

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет математики и информатики
Кафедра информационных и управляющих систем
Направление подготовки 09.04.04 – Программная инженерия
Магистерская программа управление разработкой программного обеспечения

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ
Зав. кафедрой
_____ А.В. Бушманов
« _____ » _____ 2016 г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему: Программная реализация кибернетической модели релаксационной поляризации воды

Исполнитель
студент группы 457ом _____ А.Ю. Аристов
(подпись, дата)

Руководитель
доцент, канд. физ. - мат. наук _____ В.В. Еремина
(подпись, дата)

Руководитель магистерской
программы, профессор
доктор техн. наук _____ Е.Л. Еремин
(подпись, дата)

Нормоконтроль
доцент, канд. физ.-мат. наук _____ В.В. Еремина
(подпись, дата)

Рецензент
доцент, техн. наук _____ Т.В. Труфанова
(подпись, дата)

Рецензент
доцент, канд. техн. наук _____ А.Н. Рыбалев
(подпись, дата)

Благовещенск 2016

РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 104 с., 33 рисунка, 1 таблица, 1 приложение, 67 источников.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, РЕЛАКСАЦИОННАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ, КИБЕРНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕЛАКСАЦИОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ, СТРУКТУРНАЯ СХЕМА ПОЛЯРИЗАЦИОННОЙ ЖИДКОСТИ.

Целью данной магистерской работы является разработка такого современного программного продукта, который позволил бы моделировать поляризационные свойства воды для адекватного восприятия в соответствии с данными физических экспериментов. Главная задача работы – построить математическую модель релаксационной поляризации воды и решить ее с помощью структурных схем теории автоматического управления. Результаты работы представлены в третьей главе. В приложении представлена программная реализация решения задач о кручении в среде Matlab.

					ВКР. 145373.090404.ПЗ			
<i>Изм</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>				
<i>Разраб</i>		<i>Аристов А. Ю.</i>			ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ КИБЕРНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕЛАКСАЦИОННОЙ ПОЛЯРИ- ЗАЦИИ ВОДЫ	<i>Лит.</i>	<i>Лист</i>	<i>Листов</i>
<i>Научный руководитель</i>		<i>Еремина В. В.</i>				У	2	104
<i>Руководитель программы</i>		<i>Еремин Е. Л.</i>				АмГУ кафедра ИУС		
<i>Н. контр.</i>		<i>Еремина В. В.</i>						
<i>Зав. каф.</i>		<i>Бушманов А. В.</i>						

СОДЕРЖАНИЕ

1	Физико-химические свойства воды	8
1.1	Поляризационная характеристика воды	9
1.2	Общее строение и виды колебаний молекул H_2O	11
1.3	Традиционное описание поляризационных свойств	17
1.3.1	Методы расчета микроскопических параметров	17
1.3.2	Расчетные формулы макроскопических характеристик	20
1.4	Классические уравнения диэлектрической проницаемости	23
1.4.1	Статические формулы Борна и Клаузиуса-Моссотти	23
1.4.2	Теоретические модели Онзагера и Кирквуда	30
1.5	Кибернетическая модель диэлектрической проницаемости	37
1.6	Кибернетическая модель релаксационной поляризации	43
1.7	Визуальные модели молекулярных ассоциатов воды	44
1.7.1	Тетраэдрический конгломерат $(H_2O)_5$	45
1.7.2	Трехмерные кластеры $(H_2O)_{20}$ и $(H_2O)_{12}$	47
1.8	Структурный синтез математической модели РП воды	50
1.9	Параметрический синтез математической модели релаксационной поляризации воды	54
1.10	Метод эмпирического расчета динамических параметров	55
2	Выбор программного обеспечения решаемой задачи	62
2.1	Математический пакет Wolfram Mathematica	62
2.2	Математический пакет Maxima	64
2.3	Математический пакет Maple	65
2.4	Математический пакет Mathcad	67
2.5	Пакет программного обеспечения Diatomic 1.0 (Xiaofeng Tan)	68
2.6	Математический пакет MatLAB	70
3	Практические результаты исследования	73
3.1	Модель общей поляризации воды	73
3.2	Модель релаксационной поляризации воды	78

3.3 Программные средства автоматизации прикладных расчетов	82
3.4 Алгоритмическая схема работы программного продукта	84
3.5 Результаты вычислительного эксперимента	84
Заключение	88
Библиографический список	89
Приложение А – Программная реализация решения задачи релаксационной поляризации воды среде Matlab	95
Приложение Б – Сертификаты и дипломы	103

ВВЕДЕНИЕ

Вода занимает важное место в составе большинства природных объектов, являясь неперенным участником естественных и техногенных процессов, происходящих в окружающей среде. Ее значение трудно переоценить, и определено оно спектром довольно необычных физико-химических свойств. Все это вызывает непреодолимый научный интерес к изучению как каждой отдельно взятой молекулы, так всего молекулярного комплекса, который образуется при помощи водородных связей, кластеров и конгломератов.

На данный момент человечество имеет довольно четкое представление о газах и твердых телах, однако в ученом мире единая точка зрения относительно молекулярной структуры жидкости отсутствует до сих пор. Подобный дефицит в научной информации можно объяснить высоким уровнем сложности физико-химических процессов, которые в ней происходят. Для анализа данных процессов необходимо применение методов регистрации надмолекулярных и молекулярных процессов в диапазоне времен от 10^{-18} и до единиц секунды.

Наиболее адекватным способом получения объективной информации о свойствах воды и особенностях ее молекулярной структуры считается разработка таких математических методов, которые бы согласовывались с существующими, как экспериментальными, так и теоретическими моделями. Использование же классических трактовок с целью описания поляризационных явлений, которые происходят в воде, возникая под воздействием слабого электромагнитного поля, нередко демонстрирует невысокий уровень эффективности, поскольку в них не всегда учитываются возможности образования молекулярных ассоциатов $(H_2O)_n$, а потому описания релаксационной поляризации.

Анализ существующих в настоящее время теоретических моделей релаксационной поляризации показал, что ни одна из них не позволяет получить количественного или качественного согласия с данными физических экспериментов.

Современные теоретические модели релаксационной поляризации воды не позволяют получить ни качественного, ни количественного согласия с данными,

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		5

полученными при проведении физических экспериментов.

Таким образом, оптимальная теоретическая модель релаксационной поляризации воды, ее изучение и разработка, а также программный продукт, который смог бы четко отразить изменения и позволял бы приблизиться к пониманию природы тех процессов, которые происходят в жидком диэлектрике, сегодня являются важной научно-технической проблемой, что и определяет актуальность данного исследования.

Основной целью данной магистерской работы является разработка такого современного программного продукта, который позволил бы моделировать поляризационные свойства воды для адекватного восприятия в соответствии с данными физических экспериментов.

Для достижения обозначенных целей автор данного исследования попытался найти новые решения базовых задач:

1. Поиск и разработка оптимальной математической модели комплексной диэлектрической проницаемости воды, которая позволила бы связать микропараметры водной молекулярной структуры с ее макро свойствами.
2. Компьютерное моделирование водных диэлектрических спектров широкого диапазона частот малой амплитуды внешнего электрического поля.
3. Создание такого программного продукта, который смог бы визуализировать моделирование соответствующих диэлектрических спектров воды, а также упрощение общей математической модели поляризации воды.

Для достижения обозначенных задач были использованы следующие подходы: построение структурных схем и их эквивалентных преобразований; математический аппарат передаточных функций, а также их частотных аналогов; общий метод математического моделирования и метод прямых итераций, а также общие принципы по алгоритмизации и функциональному программированию.

Практическая значимость исследования заключается в том, что ожидаемым результатом совокупности полученных в процессе работы математических моделей и использование определенных вычислительных методик позволит осуществить компьютерное моделирование водных диэлектрических спектров в области

релаксационной поляризации, которые были бы адекватны их физическим аналогам.

					<i>ВКР. 145373.090404.ПЗ</i>	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		7

1 ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОДЫ

Последние научно-технические достижения сегодня позволяют констатировать тот факт, что любое вещество может быть представлено на химическом уровне в виде совокупности молекул и атомов. Их конечная прочность и жесткость можно определить при помощи воздействия внешних возмущающих факторов на исследуемые образцы. Основные из них – это тепловые, механические и электромагнитные поля. Они имеют единую электрическую природу, как с атомами, так и с молекулами, которая и определяет свойства деформации электронных оболочек, чем, в свою очередь, и обусловлена поляризация данного вещества в целом.

Основополагающей теорией, сформировавшей основное представление об электромагнитной природе вещества, считается теория поляризации. На ее положениях, разработанных Х. Лоренцем более ста лет назад сегодня основываются базовые разработки данной теории. К примеру, популярность уравнений Лоренц–Лоренца и Клаузиуса–Моссотти, принято объяснять высокой эффективностью и точностью описаний поведения с их помощью широкого класса веществ.

Однако необходимо отметить также и ряд недостатков, которые являются следствием определенной доли несовершенства принимаемой модели, континуальной сферы Лоренца, которая изначально игнорирует атомно-молекулярную дискретность вещества.

Противовесом положений классической теории поляризации является современная квантовая теория. Именно ее положения позволяют получить наиболее полное описание взаимодействие частиц, с внешними полями, формирующих исследуемый образец. В данном плане важно подчеркнуть, что в процессе применения приходится использовать целый набор гамильтонианов, которые учитывают много частичность вещества. Это, в свою очередь, приводит к громоздкости исходного описания, которое далеко не всегда позволяет получить конечный результат. Также в процессе использования наиболее адекватного квантов механического описания для много частичных систем, которое задается уравнением

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		8

Шредингера, можно определить величину энергии, которая будет обуславливать, как частоту, так и форму колебаний молекулы относительно конкретной точки на поверхности потенциальной энергии.

Однако, описанные выше величины являются лишь промежуточным результатом в контексте данного исследования, а потому требуют дополнительного расчета, к примеру, в рамках уравнения Кирквуда. Исходя из вышеизложенного, с позиции возможности по эффективному моделированию непрерывных диэлектрических спектров, использование уравнения Шредингера не всегда оказывается приемлемым для практических расчетов, в процессе представления поляризационных процессов реальных диэлектриков.

Кроме того, с целью описания поляризационных процессов, которые происходят в диэлектрике под воздействием внешних электромагнитных полей, наиболее популярным становится использование методов, относящихся к теории моделирования систем, лежащих в основе «кибернетической физики».

Главным же отличием кибернетического метода от традиционного принципа математического выражения относительно состояния физической системы является факт того, что в процессе кибернетического описания подверженной изучению системы всегда очевидно указываются все входы и выходы, которые имеют место и для исследуемых объектов в целом, и для каждого отдельно взятого элемента, в частности.

Таким образом, на данный момент наибольшую актуальность имеет проблема модернизирования классических подходов с целью использования этих методов в процессе исследования поляризационных явлений жидких диэлектриков при помощи интеграции с основными положениями теории моделирования систем с математическими методами теории управления.

1.1 Поляризационная характеристика воды

Понятие поляризации диэлектрика определяется в качестве явления упорядоченного переориентирования его молекул под воздействием внешних электрических полей. В процессе поляризации одновременно с молекулами происходит перераспределение также и электрически заряженных частиц. Таким образом, в

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		9

одном направлении в отношении силовых линий поля происходит преобладание положительно заряженных частиц, в противоположном же направлении, преобладают частицы отрицательно заряженные.

Интересным фактом является появление в диэлектрике в результате поляризации собственного электрического поля, направление которого является противоположным относительно поля внешнего, которое и вызывает эту поляризацию. Не смотря на то, что внутреннее поле является значительно меньшим, чем внешнее, мы можем наблюдать факт существенного ослабления внешнего поля.

Довольно часто степень поляризации диэлектрика выражается при помощи его диэлектрической проницаемости. Чем она меньше проницаемость диэлектрика, тем сильнее он будет ослаблять внешнее поле.

Как известно, жидкая вода характеризуется довольно сложной структурой, особенности которой до сих пор не имеют точного объяснения, несмотря на многочисленные исследования.

Вода – это единственное вещество, которое демонстрирует способность одновременного нахождения в трех агрегатных состояниях – жидкого, твердого и газообразного. В ряду жидкостей вода также демонстрирует наибольшую теплоемкость, которая вдвое превышает аналогичные величины растительных масел, глицерина, ацетона и спирта.

Кроме того, в процессе плавления показатели теплоемкости воды увеличиваются практически в два раза, в рамках нагревания от 0 до 100 °С показатели теплоемкости остаются практически неизменными, однако имеют четко очерченный минимум на отметке тридцати семи градусов по Цельсию. Одновременно с уменьшением температуры от 100 °С происходит увеличение физической плотности воды, с достижением максимума на отметке 3,98 °С. После этого рубежа происходит обратное явление. В дальнейшем процесс кристаллизации приводит к падению плотности образованного из воды льда.

Таким образом, в процессе плавного охлаждения водных массивов ниже 4-х °С в них постепенно начинается формирование естественно всплывающего льда. Именно потому данные аномальные качества и свойства воды, которые проявля-

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		10

ются в условиях различных температурных значений, под воздействием внешнего давления или использования примесей, и определяют необходимость учитывать микроструктуру ее изолированных молекул.

1.2 Общее строение и виды колебаний молекул H_2O

Общеизвестным фактом является установление состава воды в 1780 г. Кавендишем и Лавуазье экспериментальным путем. Этим ученым удалось достоверно определить то, что один атом кислорода с двумя атомами водорода образуют молекулу H_2O .

В процессе рассмотрения структуры данной молекулы в гипотетически равновесном состоянии можно увидеть, что при помощи атомных ядер ее частиц при атоме кислорода образуется равнобедренный треугольник с тупым углом как представлено на рисунке 1. Длина валентных связей OH и величина угла между ними определяются с высокой степенью точности при помощи спектральных методов. Они составляют, соответственно, $R_{\text{OH}} = 0,95718 \cdot 10^{-10}$ м. и $\alpha = 104,523^\circ$.

В рамках подобной трактовки принято использовать следующую декартовую систему естественных координат. Начало ее отсчета расположено в центре масс молекулы. Ось z , принадлежащая молекулярной плоскости, образовывается при помощи двух частиц водорода и одной кислорода, выступая в качестве биссектрисы для валентного угла HOH . Ось y также относится к плоскости данной молекулы, являясь перпендикулярной к оси x , которая проходит сквозь центр масс данной молекулы, являясь перпендикулярной к ее плоскости.

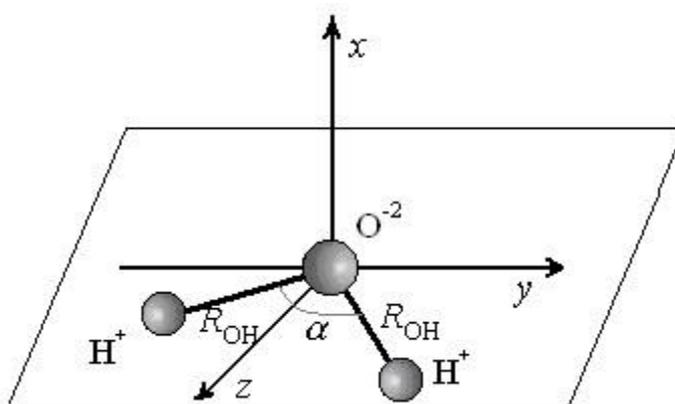


Рисунок 1 – Расположение структурных элементов молекулы H_2O

Важная роль в процессе изучения молекулярной поляризации воды, принад-

лежит также дипольным моментам. Спектроскопические методы их определения базируются на эффекте сдвига и расщепления спектральных линий электрического поля, что создает эффект Штарка, который основывается на явлении изменения уровня энергии молекул и атомов во внешнем электрическом поле в отношении к данной системе. Как для линейных молекул, так и для молекул по типу «симметричных волчков» известны более точные выражения, которые связывают дипольные моменты с расщеплением линий вращательного спектра по Штарку.

Данный метод предоставляет наиболее точное значение для величины дипольного момента, причем при помощи эксперимента можно не только определить величину, равную для молекулы воды $6,1 \cdot 10^{-30}$ Кл·м, но также и направление при помощи биссектрисы валентного угла для вектора дипольного момента

Важно подчеркнуть также, что другая группа методов по определению дипольного момента основывается на измерении диэлектрической проницаемости для ϵ вещества. Переход от измеряемого значения ϵ , то есть макроскопической характеристики диэлектрика, к самой величине дипольного момента основывается на вышеупомянутой теории поляризации.

В общих случаях в процессе структурной интерпретации дипольных моментов может потребоваться сравнение экспериментальной величины со значениями, которые были получены при помощи механических расчетов либо аддитивной векторной схемы с применением дипольных моментов отдельных связей, а также атомных групп, которые находятся либо по интенсивности колебательных полос поглощения, либо при помощи векторного разложения дипольных моментов для некоторых симметричных молекул.

В процессе микроскопического изучения строения молекулы воды, отталкиваясь от данных исследований инфракрасных полос серии спектра поглощения водяного пара, можно увидеть, что в процессе образования водной молекулы электронные облака двух не спаренных между собой $2p$ электронов атомов кислорода O^{2-} перекрываются с $1s$ электронным облаком двух атомов водорода H^+ .

Ориентация p электронных облаков кислорода, которые находятся в состоянии sp^3 -гибридизации, в направлениях, взаимно перпендикулярных друг к другу,

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		12

и определяет угловое строение молекулы воды.

В свою очередь, основываясь на том, что электроны, которые образуют связи ОН, смещаются к более электроотрицательным атомам кислорода, атом водорода приобретает эффективный положительный заряд. В данном процессе не поделенные электронные пары, которые находятся на гибридных sp^3 орбиталях, смещаются относительно кислородного ядра, создавая два отрицательных полюса как представлено на рисунке 2.

Стоит вспомнить, что данное распределение заряда, которое сходно по форме с тетраэдром, и имеет по два положительных и отрицательных угла, и при котором для каждой молекулы свойственно притягивать положительный угол или атом водорода к углу отрицательному или не поделённой паре электронов, охарактеризовали еще Бернал и Фаулер.

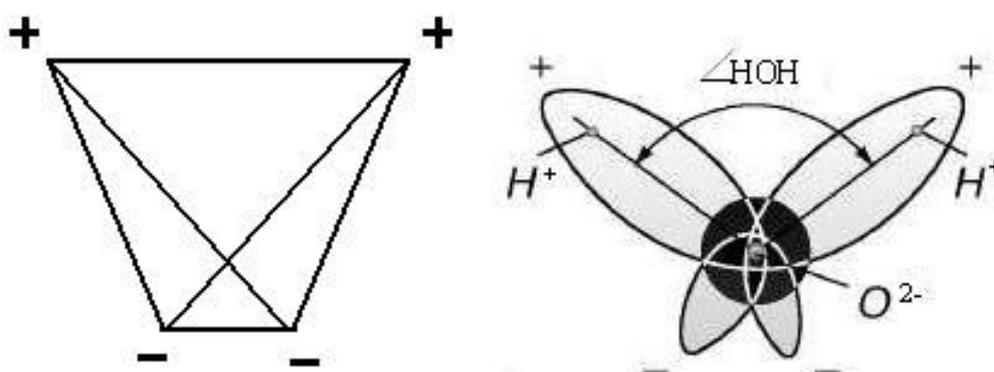


Рисунок 2 – Полюсы молекулы воды

Далее рассмотрим общую совокупность поляризационных процессов, которые происходят в воде под воздействием переменного электрического поля малой амплитуды.

В данном плане, кроме смещения электронных оболочек, которые имеют здесь место вне зависимости от агрегатного состояния любого вещества и структуры, выделяют, во-первых, выделяют колебания с изменением только внутренних координат (длины связей и угла между ними) или внутримолекулярные, а во-вторых, колебания, которые характеризуются изменением положения молекулы воды по отношению к ее исходному состоянию равновесия или межмолекулярные колебания. Учитывая небольшую величину коэффициента затухания для колеба-

ний частиц, которые являются характерными для названных процессов и обусловлены слабыми силами внутреннего трения, каждая из них относится к соответствующему виду упругой поляризации воды.

Кроме того, принято выделять отдельно сильнозатухающие гармонические колебания для многомолекулярных образований по типу $(\text{H}_2\text{O})_n$, которые имеют место в рассматриваемой жидкости при помощи автономного образования водородных связей $\text{O}-\text{H}\dots\text{O}$. Именно этими связями и определяются процессы релаксационной поляризации воды. Причем, данные явления, с учетом высокой инерционности принимающих в них участие частиц, проявляются исключительно в областях достаточно низкой частоты оптического спектра.

Далее рассмотрим каждый из этих видов молекулярных колебаний более подробно. Здесь необходимо подчеркнуть, что максимальной деформации во время смещения электронного облака касательно неподвижного атомного ядра в направлении положительного заряда внешних источников подвержены электроны внешних или оптических оболочек. Это происходит потому, что внешние электроны с атомными остатками связаны слабее всего из-за максимальной величины их радиусов, а также в силу присутствия так называемого эффекта «экранизации ядра внутренними электронными оболочками».

Таким образом, определяющий вклад, который существенно превышает вклад глубинных оболочек, в поляризацию частицы, которая обусловлена колебаниями данного вида, приходится именно на оптические электроны.

Валентные же колебания водной молекулы происходят по причине изменения длины связей OH . В каждой из данных связей ионы водорода смещаются вдоль направлений связей OH . Ионы кислорода, также в свою очередь, подвержены смещению, однако поскольку их вес значительно превышает массу ионов водорода, то и смещение это оказывается незначительным. Линии смещения ионов кислорода проходят сквозь биссектрису валентного угла в том направлении, которое является противоположным относительно ориентации молекулы H_2O .

Таким образом, деформационные колебания напрямую связаны с изменением показателей величины угла между связями OH . Данный вид колебаний объяс-

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		14

няется смещением, как ионов водорода, так и иона кислорода, хотя смещения ионов кислорода являются незначительными. Ионы H^+ двигаются в том направлении, которое перпендикулярно связям молекулы H_2O , тем самым влияя на изменение величины угла, не изменяя при этом длины связей, как переставлено на рисунке 3.

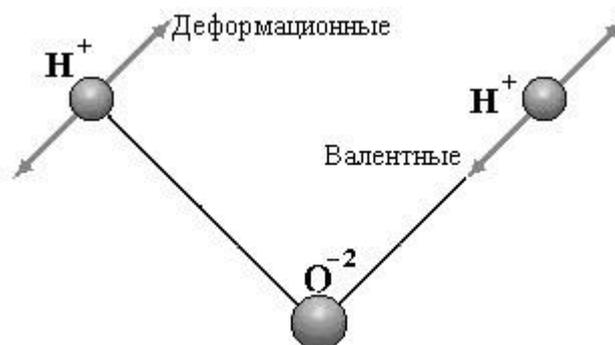


Рисунок 3 – Валентные и деформационные колебания

Стоит подчеркнуть, что межмолекулярные колебания, в частности речь идет о либрационных и трансляционных колебаниях, возникают в процессе ассоциации молекул, или между собой или же с другими молекулами. Подобный вид колебаний вводится при помощи дополнительного набора естественных внешних координат, таких как межмолекулярные связи и углы, образуемых ими, оставляя без изменений внутренние координаты (Рисунок 4).

Либрационные колебания характеризуются поворотом молекулы вокруг некоторой оси, в процессе которого из-за «тяжести» иона кислорода в молекуле H_2O , смещению подвержены только лишь «легкие» атомы водорода, оставляя атомы кислорода неподвижными. В этом случае либрационными для воды считаются те колебания, в процессе которых молекула совершает поворот около иона кислорода.

Что касается трансляционных колебаний, то они соответствуют смещению молекулы воды в качестве единого целого в том пространстве, в котором без изменения остаются как длина связей OH , так и валентный угол $H-O-H$.

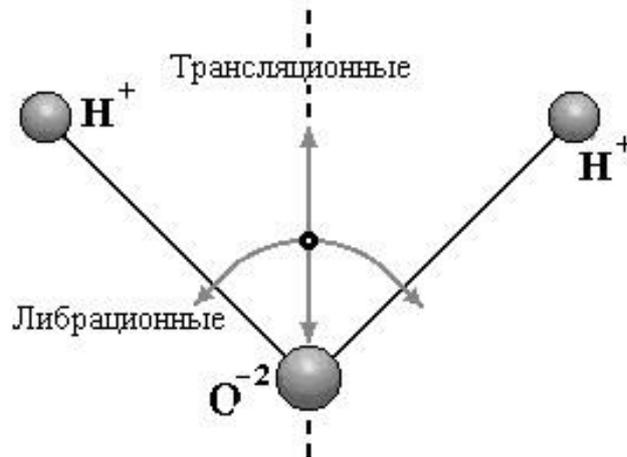


Рисунок 4 – Либрационные и трансляционные колебания

Высокая химическая активность воды, позволяет представить молекулу H_2O в виде универсальной структурной компоненты, которая способна в любом, даже самом малом объеме рассматриваемой жидкости объединяться в разнообразные многомолекулярные конструкции $(\text{H}_2\text{O})_n$ при помощи образования $\text{O}-\text{H}\dots\text{O}$ связей.

