

Международная научно-практическая конференция

**СОВРЕМЕННЫЕ  
ПРОБЛЕМЫ  
ГУМАНИТАРНЫХ  
И ЕСТЕСТВЕННЫХ  
НАУК**



Том I

УДК 53:51+54+57+67.02+93+330+14+80+340+371+61+615.1+619+7.01+  
+159.9+316+32+008+551

ББК 72  
С56

*Полное или частичное воспроизведение или размножение  
каким бы то ни было способом материалов, опубликованных в настоящем издании,  
допускается только с письменного разрешения авторов.*

**Современные** проблемы гуманитарных и естественных наук  
[Текст] : материалы X международной научно-практической конфе-  
ренции 20–21 марта 2012 г. Том I. / Науч.-инф. издат. центр «Инсти-  
тут стратегических исследований». – Москва : Изд-во «Спецкнига»,  
2012. – 288 с.

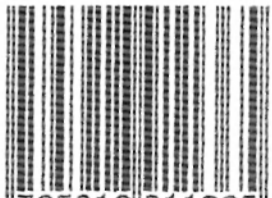
ISBN 978-5-91891-136-5

Проведение X международной научно-практической конференции  
«Современные проблемы гуманитарных и естественных наук» способствует  
интеграции науки, образования и производства. Ученым и специалистам  
предоставляется возможность познакомиться с достижениями приоритетных  
направлений современной науки и техники, продемонстрировать результаты своих  
исследований, обменяться мнениями, опубликовать научные статьи.

В сборнике представлены материалы докладов X международной научно-  
практической конференции «Современные проблемы гуманитарных и естественных  
наук», отличающиеся новизной и детальной проработкой поставленных в них  
проблем развития современной науки.

**УДК**  
**53:51+54+57+67.02+93+330+14+80+340+371+61+615.1+619+**  
**7.01+159.9+316+32+008+551**  
**ББК 72**

ISBN 978-5-91891-136-5



9 785918 911365 >

© Авторы научных статей, 2012

© Спецкнига, 2012

© Институт стратегических исследований,  
2012

## СОДЕРЖАНИЕ

---

### ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

---

- Алексеева Е.Е.*  
МЕТОДИКА РАЗЛОЖЕНИЯ В СТЕПЕННОЙ РЯД  
АЛГЕБРАИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ..... 11
- Бородаев И.А., Желтухин В.С.*  
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦЫ  
СЕРЕБРА С ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ПЛАЗМОЙ ПОНИЖЕННОГО ДАВЛЕНИЯ ..... 16
- Ерунова И.Б.*  
ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ  
О ТЕЧЕНИИ ЖИДКОСТИ НАД ТВЕРДЫМ ТЕЛОМ ..... 21
- Мегралиев Я.Т., Абдуллаева Г.З.*  
ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО  
УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА С НЕКЛАССИЧЕСКИМИ КРАЕВЫМИ  
УСЛОВИЯМИ ..... 25
- Пивнева С.В., Трифонов М.А., Твердохлебов А.Я.*  
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ  
РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА В ПРЯМОУГОЛЬНЫХ КАМЕРАХ СИОРАНИЯ  
ДВИГАТЕЛЬНЫХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК  
НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ ..... 32
- Телгожаева Ф.С.*  
РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ..... 34
- Яковлев А.С., Степанов С.Л.*  
ВЛИЯНИЕ ШЕЙКООБРАЗОВАНИЯ У ВЕРШИН ЦЕНТРАЛЬНОЙ ТРЕЩИНЫ  
В ПЛОСКОМ ОБРАЗЦЕ НА МЕХАНИЗМ РАЗРУШЕНИЯ ..... 39

### ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

---

- Азнаева М.Р., Калякина О.П.*  
ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ  
В СНЕЖНОМ ПОКРОВЕ Г. КРАСНОЯРСКА ..... 44

Бородаев И.А., Желтухин В.С.<sup>1</sup> ©  
Д.ф.-м.н., профессор, Казанский федеральный университет

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦЫ СЕРЕБРА С ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ПЛАЗМОЙ ПОНИЖЕННОГО ДАВЛЕНИЯ

*Аннотация*

Смоделирован процесс взаимодействия наночастицы серебра с потоком плазмы высокочастотного разряда. Определено время нейтрализации и описаны (показаны) ее начальное, промежуточное и конечное состояния.

