$$\theta = \theta_z e^{-\frac{\sigma (r)}{2cz}}, \quad (4)$$

где θ - избыточная температура (разность между температурой истекающего потока и температурой окружающей среды) в данной точке потока; θ_z - температура на оси потока; σ - константа.

После вышеизложенной предварительной оценки конфигурации обогревателя, влияющей на макроскопические параметры прибора, производится компьютерное моделирование методом конечных элементов, позволяющее с высокой точностью определить влияние данной конфигурации прибора на характеристики потока и в случае необходимости скорректировать их. И только после этой процедуры мы можем приступить к расчету и оптимизации внутренней проточной части обогревателя.

Расчет и оптимизация внутренней проточной части агрегата производится так же при помощи компьютерного моделирования, методом конечных элементов путем численного эксперимента в несколько итераций до момента достижения приемлемых результатов. Предварительно выбирается производительность вентилятора, конфигурация и тип нагревательных регистров, с характеристиками, требуемыми для достижения уже рассчитанной на предыдущем этапе дальности, избыточной температуры потока и площади обогрева. Затем строится модель внутренней проточной части агрегата и производится расчет.

Для исследования и расчета методом конечных элементов в этой работе используется программный комплекс ANSYS. Первым этапом является построение геометрии расчетной области объекта. При построении модели опускаются мелкие и не значительные детали, которые не вносят значительного вклада в общую картину потока, а так же те, которые абсолютно не участвуют в процессе тока и не влияют на ход решения задачи. Так же, если задача симметричная, то можно уменьшить размерность задачи, путем удаления симметричной части объекта. При выборе расчетной области необходимо учитывать, что близко расположенные к исследуемой области граничные условия могут вносить искажение в решение. Расчет течений производится на неравномерной тетраэдрической сетке, адаптируемой под особенности геометрии, путем изменения шага разбиения. Использование такой сетки позволяет описать как общую структуру течения в помещении, так и существенные детали. В среднем, пространственная сетка расчетной области данной задачи имеет порядка 280 тыс. узлов и состоит из 1.5 млн. объемных элементов (тетраэдров).

Используемая в программном комплексе для решения данной задачи математическая модель включает в себя законы сохранения массы, энергии, импульса (уравнения Навье-Стокса), уравнение состояния сжимаемого газа при 25С и модель турбулентности. Для моделирования течения в помещении используется модель турбулентности k-ε. При моделировании обтекания плоскообтекаемого тела с нефиксированной точкой отрыва (течение газа в нагревательных регистрах, моделирование течения на пластинах диффузора) используется SST модель турбулентности. Задачи решались в 3-х мерной стационарной постановке на модели сжимаемого газа.

В ходе расчетов получаем данные о трехмерной гидродинамической структуре потока, распределении скоростей в потоке, температурных полях, распределении плотности, распределении теплового потока по поверхности нагревательных регистров. После анализа этих данных в случае не удовлетворения требуемым параметрам, производится дальнейшее изменение геометрии либо граничных условий задачи и снова проводится численный эксперимент.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КРИСТАЛЛЫ С ПРОСТРАНСТВЕННЫМ ПЕРИОДИЧЕСКИМ ИЗМЕНЕНИЕМ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСИ

И.Ф. Кашевич

Сегнетоэлектрические кристаллы играют важную роль в развитии научно-технического прогресса. Они используются для создания элементной базы систем обработки и хранения информации, средств автоматики, радиоэлектроники, лазерной техники, оптоэлектроники. Расширение области их применения, а также повышение эффективности использования в уже известных научно-технических направлениях, связано с разработкой методов управления свойствами этих кристаллов.