Результатом вынужденной поляризации молекулярных ассоциатов воды становится возникновение релаксационных колебаний. Подчеркнем, что подобная разновидность поляризационных процессов играет определяющую роль в аномально высокой диэлектрической проницаемости воды, которая наблюдается относительно технических частот приложенного переменного электромагнитного поля.

Подводя итог вышесказанному, отметим, что относительно упругих видов поляризации, воздействия со стороны внешнего поля могут вызывать лишь очень малые, в сравнении с атомным размером, смещение частиц для их неполяризованного состояния.

Однако, электрическое поле, которое создается диполями данного типа, приводит к довольно существенному интегральному вкладу относительно макроскопических свойств материалов. В процессе релаксационной поляризации приложенные поля порождают асимметрию при распределении перемещающихся зарядов, которая обуславливает наведение дипольных моментов. В данных поляризационных процессах могут участвовать только лишь примесные, и, как правило,

довольно слабо связанные между собой частицы или же группы частиц с относительно невысокой концентрацией. Их вклад обычно соизмеряется с вкладом, который вносится упругими видами поляризации с участием практически всех частиц диэлектрика.

1.3 Традиционное описание поляризационных свойств

Таким образом, в полученной в спектроскопическом эксперименте информации так или иначе отражен характер взаимодействий внутри исследуемого образца. Далее для описания общего характера поляризации рассмотрим диэлектрик в виде совокупности взаимодействующих между собой заряженных частиц. Будем учитывать, что каждая из разновидностей данных частиц обладает набором своих собственных параметров, к примеру, массой m и зарядом q , а также собственным набором параметров динамических, таких как коэффициент затухания собственных колебаний b и их частота ω_0 .

При этом численные значения для собственных параметров в большинстве случаев определяются путем типового расчета искомых величин при помощи общеизвестных формул, тогда как более эффективное определение динамических параметров требует выстраивания цельной методики для их расчетов

1.3.1 Методы расчета микроскопических параметров

Классическая теория поляризации утверждает, что частоты собственных колебаний, также, как и коэффициент затухания могут определяться при помощи формул:

$$\omega_0^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 m r^3};$$

$$2b = \frac{\mu_0 q^2 \omega_0^2}{6\pi c t}$$
(1)

где r – показатель величины ионного радиуса, его численное значение находится в рамках использования ряда таблиц, к примеру, исходя из классических данных по Гольд Шмидту, численное значение для ионного радиуса частицы кислорода r_o^{2-} равно 1,32 Å.

Также, известным фактом является то, что в отношении много частичной системы наиболее адекватным воспринимается его квантово-механическое описание, которое задает уравнение Шредингера. Для стационарных состояний оно выглядит следующим образом:

$$H(R, r)\psi(r) = E(R)\psi(r) \quad (2)$$

где показатель $H(R, r)$ – оператор Гамильтона (гамильтониан), который определяет полную энергию системы;

R и r – координаты для электронов и ядер;

$\psi(r)$ – волновые функции, которые задают и (или) отражают состояние всей системы;

$E(R)$ – показатели собственного значения энергии системы.

Исходя из этого, ядерные координаты входят в гамильтониан системы параметрический, в качестве величин, которые задаются условиями:

$$H(R, r) = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{2r_{i,j}} \cdot \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{ER_{\alpha\beta}} - \sum_{i,a} \frac{Z_a e^2}{Z_a |r_i - R_\alpha|} \quad (3)$$

где, показатели e и Z – являются соответственно зарядом электрона и атомного ядра;

m и M – показатели массы электронов и ядер;

∇^2 – оператор Лапласа; $\hbar = h / 2\pi$, h – постоянная Планка;

индексы j и i относят к электронам, а β и α – к ядрам.

Важно отметить, что решение данного уравнения (2) позволит получить показатель величины электронной энергии $E(R)$, которая будет суммой потенциальной энергии взаимодействия электронов между собой и с ядрами атомов и кинетической энергии. Однако, здесь важно учитывать факт взаимодействия между собой положительно заряженных ядер атомов. Когда они находятся в конфигура-

ции, которая задается координатами R , то они электростатический отталкиваются при помощи так называемой энергии ядерного отталкивания:

$$E_R(N) = \sum_{\alpha=2}^N \sum_{\beta=1}^{\alpha} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}} \quad (4)$$

Данной суммой электронной энергии с потенциальной энергией кулоновского отталкивания ядер и определяется полная энергия молекулы $E_{tot}(R)$. В рамках адиабатического приближения ее можно рассматривать в качестве потенциальной энергии молекулы, которая определяется исключительно ее структурой, или положением ядер R относительно данного временного момента:

$$U(R) = E_{tot}(R) = E(R) + E_N(R) \quad (5)$$

где $U(R)$ – показатель поверхности потенциальной энергии (ППЭ).

В данном случае важной характеристикой $U(R)$ также выступает матрица Гессе G (гессиан), которая и определяет кривизну ППЭ и выступает в виде матрицы вторых производных для потенциальной энергии молекулы по следующим координатам:

$$G_{ij} = \frac{\partial^2 U(q)}{\partial q_i \partial q_j}, i, j = 1, 2, \dots, N, \quad (6)$$

где q – показатель набора координат, отобранный таким образом, чтобы в любой момент и по любым значениям было возможно однозначное определение декартовых координат ядра R .

Важной функцией собственных значений гессиана является факт того, что именно ими определяется частоту ω_i и форма колебаний для молекулы в той или иной точке:

$$\omega_i^2 = \frac{G_i}{m_{\alpha(i)}} \quad (7)$$

где $m_{\alpha(i)}$ – показатель массы атома α , номер которого связан с координатой i .

Исходя из вышеизложенного, приходим к формулировке следующих выводов. Квантово-механический расчет позволяет определить численное значение для резонансных частот электронно-атомных колебаний. Данное значение при наличии затуханий всегда будет отличаться от собственных частот, а потому не может быть напрямую использовано как динамические параметры для анализируемых поляризационных процессов.

Таким образом, использование классического подхода, который является характерным для традиционной теории поляризации, дает возможность непосредственно рассчитать динамический коэффициент для используемых выражений. В данном качестве, например, может быть использовано, уравнение вынужденных колебаний линейного гармонического осциллятора.

Подобный факт может только лишь в очередной раз подтвердить правомерность использования классических подходов в ходе моделирования молекулярных процессов: то есть, несмотря на то, что наиболее адекватно динамика двухатомной молекулы описывается положениями квантово-механической модели, которые представляет нестационарное уравнение Шредингера, вычисления, которые проводятся, основываясь на использование классических моделей, приводят к оптимальным результатам, которые более всего близки к реальности

1.3.2 Расчетные формулы макроскопических характеристик

Как известно, любой макроскопический параметр в исследуемом веществе можно определить при помощи совокупности происходящих микроскопических процессов. В данном процессе к основным характеристикам диэлектрика, кроме показателей его химического состава, вязкости и плотности, также можно отнести и те характеристики, которые описывают взаимодействие данного вещества с переменным электромагнитным полем, а также его диэлектрическую проницаемость и оптические показатели преломления, в процессе которого частотные зависимости принимают вид комплексной функции общего вида:

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		20

$$\begin{aligned} n(j, \omega) &= n(\omega) + j\chi(\omega); \\ \varepsilon(j, \omega) &= \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Im}}(\omega), \end{aligned} \tag{8}$$

где $\chi(\omega)$ и $n(\omega)$ – частотные зависимости показателя поглощения и показателя преломления;

$\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)$ и $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$ – мнимая и вещественная частотная характеристика комплексной диэлектрической проницаемости.

Величины n , ε и χ , в свою очередь, представляют собой макроскопические свойства вещества в виде результата и следствия способностей микрочастиц к поляризации под воздействием со стороны внешнего электрического поля. В данном случае, наипростейшим уравнением, при помощи которого можно установить связи между этими величинами, выступает уравнение Максвелла. Исходя из данного уравнения, делаем вывод о том, что квадрат показателей преломления равняется произведению относительной магнитной и диэлектрической проницаемости.

Основываясь на факт того, что электрическая составляющая электромагнитного поля света вступает во взаимодействие с заряженными частицами гораздо более сильное, чем магнитная, то комплексную функцию $n(j\omega)$ традиционно связывают с комплексной функцией $\varepsilon(j\omega)$ следующим соотношением:

$$\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) = n^2(\omega) + 2jn(\omega)\chi(\omega) - \chi^2(\omega). \tag{9}$$

Очевидно, что выделение мнимой и вещественной составляющих позволяет формировать те алгебраические уравнения, которые взаимосвязывают между собой диэлектрические и оптические характеристики в виде (10), отвечающем частному виду функций $\chi(\omega)$ и $n(\omega)$ при скалярном значении частоты, которое характерно для воздействия статического внешнего поля.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) &= n^2(\omega) - \chi^2(\omega); \\ \varepsilon_{\text{Im}}(\omega) &= 2n(\omega)\chi(\omega). \end{aligned} \tag{10}$$

Выражение второго уравнения данной системы переменной χ в виде (11) и

позволяет получить уравнение (12), которое и приведет в дальнейшем к формированию биквадратного уравнения (13).

$$\chi(\omega) = \frac{\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)}{2n(\omega)}; \quad (11)$$

$$\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) = n^2(\omega) - \frac{\varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)}{4n^2(\omega)}; \quad (12)$$

$$n^4 - \varepsilon_{\text{Re}}n^2 - \frac{\varepsilon_{\text{Im}}^2}{4} = 0. \quad (13)$$

Следствием решения последнего уравнения становится появление пары вещественных и пары комплексных корней:

$$n_{1,2} = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2} + \varepsilon_{\text{Re}}}{2}}; \quad (14)$$

$$n_{3,4} = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2} - \varepsilon_{\text{Re}}}{2}}.$$

С учетом того, что частотная зависимость оптического показателя преломления по своему определению является массивом положительных действительных чисел, из множества решений (14) нужно отбросить мнимые корни $n_{1,2}$, а также отрицательный вещественный корень. Исходя из этого, функцию $n(\omega)$ можно представить в следующем виде (15).

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (15)$$

На основе выражения рассматриваемой системы уравнений переменной n , а также по аналогии с выводами уравнения, формируем следующее биквадратное уравнение:

$$\chi^4 + \varepsilon_{\text{Re}}\chi^2 - \frac{\varepsilon_{\text{Im}}^2}{4} = 0. \quad (16)$$

В ходе решения, которого, также получаем две пары вещественных и комплексных корней:

$$\begin{aligned} \chi_{1,2} &= \pm \sqrt{\frac{-\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2} - \varepsilon_{\text{Re}}}{2}}; \\ \chi_{3,4} &= \pm \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2} - \varepsilon_{\text{Re}}}{2}}. \end{aligned} \quad (17)$$

На основе же учета физической сущности оптических показателей поглощения как положительной действительной характеристики для исследуемого диэлектрика, его частотную зависимость $\chi(\omega)$ можно представить в виде следующего выражения:

$$\chi(\omega) = \pm \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (18)$$

Таким образом приходим к выводу о том, что такие оптические характеристики вещества, как показатели преломления и поглощения, можно достаточно эффективно описать при помощи основополагающих зависимостей (15) и (18).

1.4 Классические уравнения диэлектрической проницаемости

Как известно, классическая теория поляризации для расчетов диэлектрической проницаемости вещества предлагает несколько моделей, которые отличаются представлением внешнего и эффективного полей. Они представлены в научных исследованиях П. Дебая, Дж. Кирквуда, Л. Онзагера и других ученых.

1.4.1 Статические формулы Борна и Клаузиуса-Моссотти

Одним из первых истолкований величины электрического поля, действующего внутри поляризованного материала, является модель среднего макроскопического поля [4], которую представляют, как действие дипольных цепочек, связывающих своими свободными концами противоположные по знаку заряды на обкладках конденсатора, находящегося под действием внешнего электрического поля (рисунок 5)

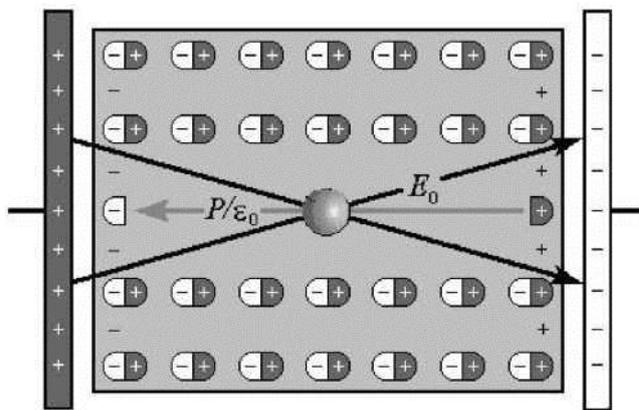


Рисунок 5 – Схема образования среднего макроскопического поля

В рамках подобной интерпретации величина поля, эффективно действующего внутри поляризованного диэлектрика, представляет собой разность между напряженностями внешнего поля и поля, образованного совокупной поляризованностью материала, и определяется на основании формулы:

$$E_{cp} = E_0 - \frac{P}{\epsilon_0}, \quad (19)$$

где E_{cp} - напряженность среднего макроскопического поля.

На основании выражения (19), с учетом того, что, $E_0 = sE_{cp}$, оказывается возможным напряженность среднего макроскопического поля представить соотношением:

В предположении возможности описания эффективного поля моделью среднего макроскопического поля, с учетом выражения (20), представляющего результирующий электрический момент P , наведенный в единице объема поляризованного материала, в виде суммы моментов μ_i всех образовавшихся в нем элементарных диполей, а также выражения (21), описывающего связь величин электрических моментов μ_i с напряженностью E индуцирующего их поля, вытекает формула диэлектрической проницаемости (22), называемая уравнением Борна

$$P = \sum_{i=1}^L \mu_i N_i; \quad (20)$$

$$\mu_l = a_l E, l = \overline{1, L}; \quad (21)$$

$$\varepsilon = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L a_i N_i, \quad (22)$$

где L - число разновидностей наведенных микроскопических дипольных моментов;

N_i - концентрации соответствующих диполей в образце;

a - поляризуемость частицы i -й разновидности.

Для оценки эффективности используемой формулы (22) диэлектрической проницаемости введем в рассмотрение некоторый параметр A , представляющий собой суммарную поляризуемость единицы объема исследуемого образца в виде (23), на базе использования которого уравнение Борна (22) может быть представлено в виде функциональной зависимости (24), анализ свойств которой показывает, что она является непрерывно возрастающей и положительной при любых значениях аргумента A (Рисунок 7).

$$A = \sum_{i=1}^L a_i N_i; \quad (23)$$

$$\varepsilon(A) = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0} A.$$

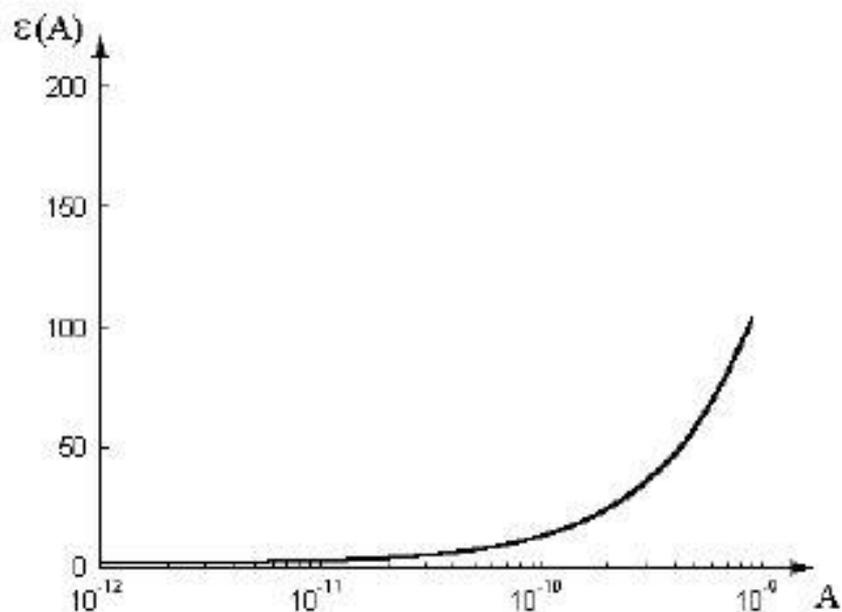


Рисунок 7 – График функциональной зависимости вида (23)

Анализируя область применения расчетной формулы (22), оказывается, что она ограничена возможностью исследования только сильно разряженных сред, поскольку модель среднего макроскопического поля не учитывает составляющих эффективного поля, обусловленных поляризацией ближайшего окружения отдельной частицы. Исходя из этого обстоятельства, уравнение

Борна, как правило, используется для вычисления диэлектрической проницаемости газов или паров жидкостей. Для полярных жидкостей, в частности воды, значение диэлектрической проницаемости, рассчитанное на базе (22), резко отличается от действительного.

При рассмотрении поляризованного диэлектрического материала на микроскопическом уровне каждая его частица оказывается в поле действия окружающих диполей, при этом поляризация ближайшего окружения не только ослабляет, но и частично усиливает поле, действующее на отдельно разбираемую молекулу. Теоретическая модель, применяемая для изображения соответствующего механизма формирования эффективного поля, схема которого приведена на рисунке 8, трактует его как результат суперпозиции среднего макроскопического поля и ряда добавочных микроскопических полей.

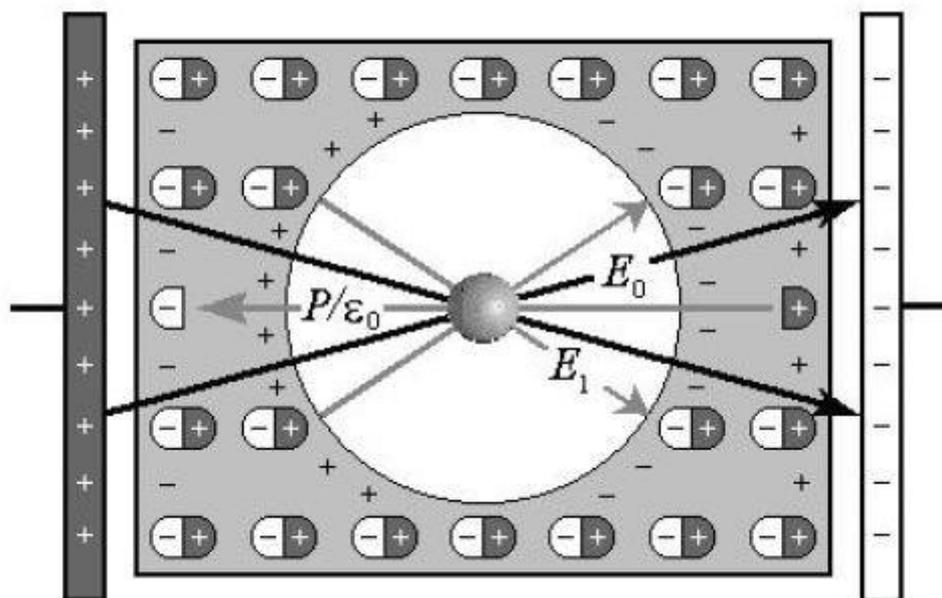


Рисунок 8 – Схема формирования локального поля Лорентца

Основная предпосылка построения модели Лорентца заключается в локализации любой молекулы, произвольно выбранной в поляризованном диэлектрике, внутри воображаемой микроскопической сферы, радиус которой должен соответствовать нескольким десяткам межъядерных расстояний. Далее предполагается, что все частицы, расположенные внутри сферы, за исключением рассматриваемой, могут быть мысленно изъяты без нарушения общего поляризованного состояния образца. В рамках подобной трактовки выражение напряженности $E_{лок}$ локального поля представляет собой сумму:

$$E_{лок} = E_{cp} + E_1 + E_2, \quad (24)$$

где E_1 - напряженность поля, обусловленного выходами дипольных цепочек на поверхность локализирующей сферы;

E_2 - напряженность поля, создаваемого молекулами, находящимися внутри сферы.

Величина электрического поля, образованного поляризованной сферой, которое эквивалентно вкладу усиливающих микрополей, действующих со стороны макроскопической части образца, находится путем интегрирования плотности ее поверхностного заряда [2, 42]. В результате напряженность E_1 оказывается свя-

занной с электрическим моментом единицы объема диэлектрика выражением:

$$E_1 = \frac{P}{\varepsilon_0}. \quad (25)$$

Расчет значения величины напряженности поля, создаваемого частицами внутри сферы, требует точных сведений о взаимном расположении поляризованных молекул в ближнем порядке конкретного диэлектрика и, как правило, вызывает существенные затруднения. Для упрощения этой ситуации Моссотти предложил полагать $E_2 = 0$. Отметим, что такое приближение обычно считается адекватным только при рассмотрении диэлектрических сред, молекулярная структура которых обуславливает взаимное подавление соответствующих микрополей, например, за счет своей высокой симметрии или же полного беспорядка.

Подстановка описаний напряженностей среднего макроскопического и добавочных полей Лорентца в уравнение их суперпозиции (24), учитывая соотношения (20) и (21), позволяет получить выражение (26), на основании которого вытекает формула диэлектрической проницаемости в виде (27), называемая уравнением Клаузиуса-Моссотти [3] или уравнением Лоренц-Лорентца-Клаузиуса-Моссотти [2].

$$E = \frac{1}{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)} E \sum_{i=1}^L a_i N_i + \frac{1}{3\varepsilon_0} E \sum_{i=1}^L a_i N_i. \quad (26)$$

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L a_i N_i. \quad (27)$$

Оценка свойств функции (28), являющейся эквивалентом формулы, с учетом применения введенного выше параметра A (23), показывает, что она является возрастающей и терпящей разрыв второго рода при условии $A = 3\varepsilon_0$, как показано на рисунке 9, что, в свою очередь, приводит к выводу о возможности использования формулы Клаузиуса-Моссотти только при рассмотрении материалов, суммарная поляризуемость которых не превышает значения $3\varepsilon_0$

$$\varepsilon(A) = \frac{1 + 2A/3\varepsilon_0}{1 - A/3\varepsilon_0} = 1 + \frac{A/\varepsilon_0}{1 - A/\varepsilon_0}. \quad (28)$$

Причина данного обстоятельства, известного под названием «4π катастрофы» или «катастрофы Моссотти», обычно объясняется неадекватностью приближения Моссотти действительному состоянию интенсивно поляризуемых сред.

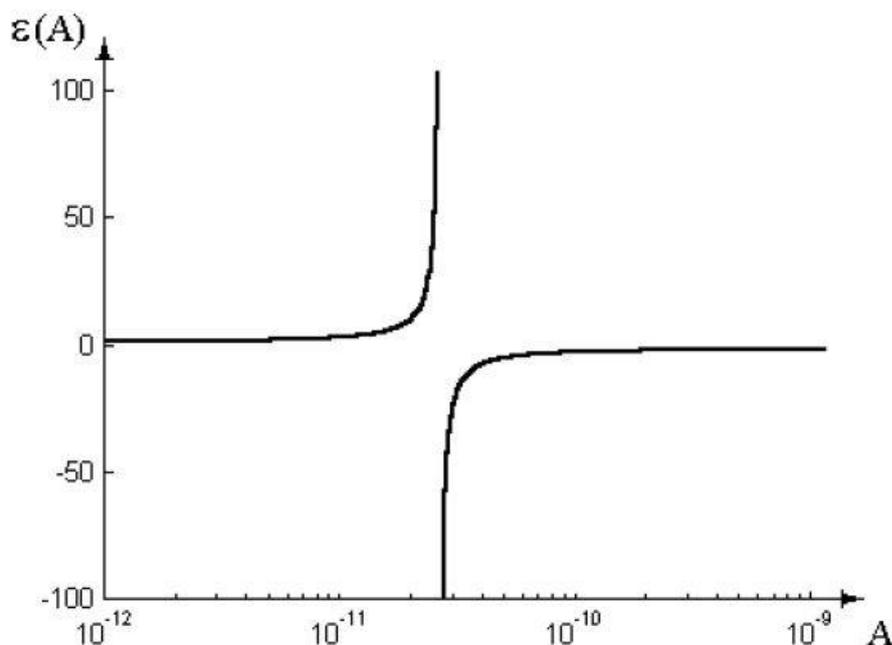


Рисунок 9 – График функциональной зависимости $\varepsilon(A)$ вида (28)

Анализ диэлектрических спектров, построенных с использованием формулы (27), показывает, что применение уравнения Клаузиуса- Моссотти для моделирования $\varepsilon(j\omega)$ вызывает произвольное смещение графического образа резонанса из зоны значения частоты собственных колебаний частиц в область более низких частот и на практике оказывается малоэффективным.

