

Рис. 5. Коефіцієнт передачі нульового фільтра на RC-структурі

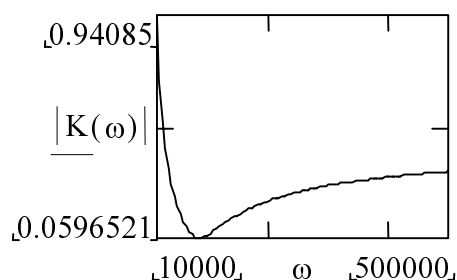


Рис. 6. Залежність нульової частоти фільтра від відносної вологості

збільшенні ємності на 1 пФ нульова частота фільтра зменшується на 570 Гц. Враховуючи, що залежність ємності від відносної вологості для розглянутого композиційного матеріалу також має практично лінійний характер, можна стверджувати, що сенсор вологості на основі RC-структури забезпечує практично лінійну

залежність нульової частоти від вологості (рис. 6). На рис. 6 нульова частота вказана в кГц, відносна вологість – в %. У разі зміни відносної вологості на 1 % нульова частота фільтра змінюється на 250 Гц.

Висновки

Розроблено конструкцію та досліджено характеристики товстоплівкового сенсора вологості ємнісного типу, в якому використовувався запропонований композиційний матеріал на основі полівінілового спирту з вкрапленими алюмінієвими мікрочастинками. Така конструкція забезпечує збільшення площі сорбційної поверхні та зменшення товщини сенсора, що призводить до збільшення його чутливості та швидкодії. Сенсор має високу чутливість і практично лінійну залежність ємності від вологості. Розглянута можливість використання даного матеріалу для побудови сенсорів вологості у вигляді нульових фільтрів на основі розподілених RC-структур. Показано, що залежність нульової частоти фільтрів від ємності та відносної вологості має лінійний характер.

1. Prudenziati M. *Thick film sensors*. Amsterdam – New York, 1994, 2 Mitchell A.K. *Humidity sensing in "Techniques and mechanisms in gas sensing"*. New York, 1991, 3. Potencki J. *Temperature transducer with thick-film distributed RC-networks in notch filter configuration // Proc. of the 16-th International Spring Seminar on Electronic Technology, "Thick and thin film sensor", 25-28 April, 1993, Szklarska Poreba, P. 40-43.*

УДК 536.532

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРНОГО СТАНУ БІНАРНИХ МЕТАЛЕВИХ АМОРФНИХ СИСТЕМ

© Пилип Скоропад, Ярослав Луцик, 2000

Національний університет "Львівська політехніка", кафедра "Інформаційно-вимірювальна техніка",
вул. С. Бандери, 12, 79013, Львів, Україна

Наведено алгоритм моделювання структури бінарних металевих аморфних сплавів.

Приведен алгоритм моделирования структуры бинарных металлических аморфных сплавов.

The algorithm of modelling of a structure binary metal amorphous of alloys is indicated.

У контексті інтерпретації результатів дифракційних вимірювань розглянемо систему з N ідентичних частинок, що взаємодіють та займають об'єм V . Виділивши з неї підсистему з S частинок, визначимо

імовірність знаходження першої частинки в нескінченно малому об'ємі dV_1 поблизу точки \vec{r}_1 , а n -ї – в об'ємі dV_n поблизу точки \vec{r}_n , для випадку довільного розташування решти частинок [1]:

$$dW(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) = 1/V^S F_S(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) dV_1 \dots dV_S, \quad (1)$$

тут $dV_i = dx_i dy_i dz_i$, де x_i, y_i, z_i – координати i – ї частинки; $F_S(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S)$ – корелятивна функція S – порядку, що визначає густину імовірності заданої конфігурації.

