π получим формулу:

$$\pi = P_n + P_{оч}. \quad (46)$$

Приведём формулы для вероятности отказа $P_{отк}$ и средней длины очереди N . Требование получит отказ, если все приборы и все места ожидания заняты, а этому соответствует состояние $n + m$. Итак,

$$P_{отк} = P_{n+m}. \quad (47)$$

В состоянии $i \in [0, n]$ очередь пуста, а в состоянии $i \in [n + 1, n + m]$ длина очереди равна $i - n$. Если ввести признак наличия очереди r_i по формуле

$$r_i = \begin{cases} 0, & \text{если } i \leq n, \\ 1, & \text{если } i > n, \end{cases} \quad (48)$$

то в любом состоянии i длину очереди q_i можно найти по формуле

$$q_i = r_i(i - n). \quad (49)$$

Отсюда получим формулу для средней длины очереди:

$$N = \sum_{i=0}^{n+m} q_i P_i. \quad (50)$$

Пусть $\lambda = 1,624$, $\mu = 0,468$, $n = 5$ и $m = 3$. В Excel добавим новый лист для этого типа СМО (Лист2). Заполним следующую таблицу (см. табл. 3). В ячейке A1 приведено название таблицы. В ячейках A2:F2 приведены обозначения λ , μ , n , m , ρ и γ . В ячейки A3:D3 введём исходные данные λ , μ , n и m . Для вычисления

значений ρ и γ в ячейки E3 и F3 введём формулы $=A3/B3$ и $=E3/C3$. В ячейке A4 находится обозначение i для состояний системы. В ячейках B4:J4 расположены сами состояния системы (их можно ввести, используя автозаполнение). В ячейке A5 находится обозначение r_i , а в ячейках B5:J5 вычисляются значения r_i по формуле (48). Для этого в ячейку B5 введём формулу $=ЕСЛИ(B4>\$C\$3;1;0)$ и скопируем эту формулу для ячеек C5:J5. В ячейке K5 находится обозначение суммы S из формулы (42), в ячейке A6 приведено обозначение s_i для её слагаемых, а в ячейках B6:J6 вычисляются сами значения этих слагаемых. Для этого в ячейку B6 введём значение, равное единице. В ячейку C6 введём формулу $=B6*ЕСЛИ(C5=0;\$E\$3/C4;\$F\$3)$ и скопируем эту формулу для ячеек D6:J6. В ячейке K6 с помощью кнопки Σ найдём сумму значений ячеек B6:J6. В ячейке A7 приведено обозначение вероятности состояния P_i . В ячейках B7:J7 получим предельные вероятности состояний. Для этого в ячейку B7 введём формулу $=B6/\$K\6 и скопируем эту формулу для всех ячеек C7:J7. Если формулу в ячейке K6 скопировать в ячейку K7, то получим сумму предельных вероятностей состояний, т. е. единицу. В ячейке A8 находится обозначение длины очереди q_i в состоянии i . В ячейках B8:J8 вычисляются сами значения длины очереди для всех состояний системы. Для этого введём в ячейку B8 формулу $=B5*(B4-\$C\$3)$ (см. формулу (49)) и скопируем эту формулу для всех ячеек C8:J8. В табл. 3 результаты всех вычислений округлены до трёх знаков после запятой.

Таблица 3 / Table 3

Предельные вероятности состояний для СМО с очередью / Limiting probabilities of states for queuing systems with a queue

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Таблица 1										
2	λ	μ	n	m	ρ	γ					
3	1,624	0,468	5	3	3,470	0,694					
4	i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	
5	r_i	0	0	0	0	0	0	1	1	1	S
6	s_i	1	3,47	6,021	6,964	6,042	4,193	2,910	2,020	1,402	34,021
7	P_i	0,029	0,102	0,177	0,205	0,178	0,123	0,086	0,059	0,041	1
8	q_i	0	0	0	0	0	0	1	2	3	

Источник: составлено автором.

