Lines and Internal Storage // Management Science. – 1956. – 5. – 410 p. 11. Okamura, K., Yamashina, H. Computer simulation of the fact of buffer storage capacity in transfer line systems // Japanese Journal of Precision Engineering. – 1977. – Vol. 43. 12. Zahvoyska, L. Improvement Design and Management of Wood Processing Manufacture Systems Proceedings of the 7th International Symposium on Operational Research in Slovenia. L.Zadnik-Shtirn, V.Bastic and S.Drobne (Eds.). – Ljubljana: MIGRAF, 2005. – P. 397–403.

УДК 681.3:551.568.85:539.3

П. Сопрунюк, В. Юзевич
Фізико-механічний інститут ім. Г. Карпенка НАН України, Львів

МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕРХНЕВИХ ЕФЕКТІВ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ ОПТИЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ З ПОРОШКОВИМИ МАТЕРІАЛАМИ

Із застосуванням методів теорії розсіяння електромагнітного випромінювання, термодинамічного підходу і методу розкладу параметрів стану за малим параметром запропоновано математичну модель для дослідження взаємодії оптичного випромінювання з поверхневими шарами сферичних частинок, а також системи довгих циліндричних стрижнів, які є елементами порошкових матеріалів.

With use of methods of the theory of dispersion of electromagnetic radiation, the thermodynamic approach and a method of decomposition of parameters of a condition on small parameter it is offered mathematical model for research of interaction of optical radiation with surface layers of spherical particles, and also systems of long cylindrical cores which are elements of powder materials.

Вступ

Серед пристроїв, які використовують для вивчення змін дисперсного складу порошкових матеріалів у процесі спікання, важливе місце належить оптичним [1]. Відповідні існуючі методи оптики та фізики твердого тіла досить загальні і недостатньо конкретизовані, громіздкі та забезпечені неповною інформацією [1–3].

Крім того, теоретичні основи застосування оптичних пристроїв до зондування поверхні дрібнодисперсних порошкових матеріалів недостатньо розвинуті. Для опису фізичних процесів, які супроводжують відбивання електромагнітного променя оптичного чи інфрачервоного діапазону від поверхні дрібнодисперсного твердого тіла, використаємо макроскопічні підходи [2,4].

Розглядаємо поверхню порошкових матеріалів, які представляють систему сферичних частинок, а також систему довгих паралельних циліндрів, з показником заломлення, що може відрізнятись від усередненого показника заломлення плоскопаралельної пластини великого розміру. Відмінності виникають за рахунок дефектів структури і перерозподілу електронів провідності та механічних напружень у поверхневих шарах.

У науковому та інформаційному планах для розрахунку змін геометричних профілів поверхневих шарів порошкових матеріалів у процесі спікання треба проаналізувати результати застосування методу розкладу параметрів локального стану в ряди за малим параметром та визначити особливості змін функцій стану.

Для розрахунку оптичних особливостей сферичних та циліндричних структур застосовують метод матриці розсіяння [2]. Цьому методу надають перевагу, оскільки за ним можна моделювати структури з фрактальними й статистично випадковими розміщеннями просторових і поверхневих неоднорідностей. У цьому випадку неоднорідності мають сенс кривизни поверхні частинок.

Термодинамічний макроскопічний підхід для вивчення фізичних процесів на поверхні металу та в міжфазних шарах висвітлено у праці [5]. Застосування методу розкладу за малим параметром до проблеми оцінки параметрів механоелектричного поля в поверхневих шарах твердих тіл розвинуто у [6].

Треба зазначити, що раніше відбиті сигнали випромінювання оптичного діапазону від поверхонь із сферичними та циліндричними нерівностями для порошкових матеріалів не порівнювали.

Тому метою роботи було моделювання впливу неоднорідностей поверхневих шарів на особливості взаємодії оптичного випромінювання із системою сферичних частинок і системою довгих циліндричних стрижнів, які є елементами порошкових матеріалів.

Насамперед розглянемо розсіяння оптичного випромінювання на системі сферичних частинок (півсфер), розміщених на горизонтальній плоскій поверхні у газовому середовищі (зокрема, в повітрі). Показник заломлення повітря $n_a = 1$. Зондуюче оптичне випромінювання моделюємо плоскою хвилею. Потім розглянемо розсіяння оптичного випромінювання на системі паралельних густоупакованих циліндрів (півциліндрів) кругового перерізу, розміщених на горизонтальній плоскій поверхні у газовому середовищі (повітрі). Зондуюче оптичне випромінювання для циліндричних частинок також моделюємо плоскою хвилею [2].

Розсіяння оптичного випромінювання на системі сферичних частинок

Дослідження відбитого від таких складних (сферичних) поверхонь випромінювання ґрунтуються на інформації про матрицю розсіяння, яка є матрицею Стокса для розсіяння окремою частинкою [2]. Використовуємо принцип суперпозиції. Вважаємо, що відбите від поверхні зразка випромінювання для сукупності частинок є просто сумою потоків для окремих частинок. При цьому обмежуємось варіантом, що лінійні розміри системи частинок порошкового матеріалу малі порівняно з відстанню m_1, на якій знаходиться приймач випромінювання.