У разі відсутності взаємодії частинок між собою, імовірність конфігурації системи можна записати так: $dW(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) = dW(\vec{r}_1) dW(\vec{r}_2) \dots dW(\vec{r}_S)$, де $dW(\vec{r}_i)$ – імовірність знаходження i – ї частинки в об'ємі dV_i поблизу точки r_i для випадку довільного розташування решти частинок. Вона визначається відношенням об'єму i – ї частинки до об'єму всієї системи.

$$\text{Тоді: } dW(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) = 1/V^S dV_1 \dots dV_S.$$

Отже, для системи взаємодіючих частинок корелятивні функції – ефективна міра впорядкування в розташуванні атомів (при $S > 1$).

Корелятивні функції пов'язані з функцією розподілу імовірності всіх атомів системи $D_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$, а згідно зі статистикою Гіббса вона визначається як [1]:

$$D_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{Z_Q} \exp \left\{ -\frac{U_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{kT} \right\}, \quad (2)$$

де $U_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ – потенційна енергія системи, що залежить від координат частинок; Z_Q – конфігураційний інтеграл, що визначають із залежності:

$$Z_Q = \int_V \dots \int_V \exp \left\{ -\frac{U_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{kT} \right\} dV_1 dV_2 \dots dV_N. \quad (3)$$

Тоді імовірність знаходження S частинок в об'ємах $dV_1 \dots dV_S$ поблизу точок з фіксованими координатами $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S)$ при довільному розташуванні решти [1]:

$$dW(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) = dV_1 \dots dV_S \int_V \dots \int_V D_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) dV_{S+1} \dots dV_N.$$

Із залежностей (1) та (2) як наслідок отримуємо співвідношення між корелятивними функціями розподілу різних порядків:

$$F_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_k) = \frac{1}{V^{m-k}} \int_V \dots \int_V F_m(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_m) dV_{k+1} \dots dV_m. \quad (4)$$

Виходячи із (4), можемо корелятивні функції високих порядків представляти функціями нижчих, зокрема через бінарну корелятивну функцію $F_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$,

що являє собою відносну функцію радіального розподілу атомів (відносно ФРРА) $g(r)$.

Отже, корелятивні функції дають змогу вирахувати середні значення фізичних величин, що залежать від координат. Беручи до уваги, що імовірність заданої конфігурації з S частинок становить $dW(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) = 1/V^S F_S(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S)$, отримуємо [2]:

$$\bar{f} = \frac{1}{V^S} \frac{N!}{(N-S)!} \int_V \dots \int_V f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) F_S(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_S) dV_1 \dots dV_S.$$

Враховуючи (2), для конфігураційної функції розподілу можна встановити зв'язок між парною ФРРА та парним потенціалом. Виходячи з припущення адитивності потенціалу парної взаємодії, з урахуванням (4) матимемо:

$$g(r) = \frac{V^2}{Z_Q} \int_V \dots \int_V \exp \left\{ -\frac{1}{kT} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \varphi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \right\} dV_3 \dots dV_N. \quad (5)$$

Для розрахунків залежність (5) надто складна, а тому для практичного застосування рекомендується використовувати наближені інтегрально-диференційні залежності, що пов'язують бінарну ФРРА з парним потенціалом взаємодії. Слід зазначити, що серед них найбільш поширеними є рівняння Боголюбова-Борна-Гріна (ББГ), Перкуса-Євіка (ПЄ) та гіперланцюгове [2, 3]. Застосування цих рівнянь дає змогу розрахувати термодинамічні параметри для рідин за їх експериментально отриманими структурними характеристиками. Однак для металів домінуючу роль відіграють сили, що пов'язані з системою колективізованих електронів. Потенціал цих сил не може бути представлений сумою парних потенціалів, як для випадку систем з парним характером взаємодії.

Стосовно точності розрахунків потенціалів взаємодії за експериментальними даними щодо дифракції, то обрив кривої інтенсивності до 80 nm^{-1} включно істотного впливу не має. Дуже важливою є достовірна інформація про малокутову область розсіювання ($0 < k < 15 \text{ nm}^{-1}$).