Физической основой для решения этих задач является проверенный практикой путь оптимизации характеристик за счет введения тех или иных дефектов в структуру кристаллов, поскольку свойства сегнетоэлектриков являются структурно-чувствительными. Важную роль в общей группе создаваемых дефектов играют примесные атомы, так как вызывают существенные изменения диэлектрических, пьезоэлектрических, тепловых, переполаризационных характеристик и т.д. Свойства известных сегнетоэлектрических кристаллов широко исследуются в зависимости от типа

и концентрации вводимых примесей. Но, как показывают эти исследования, параметры материалов во многом определяются и характером распределения примеси в его объеме. В последнее время вопросу получения и исследования сегнетоэлектриков с программируемым профильным распределением примеси уделяется все больше внимания, например, созданию и исследованию различных так называемых периодических структур. Одним из вариантов таких структур являются кристаллы с полосчатой примесной структурой, распределение примеси в которых представляет собой многократное периодическое чередование (повторение) слоев кристалла с повышенным и пониженным содержанием примеси в определенном направлении. При этом кристалл приобретает новые интегральные свойства (например, вызывает дифракцию излучения определенной длины волны). Но необходимо отметить, что изучаются, в основном, высокотемпературные кристаллы, получаемые из расплавов. Вопросы, связанные с получением и исследованием водородсодержащих кристаллов с периодическим распределением примеси остаются не изученными. Хотя в таких кристаллах, выращиваемых из растворов, к которым относятся кристаллы изоморфных рядов дигидрофосфата калия (KDP), триглицинсульфата (TGS), сегнетовой соли (RS) и другие, благодаря особенностям их строения, особенно выражен ряд эффектов, возникающих при легировании их примесями.

В данной работе приведены методы получения и исследование влияния периодического распределения примесей на свойства кристаллов TGS и RS.

Для получения закономерно-неоднородных кристаллов, которые состоят из регулярных слоев с различной концентрацией примеси, было разработано и изготовлено два устройства, основанных на разных принципах получения слоистых кристаллов. Работа первого устройства основана на использовании зависимости вхождения примеси в кристалл от скорости роста. Также разработано устройство для получения слоистой примесной структуры путем последовательного доращивания слоев в растворах, содержащих различную по составу и количеству примесь. Растворы помещаются в различные секции одного и того же кристаллизатора, кристаллы перемещаются из одного раствора в другой механически, с помощью специального устройства.

Исследованы диэлектрические свойства кристаллов триглицинсульфата и сегнетовой соли с периодическим послойным изменением концентрации примеси ионов хрома и меди соответственно. Показано, что свойства неоднородных сегнетоэлектрических кристаллов с периодической примесной структурой определяются периодом примесной структуры и температурой роста. Установлено, что наиболее значительные изменения свойств наблюдались у неоднородных кристаллов TGS:Cr с периодом от 40 мкм до 160 мкм; у кристаллов RS:Cu соли этот период составлял 50 - 130 мкм. Для кристаллов с указанным периодом примесной структуры наблюдалось уменьшение значений диэлектрической проницаемости ϵ , размытие температурной зависимости ϵ в области фазового перехода и сдвиг точки Кюри T_c в сторону парафазы; увеличение коэрцитивного поля E_c и наличие значительного внутреннего поля смещения, уменьшение величины реориентируемой спонтанной поляризации и тангенса угла диэлектрических потерь; наличие пиротоклика (для TGS:Cr) выше T_c . Анализ полученных данных позволяет объяснить влияние периодического распределения примеси на изменение свойств сегнетоэлектрических кристаллов, выращиваемых из растворов, с позиций модели механизма критического градиента примеси.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В СПИН-КРОССОВЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Н.А. Клиндухов, Н.С. Буйнов

В наше время большой интерес представляет исследование магнитных свойств свободных стабильных органических радикалов и гетероспиновых соединений переходных металлов. Спин-кроссоверные соединения на основе ионов Fe (II) представляют наибольший интерес. В таких материалах существует тесная связь между магнитным состоянием (высокоспиновое состояние, ВС) и немагнитным (низкоспиновое состояние, НС) и сопровождается изменением цвета и объема. С другой стороны, в некоторых случаях изменение спинового состояния имеет явление гистерезиса. Это типичное свойство систем с существенной бистабильностью дает возможность использования таких материалов для хранения информации.

Высокоспиновое состояние в спин-кроссоверных конденсированных системах является возбужденным метастабильным состоянием. В процессе нагревания или в течение времени система спин-активных молекул релаксирует обратно к низкоспиновому состоянию. Наблюдаемая релаксация имеет необычный, отличный от экспоненциального, вид, так называемый сигмоидальный тип. Впервые этот факт был учтен в феноменологической модели Хаузера. Более детальное теоретическое исследование этой модели было проведено Букхедадемом и коллегами.