У першому випадку нехай плоска хвиля E_p падає під кутом α на систему сферичних частинок. Уважаємо, що загальна кількість півсфер на одиничній площі – N_s.

Для визначення параметрів Стокса, що описують падаюче і розсіяне світло від сферичної частинки, використовуємо комп’ютерну програму (фактично підпрограму загальної програми) і відповідні співвідношення, наведені у праці [2], зокрема співвідношення для фактора екстинкції Q_{ext}, що обчислюється за оптичною теоремою

$$Q_{ext} = (4\pi / k_p^2)\,\mathrm{Re}(S(0^o))/G\,, \tag{1}$$

де Re – символ реальної частини комплексної величини; $S(0^o)$ – параметр матриці Стокса; G – площа проекції частинки на площину, перпендикулярну до падаючого пучка (зокрема, для кулі радіуса R площа проекції дорівнює $G = \pi R^2$); $Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{sca}$; Q_{sca}, Q_{abs} – фактори ефективності розсіяння і поглинання відповідно. Екстинкція – це зумовлене розсіянням і поглинанням зменшення інтенсивності електромагнітної хвилі під час її проходження через середовище з певною кількістю частинок.

Для розрахунку параметрів Q_{ext}, Q_{sca}, Q_{abs} , а також розподілів параметрів S_{11} матриці Стокса для заданого діапазону кутів, що характеризують індикатрису розсіяння кулі радіуса R, використаємо програму, аналогічну CALLBH [2].

Розглянемо алгоритм, який описує отримання оптичного сигналу, відбитого від квадратної площадки розміром l (l = 5 мм) , заповненої сферичними частинками одного радіуса R (наприклад, R = 5 мкм). Вважаємо, що центри куль знаходяться у вершинах квадратів, ребро яких R (R = 5 мкм). Отже, оптичне випромінювання падає на поверхню площадки, заповненої півсферами, яких на цій площадці є $N = 2{,}5\cdot 10^5$.

Наступна підпрограма SEGMENT дає змогу визначити інтенсивність сигналу, що відбивається від півсферичного об’єкта і потрапляє на реєструючий пристрій (систему світлодіодів), розміри якого m (m = 15 мм), який розміщений на віддалі m_1 (m_1 = 15 мм) від поверхні порошкового матеріалу.

Впродовж першого етапу підпрограми використовують дані про Q_{ext}, Q_{sca}, а також розподіл параметрів S_{11} (індикатрису розсіяння) по кутах. Для прикладу розглянемо частинки кремнію, для яких показник заломлення $n+ik$ = 4,5+6,7i [7], $k_p = 2\pi n_a/\lambda$ – хвильовий вектор у навколишньому середовищі; n_a = 1; λ = 0,95 мкм. Тут i – уявна одиниця. Для приведених значень показника заломлення і розміру частинок отримаємо Q_{ext}= 2,186, Q_{sca}= 1,853, а також числові значення S_{11} у діапазоні кутів $\theta = [0, 2^o, 4^o, \ldots, 180^o]$ ($\Delta\theta = 2^o$). Оптимальне значення кроку за кутами $\Delta\theta = 2^o$ встановлено в результаті обчислювального експерименту. Використовуючи значення Q_{sca}= 1,853 і S_{11}, розроблено методику визначення відбитого від зовнішньої півсфери сигналу, тобто в діапазоні кутів $\theta = [90^o, 92^o, \ldots, 180^o]$. Йому відповідає фактор, який позначимо Q_z. З використанням даних для S_{11} отримано Q_z = 0,768 . Це означає, що відбитий від зовнішньої поверхні півсферичної частинки сигнал становить (оскільки Q_z/Q_{sca} = 0,414) 41,4 % частину сигналу, який може бути розсіяний вільною сферичною частинкою.

Під час наступного етапу підпрограми враховують кут падіння θ_p між пучком променів і перпендикуляром до горизонтальної поверхні, на якій знаходяться частинки. Для прикладу розглянемо ситуацію, коли кут $\theta_p = 45^o$. У цьому випадку враховують можливість затінювання однієї частинки іншою. Оскільки обмежуємось розглядом сферичних частинок однакового розміру, то проекція затіненої області на площину, перпендикулярну до падаючого випромінювання, являє собою два однакові симетричні відносно основи сегменти зі спільною основою a і висотою h. При цьому $b^2 = h^2 + a^2/4$, де b – бокова сторона рівностороннього трикутника з основою a і висотою h, вписаного в сегмент. Загальну площу двох секторів визначають за формулою [8]

$$S_1 = R^2\cdot(\pi\alpha_1/180 - \sin(\pi\alpha_1/180)) \approx 4h\cdot(3a + 4b)/15. \tag{2}$$

Тут α_1 – кут, під яким видно основу a сегментів з центра кола радіуса R. У цьому випадку $G = \pi R^2$ = 78,5 мм^2; S_1 = 11,33 мм^2; $S_z = G - S_1$ = 67,21 мм^2 . Відношення $z_1 = S_z/G$ = 0,856 і залежить від значення θ_p.