В Excel заполним новую таблицу (см. табл. 4). В ячейке A10 приведено название таблицы. В ячейках A11:K11 приведены обозначения характеристик. В ячейках A12:K12 вычисляются их значения. Для вычисления вероятности $P_{оч}$ в ячейку A12 введём формулу $=СУММПРОИЗВ(B5:J5;B7:J7)$ (см. формулу (45)). Вероятность занятости всех приборов π находим по формуле (46) $\pi = P_n + P_{оч}$. Так как $n = 5$, а значение P_5 находится в ячейке G7, то в ячейку B12 введём формулу $=G7+A12$. На основании формулы (47) $P_{отк} = P_{n+m}$. Так как $n = 5$ и

$m=3$, а значение P_8 находится в ячейке J7, то в ячейку C12 введём формулу $=J7$. Среднюю длину очереди найдём по формуле (50). Для этого в ячейку D12 введём формулу $=\text{СУММПРОИЗВ}(B8:J8;B7:J7)$. Вычисление остальных характеристик аналогично их вычислению для СМО типа $M|M|n|0$ на основании формул (21)–(29). В ячейки E12:K12 введём следующие формулы: в ячейку E12 – формулу $=1-C12$ (см. формулу (21)), в ячейку F12 – формулу $=A3*E12$ (см. формулу (22)), в ячейку G12 – формулу $=F12/B3$ (см. формулу (25)), в ячейку H12 – формулу $=G12/C3$ (см. формулу (26)), в ячейку I12 – формулу $=D12/F12$ (см. формулу (27)), в ячейку J12 – формулу $=I12+1/B3$ (см. формулу (28)), в ячейку K12 – формулу $=D12+G12$ (см. формулу (29)). Результаты округлены до двух знаков после запятой.

Таблица 4 / Table 4

Стационарные характеристики для СМО с очередью / Stationary characteristics for queuing systems with a queue

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
10	Таблица 2										
11	$P_{\text{оч}}$	π	$P_{\text{отк}}$	N	Q	A	$\bar{k}$	$Q_{\text{зан}}$	W	V	L
12	0,19	0,31	0,04	0,33	0,96	1,56	3,33	0,67	0,21	2,35	3,65

Источник: составлено автором.

5. СМО с неограниченной очередью

Множеством состояний системы $M|M|n|\infty$ будет $S = \{0, 1, 2, \dots\}$, а граф состояний имеет вид (7). Для существования предельных вероятностей ставим условие (15): $\gamma < 1$. Так как $\lambda_{i,i-1} = i\mu$ при $1 \leq i \leq n$ и $\lambda_{i,i-1} = n\mu$ при $i \geq n+1$, то в этом типе СМО система (20) имеет вид:

$$\begin{cases} P_i = \frac{\rho}{i} P_{i-1} \text{ при } 1 \leq i \leq n, \\ P_i = \gamma P_{i-1} \text{ при } i \geq n+1, \\ \sum_i P_i = 1. \end{cases} \quad (51)$$

Из этой системы следует, что

$$P_i = \frac{\rho^i}{i!} P_0, \text{ где } i = 0, 1, \dots, n. \quad (52)$$

$$P_i = \frac{\rho^n}{n!} \gamma^{i-n} P_0, \text{ где } i = n+1, n+2, \dots \quad (53)$$

Подставляя эти выражения в третью формулу системы (51), получим:

$$P_0 \sum_{i=0}^n \frac{\rho^i}{i!} + P_0 \frac{\rho^n}{n!} \sum_{i=n+1}^{\infty} \gamma^{i-n} = 1. \quad (54)$$

В данном соотношении второе слагаемое $P_0 \frac{\rho^n}{n!} \sum_{i=n+1}^{\infty} \gamma^{i-n}$ равно сумме вероятностей состояний, в которых есть очередь, и, следовательно, равно вероятности наличия в системе очереди $P_{\text{оч}}$. Так как по формуле для суммы бесконечно убывающей геометрической прогрессии

$$\sum_{i=n+1}^{\infty} \gamma^{i-n} = \frac{\gamma}{1-\gamma}, \quad (55)$$

а $P_0 \frac{\rho^n}{n!} = P_n$, то

$$P_{оч} = P_n \frac{\gamma}{1-\gamma}. \quad (56)$$

Все приборы заняты в состоянии n и во всех состояниях, в которых есть очередь. Следовательно, $\pi = P_n + P_{оч}$, а с учётом формулы (56),

$$\pi = \frac{P_n}{1-\gamma}. \quad (57)$$

Из формулы (54), с учётом формулы (55), следует, что

$$P_0 = S^{-1}, \text{ где } S = \sum_{i=0}^n \frac{\rho^i}{i!} + \frac{\rho^n \gamma}{n!(1-\gamma)}. \quad (58)$$

