

**16-ДММД**



**Международная конференция**

**Математические модели  
физических процессов  
и их свойства**

**Таганрог - 1997**



оно может менять знак, что является локальным признаком хаотического движения. Приводятся результаты численного моделирования.

### Движение по инерции абсолютно твердого тела на трехстепенном подвесе

*Акуленко Л.Д., Болотник Н.Н., Лещенко Д.Д.  
(Одесская государственная академия холода, Украина).*

Исследовано движение абсолютно твердого тела, связанного с неподвижным основанием при помощи трехстепенного подвеса, состоящего из двух тонких прямолинейных стержней и трех цилиндрических шарниров. Подвес такой конструкции можно трактовать как неидеальную реализацию шарового шарнира, обеспечивающего три степени свободы вращения абсолютно твердого тела относительно неподвижной точки. Конечность длин звеньев подвеса может быть связана, например, с необходимостью расположения приводов в шарнирах для управления соответствующими степенями свободы. Описанный выше трехстепенный подвес может использоваться в различных управляемых системах, в частности в манипулятивных работах. Рассматривается случай динамически симметричного твердого тела, ось динамической симметрии которого совпадает с осью вращения  $\vec{e}_3$  подвеса. Движение по кругу Крылова первого рода  $\beta$  описывается уравнением, по форме совпадающим с интегралом энергии консервативной механической системы с одной степенью свободы. Качественный анализ этой системы проводится методом фазовой плоскости. Определены все качественно различные типы движения рассматриваемой механической системы по координате  $\beta$ . Исследовано движение по другим углам Крылова  $\alpha$  и  $\gamma$ .

### Математическая модель пластического деформирования твердого тела и ее использование в учебном процессе

*Ананьев А.А., Сирота Л.И.  
(ГОРОО, г. Таганрог, Россия).*

При изучении процессов деформирования твердых тел в курсе физики обычно приводят диаграмму растяжения. Если тело упругое, то в этом случае имеют место обратимые процессы и, следовательно, диаграмма нагружения образца повторяет диаграмму разгрузки.

Однако в области пластических деформаций, в частности идеальной пластичности, при выходе на горизонтальный участок с постоянным напряжением (предел пластичности) с изменяющейся деформацией, картина меняется. Если образец подвергнуть разгрузке на этом участке, то он будет вести себя упруго вплоть до нулевого напряжения, повторяя упругий участок начальной кривой, и имея при полной разгрузке остаточную деформацию. В работе, используя элементарную теорию механических напряжений, показывается, что при одноосном растяжении образца наибольшие касательные напряжения возникают под углом в сорок пять градусов к направлению нагрузки и описывают деформацию сдвига, дающую горизонтальный участок. Для описания такого процесса деформирования хорошо подходит модель сухого трения двух поверхностей, на которой очень хорошо видны особенности упругопластического деформирования при нагружении и упругого поведения материала при разгрузке образца с появлением остаточных де-

формаций. Кроме того на этой модели хорошо демонстрируется образование шейки в области пластического деформирования материала.

### Математическое моделирование физических свойств кремния с дефектами

*Арзумян Г.В. Захаров А.Г., Колпачев А.Б.  
(Таганрогский радиотехнический университет, Россия).*

Многие физические свойства твердого тела, такие как упругие постоянные, проводимость, теплопроводность и другие, существенно зависят от его электронной энергетической структуры (ЭЭС). Поэтому использование математических методов моделирования ЭЭС, для диагностики физических свойств материала является актуальной задачей.

Для моделирования ЭЭС кремния с различными кристаллографическими дефектами нами использован кластерный подход. В кластерном подходе рассматривается не бесконечно большой кристалл, а лишь его фрагмент (кластер), состоящий из определенного количества атомов. При этом влияние кристаллического окружения учитывается соответствующими граничными условиями. Основным преимуществом кластерного подхода является отсутствие требования трансляционной симметрии, традиционного для зонных методов, что позволяет сравнительно просто исследовать влияние различных нарушений симметрии кристалла на его ЭЭС, а также возможность описания локальных свойств материала. Расчет ЭЭС выполнялся в рамках теории многократного рассеяния, с использованием "muffin-tin" (MT) приближения для потенциала. Идея MT - приближения заключается в разбиении кристалла на области двух типов. Каждый атом кластера окружается сферой, внутри которых потенциалы считаются сферически - симметричными, а в пространстве между сферами потенциал считается постоянным и равным нулю. Хотя на этапе решения задачи многократного рассеяния используется кластерное приближение, MT - потенциал (сумма кулоновского, обменного и маделунговского потенциалов) строился для всего кристалла. Результатами такого расчета являются локальные парциальные и полные плотности электронных состояний (ПЭС).

Используя данную методику (рассматривался кластер из 71 атомов) моделировался ЭЭС бездефектного кремния и кремния с различными точечными дефектами, связанными с атомами титана: структурная вакансия, атом замещения, А - центр (комбинация атома замещения и структурной вакансии). При этом наличие примеси и вакансии учитывалось как на этапе построения кристаллического потенциала, так и при решении задачи многократного рассеяния. Расчетные ПЭС находятся в хорошем согласии с экспериментальными рентгеновскими спектрами. По полученным ПЭС описаны электрофизические свойства полупроводникового кремния, содержащего точечные дефекты.

### Математическая модель прогрева паропроводов энергоблока с регулированием температуры пара пусковыми впрысками

*Афанасьев Н.Н., Бескровный А.И., Горбенко Е.А.  
(Институт прикладной математики и механики НАН Украины).*

При пуске энергоблока требуется, чтобы подъем температур первичного и вторичного перегретого пара перед турбиной происходил согласно заданным графикам. Достигается это