Наряду с этим, в ряде ключевых трудов по теории поляризации, например, в работе А.П. Хиппеля [2], указывается, что вклад микрополей, образованных внутри сферы, теоретически учитывался при расчете напряженности E_I , поскольку модель Лорентца подразумевает возможность их удаления без изменения общего поляризованного состояния образца. Следовательно, приближение Моссотти должно оставаться достаточно эффективным при рассмотрении диэлектриков любой структуры и агрегатного состояния.

Традиционно расширение области применения формулы Клаузиуса-Моссотти связывается с изменением его структуры путем ввода в описание эффективного поля вида (26) субъективных поправок S или γ [4], значения которых должны характеризовать величину напряженности E_2 для конкретного материала:

$$E = \frac{P}{(\varepsilon - 1)\varepsilon_0} + \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} + S\right)P;$$

$$E = \frac{P}{(\varepsilon - 1)\varepsilon_0} + \frac{1}{3\varepsilon_0}\gamma P.$$
(29)

Основным недостатком подобного подхода являются неоднозначность и проблематичность определения численных значений требуемых поправок. Однако, принимая во внимание достаточную научную обоснованность общих предпосылок вывода уравнения Клаузиуса-Моссотти, оно, несмотря на все свои недостатки, как правило, используется в качестве базовой модели, применяемой для вычисления диэлектрических и поляризационных характеристик большинства конденсированных материалов.

1.4.2 Теоретические модели Онзагера и Кирквуда

В поисках удовлетворительного описания поведения полярных веществ П.Дебаем была разработана так называемая «новая» теория, в которой дополнительно к полю Максвелла - Лорентца вводится добавочное поле, создаваемое соседними молекулами, все направления которого в отсутствие внешнего поля E равновероятны и определяются, соответственно, ориентацией соседних молекул. Однако теория Дебая не дала желаемого результата, так как в ней не удалось совместить действительный механизм теплового движения молекул с наблюдаемым в эксперименте поворотным механизмом поляризации ланжевенковского типа.

Существенное исправление в теорию П. Дебая внес Л. Онзагер, модельная теория которого становится важным этапом в становлении теории поляризации [4] и исходит из допущения, что поле, в котором находится молекула диэлектрика, можно представить в виде суммы двух слагаемых - поля полости и реактивного поля.

В свою очередь, каждая молекула полярной жидкости может быть представлена полый сферой радиуса l , в центре которой размещается точечный диполь с индуцированным электрическим моментом, складывающимся из собственного дипольного момента полярной молекулы μ_0 и момента, обусловленного ее поляризацией смещения:

$$\mu = \mu_0 + a_D F, \quad (30)$$

где a_D - суммарная деформационная поляризуемость молекулы;

$F=G+R$ - локальное поле, состоящее из поля сферической полости в присутствии внешнего поля E и поля реакции среды, проявляющегося в ее поляризации электрическим диполем молекулы.

При этом полая сфера с точечным диполем в центре находится в непрерывной макроскопической среде, обладающей конкретной диэлектрической проницаемостью ε (Рисунок 10).

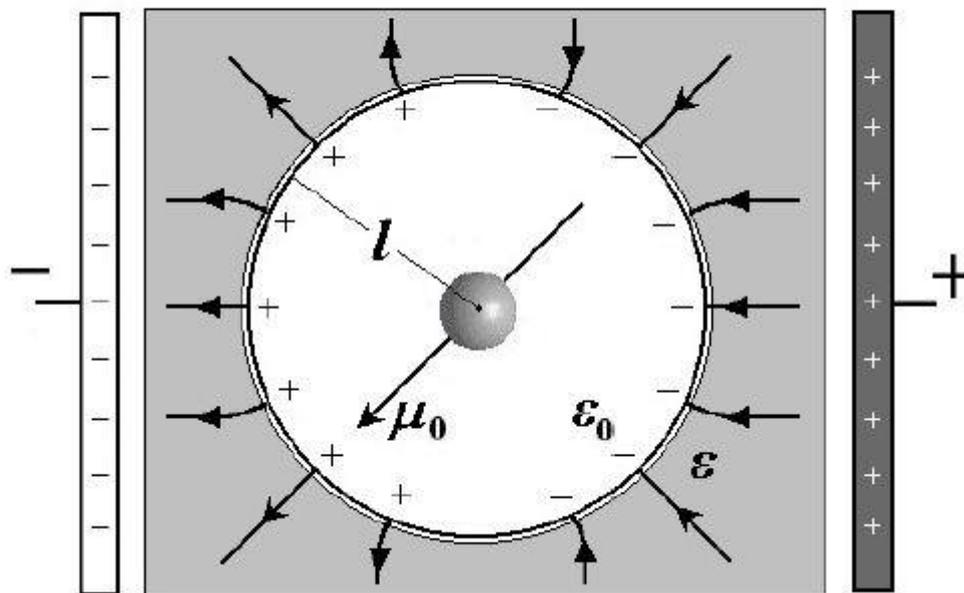


Рисунок 10 – Модель полярной молекулы в теории Онзагера

Следует отметить, что под реактивным полем понимается результат действия молекулы на саму себя через посредство окружающей среды. При этом для расчета его величины, применяется решение уравнения Лапласа для потенциала

диполя с моментом μ , которое использует граничные условия, учитывающие изменение составляющей напряженности поля, нормальной к поверхности полого шара радиусом l , при переходе через нее в ε раз. В результате напряженность реактивной части эффективного поля оказывается равной (31). При этом считается, что, поскольку вектор R совпадает по направлению с вектором собственного электрического момента молекулы, реактивное поле не может вызвать ее вращение, однако увеличивает результирующий дипольный момент.

$$R = \frac{2(\varepsilon - 1) \mu}{2\varepsilon + 1 l^3}. \quad (31)$$

В свою очередь напряженность поля, создаваемого моделируемой сферической полостью, отличается от величины среднего макроскопического поля вследствие искажения, вносимого ею в картину общего поляризованного состояния образца.

Вычисление G проводится аналогично расчетам реактивного поля, с учетом того, что вдали от полости эффективное поле не искажено. Определенное на основании подобной методики значение оказывается равным:

$$G = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon + 1} E. \quad (32)$$

Таким образом, в рамках теории Онзагера, величина напряженности электрического поля, эффективно действующего в полярных жидкостях, зависит от целого ряда факторов - реальной диэлектрической проницаемости рассматриваемой среды, геометрических размеров ее молекул, а также параметров их упругих видов поляризации:

$$F = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon + 1} E + \frac{2(\varepsilon - 1) \mu}{2\varepsilon + 1 l^3}. \quad (33)$$

После некоторых преобразований получим уравнения Онзагера [39], связывающие μ и a с ε и N , в виде (34).

$$\frac{(\varepsilon - \varepsilon_\infty)(2\varepsilon + \varepsilon_\infty)}{\varepsilon(\varepsilon_\infty + 2)^2} = \frac{N}{3\varepsilon_0} \frac{\mu_0^2}{l^3};$$

$$\frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty + 2} = \frac{Na}{3\varepsilon_0}.$$
(34)

Необходимо отметить, что согласно электромагнитной теории Максвелла, показатель преломления среды n связан с ее диэлектрической проницаемостью на предельно высоких частотах ε_∞ соотношением $\varepsilon = \varepsilon_\infty = n^2$.

Первое уравнение из (34) упрощается в двух предельных случаях:

во-первых, для значений $\varepsilon \gg \varepsilon_\infty$, характерных для сильно полярных жидкостей:

$$\varepsilon \cong \frac{N}{2\varepsilon_0} \frac{\mu_0^2(\varepsilon_\infty + 2)^2}{9kT},$$
(35)

во-вторых, для слабо полярных жидкостей, т.е. при $\varepsilon - \varepsilon_\infty \ll \varepsilon_\infty$:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} - \frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty + 2} \cong N \frac{\varepsilon(\varepsilon_\infty + 2)}{(2\varepsilon + \varepsilon_\infty)(\varepsilon + 2)} \frac{\mu_0^2}{3\varepsilon_0 kT}.$$
(36)

Необходимо отметить, что модельная теория Л. Онзагера имеет ряд недостатков.

Во-первых, используется искусственная модель молекулы, согласно которой полярная молекула является пустой сферической полостью с точечным диполем в центре. В действительности же расположение зарядов внутри полярной молекулы имеет весьма сложный характер.

Во-вторых, совокупность молекул, окружающих данную молекулу, принимается за сплошную среду, которая повсюду имеет макроскопическую диэлектрическую проницаемость и простирается вплоть до данной молекулы, в то время как в действительности вблизи рассматриваемой молекулы окружающие ее молекулы не могут восприниматься как сплошная среда.

В-третьих, связь данной молекулы с ее окружением учитывается путем вычисления реактивного поля, направление которого совпадает с направлением оси диполя. Естественнее было бы предположить, что ориентация данной молекулы связана с ориентацией ее соседей (и всех молекул диэлектрика) и, в свою очередь, зависит от расположения других молекул.

В-четвертых, теория Онзагера для сильно полярных жидкостей дает заниженные значения, например, для воды при использовании формулы (35) величина диэлектрической проницаемости оказывается равной $\varepsilon = 31$ [39], что в разы меньше действительности.

Модельная теория Л. Онзагера, косвенно учитывающая взаимодействие каждой молекулы как с внешним полем, так и с полем, создаваемым всеми остальными молекулами окружающей среды, была усовершенствована Дж. Кирквудом, который ввел вместо онзагеровской одномолекулярной сферы сферическую область с достаточно большим радиусом по сравнению с размерами молекул [4]. Согласно данной теории, объектом исследования выступает сферический образец A полярного диэлектрика, при этом i -я из полярных молекул с моментом μ_i индуцирует в A дипольный момент M_i , для вычисления которого внутри шара A мысленно выделяется сфера B с центром, где находится молекула i (Рисунок 11).

Радиус сферы B выбирается большим по сравнению с размерами молекулы. Это позволяет считать среду за пределами B непрерывной и обладающей макроскопической диэлектрической проницаемостью ε .

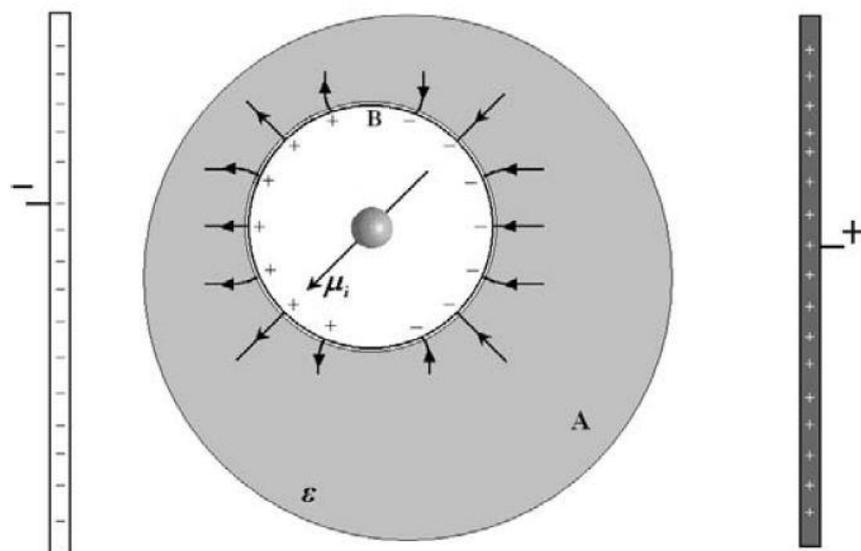


Рисунок 11 – Модель Кирквуда

Момент μ_i , который можно выразить через момент области B , находится решением электростатической задачи в виде:

$$\mu_i = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon + 1} \frac{3}{\varepsilon + 2} M_i. \quad (37)$$

Таким образом, замена сферы Онзагера, заключающей одну молекулу с дипольным моментом μ_i сферической областью с моментом M_i устраняет противоречие, связанное с предположением о сферичности молекулы и непрерывности диэлектрика вблизи данной молекулы.

В результате использования предположения Кирквуда, что локальное поле, действующее на молекулу, равно полю полости Онзагера, а также с учетом расчета среднего значения $\bar{\mu}$ электрического момента области B в направлении дипольного момента молекул, находящихся в центре этой области, диэлектрическую проницаемость полярной жидкости оказывается возможным рассчитать на основании формулы (38), которая при больших ε принимает более простой вид (39).

$$\frac{(\varepsilon - 1)(2\varepsilon + 1)}{9\varepsilon_0} = \frac{N}{3\varepsilon_0} \left(a + \frac{\mu^2 g_k}{3kT} \right); \quad (38)$$

$$\varepsilon - 1 \approx \frac{3N}{2\varepsilon_0} \left(a + \frac{\mu^2 g_k}{3kT} \right), \quad (39)$$

где g_k - корреляционный фактор Кирквуда.

Применение формулы (39) для определения диэлектрической проницаемости воды при температуре 25°C с использованием рассчитанного Дж. Кирквудом значения $g_k = 2.64$ приводит к результату $\varepsilon = 67$, а при температуре 83°C вычисленное значение ε оказывается равным 91, что также расходится с экспериментальным значением [39].

Стоит отметить, что формула (38), а следовательно, и (39) иллюстрируют принципиальную связь диэлектрической проницаемости со структурой диэлектрика.

При замене произведения N_a , входящего в состав (39), описанным выше параметром A оказывается возможным представить данную формулу в виде функциональной зависимости (40), анализ свойств которой показывает, что она является непрерывно возрастающей и положительной при любых значениях аргумента A (Рисунок 12).

$$\varepsilon \approx 1 + \frac{3A}{2\varepsilon_0} + \frac{3N}{2\varepsilon_0} \frac{\mu^2 g_k}{3kT}. \quad (40)$$

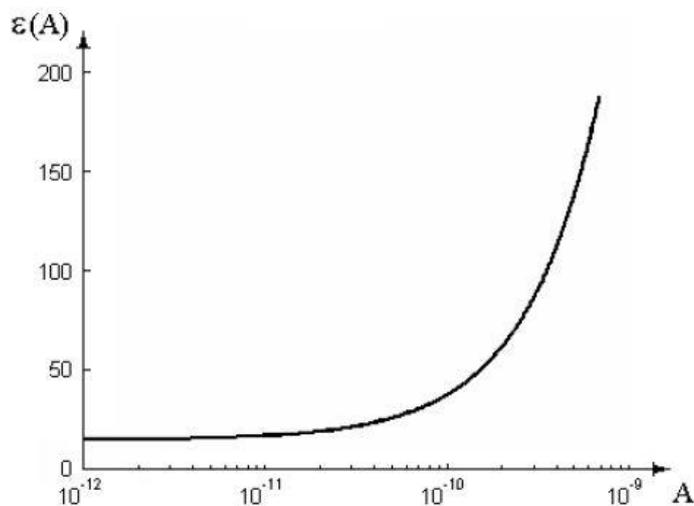


Рисунок 12 – График функциональной зависимости $\varepsilon(A)$ вида (40)

На основании вышеизложенного становится очевидным, что теории

Кирквуда также присущ ряд недостатков.

Во-первых, невозможность посчитать диэлектрическую проницаемость по известным для полярной жидкости константам.

Во-вторых, противоречие, связанное с подменой дискретной структуры вещества сплошной непрерывной средой.

В-третьих, рассмотрение соединения исследуемой молекулы с соседними в качестве квазиупругой структуры, что не является верным, поскольку молекула вращается, оставаясь жестко связанной с другими молекулами.

1.5 Кибернетическая модель диэлектрической проницаемости

Другой подход к описанию поляризационных процессов, лишенный недостатка уравнения Клаузиуса-Моссотти, основан на использовании причинно-следственных связей в сочетании с классической моделью Лорентца, сущность которого заключается в описании физических объектов с явным выделением входов и выходов исследуемых систем.

С позиций классической теории поляризации, индукция дипольного момента отдельной частицы, вызванная действием переменного электрического поля с малой амплитудой, описывается уравнением вынужденных гармонических колебаний с трением [47-48]:

$$\frac{d^2 \mu_l(t)}{dt^2} + 2b_l \frac{d\mu_l(t)}{dt} + \omega_{0l}^2 \mu_l(t) = \frac{q_l^2}{m_l} E(t), \quad (41)$$

где l - индекс конкретной частицы;

$\mu_l(t)$ - индуцированный дипольный момент;

b_l и ω_{0l} - коэффициент затухания и частота его собственных колебаний;

q_l и m_l - электрический заряд и масса частицы;

$E(t)$ - функция напряженности эффективного поля.

Решение подобных уравнений методом комплексных амплитуд позволяет получить комплексное выражение поляризуемости в виде (42)

$$a(j\omega) = \frac{\mu_l(j\omega)}{E(j\omega)} = \frac{q_l^2 / m_l}{\omega_{0l}^2 - \omega^2 + j2b_l\omega}. \quad (42)$$

Таким образом, при переходе от статических формул Борна (22) и Клаузиуса-Моссотти (27) к уравнениям, позволяющим рассчитывать частотные спектры диэлектриков, осуществляется простая замена скалярных значений суммируемых поляризуемостей a_i на их комплексные выражения, (43) и (44) соответственно.

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L a_i(j\omega) N_i. \quad (43)$$

$$\frac{\varepsilon(j\omega) - 1}{\varepsilon(j\omega) + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L a_i(j\omega) N_i. \quad (44)$$

Для устранения несовместимости статического отображения вынуждающего воздействия для системы в целом и выражений вынужденных колебаний ее элементов в выражении напряженности локального поля $E(t)$ вида (24) было заменено описание среднего макроскопического поля на временную зависимость, выраженную на базе его определения (19).

В таком случае совокупность всех дипольных моментов, обусловленных электрическими смещениями микрочастиц диэлектрика, учитывая выражение $E_1(t)$ типа (25) и приближение $E_2(t) = 0$, можно представить в виде выражения (45).

$$\frac{d^2 \mu_l(t)}{dt^2} + 2b_l \frac{d\mu_l(t)}{dt} + \omega_{0l}^2 \mu_l(t) = \frac{q_l^2}{m_l} E(t), l = 1, L; \quad (45)$$

$$E(t) = E_0(t) - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L \mu_i(t) N_i.$$

Полученное уравнение с точки зрения технической кибернетики является моделью некоторой замкнутой линейной системы управления с отрицательными обратными связями. Следовательно, для его дальнейшего исследования целесообразно использовать аппарат передаточных функций и их частотных аналогов, а

также метод структурных схем и их преобразований [15, 49-51].

Таким образом, выполнив для (45) прямое интегральное преобразование Лапласа, получим:

$$\begin{aligned} (s^2 + 2b_l s + \omega_{0l}^2) \mu_l(s) &= \frac{q_l^2}{m_l} E(s), l = 1, L; \\ E(s) &= E_0(s) - \frac{2}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^L \mu_i(s) N_i, \end{aligned} \quad (46)$$

где s - комплексная переменная;

$\mu_l(s), E(s)$ и $E_0(s)$ - изображения по Лапласу функций $\mu_l(t), E(t)$ и $E_0(t)$ соответственно.

На основании данного эквивалентного отображения электрической поляризации диэлектрика становится возможным построить структурную схему рассматриваемого процесса, представленную на рисунке 13, а также записать уравнения кибернетической связи типа выход - вход, как для выражения поляризации каждой частицы, рассматриваемой в качестве элемента исследуемой системы управления в виде (47), так и для описания изменения состояния образца в целом в виде (48).

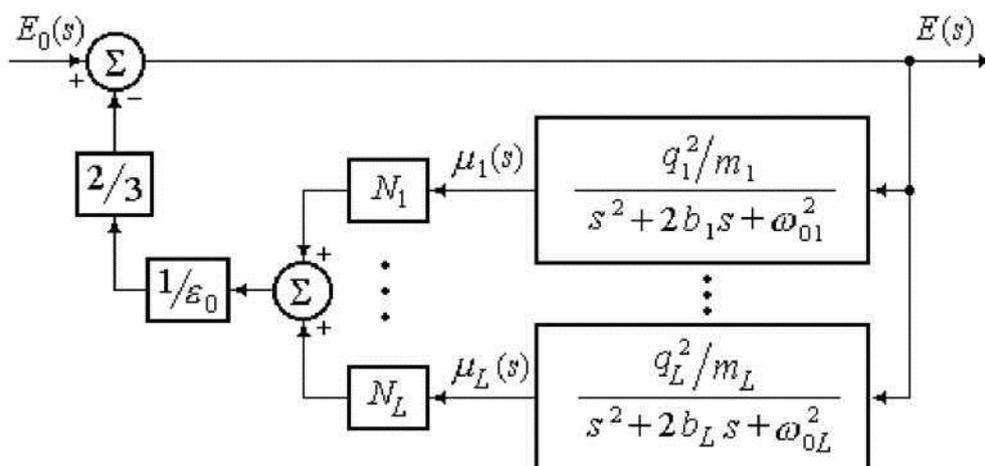


Рисунок 13 – Структурная схема процесса поляризации диэлектрика

$$\mu_l(s) = W_l(s)E(s), l = 1, L;$$

$$W_l(s) = \frac{q_l^2 / m_l}{s^2 + 2b_l s + \omega_{0l}^2}, \quad (47)$$

$$E(s) = W_\varepsilon(s)E_0(s);$$

$$W_\varepsilon(s) = \frac{1}{1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L W_i(s)N_i}, \quad (48)$$

где $W_l(s)$ - передаточные функции процессов поляризации частиц;

$W_\varepsilon(s)$ - передаточная функция по рассогласованию напряженностей внешнего и эффективного полей.

Выполнив в комплексных передаточных функциях (47) и (48) замену $s \rightarrow j\omega$, оказывается возможным перейти к их частотным аналогам:

$$W_l(j\omega) = \frac{q_l^2 / m_l}{\omega_{0l}^2 - \omega^2 + j2b_l\omega}, l = 1, L; \quad (49)$$

$$W_\varepsilon(j\omega) = \frac{1}{1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L W_i(j\omega)N_i}. \quad (50)$$

Анализ полученных выражений показал, что передаточные функции (49) являются физическими аналогами комплексных поляризуемостей частиц (42); при этом функция, обратная зависимости (50), является комплексной диэлектрической проницаемостью вещества, выражающей отношение $E_0(j\omega)/E(j\omega)$.

Таким образом, учитывая обоснованность переходов от $W_l(j\omega)$ к $a_l(j\omega)$ и от $W_\varepsilon(j\omega)$ к $1/\varepsilon(j\omega)$, оказывается возможным получить уравнение (51) которое, в свою очередь, может быть представлено через вещественную и мнимую частотные характеристики, соответственно $\varepsilon_{Re}(\omega)$ и $\varepsilon_{Im}(\omega)$, в виде (52).