Наступний етап підпрограми SEGMENT враховує розміри реєструючого пристрою m (m = 15 мм), його розміщення відносно досліджуваного об’єкта і віддаль до нього m_1 (m_1 = 40 мм). З конструктивних міркувань у першому наближенні приймаємо, що один край реєструючого пристрою знаходиться у положенні, якому відповідає кут θ_r (зокрема, $\theta_{r1} = 135^o$). Діапазон кутів, під яким спостерігаємо реєструючий пристрій із центра півсферичної частинки, визначаємо із трансцендентного рівняння $\sin(\Delta\theta_r) = m/m_1$. Звідси $\Delta\theta_r = 22^o$. Отже, у цьому випадку отримаємо $\theta_r = [\theta_{r1}, \theta_{r2}]$ ($\theta_r = [135^o, 157^o]$, $\theta_{r2} = 157^o$, $\Delta\theta_r = \theta_{r2} - \theta_{r1}$).

Надалі оцінимо площу поверхні S_2 на сферичній частинці, з якої відбитий сигнал потрапляє на реєструючий пристрій. Оскільки кривизна поверхні незначна, то визначимо її проекцію (у цьому випадку проекція буде півколом). При цьому наближено можна записати $x_1 = R\cdot\sin(\Delta\theta_r)$, $S_2 = 0{,}5\pi(x_1)^2$, $z_2 = S_2/S_z$ (x_1 = 1,875 мкм; S_2 = 5,222 мкм^2, z_2 = 0,0821).

Для врахування нерівномірного розподілу частин відбитого сигналу по поверхні півсфери використовуємо визначений з допомогою підпрограми CALLBH розподіл параметра S_{11} (одного з параметрів матриці Стокса). Зокрема, для наведених вище значень комплексного показника заломлення $n+ik$ = 4,5+6,7i і радіуса частинок R = 5 мкм, нехтуючи багатократним розсіюванням, отримаємо, зокрема:

$$S_{11}(90^o) = 2{,}185;\ S_{11}(100^o) = 2{,}024;\ S_{11}(110^o) = 2{,}107;\ S_{11}(120^o) = 2{,}053;\ S_{11}(130^o) = 2{,}112;$$
$$S_{11}(135^o) = 2{,}089;\ S_{11}(140^o) = 2{,}064;\ S_{11}(145^o) = 2{,}075;\ S_{11}(150^o) = 2{,}066;\ S_{11}(160^o) = 2{,}081;$$
$$S_{11}(170^o) = 2{,}087;\ S_{11}(180^o) = 2{,}10. \tag{3}$$

Відповідний елемент підпрограми SEGMENT з використанням розробленої методики і даних (3) дає змогу отримати значення поправки $z_3 = 2{,}0688/2{,}0818 \approx 0{,}994$.

У результаті для окремої півсферичної частинки отримаємо відносну інтенсивність відбитого і зареєстрованого сигналу (якщо враховано вищенаведені обмеження та умови):

$$Z^{*s} = Q_z \cdot z_1 \cdot z_2 \cdot z_3 \qquad (Z^{*s} = 0{,}0536). \tag{4}$$

Для системи частинок використовуємо принцип суперпозиції, обґрунтований у праці [2]. Згідно з цим принципом результуючий сигнал від системи сферичних частинок, який потрапляє на реєструючий пристрій, матиме значення $Z_{N.} = N \cdot Z^{*s} \cdot I_n = 2{,}5 \cdot 10^5 \cdot 0{,}0536 \cdot I_n = 1{,}343 \cdot 10^4 \cdot I_n$. Тут I_n – початкова інтенсивність зондуючого випромінювання, яке від джерела потрапляє на сферичну частинку, радіус якої R.

Розсіяння оптичного випромінювання на одному циліндрі кругового перерізу

Розглянемо взаємодію випромінювання з безмежної довжини однорідним циліндром кругового перерізу. Нехай плоска електромагнітна хвиля E_p падає на циліндр у від'ємному напрямку осі x декартової системи координат по нормалі до осі циліндра, який розміщений у напрямку осі z.

