

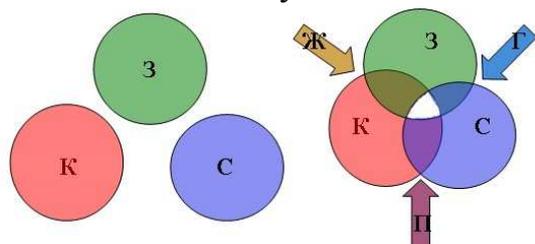
Компьютерное моделирование физических процессов в исследованиях и учебных занятиях по светотехнике и смежным дисциплинам

*Горюнов В. А., д.ф.-м.н., Мордюк В.С., д.т.н., Свешников В.К., д.т.н.,
Амелькина С. А., к.т.н., Молин В.Н. к.ф.-м.н., Тихонова Н.П., к.ф.-м.н.,
Буряк В.В., к.т.н., Зинченко Е.Ю., Иванов О.Ю.*

*Мордовский госуниверситет
г. Саранск, Большевистская, 68 а.
тел.:47-79-57, E-mail: morvla@mail.ru*

Приводится перечень разработанных авторами компьютерных моделей визуализации различных физических процессов в источниках света и в учебном процессе по другим дисциплинам с использованием метода анимации, метода Монте Карло, метода молекулярной динамики и других методов визуализации.

Введение. Особая актуальность использования компьютерных методов заключается в том, что они позволяют получать наглядные независимые подтверждения результатов теоретических и экспериментальных исследований. Они способствуют облегченному восприятию преподаваемого материала

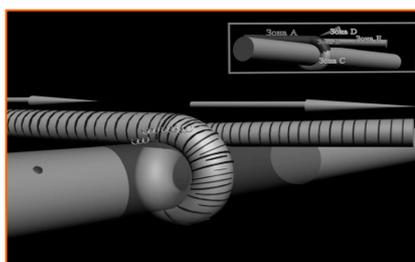


студенческой аудиторией и уже работающими на светотехнических предприятиях кадрами с устаревшими научными представлениями.

Рис.1. Схема модели смешения цветов

1. Анимационное моделирование включает действующие в динамике следующие модели. **1.1. Компьютерную модель** смешения цветов (рис 1). Для студентов, изучающих основы колориметрии создана анимационная модель образования различных цветов путем субтрактивного и аддитивного смешения цветов. Модель позволяет наблюдать процесс смешения трех основных цветов (красного (К), зеленого (З) и синего (С)). Три объекта в виде кругов, окрашенных в основные цвета, сближаются, перекрываются и в местах перекрывания образуются новые цвета. Попарное смешение этих цветов создает желтый (Ж), голубой (Г) и пурпурный (П). В процессе наложения рядом с местами перекрытия образуются поля сравнений, позволяющие сопоставить цвета. Такой наглядный динамический процесс поможет усвоению теоретического материала. **1.2. Компьютерную модель** эстафетного перемещения единичной дислокаций по кристаллу; **1.3. Компьютерную модель** пластической деформации кристалла при движении группы дислокаций; **1.4. Компьютерную модель** образования разрушающих трещин перед границами зерен; **1.5. Компьютерную модель** взаимного превращения винтовых и краевых дислокаций. На основе последней модели разработана **новая дислокационная теория** спирализации вольфрама взамен устаревшей и в настоящее время ошибочной модели, а также разработан и запатентован

принципиально **новый способ утончения** проволок из любых металлов и сплавов без использования трудно обрабатываемых и дорогостоящих алмазных фильер; **1.6. Компьютерную анимационную модель** угнетения люминесценции дислокациями. Дислокации в люминофорах являются проводящими линейными шнурами, и поэтому неспособными люминесцировать. При плотности этих дефектов в объеме $\sim 10^8 \text{ см}^{-2}$ только значительно меньше половины объема люминофоров оказывается активной с точки зрения люминесценции, поэтому дальнейшего повышения световой отдачи люминесцентных ламп следует ожидать при экспериментальном управляемом резком снижении плотности дислокаций до уровня 10^3 см^{-2} , что подтверждено нами с использованием виртуального эксперимента. На экране монитора красным цветом моделируются неспособные люминесцировать ядра дислокаций, вокруг которых на темном фоне разноцветными миниатюрными кратковременными вспышками моделируются кванты видимого света люминесценции. При сближении ядер дислокаций из-за повышения их плотности площади темных полей и вспышек люминесценции на их фоне становится все меньше, что и моделирует угнетение процесса люминесценции дислокациями. Эта анимационная модель подтверждается прямыми теоретическими расчетами на основе зонной теории твердого тела с использованием компьютерных технологий. **1.7. Компьютерную модель утончения проволок без алмазных фильер с использованием метода качения.** При изгибании проволоки вокруг керна с последующим ее распрямлением возникающие за счет превращения винтовых дислокаций в краевые новые плоскости обеспечивают ее удлинение (рис.2 а). Рядом представлена действующая компьютерная модель установки (рис.2 б).