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L a_i(j\omega)N_i. \quad (51)$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) &= 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L a_{\text{Re}i}(\omega) N_i; \\ \varepsilon_{\text{Im}}(\omega) &= -\frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L a_{\text{Im}i}(\omega) N_i.\end{aligned}\tag{52}$$

Анализ функции (53), полученной в результате замены части правого слагаемого (51) введенным выше параметром A , показывает, что она является возрастающей и положительной при любых значениях своего аргумента (Рисунок 14). Таким образом, практическое применение рассматриваемых математических методов, характерных для технической кибернетики, позволило исключить методологический разрыв в общепринятых методиках формирования выражений $a(j\omega)$ и $\varepsilon(j\omega)$, о котором упоминалось выше.

$$\varepsilon(A) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} A.\tag{53}$$

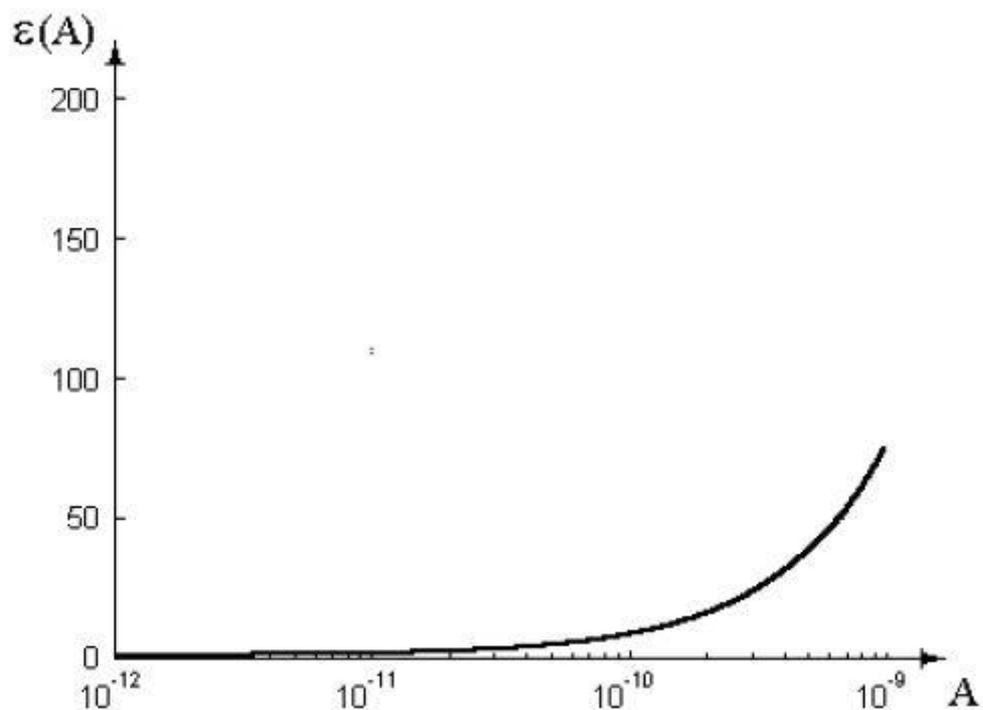


Рисунок 14 – График функциональной зависимости $\varepsilon(A)$ вида (53)

Для выявления действительной причины катастрофы Моссотти, предварительно представив комплексный аналог формулы (27) в изображениях Лапласа,

получим передаточную функцию по рассогласованию вида (54), на основании которой, используя метод структурных схем, оказывается возможным получить структурную схему процесса поляризации диэлектрика в рамках традиционной модели локального поля, изображенную на рисунке 15.

$$W_\varepsilon(s) = \frac{E(s)}{E_0(s)} = \frac{1}{1 + \frac{\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L W_i(s) N_i}{1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L W_i(s) N_i}}; \quad (54)$$

$$W_l(s) = \frac{\mu_l(s)}{E(s)} = \frac{q_l^2 / m_l}{s^2 + 2b_l s + \omega_{0l}^2}, l = 1, L.$$

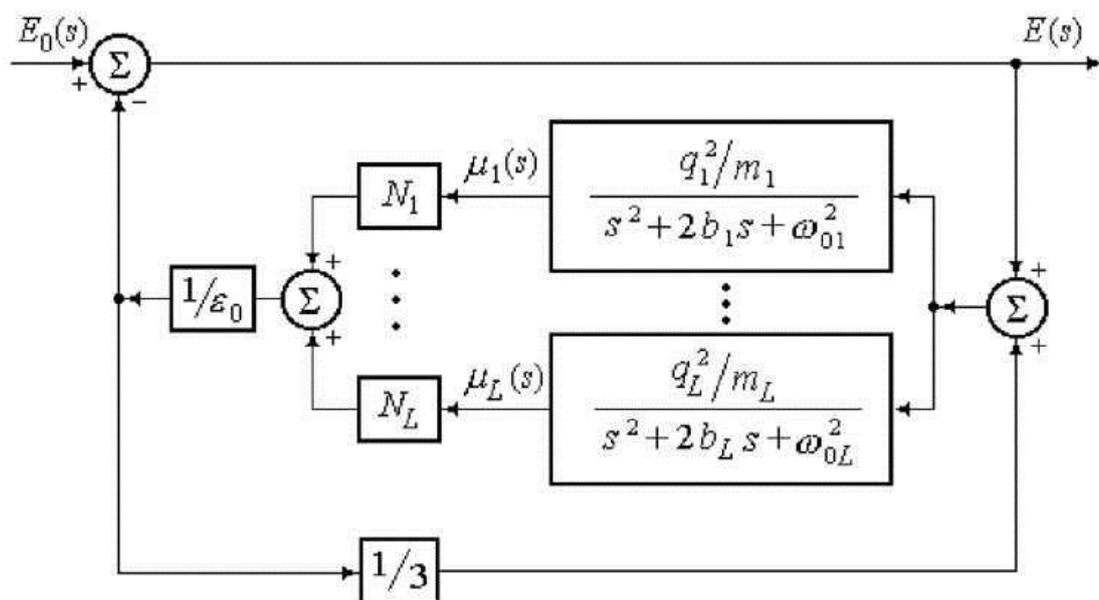


Рисунок 15 – Структурная схема процесса общей поляризации, соответствующая уравнению Клаузиуса-Моссотти

Анализ полученной схемы показал, что в соответствии с уравнением Клаузиуса-Моссотти вклад электрического поля, обусловленного поляризацией поверхности сферы Лорентца со стороны макроскопической части образца, оказывается связанным с его поляризованностью положительной внутренней обратной связью. Именно это обстоятельство и приводит к появлению разрыва второго рода для функции вида (28).

Таким образом, становится очевидным, что истинная причина « 4π ката-

строфы» фактически связана с искажением причинно-следственных отношений [64], допущенных при выводе уравнения (27).

Данный факт подтверждает эффективность применения кибернетической модели (51), исключающей проявление указанной выше катастрофы, несмотря на использование приближения Моссотти в схеме формирования локального поля Лорентца, а также предопределяет необходимость ее использования в качестве базовой при имитационном моделировании частотных характеристик материалов, поскольку она является наиболее универсальной, обладая совокупностью положительных качеств, присущих обеим классическим формулам.

1.6 Кибернетическая модель релаксационной поляризации

Как известно, релаксационную поляризацию воды характеризуют при помощи колебаний многомолекулярных образований типа $(H_2O)_n$. Данные образования, в свою очередь, имеют замкнутую структуру (кластеры), или же разомкнутую (конгломераты). При этом, с учетом динамичности изменений во взаимном расположении молекул H_2O в жидком состоянии, раскрыть сущность молекулярного состава с помощью методов рентгеноструктурного анализа, оказывается невозможно.

Вышеописанным фактом предопределяется необходимость в использовании иных методов исследования, которые, прежде всего, касаются компьютерного моделирования. Именно данный метод сможет позволить прийти к определенным (модельным) предположениям о характере взаимодействия для исследуемых ассоциатов, основываясь на имеющиеся экспериментальные данные.

Исходя из вышеизложенного, можно говорить о том, что упругие виды поляризации уже имеют довольно эффективные математические описания, которые позволяют добиться максимально возможного совпадения полученных результатов при помощи компьютерного моделирования непрерывного оптического спектра H_2O с результатами физических измерений.

Относительно же процессов релаксационных, возможно, по причине большего затухания гармонических колебаний в области более низких частот, данный моделируемый спектр с качественной точки зрения является недостаточно точ-

НЫМ.

Таким образом, основная задача, которая потребует решения в ходе данного исследования, касается разработки оптимальной и наиболее приемлемой математической модели, которая смогла бы описать анализируемые физические процессы, и определить численные значения для динамических коэффициентов b и ω_0 . Проблемы же определения пространственных параметров конкретного молекулярного ассоциата, в свою очередь, потребуют выстраивания соответствующих визуальных моделей.

1.7 Визуальные модели молекулярных ассоциатов воды

Как уже подчеркивалось выше, характерной особенностью воды являются ее способности к самоорганизации, которая происходит вследствие образования водородных связей. В данном процессе каждая молекула проявляет способность к образованию водородных связей с четырьмя соседними молекулами по причине наличия двух неподеленных электронных пар атомов кислорода и двух атомов водорода.

В этом процессе молекулярные ассоциаты $(H_2O)_n$ могут иметь разную форму: пространственную или двухмерную, представленную кольцевыми структурами, из которых могут образовываться циклические структуры, приводящие к созданию пространственных многогранников.

Важно подчеркнуть, что в настоящее время предлагаются десятки гипотетических моделей водных ассоциатов с целью объяснения аномальных физических свойств для исследуемых диэлектриков. Наиболее популярными из них считаются, во-первых, предложенные К. Джорданом в 1993 г. кластеры воды, которые состоят из шести молекул, обуславливая шестилучевую симметрию для свободно растущих кристаллов, так называемых снежинок. Во-вторых, исходя из предположений С. В. Зенина, вода является совокупностью кластеров, с основой в виде кристаллоподобного «кванта воды», который состоит из 57 молекул, по своей структуре напоминающего тетраэдр, в свою очередь состоящий из четырех додекаэдров.

Исходя из общепринятых стереохимических соображений, с учетом бес-

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		44

спорной фрактальности любого материального объекта, которая объясняется стремлением реальной физической системы к стационарной устойчивости состояния, а также учитывая особенности валентного угла НОН, которые позволяют интерпретировать конфигурацию молекулы воды, как тетраэдрическую модель, приходим к следующему выводу. Он касается возможностей использовать правильные многогранники с осью симметрии пятого порядка (додекаэдр и икосаэдр) в качестве наиболее естественной модели замкнутых многомолекулярных связок, а в качестве представителей разомкнутых структур будем считать тетраэдрические конгломераты.

1.7.1 Тетраэдрический конгломерат (H₂O)₅

Каждая молекула H₂O одновременно может выступать как в виде донора пары водородных связей, так и в качестве акцептора двух таких же связей. С учетом этого, а также на основании факта связанности акцепторных связей и ориентации их донорных аналогов, которые совместно образуют четверку водородных связей, направленную к вершинам правильного тетраэдра, приходим к следующему выводу. Наиболее естественный молекулярный конгломерат H₂O, который является малым клатратом с максимально завершенной, то есть симметричной формой, можно представить в виде тетраэдра, который содержит связанные между собой при помощи водородных связей пять молекул H₂O. (Рисунок 16)

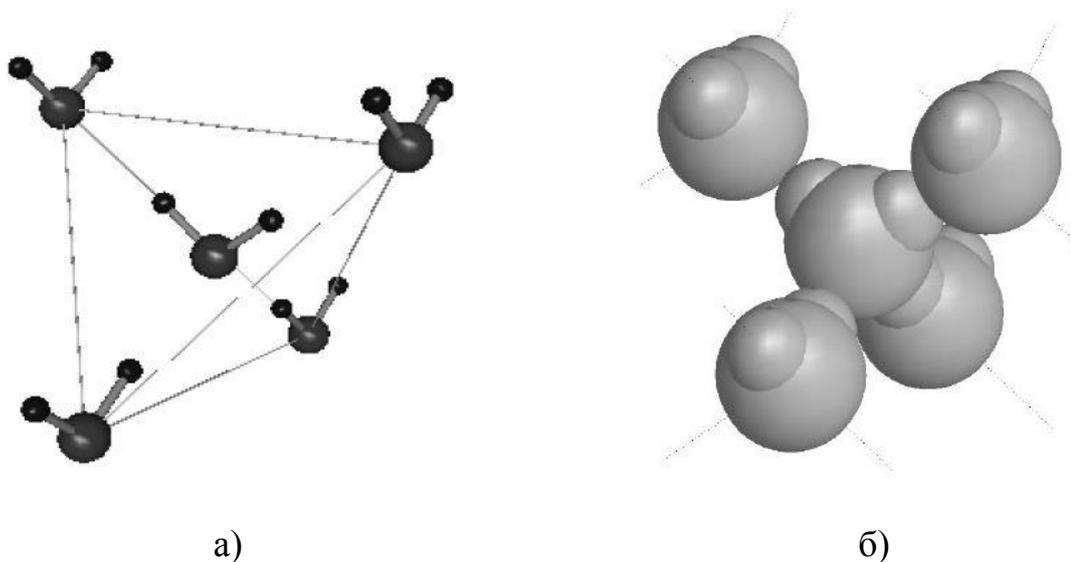


Рисунок 16 – Высокэнергетический пятимолекулярный конгломерат воды:

а) – строение атомного каркаса; б) – электронная конфигурация

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

Возможности для интерпретации рассматриваемой конфигурации $(\text{H}_2\text{O})_5$ в виде гексаэдрической модели оказались наиболее благоприятными для того, чтобы определить направление собственных дипольных моментов каждой из пяти молекул, которые формируют ассоциат, и, как выяснилось, являются со направленными (рисунок 17).

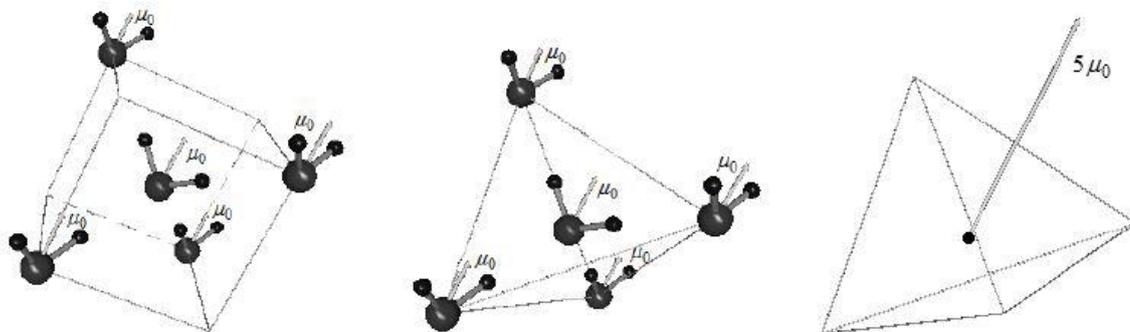


Рисунок 17 – Суммарный дипольный момент конгломерата $(\text{H}_2\text{O})_5$

Становится очевидным факт того, что пятимолекулярный конгломерат обладает наибольшим показателем энергии, поскольку его суммарный дипольный момент достиг максимального уровня:

$$\mu_{\Sigma} = 5\mu_0 \quad (55)$$

где μ_0 – собственный дипольный момент молекулы H_2O .

Таким образом, представление пятимолекулярного конгломерата в качестве его тетраэдрической конструкции позволяет данную задачу по определению осевых моментов его инерции свести к типовым расчетам данных величин относительно тетраэдрического сферического волчка.

В качестве первоначального приближения можно использовать то обстоятельство, что центр массы молекул H_2O совпадают с геометрическим центром атомов кислорода, которые размещены в вершине тетраэдра, а также точке пересечения его высот.

Используя подобную трактовку, для каждой из трех ортогональных осей, которые заданы относительно центральной молекулы, значение I_{Σ} будет равным и может рассчитываться при помощи следующей формулы:

$$I_{\Sigma} = \frac{8}{3}(2m_H + m_O)(R_{OH} + r_{1sH} + r_{3p3})^2 = 801,472 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2. \quad (56)$$

Обратим внимание, что рассчитанный показатель величины I_{Σ} оказался на два порядка выше осевых моментов в инерции изолированной молекулы воды, а это хорошо согласуется с разницей в значениях частот электрического поля, соответствующих пикам полос поглощения, которые реально наблюдаются в областях установления процессов, как релаксационной, так и упругой дипольной поляризации.

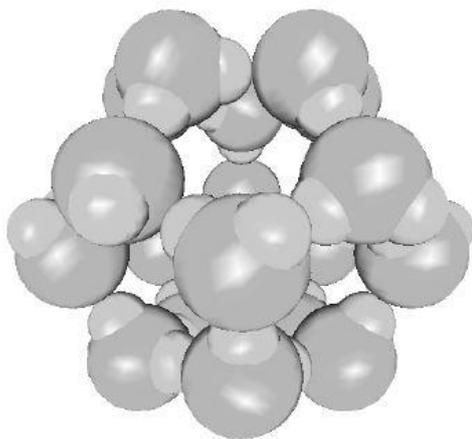
1.7.2 Трехмерные кластеры $(\text{H}_2\text{O})_{20}$ и $(\text{H}_2\text{O})_{12}$

В процессе анализа возможных вариантов конфигураций замкнутых полимолекулярных связок или кластеров, которые можно представить в виде каркасов, образованных при помощи ребер правильных многогранников, и с учетом, бесспорной фрактальности практически любых материальных объектов, которая объясняется стремлением физической системы к стационарному состоянию, минимального искривления водородных связей, которые образуются между молекулами воды, и, наконец, близости значений углов связи в многограннике по отношению к величине валентного угла НОН, можно определить наиболее естественную визуальную модель для гипотетических структур замкнутых молекулярных связок H_2O , в качестве которых и выступают клатраты в форме додекаэдра.

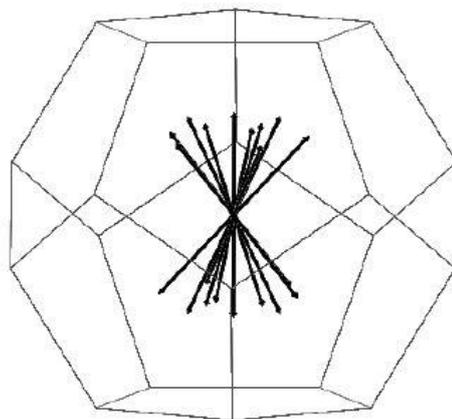
Важно подчеркнуть, что в процессе моделирования этого типа кластеров изначально предполагалось, что общее количество водородных связей, которые образуются между соседними молекулами H_2O в пространственных узлах каркаса и их направления, совпадают с расположением трех ребер, которые сходятся в каждой отдельно взятой вершине данного многогранника.

В процессе анализа возможных разновидностей этого вида кластера позволяет ввести в процесс рассмотрения его две конфигурации представленные на рисунках 18,19. Причем, исходя из позиции обеспечения максимальной анизотропии, второй его тип оказывается наиболее приемлемым (Рисунок 19), так как именно данный тип обладает наибольшей равномерностью в размещении векторов собственных дипольных моментов (Рисунок 19, б).

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		47



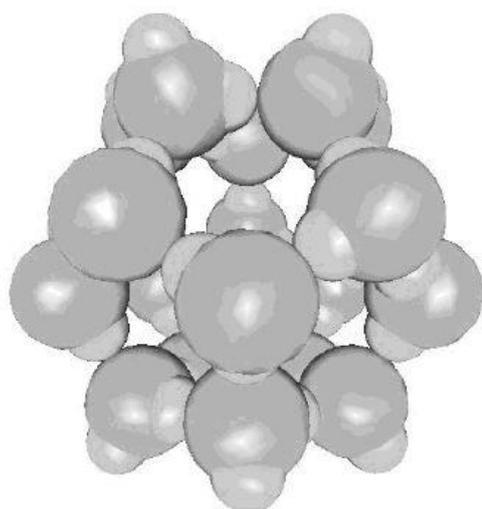
а)



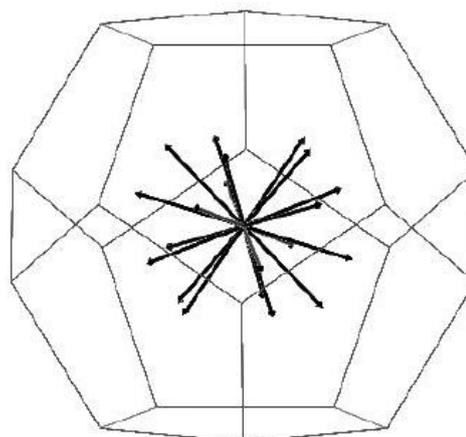
б)

Рисунок 18 – Додекаэдрический кластер воды I типа:

а) – визуализация электронной конфигурации; б) – сумма дипольных моментов



а)



б)

Рисунок 19 – Додекаэдрический кластер воды II типа:

а) – визуализация электронной конфигурации; б) – сумма дипольных моментов

В процессе анализа представленной выше структурной модели предложенной конфигурации молекулярных ассоциатов H_2O , (тетраэдрической и додекаэдрической) приходим к выводу о том, что в их основе находятся правильные многогранники, а в качестве их граней выступают либо правильные треугольники, либо соответственно пентагоны.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

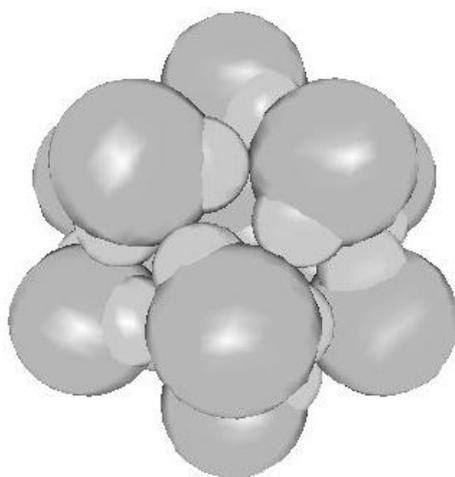
ВКР. 145373.090404.ПЗ

Лист

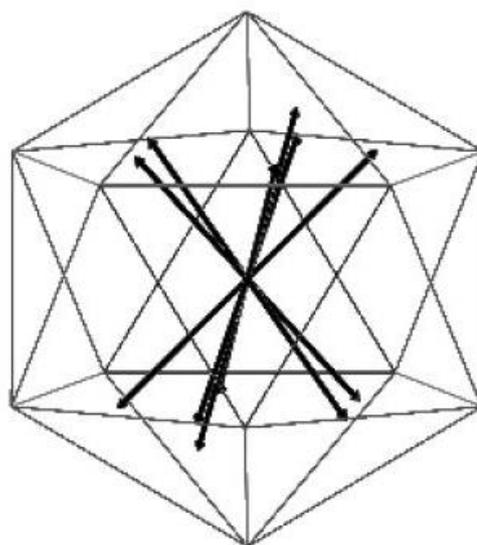
48

Исходя из этого, при прослеживании взаимосвязи визуальных моделей водных ассоциатов с так называемыми платоновыми телами, к которым относятся тетраэдр, додекаэдр, гексаэдр и икосаэдр, оказалось возможно введение в процесс рассмотрения конфигурацию H_2O в виде икосаэдрического кластера. Однако, при его моделировании стоит учитывать тот факт, что водородные связи каждой отдельно взятой молекулы расположены через одно ребро, то есть занятыми являются только лишь 2 из пяти возможных направлений (Рисунок 20).

В ходе визуального анализа полученных изображений можно понять, что двенадцати молекулярные икосаэдрические кластерные образования H_2O оказываются значительно плотнее двадцати молекулярных додекаэдрических кластеров, а это, в свою очередь, должно привести к увеличению физической плотности данной исследуемой жидкости в том случае, когда она состоит только лишь из икосаэдрических молекулярных связок.



а)



б)

Рисунок 20 – Кластер воды в форме икосаэдра:

а) – электронная конфигурация; б) – сумма дипольных моментов

Следующая особенность замкнутых симметричных кластеров, выявленная в ходе компьютерной визуализации для механизма образования многомoleкулярных структур, это нулевой суммарный дипольный момент. Этот факт – следствие симметричного расположения молекул в вершинах многогранников, которые об-

разуют ассоциат для исследуемой формы, причем дипольные моменты каждой из данных молекул будут компенсировать друг друга попарно.

С учетом вышесказанного, можно констатировать факт того, что присутствие в элементарном объеме структурированной воды рассмотренных выше конфигураций водных кластеров $(\text{H}_2\text{O})_{20}$ и $(\text{H}_2\text{O})_{12}$ не оказывает влияния на результирующую поляризуемость, приводя к уменьшению ее диэлектрической проницаемости. С другой стороны, присутствие данных конфигураций влияет на сокращение общего количества свободных молекул либо тех молекул, которые участвуют в образовании ассоциатов иных возможных конфигураций.

1.8 Структурный синтез математической модели РП воды

С учетом объективного наличия отличного от нуля суммарного дипольного момента для тетраэдрического конгломерата $(\text{H}_2\text{O})_5$, которое определяется векторной суммой собственных дипольных моментов его молекул, становится возможно для того, чтобы составить физическую модель вынужденных колебаний молекулярного ассоциата H_2O под воздействием внешнего электрического поля малой амплитуды, использовать приближение для того, чтобы представить его в виде диполя с некоторым дипольным моментом μ_Σ (рисунок 17).

Изначально предполагается факт того, что разбираемый диполь ориентируется в пространстве собственным внутренним полем. Действие со стороны внешнего электрического поля, которое направлено под углом α по отношению к центральной оси диполя, способно вызвать отклонение на незначительный угол ϕ от его исходного положения. В случае отклонения диполя от состояния равновесия возникает возвращающая квазиупругая сила $F_{упр}$, которая стремится вернуть смещенный диполь в его исходное положение. Также на диполь воздействует сила $F_{сопр}$, при чем ее физический смысл является аналогичным воздействию силы внутреннего радиационного трения, поскольку обусловлен взаимодействием электромагнитного поля соседних молекулярных конгломератов H_2O (Рисунок 21). Учитывая проекции сил, которые влияют на диполь, можно сформировать следующее уравнение баланса:

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		50

$$ma = F \sin(\alpha - \varphi) - F_{\text{corp}} - F_{\text{упр}}, \quad (57)$$

где a – ускорение, приобретаемое диполем под действием внешнего электрического поля;

F – сила, действующая со стороны поля.

