

Список використаних джерел:

1. Демченко Л. Д. Влияние предварительной пластической деформации на структуру и свойства азотированных слоев в Fe / Л. Д. Демченко, В. М. Надутов, Ю. С. Черепова // ОТТОМ-4. К. – 2003. – С. 205-209.
2. Дидык Р. П. Влияние предварительной ударно-волновой обработки на параметры борирования низколегированной стали / Р. П. Дидык, В. А. Безрукавая, Л. В. Грязнова, А. Г. Лисняк // Металлофизика и новейшие технологии. – 2008. – Т.30, № 9. – С. 1289-1295.
3. Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов / Под ред. Мейерса М. А., Мурра Л. Е.: Пер. с англ. М.: Металлургия, 1984. – 512 с.

Леонтъсва Н.Р.

*кандидат фізико-математичних наук, викладач,
Буковинський фінансово-економічний університет*

**ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ПРОГРАМНИХ ПРОДУКТІВ
ДЛЯ ОБЧИСЛЕННЯ ЕЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА
СКЛАДНОЇ НАНОТРУБКИ**

Напівпровідникові квантові дроти вивчаються як теоретично, так і експериментально вже протягом 20 років. Удосконалення методів їх вирощування дало змогу вченим формувати ансамблі квантових нанодротів з радіальною гетроструктурою. У залежності від геометричних параметрів внутрішньої дротини перпендикулярна до осі квантового дроту гетроструктура, дозволяє цілеспрямовано змінювати спектральні параметри основних квазічастинок (електронів, екситонів, фононів) у наносистемі.

В залежності від властивостей квазічастинок, такі системи можуть використовуватися в якості базових елементів тунельних нанодіодів, нанотранзисторів з високою рухливістю електронів, високоефективних світловипромінюючих приладів, фотоелектричних перетворювачів, наносенсорів для діагностики різних біологічних і хімічних з'єднань [1].

На даний час інтенсивно досліджуються напівпровідникові нанотрубки, що є різновидом квантових дротів з радіальною гетроструктурою. Так, у залежності від напівпровідникових матеріалів, що входять до складу гетроструктури, експериментаторами вже створені прості (з однією квантовою ямою для електрона) [2] та складні (багатоямні) кількешарові [3] шестигранні нанотрубки.

Метою даної роботи є розробка програмних продуктів за допомогою C++ та Wolfram Mathematica 7.0 та оцінка точності у вимірюваннях енергетичного спектра електрона за допомогою цих програм.

Теорія енергетичного спектра та хвильових функцій електрона, що використовується для створення програмних продуктів, розроблена для складної нанотрубки, що подана на рис. 1. [4]

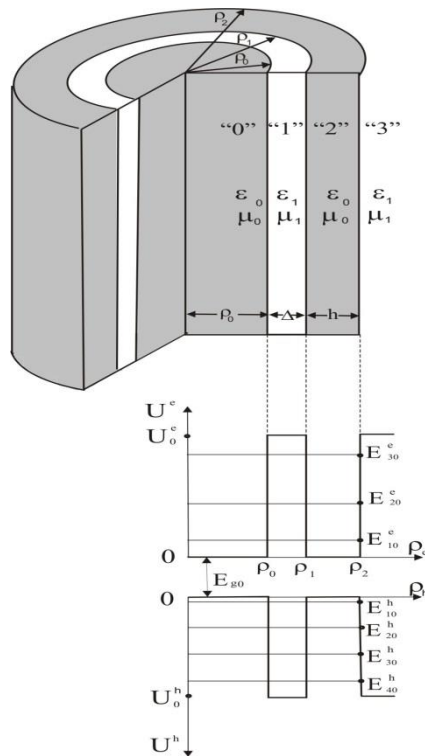


Рис. 1. Геометрична та енергетична схеми складної нанотрубки

Програмні продукти створювалися для наносистеми з такими початковими параметрами: товщини шару-бар'єра $\Delta = 4a_{GaAs}$ та нанотрубки $h = 4\text{нм}$ і концентрації 0,4. Радіус внутрішньої дротини (ρ_0) вибирався в інтервалі $[0; 50a_{GaAs}]$.

На рис. 2. та рис. 3. подано розрахунок першого значення енергетичного спектра обраховане за допомогою двох програм. У Wolfram Mathematica енергетичний спектр електрона отримується як перетин з віссю X (корінь), а в C++ – як значення величини в певному інтервалі від a до b з певною похибкою вимірювання.

В результаті проведених розрахунків отримано, що Wolfram Mathematica 7.0, на відміну від C++, дає більш точні результати.

Складання програмного продукту в C++ є досить складним, порівняно з Wolfram Mathematica 7.0, тому пропонується для розв'язування такого роду задач використовувати саме його.