Теперь мы можем записать формулы (52)–(53) в следующем виде:

$$P_i = \frac{\rho^i}{i!} S^{-1}, \text{ где } i = 0, 1, \dots, n, \quad (59)$$

$$P_i = \frac{\rho^n \gamma^{i-n}}{n!} S^{-1}, \text{ где } i = n+1, \dots \quad (60)$$

В системах типа $M|M|n|\infty$

$$P_{отк} = 0, \quad (61)$$

так как число мест ожидания не ограничено и в случае занятости всех каналов требование становится в очередь. В системах типа $M|M|n|\infty$ в состоянии $i \in [0, n]$ очередь пуста, а в состоянии $i \in [n+1, +\infty)$ длина очереди равна $i - n$. Таким образом, средняя длины очереди N находится по формуле $N = \sum_{i=n+1}^{\infty} (i - n) P_i$. С учётом формул (52)–(53) эту формулу можно переписать в виде

$$N = P_n \gamma \sum_{i=n+1}^{\infty} (i - n) \gamma^{i-n-1}.$$

Но сумма последнего ряда является производной суммы геометрической прогрессии:

$$\sum_{i=n+1}^{\infty} (i - n) \gamma^{i-n-1} = \left(\sum_{i=n+1}^{\infty} \gamma^{i-n} \right)' = \left(\frac{\gamma}{1-\gamma} \right)' = \frac{1}{(1-\gamma)^2}.$$

Таким образом, с учётом формулы (52),

$$N = \frac{P_n \gamma}{(1-\gamma)^2}. \quad (62)$$

Пусть $n=5$, $\lambda=2,9412$ и $\mu=0,7513$. В Excel добавим новый лист для этого типа СМО (Лист3). Заполним следующую таблицу (см. табл. 5). В ячейке A1 приведено название таблицы. В ячейках A2:E2 приведены обозначения λ , μ , n , ρ и γ . В ячейки A3:C3 введём исходные данные λ , μ и n . Для вычисления значений ρ и γ в ячейки D3 и E3 введём формулы $=A3/B3$ и $=D3/C3$. В ячейке

А4 находится обозначение i для состояний системы. В ячейках В4:G4 расположены состояния системы (их можно ввести, используя автозаполнение), в которых нет очереди. В ячейке Н4 находится обозначение $6 - \infty$ для всех состояний, в которых есть очередь, в ячейке I4 – обозначение суммы S в формуле (58), в ячейке А5 приведено обозначение s_i для её слагаемых. В ячейках В5:Н5 вычисляются сами значения этих слагаемых суммы S , причём в ячейке Н5 будет вычислено последнее слагаемое $\frac{\rho^n \gamma}{n!(1-\gamma)}$. Для этого в ячейку В5 введём значение, равное единице. В ячейку С5 введём формулу $=B5*\$D\$3/C4$ и скопируем эту формулу для ячеек D5:G5. В ячейку Н5, в которой вычисляется последнее слагаемое $\frac{\rho^n \gamma}{n!(1-\gamma)}$, введём формулу $=G5*E3/(1-E3)$, так как в ячейке G5 находится значение $\frac{\rho^n}{n!}$. В ячейке I5 с помощью кнопки Σ найдём сумму значений ячеек В5:Н5. В ячейке А6 приведено обозначение вероятности состояния P_i . В ячейках В6:G6 получим предельные вероятности состояний, в которых нет очереди, а в ячейке Н6 – сумму вероятностей состояний, в которых есть очередь, т. е. величину P_{oc} . Для этого в ячейку В6 введём формулу $=B5/I\$5$ и скопируем эту формулу для всех ячеек С6:Н6. Если формулу в ячейке I5 скопировать в ячейку I6, то получим сумму предельных вероятностей состояний, т. е. единицу. В табл. 5 результаты округлены до трёх знаков после запятой.