#### Введение

Высокочастотная (ВЧ) плазма пониженного давления эффективно используется в различных технологических процессах, в том числе для нанесения нанопокровов серебра на мех [1]. Напыляемые наночастицы вводятся в плазму из барботера, в котором находится коллоидный раствор серебра, при пропускании через него плазмообразующего газа.

При нанесении покрытия функциональное назначение плазмы состоит в активации наночастиц, транспортировке их к поверхности образца, выносе с поверхности слабо адсорбированных и укреплении хорошо адсорбированных частиц, которые и образуют в конечном итоге покрытие.

В настоящее время процесс активации наночастиц в потоке газа исследован недостаточно. В связи с этим разработана математическая модель взаимодействия наночастицы серебра с потоком плазмы ВЧ индукционного разряда пониженного давления.

#### Постановка задачи и основные результаты

Экспериментальные исследования ВЧ разрядов в инертных газах [2] показали, что при давлениях  $p=13.3 - 133$  Па, частоте электромагнитного поля  $f=1.76$  МГц, мощности разряда  $P_{\text{вч}}=0.5 - 4$  кВт, расходе газа  $G<0.2$  г с<sup>-1</sup> плазма обладает следующими характеристиками: степень ионизации не более  $10^{-4}-10^{-7}$ , концентрация электронов  $n_e \sim 10^{15}-10^{19}$  м<sup>-3</sup>, электронная температура  $T_e=1-4$  эВ, температура атомов и ионов плазменном сгустке  $T_a=(3-4) \cdot 10^3$  К, в плазменной струе  $T_a=350-700$  К.

Известно, что вокруг образца в плазме образуется двойной (дебаевский) электрический слой [3]. При рассматриваемых в настоящей работе условиях, его толщина составляет  $\lambda_D \approx 7 \cdot 10^{-7}$  м.

Концентрация наночастиц Ag<sup>+</sup> в коллоидном растворе не превышает  $10^5$  м<sup>-3</sup>. Соответственно, их концентрация в плазмообразующем газе на несколько порядков меньше концентрации атомов и заряженных частиц в плазме и в дебаевской сфере может содержаться не более одной наночастицы серебра. Поэтому рассмотрим в приближении молекулярной динамики процесс активации одной наночастицы, без учета влияния других наночастиц [4].

Модель построена в предположении, что наночастицы движутся со скоростью плазмообразующего газа так, что в системе координат, связанной с наночастицей, ионы

<sup>1</sup> Бородаев И.А., Желтухин В.С., 2012 г.

неподвижны, а электроны колеблются синфазно с изменением напряженности электрического поля. При концентрации электронов в плазме  $n_e = 10^{15} - 10^{18} \text{ м}^{-3}$ , в элементарной кубической ячейке со стороной  $10^{-6} - 10^{-5} \text{ м}$  в среднем содержится по одному электрону или иону. Поэтому при моделировании рассматривается элементарная ячейка с линейным размером  $n_e^{-1/3}$ , содержащая одну заряженную наночастицу серебра.

Время пролета наночастицы серебра от входного отверстия плазматрона до поверхности меха составляет  $\sim 10^{-3} \text{ с}$ , или  $\sim 10^2$  периодов колебания электромагнитного поля.

При диаметре наночастицы серебра 5-9 нм, она занимает объем порядка  $113 - 381 \text{ нм}^3$  и содержит  $2 \cdot 10^3 - 3 \cdot 10^3$  иона и  $5 \cdot 10^3 - 22 \cdot 10^3$  атомов серебра.

Рассмотрим наночастицу на подлете к области ВЧ индуктора, в области газовых температур 500-1500 К, и концентраций электронов  $10^{15} - 10^{18} \text{ м}^{-3}$ .

Наночастица, поступающая в плазму, заряжена положительно, так как образована в результате агрегации ионов и атомов, содержащихся в растворе. Максимальный заряд  $Q$  частицы составляет

$$Q = e \left\lfloor 4\pi \left( \frac{R}{r_{Ag^+}} \right)^2 \right\rfloor \approx 8 \cdot 10^{-16} - 2,5 \cdot 10^{-15} \text{ Кл.} \quad (1)$$

где  $e$  – элементарный заряд,  $r_{Ag^+}$  – ионный радиус серебра, квадратные скобки означают математическую операцию взятия целой части.