а



б

Рис. 2.

2. Моделирование с использованием вероятностного метода Монте Карло включает следующие действующие в динамике модели:

2.1. Компьютерную модель испарения поверхностных атомов нанокристалла вольфрама в условиях высокого вакуума. В зависимости от структурно-энергетических позиций окрашенных в разные цвета с различной парциальной энергией активации поверхностных атомов процесс испарения осуществляется поэтапно. Вначале испаряются слабосвязанные с решеткой атомы и когда на определенном этапе «вскрываются» плотноупакованные кристаллографические плоскости с повышенными силами межатомной связи, скорость испарения вольфрама уменьшается в миллионы раз. Ламповый вольфрам пока единственный из всех металлов, который «подчиняется» этой

новой кинетической теории испарения. Результаты **компьютерного моделирования** подтверждаются экспериментальными исследованиями спиралей ламп с использованием **оптической, электронной и автоионной микроскопии** с увеличениями от сотен до десятков миллионов крат.

2.2. Компьютерную модель образования «горячей точки» при наличии в структуре нанокристалла зерна с другой кристаллографической ориентацией. Если в структуре посередине проволоки присутствуют зерна, внутри которых отсутствуют параллельные поверхности кристаллографические плоскости, то замедления процесса испарения не наблюдается и образуются «горячие точки», что подтверждается многими исследованиями на недостаточно качественных проволоках с использованием микроскопических методов. **2.3. Компьютерную модель образования «горячей точки»** при наличии в объеме ламп кислородсодержащих примесей. Энергия образования окислов вольфрама сопоставима с энергией сублимации, поэтому в имеющихся всегда изначально перегретых на спиралах участках она суммируется с энергией тепловых колебаний атомов и скорость испарения в этом месте нарастает быстрее, что и служит основной причиной образования «горячих точек».

3. Моделирование с использованием метода молекулярной динамики включает действующие в динамике следующие модели. **3.1. Компьютерную модель испарения вольфрама в лампах накаливания в высоком вакууме.** На экране монитора в центре размещается сечение вольфрамовой нити красного цвета, из которой временами «выползают» испаряющиеся атомы. Процессы испарения визуализируются в двух видео окнах. На первом видео окне наблюдаются испаренные движущиеся атомы, не сталкивающиеся с атомами наполняющих инертных газов из-за отсутствия последних. На втором видео окне визуализируются только траектории движения испарившихся атомов. После достижения границы экрана монитора из поверхности нити начинает «испаряться» следующий атом и так далее. **3.2. Компьютерную модель испарения в лампах накаливания в среду инертного газа.** Для реализации этой компьютерной модели предварительно была разработана **теоретическая модель этого процесса**, учитывающая зависимость от давления газа три вероятности: **вероятность** столкновения испарившегося атома с атомом газа высокого давления, зависимость от соотношения импульсов атомов вольфрама и газа **вероятность** взаимного отталкивания и **вероятность** прицельного возврата испарившегося атома на испаряющую нить. Сама **компьютерная модель** отличается от предыдущей тем, что вокруг расположенной в центре экрана нити вольфрама красного цвета располагаются постоянно двигающиеся и сталкивающиеся между собой атомы инертного газа зеленого цвета, давление которого изменяется пользователем в процессе моделирования. После испарения атом вольфрама начинает сталкиваться с атомами газа, компьютер каждый раз решает задачу столкновения в зависимости от величин масс сталкивающихся атомов и направлений их движения и выдает на экран направление движения сталкивающихся частиц после соударения. Пользователь (преподаватель, студент) задает по письменному запросу компьютера параметры процесса (температуру, массы

атомов, энергию активации, и др.), после чего включает работу модели нажатием клавиши Enter. Результаты компьютерного эксперимента тоже можно наблюдать в двух видео окнах. В одном из них - саму динамику последовательных столкновений, а во втором видео окне компьютер выдает на экран только траектории разлета сталкивающихся частиц, при этом в каждой точке столкновения он фиксирует и отмечает на экране или изменение величины вероятности прицельного возврата на испаряющуюся поверхность или, по выбору, относительную величину скорости испарившегося атома вольфрама после очередного столкновения. Модель показывает, что при повышении давления газа частота возврата атомов на поверхность нити увеличивается, что соответствует реальности.