Якщо виникає необхідність проведення розрахунків, не використовуючи інформації про структуру, слід знати потенціал міжчастинної взаємодії. За допомогою одного з відомих інтегрально-диференційних рівнянь, можна розрахувати ФРРА, а потім вже і фізико-хімічні властивості об'єкта. Міжчастинний потенціал можна розрахувати з "перших принципів" за допомогою теорії псевдопотенціалу. Якщо вважати рідкий чи твердий метал сукупністю іонів, що оточені газом колективізованих електронів, то матимемо вза-

емне притягання іонів та електронів, що спричинятиме екранування заряду іонів. Оскільки електрони рухаються в полі, що визначається координатами тих самих електронів, то розрахунок хвильових функцій електронів та енергії системи – завдання великої складності.

Взаємодія колективізованих електронів з електронами іонного остова спричиняє додатковий внесок відштовхування в електрон-іонну взаємодію. Отже, сумарний потенціал остова та потенціалу відштовхування – “псевдопотенціал” [4].

Найпоширенішим є модельний псевдопотенціал пустого остова, а окрім нього, широко застосовуються також модельні псевдопотенціали: Харрісона, Хейне-Абаренкова-Анімалу (ХАА), Краско-Гурського (КГ) та ін. [5].

Задовільні результати можна одержати лише для простих металів. В узагальненні теорії псевдопотенціалу слід ввести поправку до потенціалу, пов'язану з відмінністю d -станів у окремому атомі та в металі [4]. Оскільки d -зона опиняється всередині зони провідності, створюються нові, гібридизовані стани, що містять d -та s -стани.

Для простих металів широко застосовується модельний псевдопотенціал ХАА, котрий може поширюватися і на перехідні метали. Псевдопотенціал ХАА всередині сфери з радіусом R_m відповідає певній сталій величині (для моделі пустого остова ця величина має нульове значення), а у випадку $r > R_m$ є суто кулонівським. Параметри цього псевдопотенціалу визначають з енергетичної залежності спектроскопічних термів ізольованих іонів екстраполяцією до енергії Фермі в металі.

Якщо розглядати двокомпонентні системи, то матимемо справу з трьома ФРРА, що називаються парціальними $\rho_{ij}(r)$. Вони через фур'є-перетворення пов'язані з парціальними структурними чинниками $Q_{ij}(k)$. Інтегральний структурний чинник $Q(k)$ пов'язаний із парціальними таким співвідношенням [6]:

$$Q(k) = x_i^2 \alpha_i^2 Q_{ii}(k) + x_j^2 \alpha_j^2 Q_{jj}(k) + 2 x_i x_j \alpha_i \alpha_j Q_{ij}(k), \quad (6)$$

де x_i – атомна частка i -компонента в системі; α_i – його відносний атомний чинник: $\alpha_i = f_i / (x_i f_i^2 + x_j f_j^2)^{1/2}$; f_i – атомний чинник матричного компонента.

Якщо парціальні структурні чинники елементів системи $Q_{ii}(k)$ та $Q_{jj}(k)$ не залежать від складу та збігаються зі структурними чинниками чистих компонентів $Q_i(k)$ та $Q_j(k)$, можна значно спростити аналіз інтерференційної кривої.

Розглянемо рівняння ПЄ для пари атомів з ефективним потенціалом взаємодії $\varphi_{ij}(r)$:

$$g_{ij}(r) \left\{ \exp \left[-\frac{\varphi_{ij}(r)}{kT} \right] - 1 \right\} = c_{ij}(r) \exp \left[-\frac{\varphi_{ij}(r)}{kT} \right],$$

де $g_{ij}(r)$ та $c_{ij}(r)$ – відповідно парна та пряма корелятивні функції. Функції $h_{ij}(r) = g_{ij}(r) - 1$ та $c_{ij}(r)$ пов'язані залежністю Орнштейна-Церніке:

$$h_{ij}(\vec{r}, \vec{r}) = c_{ij}(\vec{r}, \vec{r}) + \int \left[n_i h_{ii}(\vec{r}, \vec{t}) c_{ij}(\vec{t}, \vec{r}) + n_j h_{jj}(\vec{r}, \vec{t}) c_{ij}(\vec{t}, \vec{r}) \right] dt,$$

де n_i – кількість i -частинок в одиниці об'єму.