Таблица 5 / Table 5

Предельные вероятности состояний для СМО с неограниченной очередью / Limiting probabilities of states for queueing systems with an unlimited queue

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Таблица 1								
2	λ	μ	n	ρ	γ				
3	2,9412	0,7513	5	3,9148	0,7830				
4	i	0	1	2	3	4	5	$6 - \infty$	S
5	s_i	1	3,915	7,663	10,000	9,787	7,663	27,643	67,669
6	P_i	0,015	0,058	0,113	0,148	0,145	0,113	0,408	1

Источник: составлено автором.

В Excel заполним новую таблицу (см. табл. 6). В ячейке А8 приведено её название. В ячейках А9:K9 приведены обозначения. В ячейках А10:K10 вычисляются их значения. Так как $n = 5$, то $P_n = P_5$, а P_5 находится в ячейке G6. В ячейку А10 введём формулу $=G6*E3/(1-E3)$ (см. формулу (56)). Для вычисления вероятности π по формуле (57) в ячейку В10 введём формулу $=G6/(1-E3)$. В ячейку С10 введём нулевое значение (см. формулу (61)). Величину N вычислим по формуле (62). Для этого в ячейку D10 введём формулу $=G6*E3/(1-E3)^2$. Так как $P_{отк} = 0$, то $Q = 1$ (см. формулу (21)). В ячейку E10 введём значение, равное единице. Так как $Q = 1$, то $A = \lambda$ (см. формулу (22)), следовательно, в ячейку F10 введём формулу $=A3$. Вычисление остальных

характеристик аналогично их вычислению для СМО типа $M|M|n|0$. В ячейки G10:K10 введём следующие формулы: в ячейку G10 – формулу $=F10/B3$ (см. формулу (25)), в ячейку H10 – формулу $=G10/C3$ (см. формулу (26)), в ячейку I10 – формулу $=D10/F10$ (см. формулу (27)), в ячейку J10 – формулу $=I10+1/B3$ (см. формулу (28)), в ячейку K10 – формулу $=D10+G10$ (см. формулу (29)). Результаты округлены до двух знаков после запятой.

Таблица 6 / Table 6

Стационарные характеристики для СМО с неограниченной очередью / Stationary characteristics for queueing systems with an unlimited queue

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
8	Таблица 2										
9	$P_{оч}$	π	$P_{отк}$	N	Q	A	$\bar{k}$	$Q_{зан}$	W	V	L
10	0,41	0,52	0	1,88	1	2,94	3,91	0,78	0,64	1,97	5,80

Источник: составлено автором.

Заключение

Вычислительные схемы для расчёта характеристик СМО, основанные на возможностях программы Excel, выглядят достаточно просто. При изучении теории массового обслуживания в условиях жёстко ограниченных временных рамок занятия могут быть организованы в компьютерных классах с использованием табличного процессора Excel.

Статья поступила в редакцию 11.03.2024

ЛИТЕРАТУРА

1. Гнеденко Б. В., Коваленко И. Н. Введение в теорию массового обслуживания. М.: Наука, 1987. 336 с.
2. Саати Т. Л. Элементы теории массового обслуживания и ее приложения. М.: Советское радио, 1997. 520 с.
3. Кремер Н. Ш. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Юнити, 2002. 543 с.
4. Исследование операций в экономике / Кремер Н. Ш., Путко Б. А., Тришин И. М., Фридман М. Н.; под ред. Н. Ш. Кремера. М.: Юрайт, 2021. 414 с.
5. Плескунов М. А. Теория массового обслуживания. Екатеринбург: Издательство Урал. ун-та, 2022. 264 с.
6. Черушева Т. В., Зверовщикова Н. В. Теория массового обслуживания. Пенза: Издательство ПГУ, 2021. 224 с.
7. Олейникова С. А. Математическое моделирование и системы массового обслуживания. Воронеж: Изд-во ВГТУ, 2021. 90 с.
8. Хасанов А. С. Индивидуальные задания по линейной алгебре и линейному программированию. М.: ФГБОУ ВО «РЭУ им. Г. В. Плеханова», 2023. 48 с.
9. Напеденина Е. Ю., Никитина Н. И. К вопросу о культуре самообразовательной деятельности студентов системы дистанционного обучения // Ученые записки

Российского государственного социального университета. 2011. № 9-1 (97). С. 220–224.