Показник заломлення матеріалу $n+ik$ ($n+ik = 4{,}5+6{,}7i$). Вважаємо, що положення кожної частини циліндра характеризується радіус-вектором r_j. Розгляд розсіяння на паралельному циліндрі можна вважати двовимірним. Оскільки циліндр безмежний, то падаюче і розсіяне поля інваріантні відносно осі z. Електромагнітне поле, що потрапляє на поверхню j-го циліндра, складається з двох частин [2]:

$$E_i(j) = E_p(j) + \sum_{l \neq j}^{N} E_s(l, j) . \tag{5}$$

Падаюча плоска хвиля описується виразом [2]

$$E_p(j) = E_0 \exp(i k_p r) . \tag{6}$$

Тут E_0 – постійний вектор; i – уявна одиниця; k_p – хвильовий вектор (хвильове число); r – радіус-вектор.

Падаючу плоску хвилю можна розкласти по векторних циліндричних гармоніках у зв'язаній з j-м циліндром системі координат. Циліндричні векторні хвильові функції (M_n, N_n) у площині $x0y$ подано так [2]:

$$M_n = k(inZ_n(\rho)e_r / \rho - Z_n^{/}(\rho)e_\varphi)\exp(in\varphi) , \; N_n = kZ_n(\rho)e_z \exp(in\varphi) , \tag{7}$$

де e_r, e_φ, e_z – одиничні орти в циліндричній системі координат; $n = 0, \pm 1, \ldots$; $Z_n(\rho)$, $Z_n^{/}(\rho)$ – функції Бесселя; $\rho = r\sqrt{k^2 - h^2}$; параметри k, h входять до скалярного хвильового рівняння $\nabla^2 \Psi_{opt} + k^2 \Psi_{opt} = 0$ та його розв'язок $\Psi_{opt} = \Psi_n(r, \varphi, z) = Z_n(\rho)\exp(in\varphi)\exp(ihz)$ [2]; Ψ_{opt} – хвильова функція.

Циліндр характеризується матрицею розсіяння, яка зв'язує падаючу і дифраговану хвилі. Поле розсіяння для випадку нормального падіння зондуючого випромінювання подамо так:

$$E_s(j) = -\sum_{n=-\infty}^{n=\infty} E_n b_n^j N_n^3 , \tag{8}$$

де N_n^3 – циліндрична векторна хвильова функція, що що містить циліндричну функцію Ханкеля $Z_n = H_n(kr) = J_n(kr) + Y_n(kr)$; $J_n(kr)$, $Y_n(kr)$ – функції Бесселя; b_n^j – коефіцієнти розкладу розсіяного циліндром поля. Коефіцієнти b_n^j виражаються через коефіцієнти розсіяного циліндром поля p_n^j, використовуючи граничні умови на поверхні циліндра [2]:

$$b_n^j = b_n p_n^j , \quad b_n = \frac{J_n(mq)J_n^{/}(q) - mJ_n^{/}(mq)J_n(q)}{J_n(mq)H_n^{(1)/}(q) - mJ_n^{/}(mq)H_n^{(1)}(q)} , \tag{9}$$

де $q = ka$; $m = n_c/n_a$; a – радіус циліндра. У результаті обчислювального експерименту встановлено, що ітераційний метод вільний від обмеження розмірів системи, але збіжність ітераційної процедури є задовільною тільки у випадку, коли відносна величина багатократного розсіяння незначна. Тому ітераційний метод розрахунку параметрів застосовний в основному для невеликих систем.

Розсіяння оптичного випромінювання на системі циліндричних частинок

Розглянемо взаємодію випромінювання з системою паралельних циліндрів. Уважаємо, що загальне число циліндричних елементів на одиничній площі – L.

Повне поле розсіяння від системи L циліндрів визначається сумою полів, розсіяних циліндрами:

$$E_L = \sum_{j=1}^{L} E_s(j) = \sum_{j=1}^{L} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} E_n b_n^j \exp(-ik_s r_j) N_n^3 . \tag{10}$$

Якщо реєструюча система знаходиться досить далеко від поверхні порошкового матеріалу, то циліндричні хвильові функції при можна замінити при $r \to \infty$ виразами:

$$N_n^{(3)} \approx k \exp(in\varphi) \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} (-1)^n \exp(ikr + i\pi/4) . \tag{11}$$

При цьому в далекій зоні повне поле розсіяння набуває значення:

$$E_L = \sum_{j=1}^{L} E_s(j) = -E_0 \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \exp(ikr - i\pi/4) \sum_{j=1}^{L} \exp(-ik_s r_j) \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} b_n^j \exp(in\theta) , \tag{12}$$

де θ – кут між k_p і k_s.

Інтенсивність розсіяння оптичного випромінювання від системи циліндрів запишемо так:

$$I_L(\theta) = |E_L|^2 = |E_0|^2 \frac{2}{\pi kr} \left| \sum_{j=1}^{L} \exp(-ik_s r_j) \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} b_n^j \exp(in\theta) \right|^2 . \tag{13}$$

Запропоновані співвідношення (5)–(13) дають змогу моделювати процеси поширення світла в структурах з різним просторовим розміщенням розсіювачів (циліндрів).