Необхідні для розрахунку структурних характеристик ефективні парні потенціали взаємодії між іонами визначаються в рамках теорії псевдопотенціалу із залежності:

$$\varphi_{ij}(r) = \frac{z_i z_j e^2}{r} + \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty \left[-\frac{\Omega k^2 w_i^0(k) w_j^0(k) (\varepsilon_H(k) - 1)}{8\pi e^2 \varepsilon(k)} \right] k^2 \frac{\sin kr}{kr} dk,$$

де z_i – число валентних електронів чистого i -компонента; $\Omega = V_m / N_A$; V_m – мольний об'єм; $w_i^0(k)$ – формфактор псевдопотенціалу i -компонента; $\varepsilon_H(k)$ – діелектрична проникність Хартрі; $\varepsilon(k)$ – екрануюча функція Шоу.

Використовуючи псевдопотенціали пустого остова за рівнянням ПЄ згідно з алгоритмом, поданим на рис.1, розрахуємо парціальні ФРРА бінарної системи екіатомного складу.

Прийmemo, що радіуси пустого остова компонентів становлять відповідно r_i^0 та r_j^0 , а атомні об'єми компонентів при температурі T становлять відповідно Ω_i та Ω_j .

1. Визначення:

– сумарного об'єму – Ω : $\Omega = \Omega_i x_i + \Omega_j x_j$

– числа електронів провідності / атом – z :

$$z = z_i x_i + z_j x_j = 1$$

– хвильового числа – k_F : $k_F = (3\pi^2 z / \Omega)^{1/3}$

– енергії Фермі системи – E_F : $E_F = k_F^2 / 2$

2. Визначення:

– формфактора неекранованого псевдопотенціалу

пустого остова для i -компонента: $w_i^0 = -\frac{4\pi z_i}{\Omega k^2} \cos(k r_i^0)$