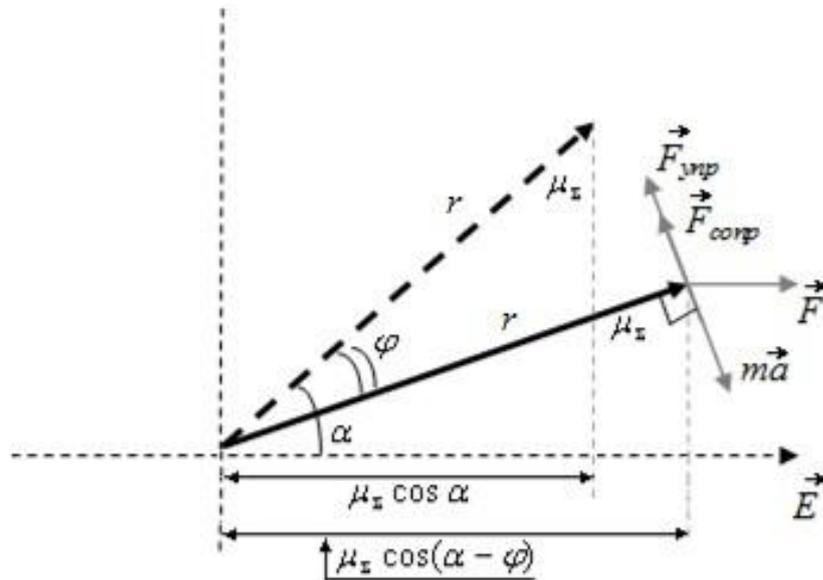


Рисунок 21. Схема смещения диполя под действием электрического поля

Предполагая, что $\sin(\alpha - \varphi) \approx \sin(\alpha)$, из-за малости угла φ , с учетом физической сущности каждой из сил данного уравнения (57), далее перейдем от линейного к угловому смещению:

$$mr \frac{d^2 \varphi}{dt^2} + \frac{mr}{\tau} \frac{d\varphi}{dt} + kr\varphi = qE \sin \alpha, \quad (58)$$

где k – коэффициент упругости;

τ – время релаксации;

E – функция напряженности эффективного поля.

Разделив каждый член данного уравнения (58) на произведение mr , учитывая также, что дипольный момент по определению является произведением величины зарядов на расстояние между ними, произведение же массы на квадрат расстояния является осевым моментом инерции, получаем соответствующее уравнение (59).

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\varphi}{dt} + \frac{kr}{mr} \varphi = \frac{q}{mr} E \sin a,$$

$$qr = \mu_{\Sigma}, mr^2 = I_{\Sigma} \tag{59}$$

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\varphi}{dt} + \frac{k}{m} \varphi = \frac{\mu_{\Sigma}}{I_{\Sigma}} E \sin a,$$

где μ_{Σ} – суммарный дипольный момент водного клатрата;

I_{Σ} – его суммарный момент инерции.

С учетом замены (60), – где обратная величина времени релаксации является удвоенным коэффициентом затухания, отношение же коэффициента упругости к массе - это квадрат частоты собственных колебаний, приходим к возможности представить итоговое уравнение (59) в следующем виде:

$$\frac{1}{\tau} = 2b, \frac{k}{m} = \omega_0^2, \tag{60}$$

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + 2b \frac{d\varphi}{dt} + \omega_0^2 \varphi = \frac{\mu_{\Sigma}}{I_{\Sigma}} E \sin a. \tag{61}$$

В процессе анализа рисунка 21, можно определить, что поворот диполя на угол φ по направлению к полю E является эквивалентным возникновению дипольного момента μ , его составляющая будет равна:

$$\mu = \mu_{\Sigma} \cos(a - \varphi) - \mu_{\Sigma} \cos a. \tag{62}$$

Применение формул косинуса двойного угла и косинуса разности углов, а также приведение подобных далее позволяет перейти к следующему его виду уравнения:

$$\begin{aligned}
\mu &= \mu_{\Sigma} \cos a \cos \varphi + \mu_{\Sigma} \sin a \sin \varphi - \mu_{\Sigma} \cos a = \\
&\mu_{\Sigma} \cos a (\cos \varphi - 1) + \mu_{\Sigma} \sin a \sin \varphi = \\
&\mu_{\Sigma} \cos a (1 - 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 1) + \mu_{\Sigma} \sin a \sin \varphi = \\
&\mu_{\Sigma} \sin a \sin \varphi - 2 \mu_{\Sigma} \cos a \sin^2 \frac{\varphi}{2}.
\end{aligned} \tag{63}$$

В данном случае, как уже подчеркивалось выше, по причине малости угла φ 2-м членом правой части уравнения (63) в сравнении с 1-м членом конечного выражения можно пренебречь, также оказывается допустимым использовать приближение $\sin \varphi \approx \varphi$. Исходя из этого, следует:

$$\mu = \mu_{\Sigma} \varphi \sin a. \tag{64}$$

Таким образом, в процессе перехода от угловых смещений к индуцированным дипольным моментам уравнения (61) учитывая (64) считаем возможным записать в следующем виде:

$$\frac{d^2 \mu}{dt^2} + 2b \frac{d\mu}{dt} + \omega_0^2 \mu = \frac{\mu_{\Sigma}^2}{I_{\Sigma}} E \sin^2 a. \tag{65}$$

С учетом изначальной хаотичности в расположении молекулярных ассоциатов H_2O в замкнутом объеме, среднее значение для величины $\sin^2 a$ можно найти при помощи интегрирования значений угла между направлением результирующего дипольного момента конгломерата $(\text{H}_2\text{O})_5$ с силовыми линиями приложенных электромагнитных полей в диапазоне изменения от 0 до 2π в следующем виде:

$$\overline{\sin^2 a} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 a da = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos 2a}{2} \right) da = \frac{1}{4\pi} \left(a \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \cos 2a da \right) = \frac{1}{2} \tag{66}$$

В результате этого итоговое уравнение релаксационной поляризации приобретает следующий вид:

$$\frac{d^2 \mu(t)}{dt^2} + 2b \frac{d\mu(t)}{dt} + \omega_0^2 \mu(t) = \frac{\mu_\Sigma^2}{I_\Sigma} E \sin^2 a. \quad (67)$$

Исходя из вышеизложенного, приходим к выводу о том, что в рамках гипотезы о возможностях адекватного представления процесса релаксационной поляризации H_2O , который вызван воздействием со стороны электромагнитного поля малой амплитуды, каждая их разновидность может быть представлена с помощью математического описания характеристик для соответствующей линейной динамической системы управления, в виде уравнения (67)

1.9 Параметрический синтез математической модели релаксационной поляризации воды

Следует отметить, что в настоящее время оптические характеристики диэлектрических материалов являются физически доступными для проведения практических измерений. При этом методология расшифровки заложенных в них данных о собственных и динамических параметрах отдельно взятых частиц диэлектрика требует обработки массивов экспериментальных значений на базе использования соответствующих теоретических моделей как отдельных поляризационных процессов, так и математического описания общей картины их взаимодействия.

Анализ экспериментальных оптических спектров воды в области достаточно низких частот позволяет говорить о наличии в ее элементарном объеме групповой однородности соединений $(H_2O)_n$, участвующих в релаксационной поляризации. С теоретической точки зрения, данное обстоятельство может быть обосновано наличием единственной полосы поглощения, отвечающей вынужденным электромагнитным колебаниям клатратов одной структурной разновидности, обладающих одинаковым моментом инерции. При этом, учитывая полученные выше результаты, становится очевидным, что именно пятимолекулярные тетраэдрические конгломераты, объективно обладающие собственным дипольным моментом, вносят результирующий вклад в релаксационную поляризацию воды, поскольку суммарный дипольный момент ее возможных кластерных образований оказывается

равным нулю, что, в свою очередь, говорит о том, что водные кластеры $(\text{H}_2\text{O})_{12}$ и $(\text{H}_2\text{O})_{20}$ не подвержены действию внешнего электромагнитного поля.

1.10 Метод эмпирического расчета динамических параметров

Очевидно, что основными характеристиками, описывающими взаимодействие вещества с переменным электромагнитным полем являются частотные зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon(j\omega)$ образца и его оптического показателя преломления $n(j\omega)$, которые принимают вид комплексных функций общего вида (8).

При этом существование зависимостей (15) и (18), описывающих оптические характеристики воды, позволяет на основе явно выделенного максимума экспериментального показателя поглощения воды в области релаксационной поляризации, а также точки перегиба на графике ее оптического показателя преломления использовать для определения численных величин ее динамических параметров методы математического анализа условий существования экстремумов теоретических функций.

Однако задача поиска максимума теоретической функции $\chi(\omega)$, описываемой уравнением (18), направленная на определение численного значения частоты ω , соответствующей экстремальному значению, оказалась безуспешной, поскольку в результате нахождения первой и второй производной данной функции, представленной в виде (68), были получены линейные алгебраические уравнения высоких порядков, не имеющие аналитического решения.

Первая производная представлена формулой (68)

$$\frac{d\chi(\omega)}{d\omega} = \frac{2\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)(\varepsilon_{\text{Re}}(\omega))' + 2\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)(\varepsilon_{\text{Im}}(\omega))' - (\varepsilon_{\text{Re}}(\omega))' 2\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)}}{2\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} 2\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}} \quad (68)$$

Вторая производная представлена формулой (69)

$$\frac{d^2 n(\omega)}{d\omega^2} = \frac{\left(\frac{(\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega))' + (\varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega))'}{2\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)}} + (\varepsilon_{\text{Re}}(\omega))' \right) (2\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)})}{((2\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)})^2} - \frac{\left(\frac{(\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega))' + (\varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega))'}{2\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)}} + (\varepsilon_{\text{Re}}(\omega))' \right) (2\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)})'}{((2\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)})^2} \quad (69)$$

Таким образом, для определения численных значений динамических параметров комплексных поляризуемостей частиц, входящих в состав рассматриваемого диэлектрика, было принято решение о переходе от практического рассмотрения экспериментальных оптических спектров к анализу экстремумов более простых теоретических зависимостей.

В качестве подобных величин могут быть рассмотрены вещественная и мнимая частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости образца, массивы контрольных данных которых однозначно определяются на базе экспериментальных измерений частотных зависимостей оптических показателей преломления $n(\omega)$ и поглощения $\chi(\omega)$ с помощью соотношений (10).

При этом моделирование исходных оптических и вытекающего на их основе согласно (10) контрольного диэлектрического спектров, представленных на рисунке 22, подтвердило необходимость анализа экстремумов только для расчетного экспериментального массива частотной зависимости мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)$, обладающего собственным экстремумом в точке $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega_{\text{рез}})$.

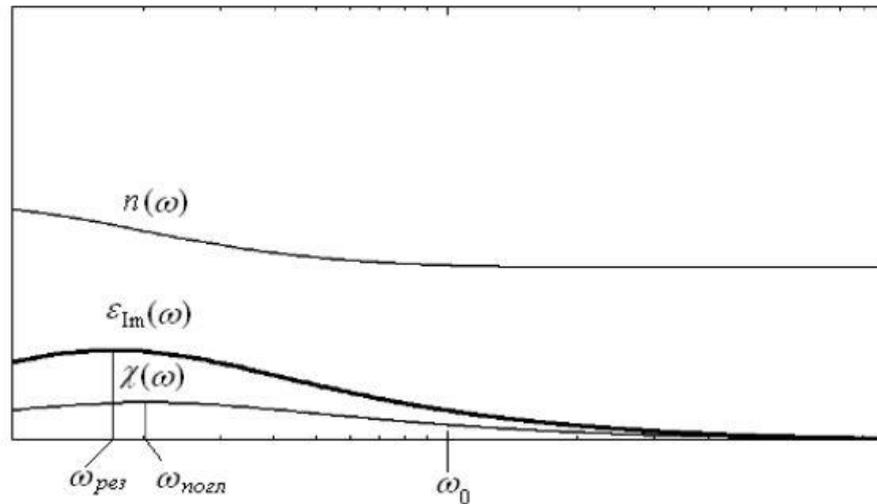


Рисунок 22. Взаимосвязь моделируемых контрольных спектров воды в области релаксационных колебаний

Для выражения динамических параметров ω_0 и b поляризационного процесса рассматриваемой разновидности через частоту его резонанса $\omega_{рез}$, численное значение которой определяются на базе обработки контрольного массива функции, определим первую производную для ее модели в виде:

$$\frac{d\varepsilon_{Im}(\omega)}{d\omega} = \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{\mu_{\Sigma}^2}{I_{\Sigma}} N2b \frac{\omega_0^4 + 2\omega_0^2\omega^2 - 3\omega^4 - 4\omega^2b^2}{((\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\omega b)^2)^2}. \quad (70)$$

Очевидно, что выполнение условия существования экстремума для мнимой характеристики комплексной диэлектрической проницаемости в виде (71) приведет к формированию системы (72):

$$\frac{d\varepsilon_{Im}(\omega)}{d\omega} = 0, \quad (71)$$

$$\omega_0^4 + 2\omega_0^2\omega^2 - 3\omega^4 - 4\omega^2b^2 = 0, \quad (72)$$

$$((\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\omega b)^2)^2 \neq 0.$$

При этом, если в биквадратное уравнение из (72) вместо абстрактного значения ω подставить ее физически фиксируемую величину $\omega_{рез}$, будет сформировано основополагающее уравнение (73), решение которого позволит получить ис-

комую величину.

$$\omega_0^4 + 2\omega_0^2\omega_{рез}^2 - 3\omega_{рез}^4 - 4\omega_{рез}^2 b^2 = 0. \quad (73)$$

Поскольку очевидно, что аналитическое выражение искомым переменных ω_0 и b на базе представленного соотношения является невозможным, для определения их численных значений предлагается первоначально получить решение уравнения (73) относительно переменной b в виде:

$$b = \pm \sqrt{\frac{\omega_0^4 + 2\omega_0^2\omega_{рез}^2 - 3\omega_{рез}^4}{4\omega_{рез}^2}}. \quad (74)$$

Анализ практической значимости найденных решений позволяет отбросить из дальнейшего рассмотрения отрицательный корень.

Следовательно, величина коэффициента затухания колебаний может быть связана с их собственной частотой, а также физически фиксируемой частотой резонанса соотношением:

$$b = \sqrt{\frac{\omega_0^4 + 2\omega_0^2\omega_{рез}^2 - 3\omega_{рез}^4}{4\omega_{рез}^2}}. \quad (75)$$

Очевидно, что нахождение собственных параметров исследуемых релаксационных колебаний частиц конкретного образца сводится к минимизации расхождения его теоретических характеристик с их контрольными экспериментальными спектрами.

При этом целесообразно отметить, что в случае рассмотрения колебаний, происходящих исключительно в области релаксационной поляризации, для определения вещественной и мнимой величин комплексной диэлектрической проницаемости необходим учет всех ранее произошедших упругих видов поляризации.

Таким образом, $\varepsilon_{Re}(\omega)$ и $\varepsilon_{Im}(\omega)$ могут быть результативно представлены в частном виде:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) &= \varepsilon_{\text{Re}_{ycm}} + \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{\mu_{\Sigma}^2}{2I_{\Sigma}} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2b\omega)^2} N, \\ \varepsilon_{\text{Im}}(\omega) &= \varepsilon_{\text{Im}_{ycm}} + \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{\mu_{\Sigma}^2}{2I_{\Sigma}} \frac{2b\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2b\omega)^2} N,\end{aligned}\tag{76}$$

где $\varepsilon_{\text{Re}_{ycm}}$ и $\varepsilon_{\text{Im}_{ycm}}$ - численные значения рассматриваемых характеристик, установившиеся за счет ранее произошедшей реализации упругих видов поляризации;
 N - концентрация молекулярных ассоциатов.

Величина концентрации N в предположении, что рассматриваемый конечный объем воды заполнен исключительно тетраэдрическими конгломератами $(\text{H}_2\text{O})_5$, может быть рассчитана по формуле:

$$N = \frac{\rho}{5(2m_{\text{H}} + m_{\text{O}})aem},\tag{77}$$

где ρ - физическая плотность воды; m_{H} и m_{O} - атомные массы водорода и кислорода;

aem - атомная единица массы, равная $9,109543 \cdot 10^{-31}$ кг.

Для определения величин $\varepsilon_{\text{Re}_{ycm}}$ и $\varepsilon_{\text{Im}_{ycm}}$ необходимо преобразовать имеющиеся массивы контрольных данных длинноволновых спектров $n(\lambda)$ и $\chi(\lambda)$ в эквивалентные им частотные характеристики ε_{Re} и ε_{Im} на основании ранее выведенных формул (10), а также общеизвестной формулы $\omega = 2\pi c / \lambda$ перевода длины волны к в соответствующую ей круговую частоту.

При этом необходимо учесть следующие условия.

Во-первых, коротковолновая часть должна охватывать минимальное значение показателя поглощения воды, непосредственно предшествующего максимуму, характеризующее начальный момент проявления релаксационных колебаний, а также позволяющее определить численные значения $\varepsilon_{\text{Re}_{ycm}}$ и $\varepsilon_{\text{Im}_{ycm}}$ частотных характеристик комплексной диэлектрической проницаемости воды, установивши-

еся в результате ранее произошедшей физической реализации механизмов ее упругой поляризации.

Во-вторых, длинноволновая часть исследуемой выборки должна отражать установившиеся значения показателя преломления, характеризующие процесс релаксационной поляризации, одним из основных признаков которой являются активно затухающие колебания молекулярных образований $(H_2O)_n$, наполняющих исследуемый элементарный объем воды.

В свою очередь определение максимума заранее подготовленной зависимости $\varepsilon_{Im}(\omega)$ дает возможность установить эмпирическое значение резонансной частоты $\omega_{рез}$, необходимое для использования формулы (75).

При этом максимум экспериментальной зависимости оптического показателя поглощения $\chi(\lambda)$ в области релаксационной поляризации, с точки зрения современной практики колебательной спектроскопии, соответствует численному значению частоты $\omega_{ног}$.

Кроме того, в рамках реализации предложенного алгоритма определения численных значений искомых величин $\varepsilon_{Re_{учт}}$ и $\varepsilon_{Im_{учт}}$, частота собственных колебаний ω_0 оказывается ограниченной в диапазоне ее допустимых значений:

$$\omega_{ног} < \omega_0 < \omega_{рез}.$$

Таблица 1 – Массивы контрольных данных

№	Исходные контрольные данные			Обработанные контрольные данные		
	$\lambda, 10^{-3} м$	n	χ	ε_{Re}	ε_{Im}	$\omega, 10^{12}$ рад/с
1	2	3	4	5	6	7
1	0,070	1,763	0,517	2,841	1,823	26,90915
2	0,090	1,874	0,465	3,296	1,743	20,92934
3	0,120	1,912	0,417 (min)	3,482 (вст.)	1,595 (вст.)	15,69700
5	0,200	1,975	0,470	3,680	1,857	9,418203
7	0,300	2,060	0,551	3,940	2,270	6,278802
8	0,400	2,126	0,629	4,124	2,675	4,709101
9	0,500	2,189	0,699	4,303	3,060	3,767281
10	0,700	2,270	0,831	4,462	3,773	2,690915
11	0,900	2,364	0,984	4,620	4,652	2,092934
12	2,000	2,882	1,670	5,517	9,626	0,941820
13	2,100	2,934	1,718	5,657	10,08	0,896972

Продолжение таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7
14	3,000	3,375	2,079	7,068	14,03	0,627880
15	4,000	3,829	2,360	9,092	18,07	0,470910
16	5,000	4,248	2,551	11,54	21,67	0,376728
17	7,000	4,980	2,766	17,15	27,55	0,269092
18	9,500	5,747	2,835(max)	24,99	32,59	0,198278
20	15,00	6,867	2,630	40,24	36,12	0,125576
21	18,00	7,252	2,461	46,53	35,69	0,104647
22	30,00	8,074	1,824	61,86	29,45	0,062788
23	42,00	8,389	1,405	68,40	23,57	0,044849
24	50,00	8,497	1,212	70,73	20,60	0,037673
25	70,00	8,648	0,896	73,99	15,50	0,026909
26	100,0	8,743	0,641	76,03	11,21	0,018836
27	200,0	8,824	0,328	77,76	5,789	0,009418
28	500,0	8,845	0,133	78,22	2,353	0,003767
29	700,0	8,847	0,096	78,26	1,699	0,002691
30	900,0	8,848	0,074	78,28	1,310	0,002093

2 ВЫБОР ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ РЕШАЕМОЙ ЗАДАЧИ

В сравнительно недалеком прошлом использование специальных программных средств, к которым относятся интегрированные системы символьной математики, считалось прерогативой профессиональной сферы. Однако, в середине 90-х годов мировой рынок CAD/CAM/CAE-систем перешел в плоскость массового применения. Именно в это время для пользователей персональных компьютеров стали доступны пакеты так называемого параметрического моделирования, которые предусматривают промышленные возможности. Наибольшее распространение получили специальные программные средства, такие как интегрированные системы символьной математики MatLAB, MathCAD, Maple V, Axiom, Mathematica и многие другие. Среди наиболее популярных из них можно выделить такие как Maple, Mathcad, MatLab и Mathematica. Данные системы на основании учета пользовательских потребностей, предоставили возможность инженерам и математикам использовать новейшие достижения технологий CAD/CAM/CAE на своих персональных компьютерах. Подобные интегрированные математические системы предоставляют большие возможности, как для аналитических, так и для численных вычислений. Особое место занимают также специальные программные средства, к которым относятся интегрированные системы символьной математики.

2.1 Математический пакет Wolfram Mathematica

Математическая система «Wolfram Mathematica» представляет собой систему компьютерной алгебры, которая с успехом используется во многих научных, инженерных и математических областях. Изначально созданная Стивеном Вольфрамом, сегодня данная система продолжает разрабатываться компанией Wolfram Research, которая по праву считается одним из наиболее весомых игроков компьютерного рынка данной области.

Программный пакет Mathematica на протяжении долгого времени занимает лидирующие позиции как в области расчетов в современных научных исследованиях, так и в научно-образовательной сфере.

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		62

С одной стороны, Mathematica является типичной системой программирования, основанной на базе проблемно-ориентированного языка для функционального программирования высокого класса, которая предназначена для решения самых разных, в том числе и математических, задач. С другой, помогает в решении многих математических задач при помощи в диалогового режима, без использования традиционного программирования. Таким образом, в данной системе программирования Mathematica созданы все возможности, как для разработки, так и для создания любых управляющих структур, а также организации ввода-вывода и действий с системными функциями и обслуживанием любых периферийных устройств. Дополнительные пакеты расширения предоставляют возможности подстраиваться практически под любые пользовательские запросы. Некоторые пользователи данной программы даже говорят о ее избыточной функциональности, например, это касается возможностей по синтезу звука. А вот среди недостатков Mathematica выделяют разве что несколько необычный язык программирования Wolfram Language, однако и он облегчен подробной системой помощи.

Сферы по применению математического пакета Wolfram Mathematica включают:

- Программирование, которое основано на алгоритмах;
- Вычисления на основе использования данных реального мира;
- Сверх высокоуровневый скриптинг;
- Высокопроизводительность программирования;
- Высокий уровень метапрограммирования;
- Самодокументирующиеся крупномасштабные разработки;
- Высокая скорость в разработке концептов;
- Аналитичность и визуализация;
- Программирование в процессе обучения;
- Проведение исследований и разработок;
- Использование разработок под несколько платформ одновременно.

На рисунке 23 представлен пример выполнения работы в программе Mathematica

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		63

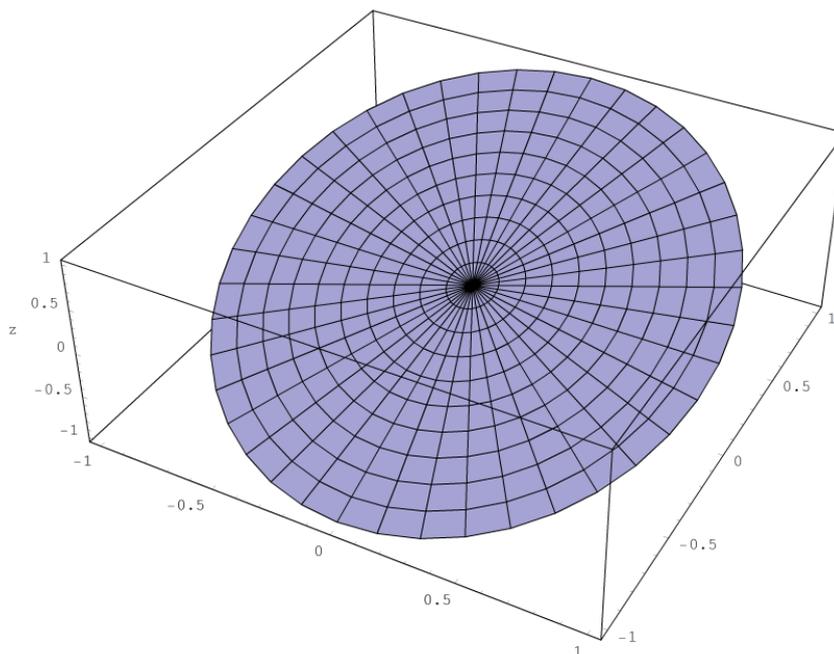


Рисунок 23 – Пример работы выполненный в математическом пакете
Wolfram Mathematica

2.2 Математический пакет Maxima

Программный продукт Maxima является системой работы с численными и символьными выражениями, которая включает в себя интегрирование, дифференцирование, преобразование Лапласа, разложение в ряд, системы линейных уравнений, обыкновенные дифференциальные уравнения, а также работу с многочленами и множествами, списками и векторами, матрицами и тензорами. Maxima способна производить высокоточные численные расчеты с использованием точных дробей, целых чисел, а также чисел с плавающими точками произвольной точности. Также данная система позволяет выстраивать графики статистических данных и функций в двух и трех измерениях. Ее исходный код может быть скомпилирован на многих системах, в числе которых Windows, MacOS X и Linux. Программа Maxima является своего рода потомком легендарной Macsyma, которая была разработана в начале шестидесятых годов в MIT и произвела настоящий переворот в системе компьютерной алгебры, оказав влияние на другие системы, в том числе Mathematica и Maple.