Розглянемо алгоритм, який описує отримання оптичного сигналу, відбитого від квадратної площадки розміром l (l = 5 мм), заповненої циліндричними частинками радіуса R (зокрема, R = 5 мкм). У першому наближенні вважаємо, що циліндри паралельні і довжина їх збігається з розміром l. Беремо до уваги, що оптичне випромінювання падає на поверхню площадки, заповненої системою півциліндрів, під заданим кутом перпендикулярно до осі циліндрів.

Підпрограма CYLINDER дає змогу визначити інтенсивність сигналу, що відбивається від системи півциліндрів і потрапляє на реєструючий пристрій (систему світлодіодів), розміри якого m (m = 15 мм) і який розміщений на віддалі m_1 (m_1 = 15 мм) від поверхні порошкового матеріалу (аналогічно як в попередньому випадку для системи сферичних частинок).

На основі підпрограми CALCYL [2] отримаємо дані про Q_{ext}, Q_{sca}, а також розподіл параметрів S_{11} (індикатрису розсіяння) по кутах для циліндричного елемента. Як приклад розглянемо частинки кремнію, для яких показник заломлення $n+ik$ = 4,5+6,7i; λ = 0,95 мкм. Для приведених значень показника заломлення і розміру частинок отримаємо Q_{ext} = 1,357, Q_{sca}= 1,151, а також числові значення S_{11} у діапазоні кутів θ = [0, 180^o] ($\Delta\theta$ = 2^o). Використовуючи значення Q_{sca} і S_{11}, розроблено методику визначення відбитого від зовнішнього півциліндра випромінювання в діапазоні кутів θ = [90^o, 180^o]. Цій ситуації відповідає фактор розсіяння, який позначимо Q_z . У цьому випадку отримали числове значеення Q_z = 0,477.

Наступний етап підпрограми враховує кут падіння θ_p між пучком променів і перпендикуляром до горизонтальної поверхні, на якій знаходяться частинки. Як і в попередньому випадку, кут θ_p = 45^o. У цьому випадку треба врахувати можливість затінювання однієї частинки іншою. Оскільки обмежуємось розглядом частинок однакових розмірів, то проекція затіненої області на площину, перпендикулярну до падаючого випромінювання, являє собою рядок висотою (чи шириною) h (h = 0,5·R). Якщо розглядати частину циліндра висотою H = 2R = 1 мкм, то G = 2RH = 4R^2; S_1 = 2Rh = R^2; S_z = 3R^2. У цьому випадку отримаємо відношення z_1 = S_z/G = 0,75, яке залежить від значення θ_p.

Надалі підпрограма SEGMENT дає змогу враховувати розміри реєструючого пристрою m (m = 15 мм), його розміщення відносно досліджуваного об’єкта і віддаль до нього m_1 (m_1 = 40 мм). Як і в попередньому випадку, один край реєструючого пристрою знаходиться у положенні, якому відповідає кут θ_r (зокрема, $\theta_{r1} = 135^o$). Діапазон кутів, під яким спостерігаємо реєструючий пристрій із центра циліндричної частинки, $\Delta\theta_r = 22^o$. Отже, отримаємо $\theta_r = [\theta_{r1}, \theta_{r2}]$ ($\theta_r = [135^o, 157^o]$, $\theta_{r2} = 157^o$, $\Delta\theta_r = \theta_{r2} - \theta_{r1}$).

Оцінимо площу поверхні S_2 на циліндричній частинці, з якої відбитий сигнал потрапляє на реєструючий пристрій. У цьому випадку наближено можна записати $x_1 = R\cdot\sin(\Delta\theta_r)$, $S_2 = H\cdot x_1$, $z_2 = S_2/S_z$ (x_1 = 1,875 мкм; z_2 = 0,25).

Для врахування нерівномірного розподілу частин відбитого сигналу по поверхні півсфери використовуємо визначений за допомогою підпрограми CALLBH розподіл параметра S_{11} (одного з параметрів матриці Стокса). Зокрема, для наведених вище значень комплексного показника заломлення $n+ik$ = 4,5+6,7i і радіуса циліндра R = 5 мкм отримаємо, зокрема:

$$S_{11}(90^o) = 4{,}83;\ S_{11}(100^o) = 1{,}99;\ S_{11}(110^o) = 2{,}44;\ S_{11}(120^o) = 4{,}16;\ S_{11}(130^o) = 2{,}01;$$
$$S_{11}(135^o) = 1{,}94;\ S_{11}(140^o) = 1{,}86;\ S_{11}(145^o) = 4{,}1;\ S_{11}(150^o) = 6{,}33;\ S_{11}(160^o) = 1{,}68;$$
$$S_{11}(170^o) = 3{,}34;\ S_{11}(180^o) = 6{,}73. \tag{14}$$

Відповідний елемент підпрограми SEGMENT з використанням розробленої методики і даних (14) дає змогу отримати значення поправки z_3 = 2,321.