В одной наночастице содержится примерно

$$N \approx \left\lfloor \frac{4\pi}{3} \left( \frac{R}{r_{Ag}} \right)^3 \right\rfloor \sim 10^4 - 10^5 \quad (2)$$

частиц серебра, где  $r_{Ag}$  – ковалентный радиус атома серебра. При рекомбинации электрона с ионом  $Ag^+$  выделяется энергия 7,5 эВ, которая почти в 3 раза больше энергии, необходимой для испарения атомов Ag с поверхности, то есть частица может быть распылена полностью или частично. В связи с этим возникает вопрос о состоянии наночастицы в момент взаимодействия ее с поверхностью меха, для решения которого построена математическая модель взаимодействия ее с плазмой.

Вычислялись траектории электронов и ионов с помощью системы уравнений движения:

$$\begin{cases} \frac{dv_{e,i}}{dt} = \frac{eE}{m_{e,i}}, t > 0; \\ \frac{dr_{e,i}}{dt} = v_{e,i}, t > 0. \end{cases} \quad (3)$$

где  $m_{e,i}$  – масса электрона и иона,  $v_{e,i}$  – скорость электрона или иона,  $r_{e,i}$  – радиус-вектор положения заряженной частицы,  $E = E_n + E_{rf}$  – напряженность полного электрического поля в окрестности наночастицы. Система (3), решалась с начальными условиями

$$v_{e,i}(0) = v_{e,i0} \quad (4)$$

$$r_{e,i}(0) = r_{e,i0} \quad (5)$$

При каждом столкновении с электроном заряд наночастицы падает, а внутренняя энергия увеличивается за счет поступления энергии рекомбинации и кинетической энергии электрона. При увеличении внутренней энергии наночастицы происходит ее нагрев до температуры плавления, затем поступающая энергия затрачивается на плавление, а затем нагрев продолжается до температуры испарения.

Для начала процесса испарения требуется попадание на наночастицу  $\approx 330-350$  электронов. На рис. 1 приводится зависимость накопленной наночастицей энергии от количества попавших на нее электронов.

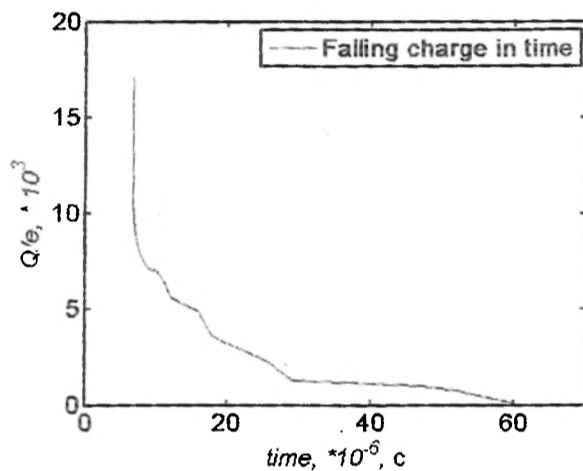


Рис.1 Зависимость заряда наночастицы серебра от времени.

Скорость электрона  $\sim 10^7$  м/с, значит время, за которое он пройдет расстояние  $10^{-6}$  м составляет  $\sim 10^{-10}$  с. Для выявления количества столкновений электронов с заряженной наночастицей серебра, введем понятие «прицельный радиус» – радиус области на грани элементарной ячейки, на котором кинетическая энергия электрона равна энергии его потенциального взаимодействия с заряженной наночастицей. Введенный радиус выражается из формулы:

$$\varepsilon_{e,k} = \frac{m \cdot v^2}{2} = \frac{k \cdot e \cdot q}{R} \quad (6)$$

где  $m$ -масса электрона,  $v$ -его скорость,  $e$ -элементарный заряд,  $q$ -заряд наночастицы.

Прицельный радиус зависит от заряда частицы, отнесенного к элементарному, линейно, по закону:

$$R(q, \varepsilon_{e,k}) = \frac{q}{\varepsilon_{e,k}} \cdot 144 \cdot 10^{-11} \text{ м} \quad (7)$$

где  $\varepsilon_{e,k}$  - кинетическая энергия электрона.