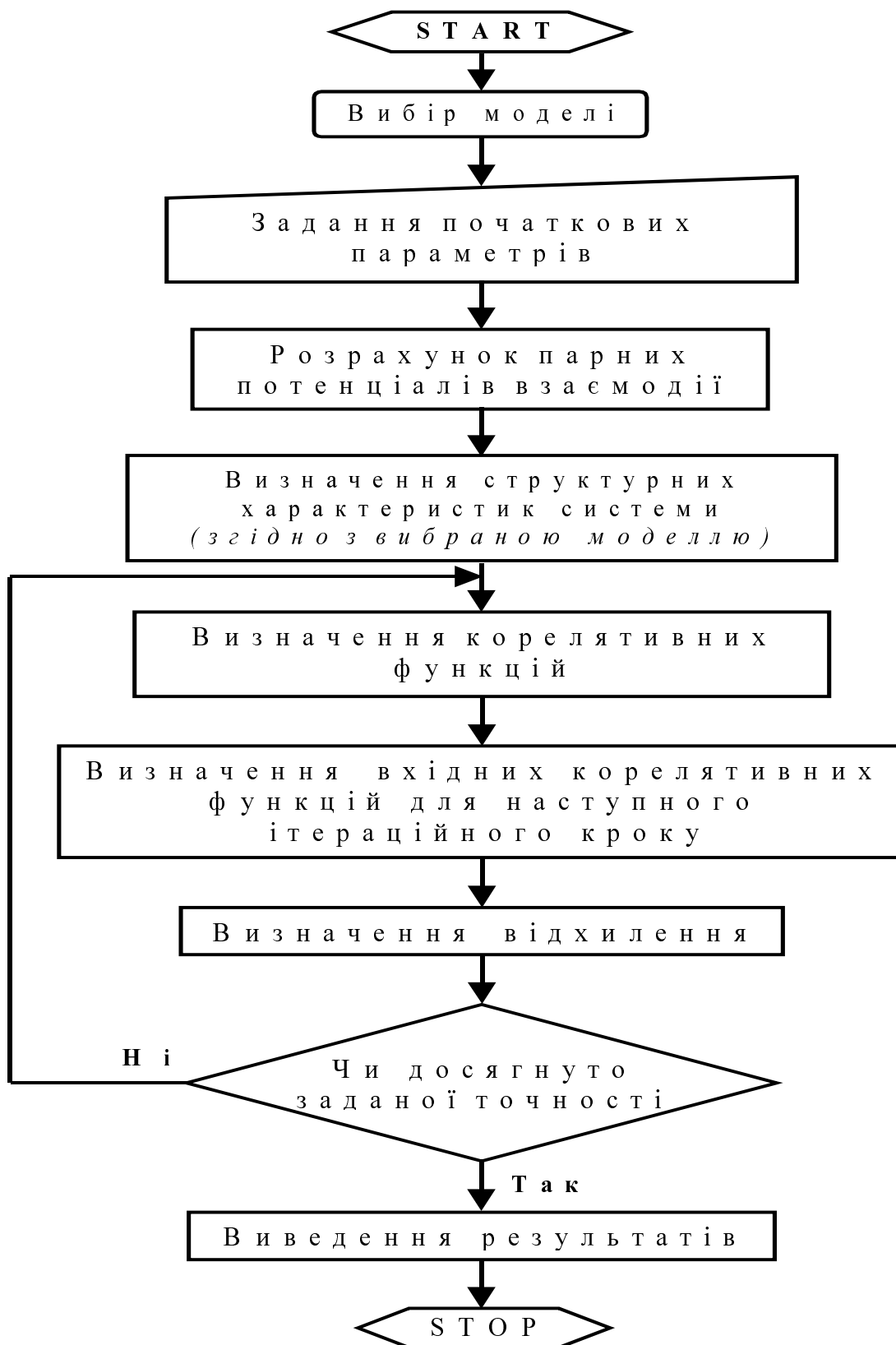


Рис. 1. Блок - схема алгоритму розрахунку парціальних ФРРА бінарної системи

– формфактора неекранованого псевдопотенціалу

пустого остова для j -компонента: $w_j^0 = -\frac{4\pi z_j}{\Omega_j k^2} \cos(k r_c^j)$.

3. Визначення:

– екрануючої функції в наближенні Гелдарта-

Воско [7]: $\varepsilon(k) = 1 + \frac{4\pi z}{\Omega k^2} \left(\frac{2}{3} E_F\right)^{-1} \lambda\left(\frac{k}{2k_F}\right) [1 - f(k)]$,

де $\lambda(k/2k_F)$ визначається залежністю [8]:

$$\lambda\left(\frac{k}{2k_F}\right) = \frac{1}{2} + \frac{1 - (k/2k_F)^2}{4(k/2k_F)} \ln \left| \frac{1 + (k/2k_F)}{1 - (k/2k_F)} \right|, \text{ а чинник } f(k)$$

становить:

$$f(k) = (1/2 k^2) / k^2 + (2k_F^2 / 1 + 0.01574 (\Omega/z)^{1/3}).$$

4. Визначення:

– ефективних парних потенціалів взаємодії в системі:

$$\varphi_{i-i}(r) = \frac{z_i^2}{r} - \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty \left[\frac{\Omega k^2}{8\pi} (w_i^0)^2 \frac{(\varepsilon_H(k)-1)}{\varepsilon(k)} \right] k^2 \frac{\sin kr}{kr} dk,$$

$$\varphi_{j-j}(r) = \frac{z_j^2}{r} - \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty \left[\frac{\Omega k^2}{8\pi} (w_j^0)^2 \frac{(\varepsilon_H(k)-1)}{\varepsilon(k)} \right] k^2 \frac{\sin kr}{kr} dk,$$

$$\varphi_{i-j} = \frac{z_i z_j}{r} - \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty \left[\frac{\Omega k^2}{8\pi} w_i^0 w_j^0 \frac{(\varepsilon_H(k)-1)}{\varepsilon(k)} \right] k^2 \frac{\sin kr}{kr} dk,$$

де $\varepsilon_H(k) = 1 + 0.534\lambda(k/2k_F) / k^2$.