У результаті для окремої циліндричної частинки (радіус якої R і висота H) отримаємо відносну інтенсивність відбитого і зареєстрованого сигналу (якщо враховано вищенаведені обмеження і умови):

$$Z^{*c} = Q_z\cdot z_1\cdot z_2\cdot z_3 \qquad (Z^{*c} = 0{,}207). \tag{15}$$

Порівнюючи Z^{*s} [4] і Z^{*c}, отримаємо відношення $w^* = Z^{*c}/Z^{*s}$ = 3,86, яке вказує на те, що для циліндричних частинок з тим самим радіусом кривизни, що і для сферичних, відбитий сигнал у 3,86 раза інтенсивніший.

Термодинамічний опис поверхневих шарів у системі контактуючих циліндрів

Циліндри радіуса R моделюємо не суцільними, а кусково однорідними, враховуючи однорідне осердя радіуса r_0 і поверхневу оболонку товщиною $h_s = R - r_0$, в якій знаходяться зв’язані електричні заряди, а також адсорбовані частинки зовнішнього середовища. Під час розгляду і опису взаємодії випромінювання зі структурними елементами подвійного шару на поверхні частинок враховуємо наявність механічних напружень [9,10].

Щоб оцінити компоненти тензора механічних напружень σ_r , σ_φ , σ_z (r, φ, z – циліндричні координати відповідно) і його кульової частини $\sigma_0 = (\sigma_r + \sigma_\varphi + \sigma_z)/3$, а також товщини поверхневої області h_s у напівпровідниковому циліндрі застосуємо підхід і співвідношення, викладені у праці [11].

Співвідношення термодинамічної моделі такі [11]:

$$\sigma_h = \int_{r_0}^{R} \sigma_r \cdot dr, \tag{16}$$

$$\sigma_\varphi + p = 0 \text{ (для } r = r_0\text{)} \quad (p = 100 \text{ кПа – атмосферний тиск}). \tag{17}$$

$$\gamma_s = \gamma_1 + \xi\gamma_2, \qquad \frac{\partial\gamma}{\partial k} = \frac{\partial(\gamma_1 + \xi\gamma_2)}{\partial k} = 0\,. \tag{18}$$

Тут σ_h – поверхневий натяг; γ_s – поверхнева енергія, подана у вигляді суми енергії зв’язаних зарядів γ_1 та механічної $\xi\gamma_2$ складових;.

Співвідношення (16)–(18) становлять основу системи рівнянь для визначення розподілу механічних напружень у поверхневих шарах.

Для визначення розподілу в поверхневій області параметрів стану для поля зв’язаних зарядів і механічного полів треба задати числові значення поверхневих натягу σ_h та енергії γ_s [7, 12, 13]. Але не для всіх матеріалів величини σ_h та γ_s подано в довідниках і наукових статтях, тому їх можна наближено розрахувати з використанням методу атомних взаємодій [14].

Напруження σ_{ij} у поверхневому шарі знаходимо, розкладаючи їх і деформації ε_{ij} в ряди за безрозмірним малим параметром $b_м = \beta\Phi_0$, аналогічно як у праці [6].

Для використання співвідношень моделі прийнято, що початок координат в центрі циліндра на осі $z = 0$.

Використовуючи значення фізичних постійних для напівпровідникових матеріалів [15], встановлено, що товщина поверхневої області приблизно дорівнює $h_s \approx 20$ *нм*, а усереднене в поверхневій зоні напруження [16]

$$\sigma_u = \int_{r_0}^{R} (\sigma_r + \sigma_\varphi + \sigma_z) \cdot dr, \tag{19}$$

набуває, зокрема, значення $\sigma_u \approx 2100$ *МПа* (розтяг).

Моделювання впливу характеристик поверхневого шару на показник заломлення матеріалу

Експериментально визначено, що коефіцієнт заломлення твердих тіл $n_a = m_s - i \cdot x_s$ лінійно зростає із навантаженням зразка гідростатичним тиском p. Зокрема, для напівпровідника згідно з даними праць [17–19] при $p = 100$ *МПа*

$$\Delta m_s = 0{,}01; \ \Delta x_s = 0{,}003. \tag{20}$$

Використавши оцінку (20) і вважаючи, що $p \approx \sigma_u$, отримаємо для поверхневого шару товщиною $h_s \approx 20$ *нм*: $\Delta m_s = 0{,}23; \ \Delta x_s = 0{,}069.$

З метою дослідження залежності показника заломлення напівпровідникового матеріалу від змін механічного навантаження та радіуса циліндрів використаємо співвідношення [16]

$$m_s = \sqrt{(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \alpha)/2}, \qquad x_s = \sqrt{(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - \alpha)/2}, \tag{21}$$

де

$$\alpha = 1 + \omega_p^2 \cdot (\omega_0^2 - \omega^2)/((\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2 \cdot \omega^2); \ \beta = \omega_p^2 \cdot \gamma \cdot \omega /((\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \cdot \omega^2);$$

$\omega_p^2 = N_e \cdot q_0^2 /(m_e \cdot \varepsilon_0)$; ω_0 – резонансна частота; ω_p – плазмова частота; N_e – концентрація зв'язаних електричних зарядів; $q_0 = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ *Кл* – елементарний електричний заряд; $m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ *кг* – ефективна маса електрона; ω – частота зондуючого випромінювання; $\in = \alpha + \beta \cdot i$ – комплексна діелектична проникність матеріалу частинки (циліндра) порошкового елемента; γ – коефіцієнт заникання електромагнітних хвиль.