Авторство данной программы принадлежит Уильяму Шелтеру, который работал над ней в период с 1982 года и вплоть до своей смерти в 2001 го-

ду. Разрешение на публикацию исходного кода автору удалось получить только в 1998 году под лицензией GPL. Сегодня считается, что только благодаря усилиям и способностям Шелтера стало возможным столь широкое распространение Maxima. Уже после его смерти группа его последователей донесла Maxima до широкой аудитории пользователей

На рисунке 24 представлен пример выполнения работы в программе Maxima

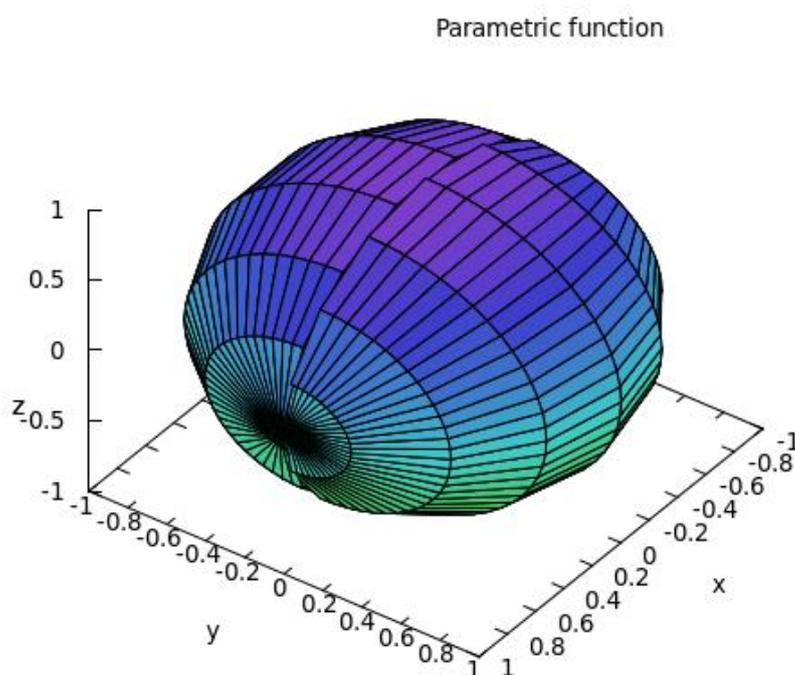


Рисунок 24 – Пример работы выполненный в математическом пакете
Maxima

2.3 Математический пакет Maple

Программа Maple, без преувеличения считается своего рода патриархом семейства систем символьной математики. Не смотря на это, она до сих пор остается лидером в ряду универсальных систем символьных вычислений. Maple предоставляет пользователям возможности удобной интеллектуальной среды для проведения математических исследований любого уровня, пользуясь особой популярностью в среде научных исследований. В качестве наиболее сильной части данного программного обеспечения выступает символьный анализатор, который был позаимствован другими производителями, включившими его в целый ряд других САЕ-пакетов, среди которых MatLab и MathCad.

Программа Maple является оптимальной для проведения компьютерных экспериментов, в ходе которых не только апробируются разные подходы к решению задач и проводится анализ частных решений, но и в случае необходимости программирования предоставляются возможности отбора отдельных фрагментов, которые требуют особой скорости.

Данный пакет также способствует созданию интегрированной среды с использованием других систем, а также языков программирования высокого уровня. По результатам произведенных расчетов, на этапе их оформления, данный пакет предоставляет дополнительные средства не только для визуализации данных, но и для подготовки иллюстраций для будущих публикаций. Для завершения работы над тем или иным проектом автору остается подготовить печатный материал, в качестве которого могут выступать отчеты, статьи или книги, причем сделать это можно прямо в программной среде Maple.

Научно-исследовательская работа в данной программе проходит в интерактивном режиме. Результат выполнения той или иной команды отображается на экране практически сразу после их введения. Пользователи отмечают, непохожесть пакета Maple на традиционную среду программирования, которая предполагает жесткость в формализации всех переменных, а также действий с ними. В данной программе выбор подходящих типов переменных обеспечивается в автоматическом режиме, а также проводится проверка корректности в выполнении операций.

Так что, относительно общих случаев ни описаний переменных, ни строгая формализация записи не потребуются. Интерфейс данной программы основывается на концепциях рабочего поля либо документа, которые содержат строки ввода-вывода, графику и сам текст. На рисунке 25 представлен пример выполнения работы в программе Maple

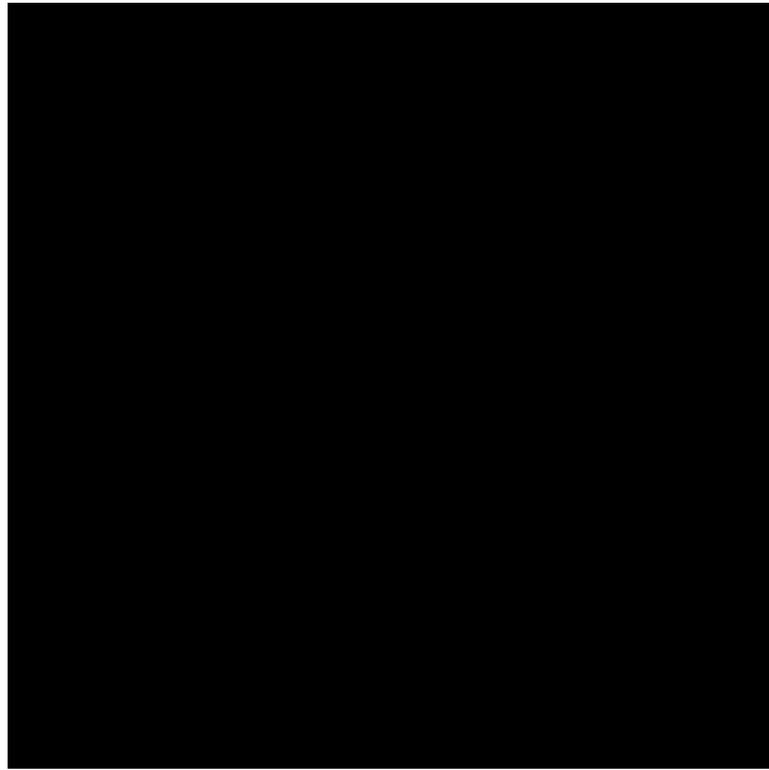


Рисунок 25 – Пример работы выполненный в математическом пакете Maple

2.4 Математический пакет Mathcad

Профессиональный программный продукт Mathcad является системой компьютерной алгебры, который относится к классу системы автоматизированного проектирования. Он ориентирован на разработку и подготовку интерактивных документов, содержащих вычисления и визуальное сопровождение, имеет отличия лёгкости в использовании, в том числе и при коллективной работе. В отличие от своих мощных и ориентированных на высокоэффективные вычисления собратьев, таких как, например MatLab, программное обеспечение MathCad выступает в виде довольно простого, но продвинутого редактора математических текстов, который предоставляет широкие возможности для символьных вычислений. Несмотря на то, что MathCad не имеет собственного языка программирования, а ее движок заимствован у Maple, данная программа имеет богаты возможности для визуализации. Практически все вычисления происходят на уровне визуальных записей выражений при помощи общеупотребительных математических форм. Кроме того, данный пакет предоставляет хорошие подсказки и подробную документацию, содержит функцию по обучению пользователей, ряд дополнительных модулей, а также существенную техническую поддержку со стороны производи-

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		67

теля. С одной стороны, возможности программы MathCad намного уступают таким серьезным конкурентам, как, например, Maple, Mathematica или MatLab, однако она имеет ряд конкурентных преимуществ при небольших вычислительных объемах в плане скорости и оформлении работы. Также данный пакет предоставляет удобную возможность по импорту/экспорту данных, к примеру, в процессе работы с таблицами Microsoft Excel в самом MathCad-документе. Данный продукт занял свое определенное место в сегменте широкого потребления, особенно в процессе постижения математических азов.

На рисунке 26 представлен пример выполнения работы в программе MathCad

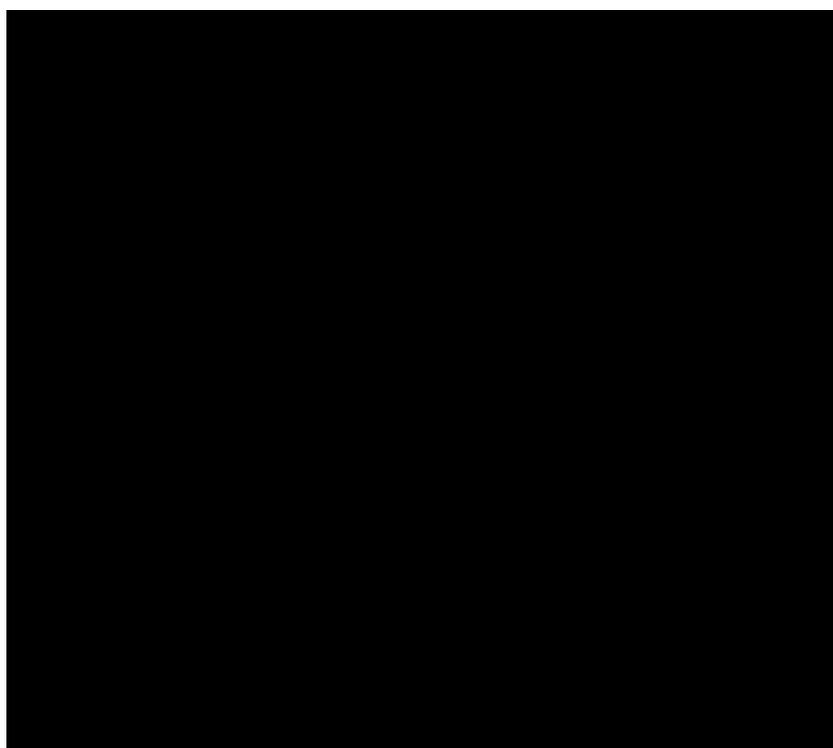


Рисунок 26 – Пример работы выполненный в математическом пакете MathCad

2.5 Пакет программного обеспечения Diatomic 1.0 (Xiaofeng Tan)

Diatomic - это программа, моделирующая спектры двухатомных молекул. Это могут быть спектры лазерно-индуцированной люминесценции, спектры поглощения и хемилюминесценции.

Функционал пакета Diatomic 1.0:

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		68

– Моделировать спектров в случаях, промежуточных между случаями "а" и "б" по классификации Гунда. Учитывать центробежные поправки. Расчет спектров означает, в частности, учет спин-орбитального, спин-спинового, и спин-вращательного взаимодействий;

– Рассчитывать относительные интенсивности колебательных переходов в электронных спектрах, либо используя факторы Франка-Кондона, либо параметры RKR потенциала, причем эти параметры рассчитываются, исходя из вращательных констант и колебательных частот;

– Учитывать влияние ядерной статистики на интенсивность спектральных линий;

– Для ЛИФ-спектров программа умеет учитывать геометрию возбужденного состояния, поляризацию и выстраивание углового момента начального состояния молекулы;

– Вычислять формы спектральных линий. Например, для ЛИФ-спектров форма линий может быть Доплеровской, Лоренцевской, и Войтовской. Для спектров хемилюминесценции программа умеет учитывать влияние аппаратной функции (задаваемой дифракционной решеткой) на Гауссовский и Лоренцевские профили спектральных линий;

– Указывать вращательные числа, характеризующие переход, прямо на графике, изображающем спектр;

Технические подробности о программе Diatomic 1.0

– Diatomic - это 32-битовая программа для Windows, использующая графический интерфейс;

– Использование оперативной памяти очень эффективно. Динамически создаваемые массивы используются очень эффективно, в результате чего программа не требует слишком много лишней памяти;

– Для вычисления частот используется очень эффективный алгоритм, ускоряющий вычисления, особенно для молекул с большим спином. Программа рассчитывает, а затем запоминает энергии и волновые функции молекул для дальнейшего использования;

– Вычисления многопоточны, каждый пересчет выполняется в отдельном потоке. Это позволяет программе быстро реагировать на запросы пользователя и завершать моделирование в любое время.

Недостатки программы Diatomic 1.0

- Программа учитывает только электродипольные переходы
- Программа не рассчитывает внутримультиплетные переходы.
- Программа не рассчитывает спектры комбинационного рассеяния.
- Программа использует только традиционные обозначения Герцберга для спектроскопических констант. Коэффициенты Дунхама программой пока не используются;
- Отсутствует анализ данных и какая-либо оптимизация.

2.6 Математический пакет MatLAB

MatLAB – является одной из старейших, тщательно разработанных и проверенных временем системой для автоматизации математических расчетов, изначально направленная на расширенное представление и использование матричных операций. Сегодня именно программное обеспечение MatLAB считается мощнейшей универсальной интегрированной системой компьютерного моделирования, объединяющая в себе удобную оболочку, вычислитель, графический программный процессор, редактор выражений и редактор текстовых комментариев.

Основной задачей данной системы ее разработчики продекларировали предоставление для пользователей мощного языка программирования, который был бы ориентирован на математические расчеты, а также значительно превосходил возможности традиционных языков программирования, которые на протяжении долгого времени использовались для реализации численных методов.

Потому скорости вычислений и адаптация решению самых сложных задач пользователей в этой системе уделяется особое внимание.

Кроме того, MatLAB можно использовать в расчетах практически для любой области науки и техники. К примеру, данную программу довольно широко использует для математического моделирования механических устройств в

					<i>ВКР. 145373.090404.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		70

динамике и гидродинамике, акустике и энергетике и так далее.

Профессиональному использованию программы способствует не только расширенный набор для проведения матричных и других операций, но и дополнительный пакета расширения (toolbox) Simulink, который специально предназначен для задач по блочному моделированию динамических систем, а также десятки других пакетов. Именно расширяемость и открытость данной программы считаются ее важными достоинствами. Большинство функций и реализуются в виде файлов на языке Си, а также текстовых m-файлов, причем все они доступны для модифицирования. Пользователям предоставляются возможности для создания, как отдельных файлов, так и целых файловых библиотек с целью реализации сложных специфических задач. Легкость в модификации и предусмотренные возможности адаптации системы к решениям специфических задач стали основой для создания дополнительных пакетов прикладных программ (toolbox), которые значительно расширили сферу применения данной системы. Некоторые из них, такие как, к примеру, Notebook, предусматривающая интеграцию с Word и подготовку электронных книг, Extended Symbolic Math и Symbolic Math, предоставляющие возможность для символьных вычислений на основе ядра Maple V R5, а также Simulink, позволяющей моделировать динамические системы, заданные в виде блоков, не только интегрировались с MatLAB, но и стали составными частями данной системы.

Более того, в последней версии MatLAB можно использовать многомерные массивы: ячеек и структур, Java, а также разреженные матрицы, которые могут применяться в процессе создания и отладки для новых алгоритмов, как матричных, так и основанных на них параллельных вычислений. Также данная система имеет несколько дополнительных средств по интеграции библиотек с иными программными продуктами. Речь идет, во-первых, о Matlab Compiler, который является основным инструментом для разработки независимых приложений, предусматривая преобразование файл m-кода в исходный код C или C++. Также нельзя не упомянуть о Matlab C/C++ Math Library и Matlab C/C++

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		71

Graphic Library, которые выступают в виде динамически связываемых библиотек, которые позволяют использовать встроенные графические и математические функции данной системы.

Основываясь на вышеизложенном, и с учетом определенной громоздкости математического описания процессов, которые происходят в воде под воздействием переменного электрического поля, автором данной работы, в качестве наиболее подходящего программного обеспечения для исследования, была выбрана именно вычислительная среда MatLAB. На данный выбор повлияла также необходимость в моделировании поляризованных спектров широкого диапазона с малой дискретизацией.

На рисунке 27 представлен пример выполнения работы в программе MatLAB

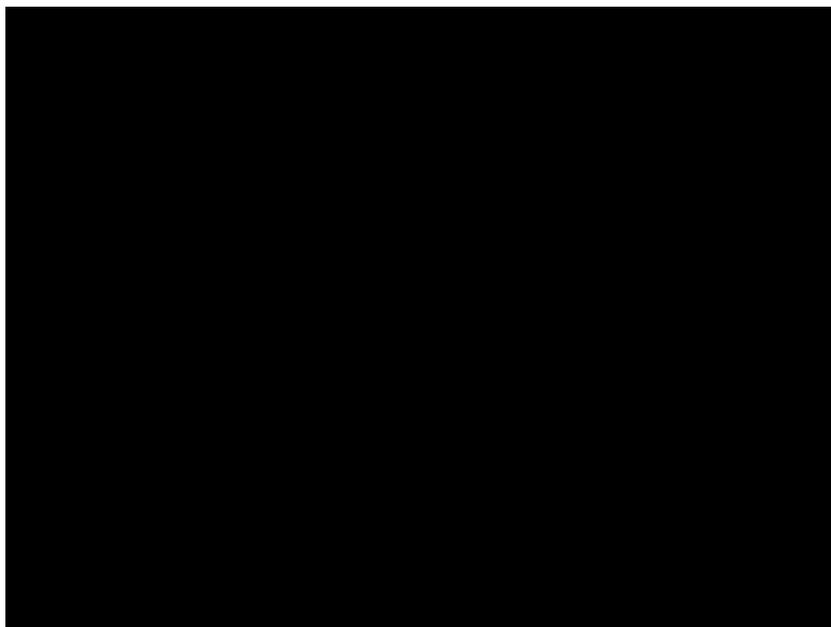


Рисунок 27 – Пример работы выполненный в математическом пакете MatLAB

3 ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Современный этап развития наукоемких технологий предполагает привлечение новейших, как теоретических, так и экспериментальных методов исследований с использованием технологии компьютерного моделирования. Именно поэтому использование современных ЭВМ для проведения наиболее точных научно-технических и математических расчетов приобретает неоспоримый приоритет. Автоматизация в процессе решения прикладных задач предполагает привлечение различных программных средств для достижения оптимальных результатов.

Во-первых, потому, что все вычисления, а также графические построения могут реализовываться в рамках использования универсальных интегрированных систем, например, таких как MatLAB по автоматизации научных и математических расчетов.

Во-вторых, в процессе проведения необходимых вычислительных экспериментов могут быть созданы независимые пакеты прикладных программ, которые написаны на современном языке программирования самого высокого уровня.

Таким образом, становится очевидным факт того, что эффективность реализации и первого, и второго подхода будет напрямую зависеть от адекватности тех математических моделей, которые и будут использованы для описания строения исследуемых диэлектрических образцов, а также происходящих в них поляризационных процессов, которые вызваны воздействием переменного электрического поля.

3.1 Модель общей поляризации воды

Имеющиеся теоретические трактовки механизма взаимодействия микрочастиц, которые образуют разбираемую жидкость, со слабым электромагнитным полем света позволяют произвести выделение следующих разновидностей поляризационных явлений.

С одной стороны, в этом качестве выступают молекулярные колебания воды. В первую очередь, это деформация электронных оболочек частиц, которые и составляют молекулу или упругая электронная поляризация; изменение длины

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		73

валентных связей ОН, и валентных углов НОН или упругая ионная поляризация; изменение положения молекул воды относительно исходного уравновешенного состояния или упругая дипольная поляризация. Важно подчеркнуть, что факт совпадения молекулярной оси z с направлениями собственного дипольного момента молекулы H_2O в случае рассмотрения процесса упругой дипольной поляризации может определять переориентацию только лишь относительно осей y и x .

С учетом небольших значений величины коэффициента затухания колебаний частиц, которые являются характерными для данных процессов и обусловлены слабостью сил внутреннего трения, каждая из них выступает в соответствующем виде именно упругой поляризации H_2O .

Однако, с другой стороны, нужно отдельно выделять процессы релаксационной поляризации, то есть сильно затухающие гармонические колебания многомолекулярных образований по типу $(H_2O)_n$, которые имеют место в данной жидкости при помощи автономного образования водородных связей ОН...О.

В данном процессе подобные явления, с учетом высокой инерционности принимающих участие в них частиц, проявляются только лишь в областях низких частот оптического спектра, которые соответствуют техническому диапазону.

При рассмотрении данных процессов с временных позиций отметим, что я сначала поляризации протекает более быстро, а после замедляется. То есть как упругие определяются слабозатухающие процессы, а как релаксационные – те, которые обусловлены активно затухающими колебаниями. Данным определением обусловлено также и название релаксационной поляризации, то есть замедляющейся или ослабевающей.

В процессе проведения работ было доказано, что совокупности упругих видов поляризации исследуемых жидких диэлектриков можно довольно эффективно описать при помощи набора линейных дифференциальных уравнений, которые отражают вынужденные затухающие колебания частиц для изолированных молекул воды с учетом обратных связей, которые объективно существуют в каждой диэлектрической системе. Также, в предыдущей главе нам удалось получить математическую модель вынужденной переориентации молекулярных ассоциатов

$(\text{H}_2\text{O})_n$, которая обусловлена воздействием со стороны переменного электрического поля малой амплитуды.

Исходя из вышеизложенного, приходим к выводу о том, что в качестве наиболее адекватного математического описания общей совокупности процессов поляризации H_2O , которая представлена ее отдельными молекулами, а также их конгломератными или кластерными соединениями, выступает кибернетическая модель следующего вида:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 \mu_1(t)}{dt^2} + 2b_1 \frac{d\mu_1(t)}{dt} + \omega_{01}^2 \mu_1(t) &= \frac{2e^2}{m_e} E(t), l = \overline{1,5}; \\
 \frac{d^2 \mu_6(t)}{dt^2} + 2b_6 \frac{d\mu_6(t)}{dt} + \omega_{06}^2 \mu_6(t) &= \frac{e^2}{m_H} \frac{2}{\pi} E(t); \\
 \frac{d^2 \mu_7(t)}{dt^2} + 2b_7 \frac{d\mu_7(t)}{dt} + \omega_{07}^2 \mu_7(t) &= \frac{e^2}{m_H} \frac{2}{\pi} (\sin a + \cos a) E(t); \\
 \frac{d^2 \mu_8(t)}{dt^2} + 2b_8 \frac{d\mu_8(t)}{dt} + \omega_{08}^2 \mu_8(t) &= \frac{\mu_{OH}^2}{I_{OH}} \frac{1}{2} E(t); \\
 \frac{d^2 \mu_9(t)}{dt^2} + 2b_9 \frac{d\mu_9(t)}{dt} + \omega_{09}^2 \mu_9(t) &= \frac{\mu_{OH}^2}{I_{OH}} \frac{1}{2} (1 - \sin 2a) E(t); \\
 \frac{d^2 \mu_{10}(t)}{dt^2} + 2b_{10} \frac{d\mu_{10}(t)}{dt} + \omega_{010}^2 \mu_{10}(t) &= \frac{\mu_0^2}{I_y} E(t); \\
 \frac{d^2 \mu_{11}(t)}{dt^2} + 2b_{11} \frac{d\mu_{11}(t)}{dt} + \omega_{011}^2 \mu_{11}(t) &= \frac{\mu_0^2}{I_x} E(t); \\
 \frac{d^2 \mu_{12}(t)}{dt^2} + 2b_{12} \frac{d\mu_{12}(t)}{dt} + \omega_{012}^2 \mu_{12}(t) &= \frac{\mu_{\Sigma}^2}{2I_{\Sigma}} E(t); \\
 E(t) &= E_0(t) - \frac{2}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^{12} \mu_i(t) N_i;
 \end{aligned} \tag{78}$$

где $\mu_l(t)$ – наведенные дипольные моменты соответствующих частиц;

b_l и ω_{0l} – соответственно коэффициент затухания и частота собственных колебаний молекулярного кластера воды определенного вида;

e и m_e – заряд и масса электрона;

m_H – масса иона водорода;

α – величина валентного угла НОН;

μ_{OH} и I_{OH} – собственный дипольный момент и осевой момент инерции химической связи OH;

μ_0 – собственный дипольный момент молекулы H₂O;

I_y и I_x – моменты ее инерции относительно молекулярных осей y и x ;

μ_{Σ} – суммарный дипольный момент водного ассоциата;

I_{Σ} – суммарный момент инерции рассматриваемой молекулярной связки;

$E_0(t)$ и $E(t)$ – функции напряженности внешнего и эффективного полей;

ϵ_0 – электрическая постоянная;

N_i – концентрации одинаковых частиц.