5. Визначення:

– структурних характеристик системи (в рамках вибраної моделі: “хаотичного щільного пакування твердих сфер” (ХЩПТС):

$$Q_{i-i}(k) = \frac{1 - n_j c_{j-j}(k)}{[1 - n_i c_{i-i}(k)][1 - n_j c_{j-j}(k)] - n_i n_j c_{i-j}^2(k)},$$

$$Q_{j-j}(k) = \frac{1 - n_i c_{i-i}(k)}{[1 - n_j c_{j-j}(k)][1 - n_i c_{i-i}(k)] - n_i n_j c_{i-j}^2(k)},$$

$$Q_{i-j}(k) = \frac{\sqrt{n_i n_j} c_{i-j}(k)}{[1 - n_i c_{i-i}(k)][1 - n_j c_{j-j}(k)] - n_i n_j c_{i-j}^2(k)}.$$

Фур'є-трансформовані прямі парціальні корелятивні функції $c_{i,j}(k)$ визначаємо із залежностей, наведених у [9].

6. Визначення:

– корелятивних функцій системи з розв'язку рівняння (6) [10]:

$$c_{i-i}(r) = [1 + s_{i-i}(r)] \exp\left(-\frac{\varphi_{i-i}(r)}{kT}\right) - s_{i-i}(r) - 1;$$

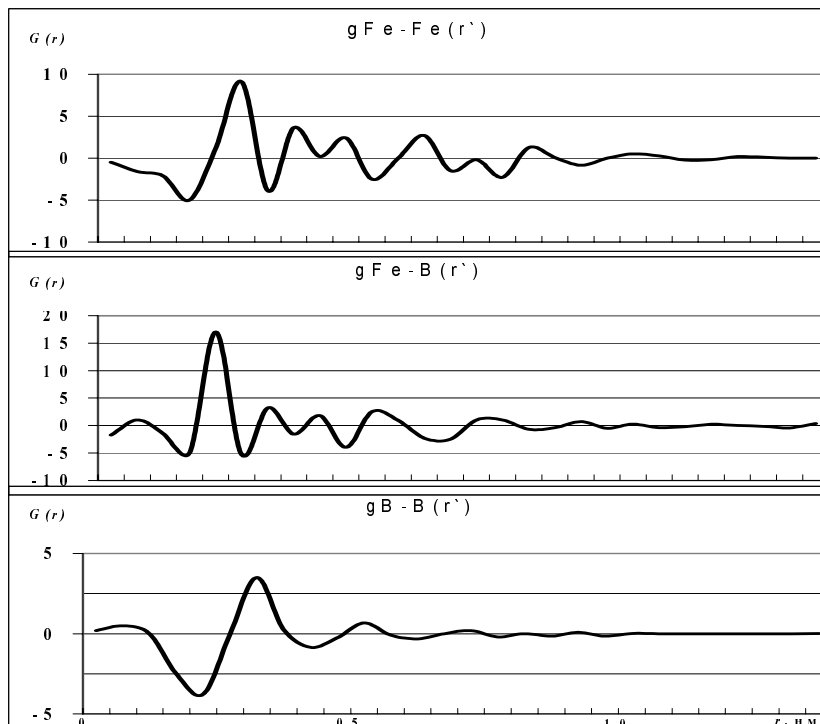


Рис. 2. Розраховані згідно з поданим алгоритмом приведені парціальні парні функції розподілу атомів для металевого аморфного ступу $Fe_{80}B_{20}$

$$c_{j-j}(r) = [1 + s_{j-j}(r)] \exp\left(-\frac{\varphi_{j-j}(r)}{kT}\right) - s_{j-j}(r) - 1; \quad (7)$$

$$c_{i-j}(r) = [1 + s_{i-j}(r)] \exp\left(-\frac{\varphi_{i-j}(r)}{kT}\right) - s_{i-j}(r) - 1.$$