Використовуючи співвідношення (21), знаходимо, що для порошкового матеріалу, фізичні характеристики якого відповідають кремнію, при $\lambda_1 = 1$ *мкм* і $\lambda_2 = 0{,}436$ *мкм* ($m_{s1} = 1{,}95$; $x_{s2} = 1{,}02$; $m_{s2} = 1{,}3$; $x_{s2} = 0{,}68$ [17–19]) .

$$\gamma = 3{,}5757 \cdot 10^{16}\,Гц; \ \omega_p = 1{,}637 \cdot 10^{16}\,Гц; \ \omega_0 = 5{,}778 \cdot 10^{15}\,Гц, \tag{22}$$

а в поверхневому шарі

$$\gamma_c = 3{,}133 \cdot 10^{16}\,Гц; \ \omega_p^c = 7{,}0348 \cdot 10^{18}\,Гц; \ \omega_0^c = 5{,}9652 \cdot 10^{15}\,Гц. \tag{23}$$

тут λ_1 і λ_2 довжини зондуючих електромагнітних хвиль.

За допомогою числових значень фізичних величин $\gamma, \gamma_c, \omega_p, \omega_p^c, \omega_0, \omega_0^c$, наведених у (22), (23), знаходимо для зондуючих електромагнітних хвиль ($\lambda_1 = 0{,}55$ *мкм*, $\lambda_2 = 0{,}95$ *мкм*):

$$m_1 = 1{,}4102; \ x_1 = 0{,}7741; \ m_{c1} = 1{,}0723; \ x_{c1} = 0{,}2148;$$

$$m_2 = 1{,}8895; \ x_2 = 0{,}9994; \ m_{c2} = 1{,}2294; \ x_{c2} = 0{,}3237\ . \tag{24}$$

Фактори екстинкції Q_{ext}, розсіяння Q_{sca}, а також розподіл параметрів S_{11} для сферичних частинок з оболонками і циліндрів з оболонками розраховуємо чисельно, використовуючи співвідношення теорії Мі та відповідні підпрограми, аналогічні COAT, яка сформована для сферичних частинок з оболонками [2].

Як показали результати обчислювального експерименту, під час визначення параметрів, що характеризують дисперсний склад покриття з порошку, треба використати інформацію про наявність у частинках тонкого поверхневого шару, в якому зосереджено механічні напруження. Для оцінки впливу зв'язаних електричних зарядів на поверхневі взаємозв'язані оптичні, електричні і механічні ефекти враховуємо залишкові механічні напруження (напруження, що характеризують поверхневу енергію), оскільки прямий зв'язок між характеристиками поверхневого шару і функцією розподілу сферичних та циліндричних частинок за розмірами у поверхневому шарі порошкового матеріалу експериментально встановити досить важко.

Висновки

1. В основу досліджень оптикомеханічних характеристик поверхневої взаємодії для систем сферичних та циліндричних частинок покладено співвідношення оптики, нерівноважної термодинаміки, фізики поверхні твердого тіла, а також відповідне інформаційне забезпечення, викладене у монографії К. Борена, Д. Хафмена.
2. Розроблено алгоритм визначення потоку оптичного випромінювання, відбитого від системи сферичних частинок одного радіуса.
3. Розроблено алгоритм визначення потоку оптичного випромінювання, відбитого від системи циліндричних частинок одного радіуса.
4. Порівнюючи інтенсивність відбитого випромінювання від частинок різної геометричної форми, встановлено, що для циліндричних частинок з тим самим радіусом кривизни, що і для сферичних, відбитий сигнал у 3,86 раза інтенсивніший.
5. На основі термодинамічного підходу до вивчення механоелектронних процесів у наношарах поблизу межі розділу напівпровідник – повітря запропоновано методику розрахунків для визначення розподілу механічних напружень. Методика інформаційного забезпечення конкретних задач ґрунтується на використанні методу розкладу локальних параметрів стану в ряди за малим параметром.
6. На основі обчислювального експерименту для поверхневого шару порошкового матеріалу, фізичні характеристики якого відповідають кремнію, розраховано зміну комплексного показника заломлення.
7. Встановлено, що під час визначення параметрів, що характеризують дисперсний склад покриття з порошку, необхідно використати інформацію про наявність в частинках тонкого поверхневого шару, в якому зосереджено механічні напруження. Для оцінки впливу зв'язаних електричних зарядів на поверхневі взаємозв'язані оптичні, електричні і механічні ефекти у напівпровідникових тілах враховуємо залишкові механічні напруження (напруження, що характеризують поверхневу енергію), оскільки прямий зв'язок між характеристиками поверхневого шару і функцією розподілу сферичних та циліндричних частинок за розмірами в поверхневому шарі порошкового матеріалу експериментально встановити досить важко.