Расчеты проводились для скорости плазменного потока равной 200 м/с. Время, в которое наночастица достигнет плазменного сгустка, составляет  $2 \cdot 10^{-7}$  с. За это время через ячейку с рассматриваемой частицей пройдет  $2 \cdot 10^6$  электронов.

На грани ячейки определяется область, при прохождении через которую, электрон однозначно попадает в наночастицу. Эта область представляет собой круг радиуса  $R(q) + d_{нк}$ . Используя приведенные данные, рассчитаем заряд и размер наночастицы по прохождении рассматриваемого расстояния.

Вероятность попадания электрона, проходящего через стенку ячейки, в наночастицу определяется отношением площади области попадания к площади грани ячейки. В таблице 1 приведены вероятности попадания для различных значений прицельного радиуса, рассчитанные для наночастицы серебра диаметром 6 нм. Каждому значению прицельного расстояния поставлена в соответствие вероятность попадания электрона на наночастицу.

Табл.1 Основные значения прицельного радиуса

$R$	$2 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^2$	$10^2$	$10^1$
$P$	$0.071 \cdot 10^{-4}$	$0.038 \cdot 10^{-6}$	$0.022 \cdot 10^{-6}$	$0.009 \cdot 10^{-6}$	$0.00332 \cdot 10^{-4}$
$P$	$5 \cdot 10^{-3}$	$15 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$81 \cdot 10^{-4}$	$11 \cdot 10^{-4}$

$R$ -прицельный радиус

$P$ -вероятность попадания электрона на наночастицу

При попадании электрона на наночастицу, содержащую ионы серебра, ее объем увеличивается на  $0.56 \cdot 10^{-29}$  м<sup>3</sup>, а радиус получает приращение  $\approx 1.1 \cdot 10^{-10}$  м за счет того, что радиус иона меньше радиуса атома. Происходит восстановление одного иона  $Ag^+$  до  $Ag$ , сопровождающееся увеличением энергии наночастицы на 7.5 эВ и на 1 эВ за счет энергии рекомбинации и кинетической энергии электрона соответственно. Температура кипения достигается при увеличении внутренней энергии наночастицы до 4000 эВ. Такая энергия будет накоплена наночастицей при столкновении с ней  $\approx 330$  электронов, за время  $\approx 66 \cdot 10^{-7}$  с. Для испарения иона или атома серебра с поверхности наночастицы при температуре кипения серебра, необходима дополнительная энергия, равная 2.65 эВ. Следовательно, при температуре кипения серебра, каждый электрон, попавший на наночастицу, будет способствовать испарению трех ионов или атомов серебра, а каждый четвертый попавший электрон – четырех. Наиболее вероятное соотношение испаряемых частиц приведено в таблице 2.

Табл.2 Наиболее вероятное соотношение отщепляемых частиц

Количество ионов серебра в наночастице	Соотношение отщепляемых частиц
$1/2K-K$	$Ag^0 Ag^- Ag^+$
$1/4K-1/2K$	$Ag^0 Ag^0 Ag^-$
$0-1/4K$	$Ag^0 Ag^0 Ag^0$

$K$  – первоначальное количество ионов серебра в наночастице

На рис. 2 приведен график процесса восстановления заряженной наночастицы серебра. За время  $\approx 1.5 \cdot 10^{-4}$  с наночастица полностью нейтрализуется. Полученный

результат согласуется с тем, что в наночастице диаметром 6 нм после ее нейтрализации остается  $\approx 4300$  атомов серебра, а первоначальный объем уменьшится в  $\approx 6.5$  раз.

