УДК 389

О.І. Шевченко
Держспоживстандарт України

СПЕЦІАЛЬНИЙ МАТЕМАТИЧНИЙ АПАРАТ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ НАНОМЕТРІЇ

Пропонується до розгляду один з можливих методів створення спеціального апарату фізики та метрології, орієнтованого на розв'язання специфічних задач нанометрії.

One of the methods for creation special apparatus critiques physic and metrology orientated for decision specific problem of nanometry in address are considered.

Пропонується до розгляду одна з можливостей створення спеціального апарата фізики і метрології, орієнтованого на розв'язання специфічних задач нанометрії.

1. Вважається, що для успішного розвитку нанометрії необхідно розробити спеціальний апарат фізики, математики та метрології. Постулати класичної фізики та нанометрії різняться (див. таблицю). Розглядаються не точки, а об'єкти. Постулатом є твердження, що точка не є нескінченно малою. Об'єкти утворюють множину, на який задана міра. Міра задається як на кожному об'єкті, так і на множині об'єктів. Можливий варіант задавати міру об'єкта через міру множини або навпаки. На цій множині немає диференціювання, а задані операції підсумовування та віднімання, і є множення тільки на додатні натуральні числа *n*. А це означає, що немає інтеграла, а є сума; немає нескінченних рядів, а є скінченні ряди [1]. На множині об'єктів немає нескінченно малої величини, всі величини малі, але скінченні, і тому кількість об'єктів може бути підрахована. Обмін енергією між атомами відбувається квантованими (не безперервними) величинами.

Порівняння постулатів класичної фізики твердого тіла та об'єктів у нанометрії

Класична фізика	**Нанометрія**
Кінематика	
Точка	**Об'єкт**
Матеріальною точкою називається тіло, розміри і форма якого не є істотними у задачі, що розглядається	Матеріальний об'єкт – тіло, розміри якого є істотними
Матеріальна точка нескінченно мала	Об'єкт має скінченний розмір (порядку нанометра, 1 нм = $1 \cdot 10^{-9}$ м). Наприклад, атомний радіус атома Cr = 0,125 нм
Маса матеріальної точки зосереджена у точці	Маса розподілена рівномірно по всьому об'єкті
Абсолютно твердим тілом (АТТ) називається тіло, відстань між двома точками якого є постійною. АТТ часто розглядають як систему матеріальних точок, жорстко зв'язаних одна з однією	*Тіло* – скінченна множина об'єктів із введеною на них мірою
Динаміка руху	
Швидкістю називається векторна величина, яка дорівнює перший похідній у часі від радіуса-вектора рухомої точки	*Переміщення* – кінцева зміна координат об'єкта за кінцевий проміжок часу

2. Функцію цілочислового аргументу називають гратчатою функцією $f(n) = f_n$ [2]. До гратчатих функцій можна застосувати дискретне перетворення Лапласа або *D*-перетворення [2]. Пропонується використовувати простішу огинаючу гратчатої функції – ступінчасту функцію $f[t]$, $n \le t \le n+1$.

Цілочисловий аргумент n відповідає номеру об'єкта n (атома, молекули).

Значення функції $f[t]$, наприклад, температури, на усьому об'єкті від n до $n+1$ є однаковим і є рівним; на об'єкті від $n+1$ до $n+2$ – це значення інше, і також однакове і т.і.

Природно поширити поняття функції $f[t]$ на поняття багатовимірної матриці функцій, де матричними елементами будуть: фізичні характеристики – маса, теплопровідність, температуро-провідність, щільність тощо.

Як температуру доцільно використовувати термодинамічну температуру T [3] (а не енергетичні параметри квантової фізики), яка визначається як величина, обернена до похідної від ентропії тіла по його енергії: $1/T = dS/dE$, де S − ентропія, E − енергія. Термодинамічна температура має розмірність енергії [3].

На рис. 1 показана функція $f(n) = f_n$ цілочислового аргументу, а на рис. 2 – ступенева функція $f[t]$, яка є огинаючою гратчатої функції $f(n)$.

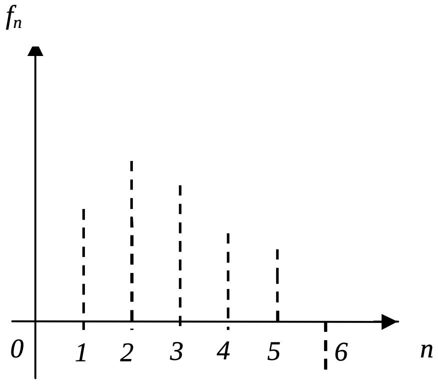

Рис. 1. Функція $f(n) = f_n$ цілочислового аргументу

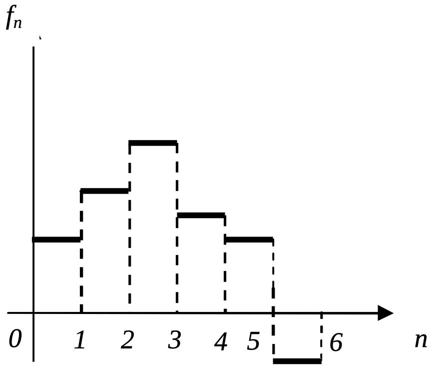

Рис. 2. Ступенева функція $f[t]$, яка є огинаючою гратчатої функції $f(n)$

3. Можна використати існуючий апарат розв'язання рівнянь у частинних похідних за допомогою різницевих схем [4], наприклад, рівняння теплопровідності, змінивши термінологію. Хоча рівняння теплопровідності і отримано з використанням нескінченно малих величин, але його розв'язання різницевими методами, з урахуванням того, що різниці кінцеві, є допустиме. Величина різниці – за визначення діаметр об'єкта.