1. Коузов П.А. Основы анализа дисперсного состава промышленных пылей и измельченных материалов. – Л.: Химия, 1987. – 364 с. 2. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 660 с. 3. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела: Пер. с англ. – М.: Наука, 1978. – 792 с. 4. Топорец А.С. Оптика шероховатой поверхности. – Л.: Машиностроение, 1988. – 191 с. 5. Юзевич В.М. Критерії міцності твердого тіла з урахуванням розмірного ефекту і впливу середовища // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1999. – № 2. – С. 80–85. 6. Юзевич В., Гук О., Сопрунюк П. Моделювання адгезійних зв'язків у твердих тілах з *використанням методу розкладу за малим параметром // Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”. – 2003. – № 481. – С. 58–66. 7. Таблицы физических величин: Справочник. – М.: Атомиздат, 1976. – 1006 с. 8. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике. Пер. с нем. – М.: Наука, 1981. – 720 с. 9. Пришивалко А.П., Бабенко В.А., Кузьмин В.Н. Рассеяние и поглощение света неоднородными и анизотропными сферическими частицами. – Минск: Наука и техника, 1984. – 264 с. 10. Юзевич В.Н. Моделирование процесса адсорбции в приповерхностном слое металла // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 1998. – № 3. – С. 32–37. 11. Сопрунюк П.М., Юзевич В.М., Підгірняк Я.Є. Методи оцінки зміни оптичних констант на поверхневих неоднорідностях частинок порошкових матеріалів // Відбір і обробка інформації. – 2005. – Вип. 99. – С. 5–10. 12. Eustathopoulus N., Joud J.-C. Interfacial tension and adsortion of metallic systems // Current Topics in Material Science. – 1980. – Vol. 4. – P. 281–360. 13. Linford R.G. Surface thermodynamics of solids // Solid State Surface Sci. – N.-Y., 1973. – Vol. 2. – P. 1–152. 14. C.W. Price, J.P. Hirth. Surface energie end surface stress tensor in an atomistic model // Surface science. – 1976. – **57**, № 2. – P. 509–522. 15. Юзевич В.М., Сопрунюк П.М., Коман Б. П., Луговий П. В. Енергія адгезійних зв’язків у системі мідь – тверде тіло // Укр. фіз. журн. – К., 2005. – Т. 50, № 6. – С. 575–581. 16. Сопрунюк П.М., Юзевич В.М. Діагностика матеріалів і середовищ. Енергетичні характеристики поверхневих шарів. – Львів: ФМІ ім. Г.В. Карпенка НАН України, вид-во “СПОЛОМ”, 2005. – 308 с. 17. Waxler R.M., Weir C.E. Effect of hydrostatic pressure on the refractive indices of some solids // J. Res. Bur. Standards. – 1965. A69, No.4. – P. 325–333. 18. Gartney J.T., Ergun S. Optical properties of coals and graphite // Bull. Bur. Mines. – 1967. No. 641. – P. 1–49. 19. Halow Y.S., Zeek S.Y. Optical charakteristios and Ringelman number of plumes with log-normal distributions // AIGHE Symp. Sor. – 1975. – Vol. 71, No. 147. – P. 38–46.*

УДК 004.891.2

А. Ковальчук
Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра автоматизованих систем управління

ОЦІНКА СТІЙКОСТІ БУДІВЕЛЬНИХ КОНСТРУКЦІЙ

Описано методику оцінки придатності існуючих споруд з використанням засобів теорії нечітких множин. Методику можна застосовувати як в зонах сейсмічної активності, такі в звичайних умовах як інструмент під час розроблення методів інженерно-сейсмічних досліджень.

In the article the method of estimation of fitness of existent building with the use of facilities of the fuzzy set theory is described. A method can be applied as in the areas of seismic activity, so in ordinary terms, and can become an instrument at development of methods of engineering-seismic researches.

Вступ

У зонах надзвичайних ситуацій споруди можуть пошкодитися чи зруйнуватися. Однак переважна більшість споруд продовжують функціонувати, отримавши ушкодження різного степеня, які можна безпосередньо виміряти чи виявити, інші ж не допускають безпосередньої оцінки ушкодження. Такі споруди, що встояли, необхідно класифікувати відповідно до ступеня ушкодження для того, щоб можна було вжити відповідних заходів для відновлення одних чи зносу інших [1, 2].