3.3. Компьютерную модель испарения вольфрама в ксеноновых лампах сверхвысокого давления газа. Это моделирование отличается от предыдущего по геометрии (внизу экрана располагается плоская поверхность анода лампы) и по физике процесса (лампа является прямооточной, питающейся постоянным напряжением, а сверхвысокое давление газа обеспечивает на поверхности анода электрическое поле высокого напряжения). Давление газа моделируется количеством его атомов на экране, а динамика столкновений задается пользователем через отношение масс атомов и их скоростей. На рис. 3 представлены результаты моделирования. Части (а, б) рисунка отличаются только последовательными стадиями процесса столкновений: столкнувшийся с атомом вольфрама в центре экрана (рис.3 а) атом инертного газа отлетел в сторону (рис. 3 б) и начал столкновения с другими соседями. На рис 3 в. представлена траектория движения испарившегося атома в процессе его столкновениями с атомами газа. Траектория вначале прямолинейная, поскольку его начальная скорость существенно превосходит скорость сталкивающихся атомов газа. И только в конце она отклоняется от прямолинейной, поскольку в результате последовательных столкновений импульсы вольфрама начали уменьшаться и сравниваться с импульсами газа. В точке каждого очередного столкновения компьютер отмечает каждое очередное изменение относительной скорости атома. Часть рисунка (г) иллюстрирует траекторию атома вольфрама, испаряющегося из решетки без участия электрического поля, когда его средняя скорость существенно меньше скорости атомов газа. В этом случае атом вольфрама по причине большого давления газа возвращается обратно на испаряющуюся поверхность анода, что соответствует реальности.

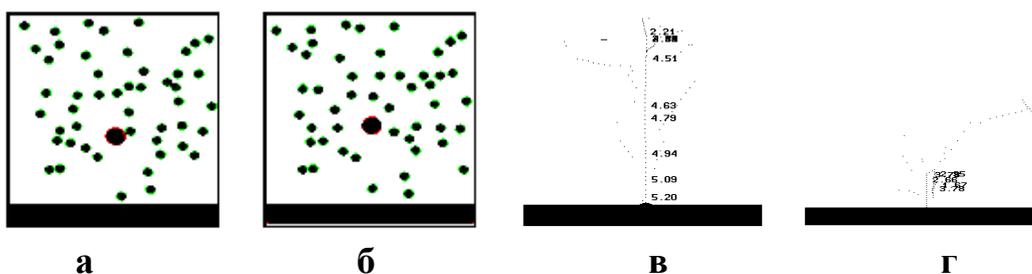


Рис.3.

3.4. Компьютерную модель испарения вольфрама в условиях недостижимых в реальности сверхвысоких давлений. При повышении

давления увеличивается средняя скорость атомов газа, поэтому при сверхвысоких давлениях столкновения с атомами вольфрама все чаще осуществляются не только в среде газа над поверхностью, но на самой его поверхности. Испаряющиеся атомы, преодолевающие энергетический барьер решетки, имеют существенно меньшую скорость, чем атомы газа, поэтому столкновения на поверхности приводят к их обратной конденсации. С учетом периода тепловых колебаний атомов решетки моделирование в этом случае уподобляется кино съемке процесса со скоростями в миллиарды кадров за секунду.

4. Компьютерное моделирование некоторых уникальных лабораторных работ экспериментального плана. В обычных вузах практически отсутствуют натурные лабораторные работы из области экспериментальной, квантовой и ядерной физики. Для устранения этого недостатка разработан ряд компьютерных лабораторных работ. **4.1. В компьютерной лабораторной работе «Масс-спектрометр»** на экране монитора визуально наблюдаются траектории ионов различных атомов в преднамеренно изменяющемся магнитном поле. **4.2. В лабораторной компьютерной работе «Опыт Франка и Герца»** студенты на экране монитора визуально наблюдают и изучают процессы столкновения электронов с атомами ртути. **4.3. В компьютерной лабораторной работе «Опыт Резерфорда»** моделирование позволяет визуализировать движение α -частиц. **4.4. В компьютерной лабораторной работе «Радиоактивный распад»** строится массив из 400 атомов радиоактивного тория Th и с течением модельного времени в процессе его радиоактивного распада визуально наблюдается постепенное превращение атомов тория в атомы протактиния Pa, определяется период полураспада для различных изотопов. **4.5. В лабораторной работе «Цепные реакции в U – 235, Pu – 239 и в смеси изотопов U – 235, U – 238»** определяется критическая масса при ядерном взрыве, зависимость концентрации нейтронов деления и энерговыделения от времени. Для реализации этих работ использовались методы Монте-Карло, молекулярной динамики, численные методы решения дифференциальных уравнений и интегрирования, в том числе и метод Эйлера. На рисунках модели не представлены из-за ограниченного объема.

Привлекательность компьютерных моделей состоит, прежде всего, в их наглядности и доступности восприятия. Русская пословица гласит «Лучше один раз увидеть, чем сто раз услышать!», но больше к данному случаю подходит китайская пословица «Я слышу – и забываю, я вижу – и запоминаю, я делаю – и постигаю!». Изменяя по запросу компьютера те или иные параметры, студент или заводской специалист лучше воспринимает «и постигает!» изучаемый процесс. Каждая действующая компьютерная модель сопровождается научно-образовательной программой и в совокупности с успехом может использоваться в качестве лабораторной работы. Данные модели можно приобрести у авторов статьи (связь по электронной почте)