Тут $s_{i-j}(r) = g_{i-j}(r) - 1 - c_{i-j}(r)$, а фур'є – образи функцій $s_{i-j}(r)$ та $c_{i-j}(r)$ перебувають між собою згідно з [10], в такій залежності:

$$\begin{aligned} s_{i-i}(k) &= A[c_{i-i}(k) - x_j c_{i-i}(k) c_{j-j}(k) + x_j c_{i-j}(k)] - c_{i-i}(k), \\ s_{j-j}(k) &= A[c_{j-j}(k) - x_i c_{i-i}(k) c_{j-j}(k) + x_i c_{i-j}^2(k)] - c_{j-j}(k), \quad (8) \\ s_{i-j}(k) &= c_{i-j}(k)(A - 1). \end{aligned}$$

Тут $A = [1 - x_i c_{i-i} - x_j c_{j-j} + x_i x_j (c_{i-i} c_{j-j} - c_{i-j}^2)]^{-1}$.

7. Розв'язування:

– системи рівнянь (7) та (8) проводимо ітераційним методом.

Перший цикл:

1) Із залежності (8) визначаємо функції $s_{ij}(k)$.

2) Зворотним фур'є-перетворенням визначаємо функції $s_{i-j}(r)$.

3) Із залежності (7) визначаємо функції $c_{i-j}(r)$.

4) Фур'є-перетворенням визначаємо функцію $c_{i-j}(k)$.

Для наступного циклу вихідною є функція $s_2(r) = 1/2[s_0(r) + s_1(r)]$, де $s_0(r)$ та $s_1(r)$ – функції, відповідно, до і після ітерації. Збіжність ітерацій визначається

досягненням заздалегідь заданої величини Δ_{min} різниці функцій $s_0(r)$ та $s_1(r)$.

Отже, отримавши значення функцій $s_{i-j}(r)$ та $c_{i-j}(r)$, остаточно вираховуємо відносну ФРПА $g_{i-j}(r)$ та структурний чинник $Q(k)$:

$$g_{i-j}(r) = 1 + s_{i-j}(r) + c_{i-j}(r),$$

$$Q(k) = 1 + \frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} 4\pi r^2 [g(r) - 1] \frac{\sin(kr)}{kr} dr.$$

Результати розрахунку, що подані на рис. 2, добре узгоджуються (відхилення не перевищують 10 %) з експериментально отриманими в роботі [11].

1. Шахпаронов М.И. Введение в молекулярную теорию растворов. М., 1956. 2. Физико-химические основы металлургических процессов / А.А. Жуховицкий, Д.К. Белащенко, В.А. Григорян и др. М., 1973. 3. Крокстон К. Физика жидкого состояния / Пер. с англ. М., 1978. 4. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Ч. 2. М., 1983. 5. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М., 1973. 6. Ватолин Н.А., Пастухов Э.А. Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов. М., 1980. 7. Межчастичное взаимодействие в жидких металлах / В.Ф. Ухов, Н.А. Ватолин, Гельчинский Б.Р. и др. М., 1979. 8. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М., 1981. 9. Харьков Е.И., Лысов В.И., Федоров В.Е. Физика жидких металлов. К., 1979. 10. Белащенко Д.К. // Изв. АН СССР. Металлы, 1982, №1, С. 29 – 38. 11. Lamparter P., Sperl W., Nold E., e.a. // In: Rapidly Quenched Metals IV, ed. T. Masumoto, K.Suzuki, The Japan Institute of Metals, Sendai, 1982. Pp.343.

УДК 536.532

МОДЕЛЮВАННЯ РОБОТИ ТЕРМОПЕРЕТВОРЮВАЧА В ДИНАМІЧНОМУ РЕЖИМІ

© Володимир Столярчук, 2000

Національний університет “Львівська політехніка”, кафедра “Інформаційно-вимірювальна техніка”, вул. С.Бандери, 12, 79013, Львів, Україна

Термоперетворювач подається як чотириполосник. Запропоновано шлях визначення елементів матриці чотириполосника.

Термопреобразователь представлено как четырехполосник. Предложен путь определения элементов матрицы четырехполосника.

Thermotransducer as fourpoled unit is presented and the matrix elements values determination ways are proposed.