10. Алгоритмический подход к преподаванию теории графов / Мушруб В. А., Макисенко М. Н., Выборнова И. И., Фадеева Л. Л. // *Инновации и инвестиции*. 2016. № 6. С. 202–208.
11. Макжанова Я. В., Зверева А. И., Хачко О. И. Сборник заданий по теме «Функция двух переменных». М.: Белый ветер, 2018. 38 с.

REFERENCES

1. Gnedenko B. V., Kovalenko I. N. *Vvedeniye v teoriyu massovogo obsluzhivaniya* [Introduction to Queueing Theory]. Moscow, Nauka Publ., 1987. 336 p.
2. Saaty T. L. *Elementy teorii massovogo obsluzhivaniya i yeye prilozheniya* [Elements of Queueing Theory with Applications]. Moscow, Sovetskoye radio Publ., 1997. 520 p.
3. Kremer N. Sh. *Teoriya veroyatnostey i matematicheskaya statistika* [Probability Theory and Mathematical Statistics]. Moscow, Yuniti Publ., 2002. 543 p.
4. Kremer N. Sh., Putko B. A., Trishin I. M., Fridman M. N. *Issledovaniye operatsiy v ekonomike* [Operations Research in Economics]. Moscow, Yurayt Publ., 2021. 414 p.
5. Pleskunov M. A. *Teoriya massovogo obsluzhivaniya* [Queueing Theory]. Yekaterinburg, Ural University Publ., 2022. 264 p.
6. Cherusheva T. V., Zverovshchikova N. V. *Teoriya massovogo obsluzhivaniya* [Queueing Theory]. Penza, Penza State University Publ., 2021. 224 p.
7. Oleynikova S. A. *Matematicheskoye modelirovaniye i sistemy massovogo obsluzhivaniya* [Mathematical modeling and queueing systems]. Voronezh, Voronezh State Technical University Publ., 2021. 90 p.
8. Khasanov A. S. *Individual'nyye zadaniya po lineynoy algebre i lineynomu programmirovaniyu* [Individual assignments in linear algebra and linear programming]. Moscow, Plekhanov Russian University of Economics Publ., 2023. 48 p.
9. Napedenina Ye. Yu., Nikitina N. I. [On the issue of the culture of self-educational activities of students of the distance learning system]. In: *Uchenyye zapiski Rossiyskogo gosudarstvennogo sotsial'nogo universiteta* [Scientific Notes of the Russian State Social University], 2011, no. 9-1 (97), pp. 220–224.
10. Mushrub V. A., Makismenko M. N., Vybornova I. I., Fadeeva L. L. [Algorithmic approach to teaching graph theory]. In: *Innovatsii i investitsii* [Innovations and Investments], 2016, no. 6, pp. 202–208.
11. Makzhanova Ya. V., Zvereva A. I., Khachko O. I. *Sbornik zadaniy po teme «Funktsiya dvukh peremennykh»* [Collection of tasks on the topic “Function of two variables”]. Moscow, Belyy veter Publ., 2018. 38 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Хасанов Анис Салыхович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики Российского экономического университета имени Г. В. Плеханова; e-mail: ankhasanov@yandex.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Anis S. Khasanov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Higher Mathematics, Plekhanov Russian University of Economics;
e-mail: ankhasanov@yandex.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Хасанов А. С. Расчёт характеристик систем массового обслуживания в компьютерных классах // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2024. № 2. С. 60–78.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-60-78

FOR CITATION

Khasanov A. S. Calculation of the queuing systems characteristics in computer classes. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 2, pp. 60–78.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-60-78

[illegible]



ВЕСТНИК
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА
2024. № 2

Над номером работали:
Литературный редактор М. С. Тарасова
Переводчик В. А. Дворянов
Корректор М. С. Тарасова
Компьютерная вёрстка – А. В. Тетерин

Адрес редакции:
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 1, офис 98
тел. (495) 780-09-42 доб. 6101
e-mail: info@vestnik-mgou.ru
Сайты: www.physmathmgou.ru;
www.vestnik-mgou.ru

Формат 70x108/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура "Minion Pro".
Тираж 500 экз. Усл. п. л. 5, уч.-изд. л. 4,25.
Подписано в печать: 28.06.2024 г. Дата выхода в свет: 09.09.2024 г. Заказ № 2024/06-10.
Отпечатано в Государственном университете просвещения
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 1