

Воспользуемся известной формулой $D_p = \lambda / (2\pi k)$, где k – комплексная часть показателя преломления. Значения действительной n и комплексной k частей показателя преломления для Z -среза кристалла были взяты из литературы [3].

Согласно расчетам, коротковолновое излучение диапазона 190..260 нм проникает в кристалл ниобата лития на глубину десятки нанометров по уровню $1/e$. Следовательно, метод спектроскопии отражения применим для кристаллов толщиной десятки – сотни микрометров. В заключение следует отметить простоту и надежность рассмотренного метода определения знака полярной поверхности по спектру (интенсивности) отражения в ультрафиолетовом диапазоне. Для измерения подходит практически любой стабилизированный источник излучения с длиной волны $\lambda \leq 260$ нм. Метод является качественным и не предъявляет особых требований к ширине спектра и поляризации излучения источника.

Список использованных источников

1. Кузьминов, Ю.С. Электрооптический и нелинейно-оптический кристалл ниобата лития [Текст]/ Ю.С. Кузьминов. – М.: Наука, 1987. – 264с.
2. Сидоров, Н.В. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны [Текст]/ Н.В. Сидоров, Т.Р. Волк, Б.Н. Маврин. – М.: Наука, 2003. – 255 с.
3. Palik, E.D. Handbook of Optical Constants of Solids/ E.D. Palik. – Maryland: Academic Press, 1997. – 3224 p.

УДК 538.93

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МИКРО И НАНОПОРАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А. Н. Агафонов, А.В. Еремин

г. Самара, «Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королёва»

Задача комплексного моделирования процессов переноса на микро- и мезоуровнях с учетом адсорбционных явлений является актуальной для таких направлений, как микро- и наносенсорика, катализ и т.д. Использование традиционных (макроскопических) подходов к моделированию физико-химических процессов, в микро- и мезосистемах в большинстве случаев не позволяет получить удовлетворительных результатов, в связи с чем возникает необходимость применения имитационных методов, в частности молекулярной динамики (МД) [1]. Одной из актуальных проблем является проблема моделирования физико-химических процессов на границе раздела газ/твердое тело, в

частности, теплообмена между фазами на молекулярном уровне. Т.к. данный процесс участвует во многих физико-химических взаимодействиях, исключение его из рассмотрения дает существенное снижение точности полученных данных и границ применимости метода в целом.

В рамках данной работы на базе метода классической молекулярной динамики разработана модель массопереноса в газовой фазе с учетом влияния физической адсорбции.

Для интегрирования уравнений движения частиц применена схема Верле в скоростной форме. Для учета теплового взаимодействия граница твердого тела представлена в виде набора независимых осцилляторов, совершающих автоколебания.

Разработано программное обеспечение, реализующее предложенную модель с решением систем уравнений на GPU с использованием технологии CUDA. Данная технология позволяет за реальные промежутки времени (порядка нескольких часов) проследить кинетику системы состоящей из $\sim 10^4$ частиц на интервале времени $\sim 10^{-7} \dots 10^{-6}$ секунды.

Проведены численные эксперименты, направленные на проверку адекватности предложенной модели. Для модельных случаев построены кинетические кривые адсорбции, изотермы адсорбции (Ленгмюра, некоторые типы изотермы БЭТ). Полученные зависимости на качественном уровне согласуются с теоретическими.

На следующих этапах работы планируется расчет значений параметров, необходимых для моделирования конкретных веществ, что позволит провести численное сравнение результатов моделирования с литературными данными.

Список использованных источников

1. Товбин, Ю.К. Метод молекулярной динамики в физической химии [текст] / Под ред. Ю.К. Товбина // М.: Наука, 1996. – 334 с.
2. Frenkel, D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications [текст] / Frenkel D., Smit B. // San Diego, Academic Press, 2002 - p. 638

УДК 621.373.826

ИССЛЕДОВАНИЕ СХЕМЫ СТАБИЛИЗАЦИИ ОПТИЧЕСКОЙ МОЩНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ЛАЗЕРА ДЛЯ ПРИБОРОВ БИОСПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

М.С. Василькин, П.И. Бахтинов

г. Самара, «Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королёва»

При разработке многоканального прибора для неинвазивного определения гемоглобина крови методом лазерной спектрофотометрии