Важно подчеркнуть, что в системе (78) упругая электронная поляризация молекул H₂O определяется процессами 1-5, ионную поляризацию характеризуют процессы 6-9, упругую дипольную поляризацию описывают процессы 10-11, релаксационная поляризация обусловлена процессом 12.

На основе использования метода преобразования Лапласа, систему уравнений (78) второй стандартной формы записи представить в виде следующих выражений (79), при помощи которых структурная схема, отражающая общую совокупность процессов поляризации воды примет вид, который представлен на рисунке 28. Также данная схема может быть получена при помощи суммирования отдельных блоков, которые отвечают за конкретный вид поляризации - упругих электронной, дипольной, ионной или релаксационной поляризации. В этом процессе в составе каждого последующего блока появляются дополнительные элементы, которые определяют численные значения для анализируемых характеристик, которые были установлены при помощи реализации предшествующих поляризационных процессов, произошедших ранее.

Становится очевидным, что полученная схема может быть практически реализована при помощи промышленного способа, основываясь на стандартную элементную базу.

$$\begin{aligned}
s^2 \mu_1(s) + 2b_1 \mu_1(s)s + \omega_{01}^2 \mu_1(s) &= \frac{2e^2}{m_e} E(s), l = \overline{1,5}; \\
s^2 \mu_6(s) + 2b_6 \mu_6(s)s + \omega_{06}^2 \mu_6(s) &= \frac{e^2}{m_H} \frac{2}{\pi} E(s); \\
s^2 \mu_7(s) + 2b_7 \mu_7(s)s + \omega_{07}^2 \mu_7(s) &= \frac{e^2}{m_H} \frac{2}{\pi} (\sin a + \cos a) E(s); \\
s^2 \mu_8(s) + 2b_8 \mu_8(s)s + \omega_{08}^2 \mu_8(s) &= \frac{\mu_{OH}^2}{I_{OH}} \frac{1}{2} E(s); \\
s^2 \mu_9(s) + 2b_9 \mu_9(s)s + \omega_{09}^2 \mu_9(s) &= \frac{\mu_{OH}^2}{I_{OH}} \frac{1}{2} (1 - \sin 2a) E(s); \\
s^2 \mu_{10}(s) + 2b_{10} \mu_{10}(s)s + \omega_{010}^2 \mu_{10}(s) &= \frac{\mu_0^2}{I_y} E(s); \\
s^2 \mu_{11}(s) + 2b_{11} \mu_{11}(s)s + \omega_{011}^2 \mu_{11}(s) &= \frac{\mu_0^2}{I_x} E(s); \\
s^2 \mu_{12}(s) + 2b_{12} \mu_{12}(s)s + \omega_{012}^2 \mu_{12}(s) &= \frac{\mu_{\Sigma}^2}{2I_{\Sigma}} E(S); \\
E(s) &= E_0(s) - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{12} \mu_i(s) N_i.
\end{aligned} \tag{79}$$

С учетом необходимости в дальнейшем моделировании широкодиапазонного диэлектрического спектра воды на основании структурной схемы (рисунок 28) и системы уравнений (78), а также с учетом вещественной и мнимой частотных характеристик комплексной диэлектрической проницаемости для исследуемых образцов становится возможным представить в следующем виде (79), при чем в данном составе мнимые и вещественные частотные характеристики комплексных поляризуемостей мы определяли при помощи выражений (80) соответственно.

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) &= 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{12} a_{\text{Re}i}(\omega) N_i, \\
\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) &= \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{12} a_{\text{Im}i}(\omega) N_i,
\end{aligned} \tag{80}$$

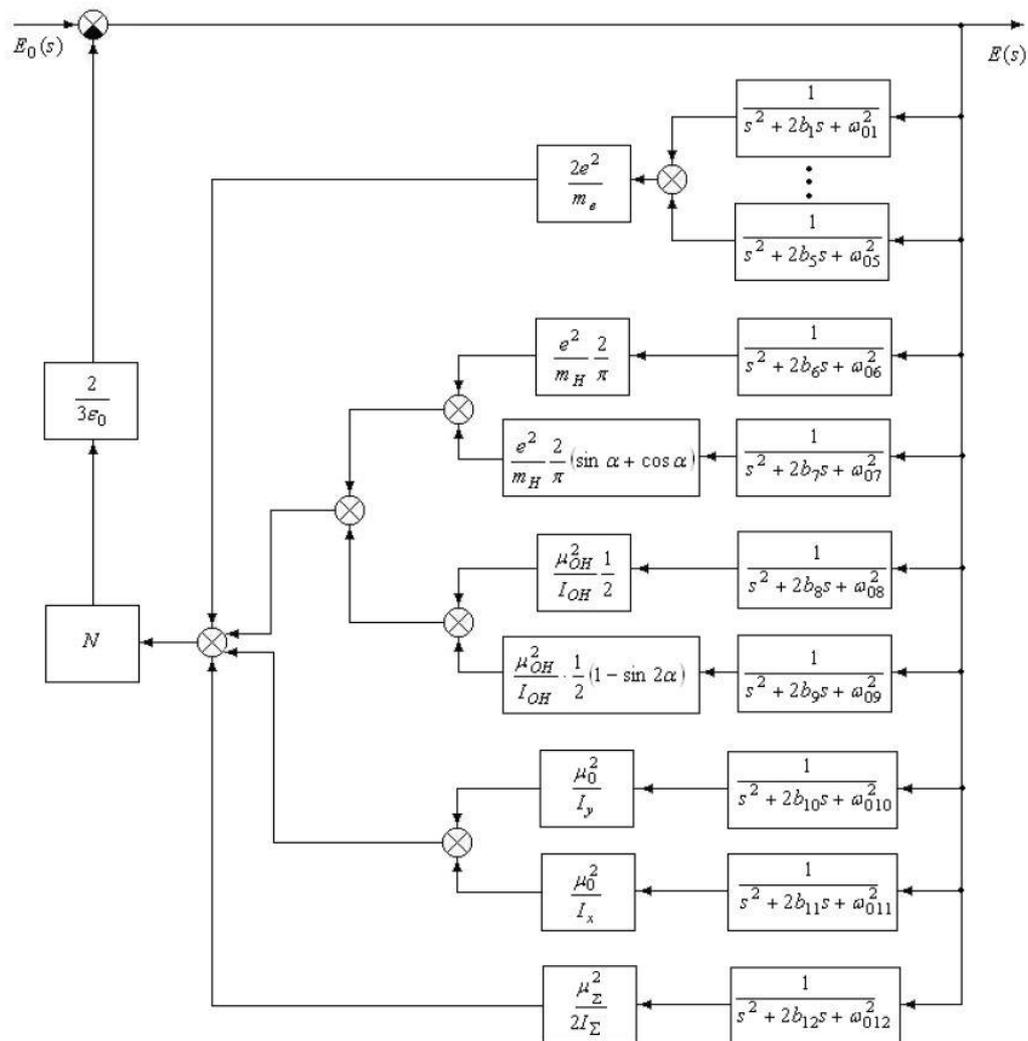


Рисунок 28 – Структурная схема общей поляризации.

3.2 Модель релаксационной поляризации воды

Преобразовывая систему (78) и считая, что процессы 1-5 электронной поляризации, а так же процессы 6-9 ионной поляризации и процессы 10-11 упругой дипольной поляризации прошли и установились. Тогда решения уравнения комплексной диэлектрической проницаемости для релаксационной поляризации воды можно представить в виде (79)

$$\varepsilon(s) = \varepsilon_{\infty} + \frac{2}{3\varepsilon_0} W(s) N_{12}, \quad (81)$$

где ε_0 – электрическая постоянная;

N_{12} – концентрации одинаковых частиц;

ε_{∞} -это вклад ранние установившихся процессов;

$W(s)$ – передаточная функция.

Используя данное уравнение можно построить структурную схему процесса релаксационной поляризации представленную на рисунке 28

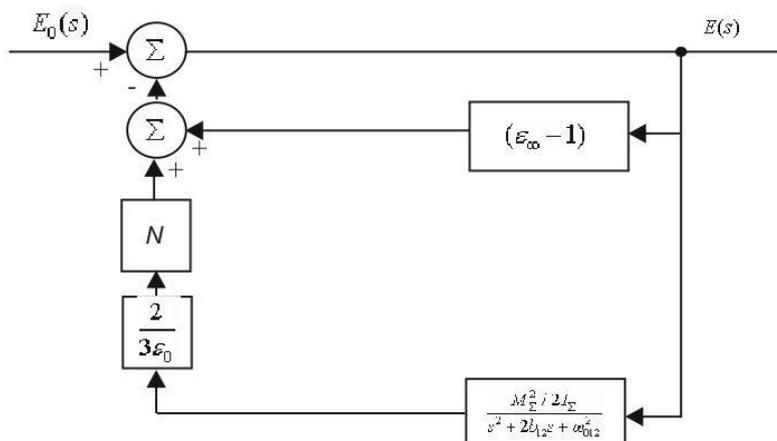


Рисунок 29 – Структурная схема процесса релаксационной поляризации диэлектрика.

Покажем, что схема изображенная на рисунке 29 работает правильно, для этого воспользуемся аппаратом для преобразования структурных схем теории автоматического управления.

Для начала устраним параллельное соединение звеньев $W(s)$ и $\varepsilon_\infty - 1$. Для этого воспользуемся правилом.

$$W_\varepsilon(s) = \sum_{i=1}^n W_i(s). \quad (82)$$

Обозначим

$$\begin{aligned} W_1(s) &= \varepsilon_\infty - 1; \\ W_2(s) &= W(s). \end{aligned} \quad (83)$$

Получим передаточную функцию

$$W_\varepsilon(s) = \sum_{i=1}^2 W_i(s) = W_1(s) + W_2(s) = (\varepsilon_\infty - 1) + W_2(s). \quad (84)$$

$$W_2(s) = N_{12} \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{M_\Sigma^2 / 2I_\Sigma}{s^2 + 2b_{12}s + \omega_{012}^2}, \quad (85)$$

где b_{12} и ω_{012} – соответственно коэффициент затухания и частота собственных колебаний молекулярного кластера воды определенного вида;

μ_Σ – суммарный дипольный момент водного ассоциата;

I_Σ – суммарный момент инерции рассматриваемой молекулярной связки;

Тогда структурную схему процесса релаксационной поляризации можно представить, как показано на рисунке 30.

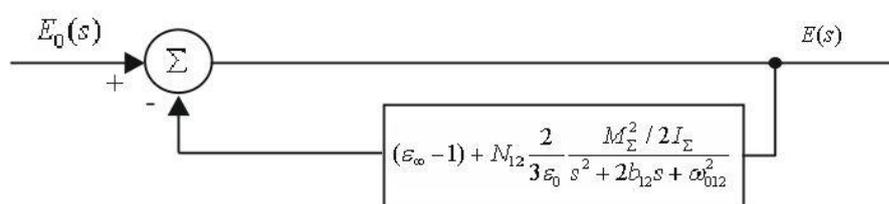


Рисунок 30 – Структурная схема процесса поляризации диэлектрика.

Из данной схемы видно, что осталась только встречно-параллельное соединение звеньев. Для свертки воспользуемся одним из правил теории автоматического управления.

$$W_\varepsilon(s) = \frac{W_1(s)}{1 + W_2(s)}; \quad (86)$$

где

$$W_1(s) = 1;$$

$$W_2(s) = (\varepsilon_\infty + 1) + N_{12} \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{M_\Sigma^2 / 2I_\Sigma}{s^2 + 2b_{12}s + \omega_{012}^2}. \quad (87)$$

Получим придаточную функцию

$$W_{\varepsilon}(s) = \frac{W_1(s)}{1 + W_2(s)} = \frac{1}{\varepsilon_{\infty} + N_{12} \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{M_{\Sigma}^2 / 2I_{\Sigma}}{s^2 + 2b_{12}s + \omega_{012}^2}}. \quad (88)$$

Схема для данной передаточной функции будет выглядеть как показано на рисунке 31

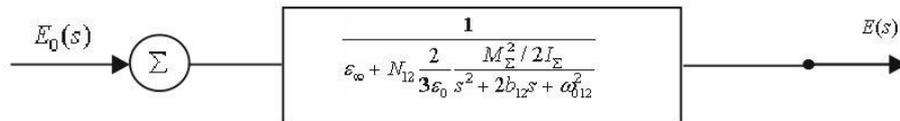


Рисунок 31– Структурная схема процесса поляризации диэлектрика

Анализ полученного выражения показал, что передаточные функции являются физическими аналогами комплексных поляризуемостей частиц, при этом функция, обратная зависимости, является комплексной диэлектрической проницаемостью вещества, выражающей отношение $E_0(t)/E(t)$.

Из выше сказанного следует что уравнение комплексной диэлектрической проницаемости для релаксационной поляризации воды запишется в виде формулы

$$E(t) = E_0(t) - ((\varepsilon_{\infty} - 1)E(t) + N_{12} \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{M_{\Sigma}^2 / 2I_{\Sigma}}{s^2 + 2b_{12}s + \omega_{012}^2}); \quad (89)$$

где b_{12} и ω_{012} – соответственно коэффициент затухания и частота собственных колебаний молекулярного кластера воды определенного вида;

μ_{Σ} – суммарный дипольный момент водного ассоциата;

I_{Σ} – суммарный момент инерции рассматриваемой молекулярной связки;

ε_{∞} – это вклад ранние установившихся процессов;

$E_0(t)$ и $E(t)$ – функции напряженности внешнего и эффективного полей.

Тогда конечная система уравнений для релаксационной поляризации воды

запишется в виде:

$$\frac{d^2 \mu_{12}(t)}{dt^2} + 2b_{12} \frac{d\mu_{12}(t)}{dt} + \omega_{012}^2 \mu_{12}(t) = \frac{\mu_{\Sigma}^2}{2I_{\Sigma}} E(t), \quad (90)$$

$$E(t) = E_0(t) - ((\varepsilon_{\infty} - 1)E(t) + N_{12} \frac{2}{3\varepsilon_0} \frac{M_{\Sigma}^2 / 2I_{\Sigma}}{s^2 + 2b_{12}s + \omega_{012}^2}).$$

Из уравнения (90) следует что решение для процесса релаксационной поляризации воды можно записать в виде:

$$\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \frac{2}{3\varepsilon_0} a_{\text{Re}12}(\omega) N_{12}, \quad (91)$$

$$\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \frac{2}{3\varepsilon_0} a_{\text{Im}12}(\omega) N_{12}.$$

3.3 Программные средства автоматизации прикладных расчетов

С учетом набора минимальных требований, предъявляемых к результатам проведения компьютерного моделирования диэлектрических спектров воды в области релаксационной поляризации, был выбран математический пакет Matlab.

Matlab - это высокоуровневый язык технических расчетов, интерактивная среда разработки алгоритмов и современный инструмент анализа данных.

Matlab по сравнению с общепринятыми языками программирования (C/C++, Java, Pascal, FORTRAN) позволяет на порядок сократить время решения типовых задач и значительно упрощает разработку новых алгоритмов.

Matlab как язык программирования был разработан Кливом Моулером (англ. Cleve Moler) в конце 1970-х годов, когда он был деканом факультета компьютерных наук в Университете Нью-Мексико.

Первоначально MATLAB предназначался для проектирования систем управления, но быстро завоевал популярность во многих других научных и инженерных областях. Он также широко использовался и в образовании, в частности, для преподавания линейной алгебры и численных методов.

Графический интерфейс дающий возможность автоматизировать расчеты и

представить их в более понятном виде для пользователя, обеспечивает возможность пользования программным продуктом другим пользователям не изучая языка программирования. Написанные на языке математического пакета Matlab программы и визуализированные с помощью графического интерфейса Matlab становятся полностью автоматическими приложениями.

Графический интерфейс, созданный в математическом пакете Matlab может содержать элементы управления, такие как: меню, область вывода графиков, кнопки, ползунки и так далее.

Многие продукты MATLAB, такие как подгонка кривой Toolbox, Signal Processing Toolbox, и система управления Toolbox, включают в себя приложения с использованием пользовательского интерфейса. Создание графического интерфейса в Matlab полностью интерактивно и интуитивно понятно.

Для большего контроля над проектированием и разработкой, вы можете также создать MATLAB код, который определяет все свойства и ответ компонента на то или иное действие пользователя.

Общая совокупность названных вычислительных средств позволяет автоматизировать выполнение соответствующих расчетов, а также моделирование требуемых характеристик и структур, т.е. обуславливает возможность реализации прикладных программных продуктов в первую очередь специализированного назначения. Так на рисунке 29 представлена главная форма программного продукта для вычисления.

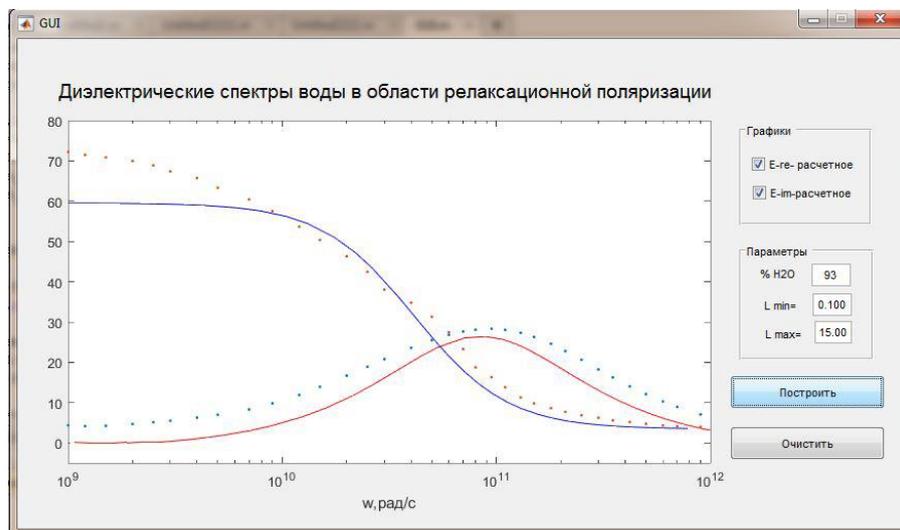


Рисунок 29 – Главная форма программного продукта

3.4 Алгоритмическая схема работы программного продукта

Практическая реализация предложенного алгоритма продолжается до тех пор, пока не будет достигнут предел допустимого диапазона $\lambda_0 < \lambda$ или же общая погрешность достигнет желаемого минимума

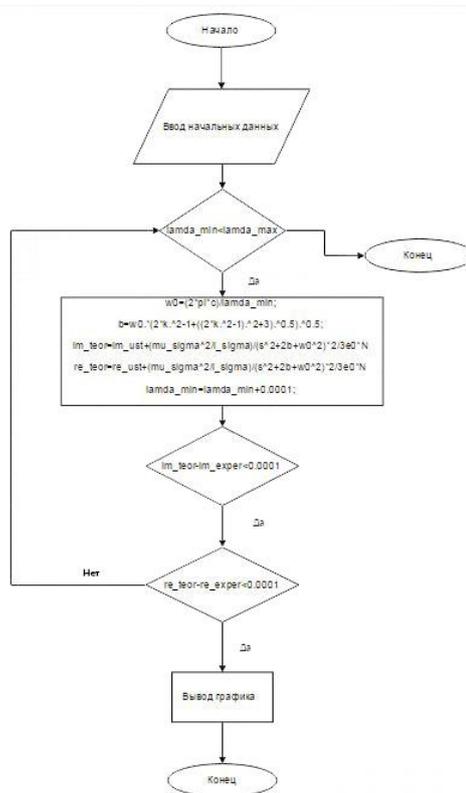


Рисунок 30 – Структурная схема алгоритмического процесса работы программного продукта

3.5 Результаты вычислительного эксперимента

В рамках данного вычислительного эксперимента были рассчитаны частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости массива воды, полностью состоящей из ее однотипных пяти молекулярных тетраэдрических конгломератов. Результаты представлены на рисунках 31, 32.

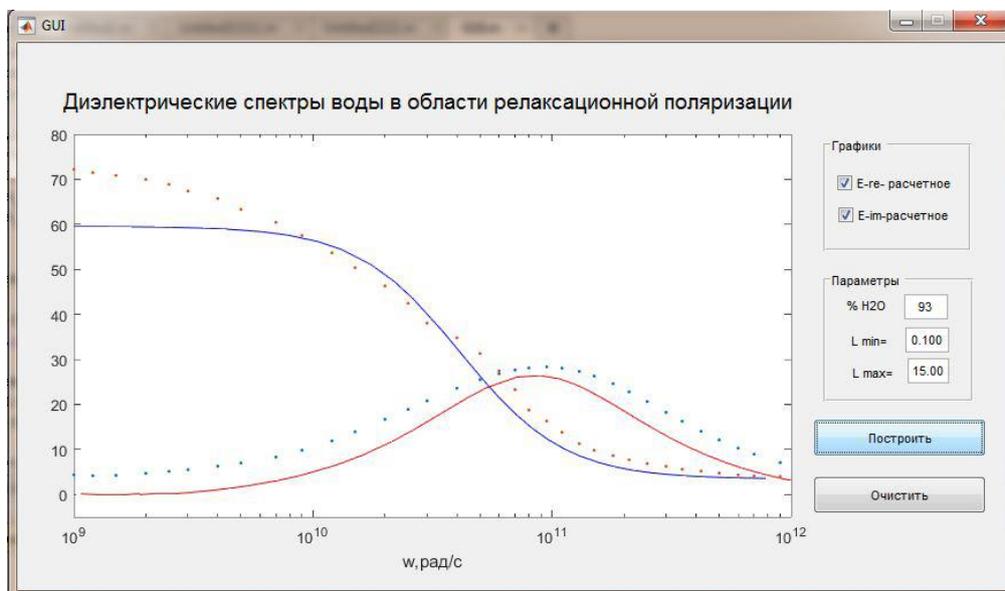


Рисунок 31 – Имитационные характеристики релаксационной поляризации массива воды, целиком состоящей из высокоэнергетических тетраэдрических конгломератов (H₂O)₅

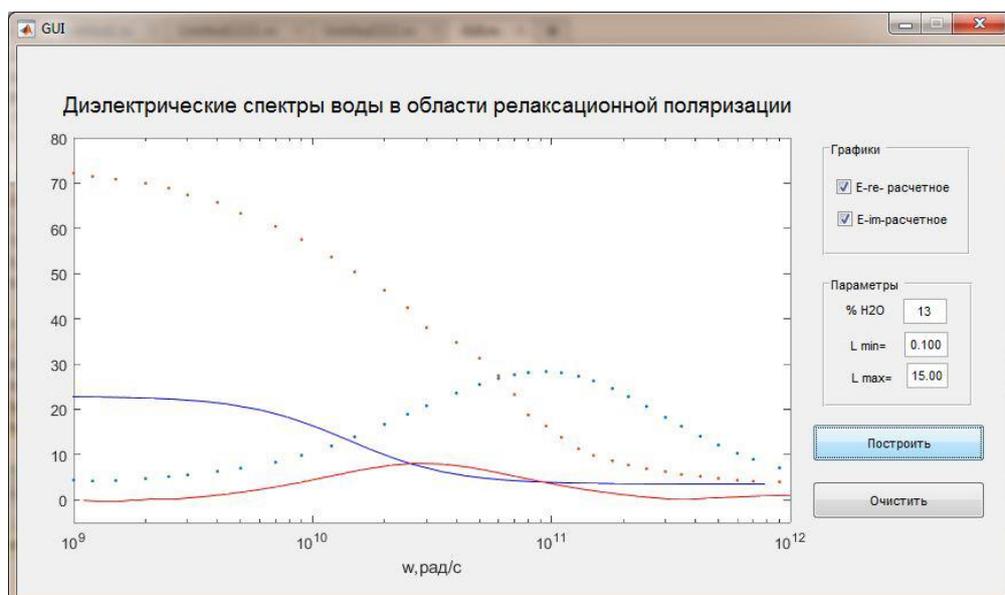


Рисунок 32 – Имитационные характеристики релаксационной поляризации массива воды, целиком состоящей из низкоэнергетических тетраэдрических конгломератов (H₂O)₅

Максимально приближенный вариант к физическим экспериментам, моделируемых кривых достигается с концентрацией в 93 % тетраэдрических конгломератов (H₂O)₅. (Рисунок 33)

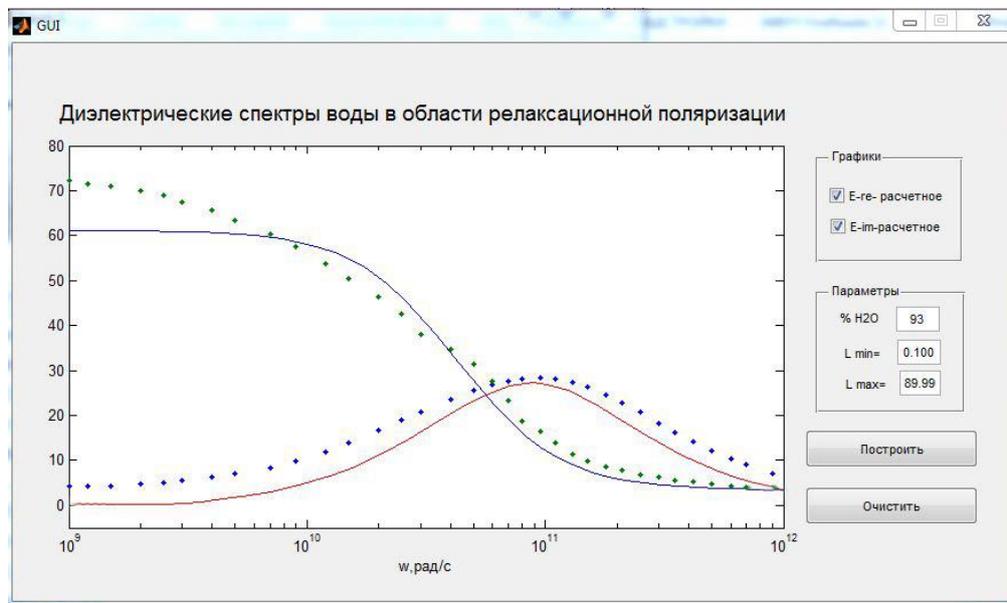


Рисунок 33 – Уровень соответствия имитационных кривых $\varepsilon_{Re}(\omega)$ и $\varepsilon_{Im}(\omega)$

Анализ уровня соответствия имитационных кривых $\varepsilon_{Re}(\omega)$ и $\varepsilon_{Im}(\omega)$ точечным массивам соответствующих контрольных данных, частично отраженным в таблице 1, позволяет сформулировать следующие выводы. Если водяной массив целиком состоит только из высокоэнергетических тетраэдрических конгломератов $(H_2O)_5$, то его результирующие диэлектрические характеристики несколько превышают физически измеряемые поляризационные свойства обыкновенной воды.