У роботі [5] наведено розв'язання рівняння теплопровідності у частинних похідних різницевим методом.

Рівняння теплопровідності у різницевій формі:

$$\frac{c^{j+1}{}_{i+1} + c^{j+1}{}_{i}}{2} \bullet \frac{T^{j+1}{}_{i} - T^{j}{}_{i}}{\Delta t} = \lambda_{i+1} \frac{T^{j+1}{}_{i+1} - T^{j+1}{}_{i}}{h_{i+1}} - \lambda j_{+1} \frac{T^{j+1}{}_{i} - T^{j+1}{}_{i-1}}{h_i} +$$

$$\lambda_i \frac{z}{r_i} \frac{T^{j+1}{}_{i+1} - T^{j+1}{}_{i-1}}{(h_{i+1} + h_i)/2} + q^{j+1}{}_{i} \qquad (1)$$

де i − просторовий індекс; j − часовий індекс; h − крок по координаті. T − поточна температура, q_i^{j+1} − тепловий потік джерела теплоти; r_i − радіус на i кроці; z − коефіцієнт форми; l_i − коефіцієнт теплопровідності на i кроці по координаті; $c^{j+1}{}_{i}$ − питома теплоємність на i кроці по координаті и

j+1 кроці по часу. Прогоночні коефіцієнти, граничні умови для центру кулі і для поверхні наведено у [5].

Температура у цій моделі змінюється стрибками від об'єкта до об'єкта (від атома до атома).

4. У літературі є приклад [6] розв'язання системи звичайних диференційних рівнянь, які описують коливання кристалічної гратки, за допомогою диференційно-різницевої задачі на колі. У лінійному наближенні система рівнянь Ньютона для такої гратки з $2N$ атомів маси m розташована на колі радіуса 1 і на відстані $h = \pi/N$ має вигляд [4]:

$$\ddot{u}_n = c^2 \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2}, \; n = 0, \pm 1, \ldots, \pm N, \tag{5}$$

де $u_i(t)$ − відхилення i-го атома у момент часу t від положення рівноваги; c − швидкість звуку; h − відстань між атомами.

У роботі [6] у нескінченному наближенні $h \to 0$ виведено хвильове рівняння, яке під час розв'язання на ЕОМ дало добрий збіг з точним розв'язком і підтвердило наявність шлейфа швидких осциляцій коливання гратки. При врахуванні нелінійних квадратичних членів у коливанні кристалічної гратки у роботі [6] отримано розв'язок рівняння для коливань, яке призводить до неосцилюючих змін кристала на велику (порівняно з амплітудою теплових коливань) величину. Прийоми розв'язання задач, розроблених у [6], можуть бути застосовані для розв'язання нелінійних задач нанометрії. Для того щоб наблизити розв'язок задачі коливання кристалічної гратки, наведеної у [6], до ідеї, висловленої у цій статті, необхідно буде зробити деякі корегування, а саме, атоми кристалічної гратки вважати не матеріальною точкою, а матеріальним об'єктом з кінцевими розмірами. Це зумовить можливість не тільки коливального, але й обертального руху матеріального об'єкта, та застосування всього математично і фізичного апарату для опису обертального руху матеріального об'єкта, включаючи момент імпульсу обертального руху тощо.

Висновки.

1. Показана можливість створення постулатів метрології для нанометрії без використання поняття абсолютно твердого тіла.

2. Проаналізована можливість використання дискретного перетворення Лапласа до функцій цілочислового аргументу, де значення цих функцій відповідають фізичним характеристикам окремого атома (молекули).

3. Наведено приклад використання різницевих схем для розв'язання рівняння теплопровідності у частинних похідних для нанометрії.

4. Наведено використання відомого з літератури прикладу для можливості розв'язання системи звичайних диференційних рівнянь за допомогою диференційно-різницевої задачі для системи атомів у кристалічні ґратці. Цей метод з добре розробленим математичним апаратом прийнятний для використання для розв'язання задач нанометрії.

1. Справочник по математике. Для инженеров и учащихся втузов / И.Н. Бронштейн, К.А. Семендяев. − М.: Главная редакция физико-математической литературы изд-ва "Наука", 1981. − 720 с. 2. Мартыненко В.С. Операционное исчисление. – К.: Вища школа, 1973. – 268 с. 3. Физика твердого тела: Энциклопедический словарь. – К.: Наукова думка. – Т.2, 1998. – 648 с. 4. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы (введение в теорию). Учебное пособие. – М.: Главная редакция физико-математической литературы изд-ва "Наука", 1973. – 400 с. 5. Шевченко А.И, Униговский Я.С., Наривский А.В. Исследование кинетики нагрева частиц в газовой фазе методом математического моделирования // Процессы литья. – 1993. – № 3. − С. 71–75. 6. Маслов В.П. Операторные методы. – М.: Главная редакция физико-математической литературы изд-ва "Наука", 1973. – 543 с.