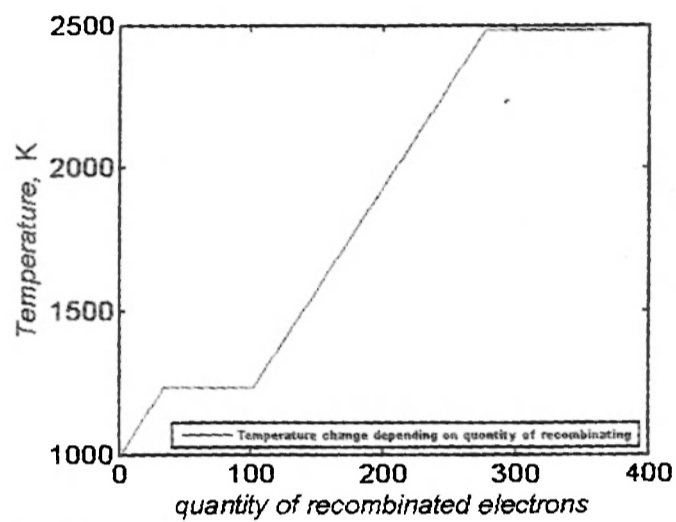


Рис.2 Изменение температуры наночастицы со временем

После полной нейтрализации наночастицы серебра происходит процесс зарядки ее остатка, так как любое тело в плазме инертных газов заряжается отрицательно.

Процесс зарядки остатка наночастицы описывается системой дифференциальных уравнений (3) с начальными условиями (4), (5).

Возникает ситуация неупругих столкновений наночастицы с электронами плазмы. По аналогии с прицельным радиусом введем понятие сечение поглощения, определяемого:

$$\sigma_e(v) = \begin{cases} \pi a^2 \left( 1 + \frac{2e\varphi_s}{m_e v^2} \right), & \frac{2e\varphi_s}{m_e v^2} > -1; \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} \quad (8)$$

Сечение поглощения зависит только от потенциала поверхности частицы, определяемого формулой:

$$I_e = I_i \quad (9)$$

$I_e$ -электронный поток,  $I_i$ -ионный поток.

Абсолютный заряд остатка наночастицы растет со временем, она начинает вступать во взаимодействие с ионами плазмообразующего газа (аргона). Рассматривается взаимодействие наночастицы с ионами аргона, статичными в выбранной системе координат.

Процесс взаимодействия отрицательно заряженного остатка наночастицы с положительными ионами аргона происходит при условии:



$$W = \frac{|e| Q_{остатка}}{4\pi\epsilon_0 R} = \frac{3}{2} kT \quad (10)$$

$k$  - константа Больцмана,  $R$  - расстояние между ионом аргона. Отсюда определяется радиус захвата ионов наночастицей. Энергия, выделяемая при рекомбинации иона аргона, 15.76 эВ, более чем в два раза превышает энергию рекомбинации серебра. Учитывая, что отрицательный заряд наночастицы постоянно восполняется, получено, что в процессе пролета через плазменную струю, наночастица полностью распыляется, и на поверхность меха поступает атомарно-ионный поток серебра.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 10-01-00728а, 11-01-00864а, и Минобра РФ, ГК от 06 сентября 2010г. № 14.740.11.0080

#### Литература

1. Абдуллин И.Ш., Паикова Е.А. // Вестник Казанского технологического университета. 2009. №4. С. 117-120.
2. Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Кашапов Н.Ф. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях. Теория и практика применения. - Казань: Изд-во Казанского ун-та, 2000.
3. Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы. - М.: МИР, 1976.
4. Harlow F. H., Ellison M. A., Reid J. H. // Methods Comput. Phys. 1964. V. 3 (3): 319-343.

#### Ерунова И.Б. \*

Доцент, кандидат физико-математических наук,  
ФГБУ ВПО «Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»

#### ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ О ТЕЧЕНИИ ЖИДКОСТИ НАД ТВЕРДЫМ ТЕЛОМ

В работе рассматривается процесс фазового перехода между телом и жидкостью со свободной границей раздела между ними. Математическая модель задачи включает как термодинамические уравнения, так и уравнения движения жидкости и границы раздела фаз.

Важным этапом в численном анализе процессов фазового перехода являются оценки скорости сходимости приближенного решения к точному.

Пусть твердое тело и жидкость с коэффициентами теплопроводности  $\hat{\lambda}_1$  и  $\hat{\lambda}_2$ , коэффициентами удельной теплоемкости  $C_1$  и  $C_2$  соответственно занимают в пространстве область

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^3: 0 < x_1 < l_1, 0 < x_2 < l_2, d_1 < x_3 < d_2\}$$

\* Ерунова И.Б., 2012 г.