Если же он состоит исключительно из низкоэнергетических конгломератов той же общей структуры, то его диэлектрическая проницаемость резко снижается. Таким образом, можно констатировать, что в обычной воде одновременно присутствуют тетраэдрические конгломераты обеих разновидностей, обладающие определенным процентным содержанием.

Анализ представленных графиков показывает, что предлагаемая математическая модель, непосредственно применима для построения имитационных спектров релаксационной поляризации воды, оказываются весьма эффективна так как она хорошо соответствует точечным массивами контрольных данных. При этом ее недостатком является несколько уменьшенные значения характеристики $\varepsilon_{Re}(\omega)$, проявляемой в высокочастотной области. Данное обстоятельство может быть связано с тем, что в рамках проводимых расчетов были преднамеренно использованы статические значения $\varepsilon_{Reуст}$ и $\varepsilon_{Imуст}$, учитывающие поляризационные вклады упру-

гих видов поляризации воды, несмотря на их объективную динамичность, определяемую общим видом кибернетической модели комплексной диэлектрической проницаемости.

					<i>ВКР. 145373.090404.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		87

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как известно, всякая теоретическая концепция становится результативным инструментом познания окружающего нас мира только тогда, когда установлены законы или выявлены закономерности, связывающие конкретное физическое явление и его внутреннюю сущность, а также определены взаимосвязи между свойствами изучаемого объекта и его строением.

С подобной точки зрения предлагаемый системный подход основанного на классической теории поляризации диэлектриков с основными принципами теории моделирования автоматизированных систем управления а так же использовании принципов и методологии технической кибернетики к построению эффективного математического описания релаксационной поляризации воды может оказаться полезным не только для теории поляризации диэлектриков, но и для совершенствования системы знаний по физике конденсированного состояния в целом.

Методика вычисления, включающая математическую модель, представленную в настоящей работе, позволяет адекватно имитировать поляризационные характеристики типичной жидкости.

При этом авторские вычислительные средства, созданные для компьютерного моделирования диэлектрических характеристик многомолекулярных ассоциатов воды, позволяют судить о практической эффективности применения предлагаемых математических моделей и вычислительных методик.

В заключение необходимо отметить, что предлагаемые модели, численные методы и комплексы программ могут рассматриваться не только в качестве прикладного дополнения теоретической базы традиционной теории поляризации, но и оказаться полезными для анализа поляризационных процессов, протекающих в живых системах, каждая из которых в большей части своего веса обычно состоит из воды. Дальнейшее развитие предлагаемого подхода может быть направлено на апробацию применения полученных математических моделей к исследованию других жидких диэлектриков, например, двухосновных бескислородных кислот.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Губкин А.Н., Физика диэлектриков. – М.: Высш. шк., 1971. – 272 с.
2. Хиппель А.Р., Диэлектрики и волны / Пер. с англ. – М.: Изд-во ин, лит. 1960. – 438 с.
3. Сканави Г.И., Физика диэлектриков. Область слабых полей. – М.; Л.: Техтеориздат, 1949. – 500 с.
4. Потапов А.А., Деформационная поляризация. Поиск оптимальных моделей. – Новосибирск: Наука, 2004. – 511 с.
5. Еремина В.В., Имитационные модели релаксационной поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2008. – № 1(15). – С. 38-45.
6. Еремина В.В., Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2007. – № 1(13). – С. 12-21.
7. Еремина В.В., Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. II // Информатика и системы управления. – 2007. – № 2(14). – С. 78-89.
8. Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С. Моделирование электронно-атомной структуры конденсированных диэлектриков. – Благовещенск: АмГУ, 2006.
9. Поплавко Ю.М., Физика диэлектриков. – Киев: Вища школа, 1980. – 400 с.
10. Флайгер У., Строение и динамика молекул. – М.: Мир, 1982. – 872 с.
11. Игнатов С.К., Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. Ч.1. – Н.Новгород. Изд-во Нижегородского государственного университета им. Лобачевского, 2007. – 84 с.
12. Игнатов С.К., Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. Ч.2. – Н.Новгород. Изд-во Нижегородского государственного университета им. Лобачевского, 2007. – 84 с.

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>		89

чевского, 2010. – 79 с.

13. Рассадкин Ю.П., Вода обыкновенная и необыкновенная. – М.: Изд-во Галерея СТО, 2008. – 840 с.

14. Винер Н., Кибернетика. – 2-е изд. – М.: Сов, радио, 1968. – 366 с.

15. Фрадков А.Л., Кибернетическая физика. Принципы и примеры. – СПб. Наука, 2003. – 208 с.

16. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. – М.: Высш. шк., 2001. – 343 с.

17. Бусленко Н.П., Моделирование сложных систем. – М.: Наука, 1988. – 234 с.

18. Веников В.А., Веников Г.В. Теория подобия и моделирования. – М.: Высш. шк., 1984. – 306 с.

19. Зацепина Г.Н., Физические свойства и структура воды. – 2-е изд., перераб. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 170 с.

20. Эйзенберг Д., Кауцман В. Структура и свойства воды. – Л.: Гидрометеоиздат, 1975. – 280 с.

21. Антонченко В.Я., Физика воды. – Киев. Наук, думка, 1986. – 125 с.

22. Яшкевич В.И., Вода, движение молекул, структура, межфазные процессы и отклик на внешнее действие. – М.: Агар, 1998. – 87 с.

23. Антонченко В.Я., Давыдов А.С., Ильин В.В. Основы физики воды. - Киев: Наук. Думка, 1991. - 672 с.

24. Азимов А., Краткая история химии / Пер. с англ. - М.: Мир, 1983. - 187 с.

25. Кузьмичев В.Е., Законы и формулы физики. Справочник. - Киев. Наук, думка, 1989. - 864 с.

26. Осипов В.И., Минкин В. И., Гарновский А. Д. Справочник по дипольным моментам. - 3-е изд., перераб. - М.: Высш. шк., 1971. - 416 с.

27. Юхневич Г.В., Инфракрасная спектроскопия воды. - М.: Наука, 1973. - 203 с.

28. Фрелих Г., Теория диэлектриков / Пер. с англ. - М.: Изд-во ин, лит.

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		90

1960. - 252 с.

29. Хиппель А.Р., Диэлектрики и их применение / Пер. с англ. - М.; Л.: Госэнергоиздат, 1959. - 364 с.

30. Поплавко Ю.М., Физика диэлектриков. - Киев: Вища школа, 1980. - 400 с.

31. Габуда С.П., Связанная вода. Факты и гипотезы. - М.: Наука, 1982. - 159 с.

32. Губкин А.Н., Релаксационная поляризация диэлектриков // Известия высших учебных заведений. Физика. - 1979. - № 1. - С. 56-73.

33. Ельяшевич М. А., Атомная и молекулярная спектроскопия. - 2-е изд. - М.: Эдиториал УРСС, 2001. - 896 с.

34. Скуг Д., Уэст Д. Основы аналитической химии. - М.: Изд-во «Мир», 1979. - 480 с.

35. Демтредер В., Лазерная спектроскопия: основные принципы и техника эксперимента / Пер. с англ. - М.: Наука, 1985. - 608 с.

36. Потапов А.А., Ориентационная поляризация: Поиск оптимальных моделей. - Новосибирск: Наука, 2000. - 334 с.

37. Орешкин П.Т., Физика полупроводников и диэлектриков. - М.: Высшая школа, 1977. - 444 с.

38. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. - Н. Новгород: Изд-во НГУ, 1993. - 490 с.

39. Гусев Ю.А., Основы диэлектрической спектроскопии. Учебное пособие. - Казань: Изд-во «Казанский государственный университет», 2008. - 112 с.

40. Еремина В.В., Уляхина Д.А., Босяк Ю.В. Моделирование водных ассоциатов // Студент и научно-технический прогресс: мат. XLVIII межд. науч. конф. - Новосибирск: НГУ, 2010. - Сек. Физика. - С. 13

41. Уляхина Д.А., Еремина В.В. Математическая модель процесса поляризации воды // Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем: сб. ст. V межд. науч.-тех. конф. - Пенза: АН-НОО «Приволжский Дом знаний», 2010. - С. 150-153.

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		91

42. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Алгоритм расчета собственных параметров тетраэдрических конгломератов воды (H₂O)₅ // Информатика и системы управления. - 2013. - № 3(37). - С. 90-98.

43. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование молекулярных ансамблей воды // Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук: тр. 52-й всерос. науч. конф. МФТИ - М.: МФТИ, 2009. - Ч. IV. - Т. 2. - С. 159-161.

44. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Модифицированный расчет моментов инерции связанных молекул воды // Вестник ТОГУ. - 2012. - № 4(27). - С. 35-44.

45. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Моделирование релаксационной поляризации и молекулярной структуры воды // Вестник ТОГУ. - 2012. - № 1(24). - С. 33-4

46. Колобов А.Г., Молчанова Л.А. Численные методы линейной алгебры. Учебно-методическое пособие. - Владивосток: Изд-во Дальневосточного университета, - 2008. - 36 с.

47. Клейнен Дж., Статистические методы в имитационном моделировании. - М.: Статистика, 1978. - 388 с.

48. Шеннон Р., Имитационное моделирование систем. Искусство и наука. - М.: Мир, 1978. - 300 с

49. Tsai C.J., Jordan K.D. Theoretical study of the (H₂O)₆ cluster // Chemical Physics Letters. - 1993. - V 213. - P.181-188.

50. Соловей А.Б., Компьютерное моделирование структуры связанной воды: автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. по спец. 03.00.02. - Москва, 2006. - 22 с.

51. Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Моисеенко В.Г. Упругая электронная поляризации конденсированных диэлектриков // Доклады Академии наук. - 2010. - Т. 432. - № 5. - С. 612-615.

52. Еремина В.В., Имитационные модели релаксационной поляризации воды. II // Информатика и системы управления. - 2008. - № 3(17). - С. 34-39.

53. Еремина В.В., Имитационные модели релаксационной поляризации воды. III // Информатика и системы управления. - 2008. - № 4(18). - С. 21-32

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		92

54. Еремина В.В., Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. I // Информатика и системы управления. - 2007. - № 1(13). - С. 12-21
55. Лебедев В.И., Ионно-атомные радиусы и их значение для геохимии и химии. - Л.: Изд-во Ленинградского университета, 1969. - 408 с
56. Пауэрс Л., Снелл М. Microsoft Visual Studio 2008. - С.: Изд-во БХВ-Петербург, - 2008. - 1200 с.
57. Еремин И.Е., Еремина В.В., Уляхина Д.А. Метод расчета динамических параметров поляризационных процессов // Информатика и системы управления. - 2011. - № 3(29). - С. 60-69.
58. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование электронного строения трехмерных многомолекулярных кластеров воды // Информатика и системы управления. - 2010. - № 3(25). - С. 57-60.
59. Моисеенко В.Г., Еремина В.В., Уляхина Д.А. Метод генерации визуальных моделей многомолекулярных образований воды // Информатика и системы управления. - 2011. - № 1(27). - С. 31-37.
60. Цирельсон В.Г., Бобров М.Ф. Квантовая химия молекул. Учеб, пособие. - М.: РХТУ, - 2000. - 110 с
61. Шеннон Р., Имитационное моделирование систем. Искусство и наука. - М.: Мир, 1978. - 300 с.
62. Киндлер Е., Языки моделирования. - М.: Энергия, 1985. - 164 с.
63. Смит Д.М., Математическое и цифровое моделирование для инженеров, и исследователей / Пер. с англ. - М.: Машиностроение, 1980. - 271 с.
64. Еремин И.Е., Еремина В.В., Ланина С.Ю. Устранение катастрофы Моссоти с позиций системного подхода // Вестник Челябинского гос. педагогического университета. - 2010. - № 2. - С. 284-297.
65. Аристов А.Ю., Программная реализация кибернетической модели релаксационной поляризации воды // Молодежь XXI века: шаг в будущее: материалы XVI региональной научно-практической конференции: в 5 т – Благовещенск: ООО «Буквица», 2015 – Т. 2: Физико-математические науки. Технические науки.

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		93

66. Еремина В.В., Аристов А.Ю. Программная реализация модели электронной поляризации воды. Выбор среды разработки// ПРОГРЕССИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ПРОЦЕССЫ [Текст]: Сборник научных статей 2-й Международной молодежной научно-практической конференции (24-25 сентября 2015 года), в 3-х томах, Том 1, Юго-Зап. гос.ун-т., ЗАО «Университетская книга», Курск, 2015, 392 с.

67. Еремина В.В., Аристов А.Ю. Обобщенная кибернетическая модель поляризации воды. // Молодежь XXI века: шаг в будущее: материалы XVII региональной научно-практической конференции:

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		94

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Программная реализация решения задачи релаксационной поляризации воды
среде Matlab

```
function varargout = GUI(varargin)
% GUI MATLAB code for GUI.fig
% GUI, by itself, creates a new GUI or raises the existing
% singleton*.
%
% H = GUI returns the handle to a new GUI or the handle to
% the existing singleton*.
%
% GUI('CALLBACK',hObject,eventData,handles,...) calls the local
% function named CALLBACK in GUI.M with the given input arguments.
%
% GUI('Property','Value',...) creates a new GUI or raises the
% existing singleton*. Starting from the left, property value pairs are
% applied to the GUI before GUI_OpeningFcn gets called. An
% unrecognized property name or invalid value makes property application
% stop. All inputs are passed to GUI_OpeningFcn via varargin.
%
% *See GUI Options on GUIDE's Tools menu. Choose "GUI allows only one
% instance to run (singleton)".
% See also: GUIDE, GUIDATA, GUIHANDLES
% Edit the above text to modify the response to help GUI
% Last Modified by GUIDE v2.5 23-May-2016 14:40:57
% Begin initialization code - DO NOT EDIT
gui_Singleton = 1;
gui_State = struct('gui_Name',    mfilename, ...
```

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		95

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

```
'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
'gui_OpeningFcn', @GUI_OpeningFcn, ...
'gui_OutputFcn', @GUI_OutputFcn, ...
'gui_LayoutFcn', [] , ...
'gui_Callback', [];
if nargin && ischar(varargin{1})
gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
end
if narginout
[varargout{1:narginout}] = gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
else
gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
end
% End initialization code - DO NOT EDIT
% --- Executes just before GUI is made visible.
function GUI_OpeningFcn(hObject, eventdata, handles, varargin)
% This function has no output args, see OutputFcn.
% hObject    handle to figure
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
% varargin   command line arguments to GUI (see VARARGIN)
% Choose default command line output for GUI
handles.output = hObject;
% Update handles structure
guidata(hObject, handles);
% UIWAIT makes GUI wait for user response (see UIRESUME)
% uiwait(handles.figure1);
% --- Outputs from this function are returned to the command line.
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

```

function varargout = GUI_OutputFcn(hObject, eventdata, handles)
% varargout cell array for returning output args (see VARARGOUT);
% hObject handle to figure
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Get default command line output from handles structure
varargout{1} = handles.output;

function edit1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to edit1 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of edit1 as text
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of edit1 as a double
% --- Executes during object creation, after setting all properties.

function edit1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to edit1 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

function edit2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to edit2 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)

```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

```

% Hints: get(hObject,'String') returns contents of edit2 as text
%      str2double(get(hObject,'String')) returns contents of edit2 as a double
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function edit2_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject   handle to edit2 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles   empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
%      See ISPC and COMPUTER.
if      ispc      &&      isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
% --- Executes on button press in pushbutton1.
function pushbutton1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% % hObject   handle to pushbutton1 (see GCBO)
% % eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% % handles   structure with handles and user data (see GUIDATA)
nk2=2;% главное квантовое число атома
ni1=2; ni2=1;% химическая формула
r_hoh=3.1786e-10;
const_aem=1.6605655*10^(-27);
m1=1.00794*const_aem;
m2=15.9994*const_aem;
const_alpha=104.5*pi/180;% угол Н-О-Н [рад]
const_Plotnost=0.35;% плотность [кг/м^3]
const_rast=0.95718*10^(-10);% межъядерное расстояние О-Н [м]
const_porH=1;% порядковый атома Н

```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

```

const_massO=15.9994*const_aem;% атомная масса
const_e=1.6021892*10^(-19);          % заряд электрона [Кл]
const_epsilon0 = 8.85418782*10^(-12); % Эпсилон 0
const_muSigma          =          (const_porH-
const_Plotnost)*const_e*const_rast*(cos(const_alpha/2)); % сигма одной молекулы
const_ISigma = 8/3*(2*m1+m2)*r_hoh^2; % сигма одной молекулы
const_c=2.99792458*10^8; %Скорость света в вакуумме
const_mH = 1.00794*const_aem; %Масса молекулы водорода
ro=997.1
mo=12.5663706144*10^(-7);
wr=15,00*10^-3; % Резонансная чистота
k=[4.13];
D_molek=1/3.1;
tm=10^(-15);
const_N =ro/(ni1*const_mH+ni2*const_massO);
%Dанные экспериментов
lamda=[ 0.100 0.120 0.150 0.200 0.250 0.300 0.400 0.500 0.700 0.900 1.200
1.500 2.000 2.500 3.000 4.000 5.000 6.000 7.000 8.000 9.500 11.00 13.00 15.00 18.00
21.00 25.00 30.00 35.00 42.00 50.00 60.00 70.00 89.99].*10^(-3);
y_re=[ 1.899 1.912 1.934 1.975 2.020 2.060 2.126 2.189 2.270 2.364 2.481 2.629
2.882 3.133 3.375 3.829 4.248 4.631 4.980 5.305 5.747 6.132 6.538 6.867 7.252 7.544
7.831 8.074 8.238 8.389 8.497 8.587 8.648 8.720].*10;
x_im=[0.438 0.417 0.426 0.470 0.514 0.551 0.629 0.700 0.831 0.984 1.191 1.393
1.670 1.891 2.079 2.360 2.551 2.685 2.766 2.811 2.835 2.807 2.733 2.630 2.461 2.280
2.064 1.824 1.627 1.405 1.212 1.031 0.896 0.708].*10;
lamda_min=str2num(get(handles.edit2,'string'))*10^-3
lamda_max=str2num(get(handles.edit3,'string'))*10^-3
%Тело программы

```

					ВКР. 145373.090404.ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата		99

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

```

lamda1=lamda_min:0.00001:lamda_max;
% Тело программы
a1=get(handles.checkbox1,'value');
a2=get(handles.checkbox2,'value');
lamda1=lamda_min:0.000001:lamda_max;
while lamda_min<lamda_max
w0=(2*pi*const_c)/lamda_min;
b=w0.*(2*k.^2-1+((2*k.^2-1).^2+3).^0.5).^0.5;
num_relax=[((const_muSigma)^2)*D_molek/const_ISigma];
den_relax=[1 2*b*k w0^2*k];
block1=tf(num_relax,den_relax);
system=block1;
% Построение графиков
[re_relax,im_relax]=nyquist(system,lamda*10^12.2);
re_relax =3.482+2/(3*const_epsilon0)*const_N.*re_relax(:);
im_relax=1.595+2/(3*const_epsilon0)*const_N.*im_relax(:);
ncm2=(((re_relax.^2+im_relax.^2).^0.5+re_relax)./2).^0.5;
xcm2=(((re_relax.^2+im_relax.^2).^0.5-re_relax)./2).^0.5;
if a1==1 semilogx (lamda*10^12.3,abs(im_relax) ,'b' ,lamda*10^12,x_im-
1.595,');
xlabel('w,рад/с');
axis([10^(8.5) 10^(11) -5 80]);
end
if a2==1 semilogx
(lamda*10^11.94,1+re_relax,'r',lamda*10^12,y_re(length(lamda):-1:1)-15,');
axis([10^(8.5) 10^(11) -5 80]);
xlabel('w,рад/с')
end

```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

```

if      a1*a2==1      semilogx      (lamda*10^11.94,re_relax,'b'
,lamda*10^12.3,abs(im_relax),'r',lamda*10^12,x_im,','lamda*10^12,y_re(length(lamda
):-1:1)-15,');
axis([10^(8.5) 10^(11) -5 80]);
xlabel('w,рад/с')
end
pause(0.001)
lamda_min=lamda_min+0.0001;
end
% --- Executes on button press in pushbutton2.
function pushbutton2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to pushbutton2 (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
cla
% --- Executes on button press in pushbutton3.
function pushbutton3_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to pushbutton3 (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
function edit3_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to edit3 (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of edit3 as text
%       str2double(get(hObject,'String')) returns contents of edit3 as a double
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function edit3_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)

```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

```
% hObject handle to edit3 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
% --- Executes on button press in checkbox1.
function checkbox1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to checkbox1 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hint: get(hObject,'Value') returns toggle state of checkbox1
% --- Executes on button press in checkbox2.
function checkbox2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to checkbox2 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hint: get(hObject,'Value') returns toggle state of checkbox2
% --- Executes on button press in checkbox3.
% --- Executes on button press in pushbutton5.
function pushbutton5_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to pushbutton5 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
```

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Сертификаты и дипломы



Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата

ВКР. 145373.090404.ПЗ

Лист

103



СЕРТИФИКАТ

УЧАСТНИКА

ХVII РЕГИОНАЛЬНОЙ
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«МОЛОДЕЖЬ XXI ВЕКА: ШАГ В БУДУЩЕЕ»

выдан

*Аристову Александру
Юрьевичу*

Председатель Совета ректоров
вузов Амурской области,
ректор ФГБОУ ВПО «ДальГАУ»,
доктор сельскохозяйственных наук,
профессор, председатель оргкомитета
конференции

П.В. Тихончук П.В. Тихончук

Научный сотрудник ФГБОУ ВО «ДВОКУ»,
доктор сельскохозяйственных наук, профессор,
председатель оргкомитета конференции



В.М. Грызлов

В.М. Грызлов

24 мая 2016 г.
г. Благовещенск