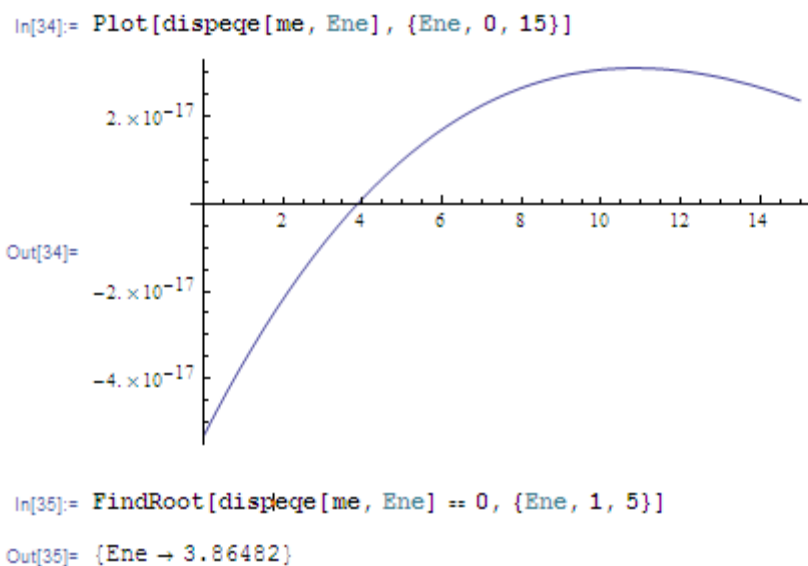


Рис. 2. Розрахунок першого значення енергетичного спектру електрона в Wolfram Mathematica 7.0

```
Введіть межі a та b через пробіл
1 5
Введіть похибку n:
0.003
-2.26458e-018
-9.19935e-018
3.49887e-019
-2.26458e-018
-8.9119e-019
-2.26458e-018
-2.54474e-019
-8.9119e-019
5.1706e-020
-2.54474e-019
-1.00379e-019
-2.54474e-019
-2.40857e-020
-1.00379e-019
1.38727e-020
-2.40857e-020
-5.0908e-021
-2.40857e-020
4.39488e-021
-5.0908e-021
-3.46985e-022
-5.0908e-021
x: 3.85449
```

Рис. 3. Розрахунок першого значення енергетичного спектру електрона в C ++

Список використаних джерел:

1. Дубровский В. Г. Полупроводниковые нитевидные нанокристаллы: синтез, свойства, применения / В. Г. Дубровский, Г. Э. Цырлин, В. М. Устинов // ФТП. – 2009. – Т. 43. – С. 1585-1626.
2. Mohan P. Fabrication of InP/InAs/InP core-multishell heterostructure nanowires by selective area metalorganic vapor phase epitaxy / P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui // Appl. Phys. Lett. – 2006. – Т. 88. – Р. 133105.
3. Fontcuberta i Morral A. Prismatic quantum heterostructures synthesized on molecular-beam epitaxy GaAs nanowires / A. Fontcuberta i Morral, D. Spirkoska, J. Arbiol, M. Heigoldt, J. R. Morante, G. Abstreiter // Small. – 2008. – Т. 4. – Р. 899-903.

4. Маханець О. М. Фононні спектри та електрон-фононна взаємодія у складній циліндричній напівпровідниковій нанотрубці / О. М. Маханець, Н. Р. Цюпак (Н. Р. Леонтєва), В. І. Гуцул // УФЖ. – 2012. – Т. 51, № 10. – С. 1060-1068.

Миргородский А.В.

аспирант,

Национальный горный университет

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЫМЫВАНИЯ МЕТАНА ИЗ ВЫРАБОТАННОГО ПРОСТРАНСТВА ШАХТЫ

В настоящее время интерес представляют динамические процессы, возникающие при проветривании, и способы их оптимального управления в сложных аэродинамических условиях. Отметим, что скорости фильтрации метано – воздушной смеси в выработанном пространстве угольной шахты весьма малы и составляют порядка см/с. Используя шаг разностной сетки равный 2 м, достаточный для пространственной локализации скоплений метана, расчет зоны обрушения при средней длине выемочного столба порядка 2 км, длине лавы ~ 200 м, высоте ~ 2 м потребует не менее 1 млн ячеек. В связи с этим, весьма актуальным становится применение для решения данной задачи параллельных технологий программирования и современной многопроцессорной техники. Интегральные законы сохранения массы, импульса и энергии, применяемые в теории фильтрации газов и жидкостей, имеют следующий вид [1,2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \varepsilon d\Omega + \int_{\Omega} \rho \varepsilon (\vec{u} \times \vec{n}) d\Sigma &= 0; \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \varepsilon \vec{u} d\Omega + \int_{\Sigma} \varepsilon [p \vec{n} + \rho \vec{u} (\vec{u} \times \vec{n})] d\Sigma &= \int_{\Omega} \vec{F}_c d\Omega + \int_{\Omega} p \text{grad} \varepsilon d\Omega + \int_{\Omega} \rho \varepsilon \vec{g} d\Omega; \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \varepsilon \left(e + \frac{|\vec{u}|^2}{2} \right) d\Omega + \int_{\Sigma} \rho \varepsilon \left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{|\vec{u}|^2}{2} \right) (\vec{u} \times \vec{n}) d\Sigma &= \int_{\Omega} \rho \varepsilon (\vec{u} \times \vec{g}) d\Omega; \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varepsilon \rho c d\Omega + \int_{\Sigma} \varepsilon \rho c (\vec{u} \times \vec{n}) d\Sigma &= 0; \\ \vec{F}_c &= - \left(\frac{150 \eta u (1 - \varepsilon)^2}{d^2 \varepsilon^3} + \frac{1,75 \rho u^2 (1 - \varepsilon)}{d \varepsilon^3} \right), \end{aligned}$$

где p – давление; ρ – плотность; \vec{u} – скорость; \vec{g} – ускорение свободного падения; \vec{n} – вектор единичной нормали; ε – пористость обрушенных пород; e – удельная внутренняя энергия; F_c – объёмная сила сопротивления пористой среды. Для решения задачи нестационарной газовой динамики в выработках рассматриваются простейшие квазиодномерные уравнения. Так как со стенок канала может поступать метан, то используются уравнения с учетом потока массы и энергии со стенок канала: со стенок канала: