

**Eiropas Sociālā fonda 1.1.1.2.aktivitātes projekts  
“Atomāro un nepārtrauktās vides tehnoloģisko fizikālo procesu  
modelēšana, matemātisko metožu pilnveide un kvalitatīvā izpēte”  
vienošanās Nr.2009/0223/1DP/1.1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/008**

**Tehniskā atskaite  
par projekta apakšaktivitātes Nr. 3.2**

**„Matemātiķu pētījumi fiziķu noformulētajās tēmās”  
izpildi**

Rīga  
Latvijas Universitāte  
2012.g. 6. janvāris

## Ievads

Projekta izpildes gaitā otrajā gadā atbilstoši plānam ir sagatavota tehniska atskaite, kurā atspoguļoti rezultāti, kas iegūti sadarbojoties fiziķiem un matemātiķiem. Atskaite pamatā atspoguļo matemātisku pētījumu rezultātus fiziķiem aktuālās tēmās, pie kam akcents tiek likts uz matemātiskā korektuma un efektivitātes pārbaudi un uzlabošanu.

Šī tehniskā atskaite ir plānotais rezultāts projekta aktivitātes Nr. 3: Starpdisciplinārā mijiedarbība starp fiziķiem un matemātiķiem (vadītājs – projekta zinātniskais vadītājs asoc. prof. Andris Muižnieks) apakšaktivitātei Nr. 3.2.: Matemātiķu pētījumi fiziķu noformulētajās tēmās (vadītājs – projekta zinātniskais vadītājs asoc. prof. Andris Muižnieks).

Projekta pieteikumā ir dots sekojošs apakšaktivitātes Nr. 3.2. raksturojums:

3.2.1. Pētījuma apakšaktivitātes mērķi: Pārbaudīt un uzlabot korektumu un efektivitāti fiziķu formulētajos matemātiskajos modeļos, algoritmos un skaitliskajās metodēs.

3.2.2. Pētījuma apakšaktivitātes uzdevumu un veicamo darbu izklāsts: Fiziķu formulēto matemātisko modeļu, algoritmu un skaitlisko metožu korektuma un efektivitātes pārbaude un uzlabošana.

3.2.3. Pētījuma apakšaktivitātes gaidāmais gala rezultāts: Pārbaudīts un uzlabots korektums un efektivitāte fiziķu formulētajos matemātiskajos modeļos, algoritmos un skaitliskajās metodēs.

Tālākajā atskaites tekstā tiek aprakstīti iegūtie rezultāti. Šis materiāls tiek grupēts atbilstoši projektā plānotajām tematiskajām pētnieciskajām apakšaktivitātēm fizikā Nr. 4.1. līdz 4.3., skat. sekojošu tabulu.

4.	Tematiska pētnieciskā darbība	Skat.(4.1.-4.7.)
4.1	Atomāro un molekulāro procesu matemātiskā modelēšana	Augstas klases spektrālie eksperimentālie pētījumi un atbilstošo atomāro procesu matemātisko modeļu izveide un pārbaude.
4.2	Tehnoloģisko procesu matemātiskā modelēšana	Nepārtrauktas vides tehnoloģisko procesu matemātisko modeļu, aprēķinu algoritmu un programmatūras izstrāde un procesu pētījumi.
4.3	Mīkstu materiālu matemātiskie modeļi un to verifikācija	Augstas klases eksperimentālie pētījumi magnētiskiem mīkstiem materiāliem, atbilstošo matemātisko modeļu izveide un pārbaude.

# Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.1: Atomāro un molekulāro procesu matemātiskā modelēšana

## Vadītājs – profesors Ruvins Ferbers

Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.1.1: Atomu un molekulu koherenta mijiedarbība ar lāzera starojumu - Matemātiskās problēmas koherentas ierosmes modelēšanā  
 Vadītājs – profesors Mārcis Auziņš

### 1. Magneto-optisko rezonanšu modelēšana atomāru sārnu metālu D līniju ierosmē

Izmantojot teorētisko modeli, kas ir iegūts balstoties uz optiskajiem Bloha vienādojumiem: tiek veikta magneto-optisko rezonanšu skaitliskā modelēšana.

Teorētiskajā modelī tiek aplūkota kvantu blīvuma matricu attīstība laikā, mijiedarbojoties ar

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho] + i\hbar \hat{R}\rho, \quad (1)$$

elektromagnētisko lauku dipola tuvinājumā un ar ārēju magnētisko lauku. Šajos apstākļos atoma pilno Hamiltoniānu veido trīs komponentes:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_B - \vec{d} \cdot \vec{E}(t). \quad (2)$$

Pirmā no tām ir neperturbēta atoma Hamiltoniāns, kas ir atkarīgs no tā iekšējām koordinātām, otrā apraksta atoma mijiedarbību ar ārēju magnētisko lauku, bet trešā – mijiedarbību ar elektromagnētisko lauku dipola tuvinājumā.

Pielietojot rotējošā viļņa aproksimāciju, stohastisku, no laika atkarīgu, vienādojumu dekorelāciju, kā arī stohastiskā fāzes mainīgā formālu vidējošanu laikā, izmantojot fāzes lēcieni vai difūzijas modeli, no optiskajiem Bloha vienādojumiem ir iespējams iegūt blīvuma matricas Zēmana koherenču daļas dinamikas vienādojumus [dis-LK]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{g_i g_j}}{\partial t} = & \left( \Xi_{g_i e_m} + \Xi_{e_k g_j}^* \right) \sum_{e_k, e_m} d_{g_i e_k}^* d_{e_m g_j} \rho_{e_k e_m} - \sum_{e_k, g_m} \left( \Xi_{e_k g_j}^* d_{g_i e_k}^* d_{e_k g_m} \rho_{g_m g_j} + \right. \\ & \left. + \Xi_{g_i e_k} d_{g_m e_k}^* d_{e_k g_j} \rho_{g_i g_m} \right) - i\omega \rho_{g_i g_j} + \sum_{e_k e_l} \Gamma_{g_i g_j}^{e_k e_l} \rho_{e_k e_l} - \gamma_g \rho_{g_i g_j} + \lambda \delta(g_i, g_j) \end{aligned} \quad (3a)$$

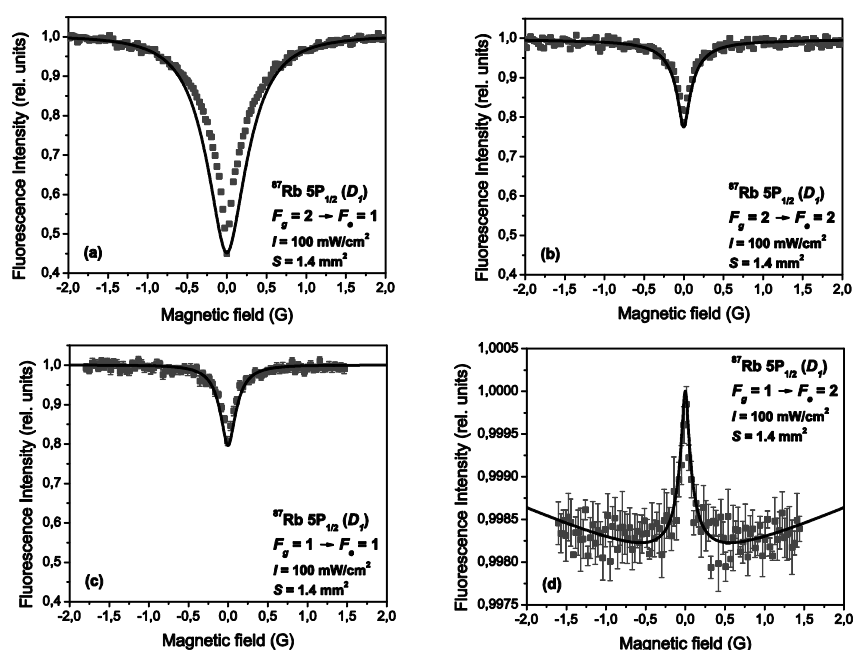
$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{e_i e_j}}{\partial t} = & \left( \Xi_{e_i g_m}^* + \Xi_{g_k e_j} \right) \sum_{g_k, g_m} d_{e_i g_k} d_{g_m e_j}^* \rho_{g_k g_m} - \sum_{g_k, e_m} \left( \Xi_{g_k e_j} d_{e_i g_k} d_{g_k e_m}^* \rho_{e_m e_j} + \right. \\ & \left. + \Xi_{e_i g_k}^* d_{e_m g_k} d_{g_k e_j}^* \rho_{e_i e_m} \right) - i\omega \rho_{e_i e_j} - (\Gamma + \gamma_e) \rho_{e_i e_j}. \end{aligned} \quad (3b)$$

Vienādojumi (3) ir spēkā stacionāras ierosmes gadījumam, kad ir iespējams iegūt to skaitlisku atrisinājumu, kas apraksta kvantu superpozīcijas stāvokli, kādā ārējie lauki (elektromagnētiskais un magnētiskais) sagatavo atomus. No šiem rezultātiem ir iespējams tiešā veidā aprēķināt fluorescences signālu, kas ir eksperimentāli novērojams lielums, kā funkciju no magnētiskā lauka, ierosmes jaudas blīvuma vai citiem eksperimentālajiem parametriem.

Skaitliskā modelēšana sārnu metālu D līniju ierosmei tiek veikta izmantojot C++ valodā rakstītu datorprogrammu, kurā tiek izmantota GSL (*GNU Scientific Library*) matemātisko rutīnu pakete. Matemātiski aprakstot magnētiskā lauka ietekmi uz atoma enerģētisko

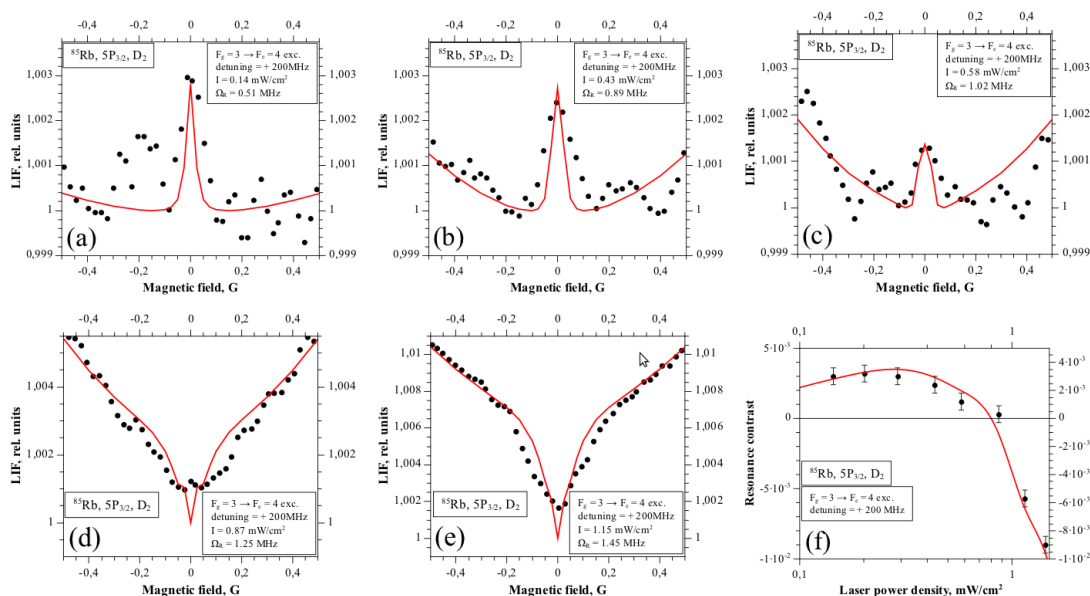
struktūru, ir jārisina īpašvērtību problēma, kurai tiek pielietota Jakobi metode, kas arī ir iekļauta minētajā C++ programmā. Jāpiebilst, ka visu īpašvērtību problēmas risināšanas algoritmu trūkums ir tāds, ka īpašvērtības un īpašvektori tiek atgriezti sajauktā secībā un ir papildus jāizstrādā algoritms to sakārtošanai, balstoties uz to fizikālo interpretāciju, kas arī tika izdarīts minētajā datorprogrammā.

Projekta izpildes gaitā, tika pabeigta L. Kalvāna promocijas darba [P1] izstrāde, kurā tika modelētas gaišās un tumšās magneto-optiskās rezonances atomāru sārnu metālu  $D_1$  līnijas ierosmē. Modelēšanas rezultātu piemērs ir redzams 1. attēlā, kur parādīti rubīdija 87. izotopa  $D_1$  līnijas četru supersīkstruktūras pāreju magneto-optisko rezonansu modelēšanas un eksperimentālo profilu salīdzinājums.



Attēls 1.  $^{87}\text{Rb } D_1$  līnijas supersīkstruktūras pārejās novērojamās magneto-optiskās rezonances. Punkti attālo eksperimentālos datus, līnija - teorētiskās modelēšanas rezultātus.

Projekta izpildes gaitā norisinās intensīvs darbs pie Rb  $D_2$  lineāri polarizētā ierosmē novērojamo magneto optisko rezonansu apraksta, īpašu vērību veltot vājo gaišo rezonansu izpētei, kas novērojamas, ja atoma pilnais leņķiskais moments pamatstāvoklī ir mazāks nekā ierosinātajā stāvoklī ( $F_g < F_e$ ). Kā parādīja modelēšanas rezultāti, tad šajās supersīkstruktūras pārejās (pa vienai katram no rubīdija izotopiem), gaišās rezonances eksistence ir ļoti jutīga gan attiecībā pret ierosinošā starojuma frekvences izskaņošanu, gan attiecībā pret precīzu atomārās pārejas enerģiju, gan arī attiecībā pret ierosinošā starojuma jaudas blīvumu. Šie modelēšanas rezultāti un no tiem izdarītie secinājumi tika izmantoti, lai plānotu laboratorijā veicamo eksperimentu, kura rezultāti apstiprināja teorētiski prognozēto rezonances zīmes (gaiša vai tumša) atkarību no ierosinošā starojuma jaudas blīvuma. Piemērs šādai rezonances zīmes maiņai ir redzams 2. attēlā. Par šiem rezultātiem tiek gatavota zinātniskā publikācija [1].

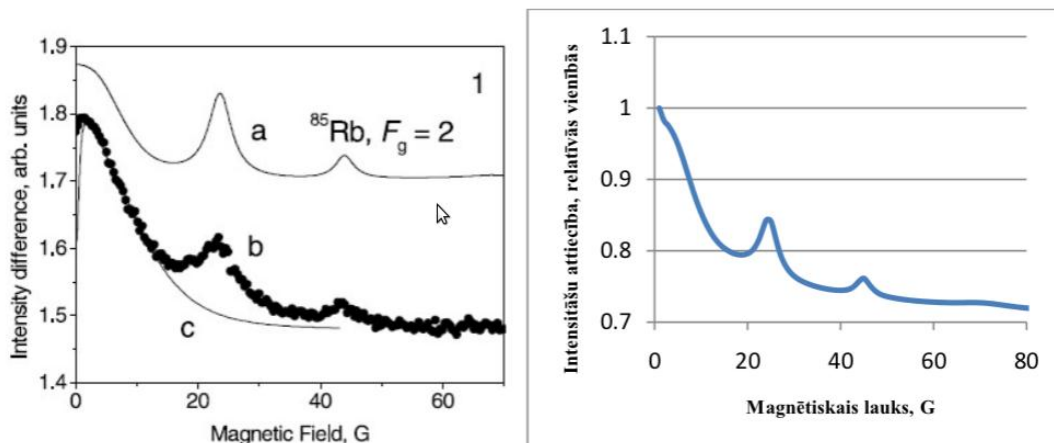


Attēls 2.  $^{85}\text{Rb}$   $D_2$  ierosmes  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 4$  ierosmē novērojamā rezonanse. (a) - (e) attēlo rezonansu profilus pie dažādiem ierosmes jaudas blīvumiem, savukārt (f) attēlo rezonanses kontrasta atkarību no ierosinošā starojuma jaudas blīvuma. Punkti – eksperimentālie dati, līnija – skaitliskās modelēšanas rezultāti.

## 2. Nenulles magnētiskā lauka līmeņu krustošanās signālu modelēšana atomāra rubīdija $D_2$ līnijas ierosmē

Atomārajiem supersīktruktūras enerģijas līmeņiem sašķeloties ārēja magnētiskā lauka ietekmē saskaņā ar nelineāro Zēmana efektu var notikt atsevišķu magnētisko apakšlīmeņu krustošanās, kas nozīmē, ka pie atiecīgās magnētiskā lauka vērtības šiem līmeņiem ir vienāda enerģija, kas savukārt noved pie eksperimentāli reģistrējamām izmaiņām ar lāzeru inducētās fluorescences (LIF) komponentēs. Procesa aprakstam izmantojams analogs teorētiskais modelis iepriekšējā nodaļā aprakstītajam, kā arī, programmai, kas veic skaitliskās simulācijas, jānodrošina stabila īpašvērtību problēmas atrisināšana pie salīdzinoši lielām magnētiskā lauka vērtībām (virs 100 Gausiem). Tas tiek panākts lietojot īpašvērtību un īpašvektoru kārtošanas algoritmu, kas balstās uz šo lielumu fizikālo interpretāciju un nosacījumu, ka to izmaiņām magnētiskajā laukā ir spēkā nepārtrauktības nosacījums.

Projekta gaitā tika izstrādāts bakalaura darbs [B1], kurā ar teorētisko modeli tika aprakstīti 2002. gadā Oklahomā veikta eksperimenta rezultāti. Ņemot vērā modelēšanas uzdevuma īpatnības un veicot skaitliskos aprēķinus, tika meklēts optimālā skaitlisko aprēķinu precizitāte, vienlaicīgi optimizējot aprēķinu resursprasības un tiem nepieciešamo laiku. Rezultātu piemērs ir redzams 3. attēlā.



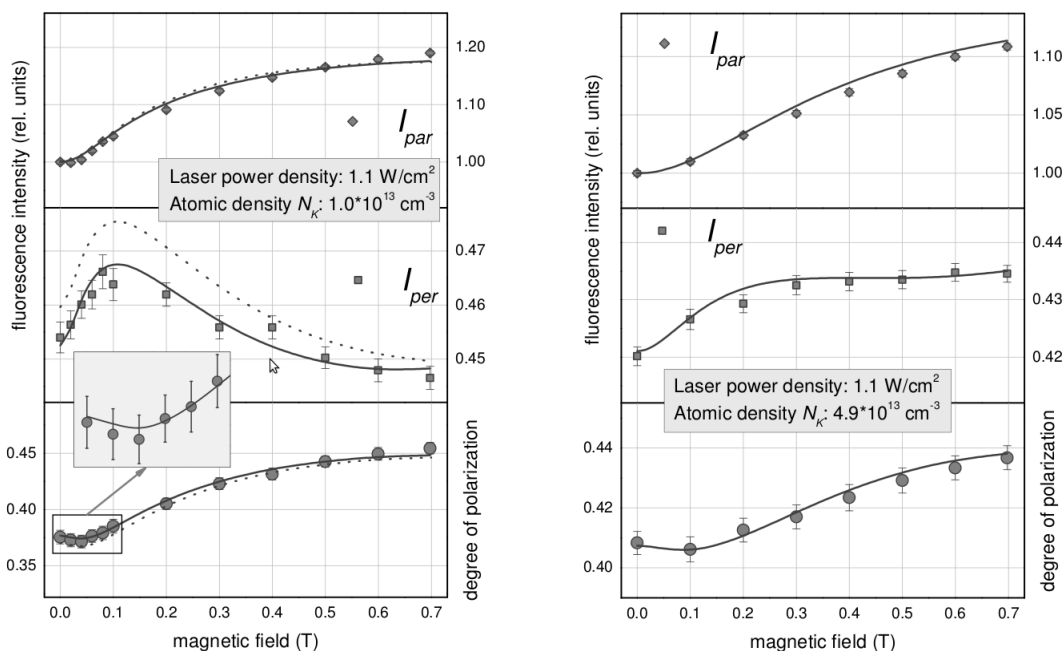
Attēls 3. Nenulles magnētiskā lauka līmeņu krustošanās signāli. Pa kreisi: punkti - eksperimentālie rezultāti, līnijas - 2002. gadā veiktās skaitliskās modelēšanas rezultāti. Pa labi: projekta ietvaros veiktās modelēšanas rezultāti.

Balstoties uz iegūtajiem rezultātiem, tika nolemts veikt atkārtotu eksperimentu LU Lāzeru centrā. Gatavojoties eksperimentam, tika veikta skaitliskā modelēšana, aprakstot nelineāro Zēmana efektu un nosakot potenciāli interesantajām līmeņu krustošanās vietām atbilstošās magnētiskā lauka un ierosinošā starojuma enerģijas vērtības. Šobrīd notiek eksperimentālo rezultātu apstrāde un analīze, kā arī tiek veikti skaitliskie aprēķini šo rezultātu aprakstam ar matemātisko modeli.

### 3. Magneto-optisko rezonāņu modelēšana $K_2$ molekulu ierosmē

Modelējot magneto-optiskās rezonanses molekulās, tiek izmantots teorētiskais modelis, līdzīgs tam, kas tiek izmantots atomārās ierosmes aprakstam. Molekulu gadījumā modelī nav jāiekļauj nelineārā Zēmana efekta apraksts un tā izraisītā līmeņu sajaukšanās, tā vietā ir izmantojams lineārais Zēmana efekta apraksts. Tai pat laikā tiem molekulu enerģētiskajiem stāvokļiem, kas tiek pētīti, ir ļoti lielas leņķiskā momenta vērtības ( $J \sim 100$ ), kas nozīmē, ka ievērojami palielinās vienādojumu skaits sistēmā (3). Lielais vienādojumu skaits ( $\sim 10^5$ ) liek meklēt īpašu pieeju vienādojumu sistēmas atrisināšanai. Kā optimālais risinājums tika izvēlēta asimetriski multifrontālais algoritms nepilnīgi aizpildīto matricu diagonalizēšanai, kas ir iekļauts C++ datorprogrammā ar UMFPACK matemātisko rutīnu paketes palīdzību.

$K_2$  Molekulās novērojamo magneto-optisko rezonāņu svarīgāko skaitliskās modelēšanas un eksperimentālo rezultātu apkopojums ir sagatavots zinātniskās publikācijas manuskriptā, kas ir iesniegts publicēšanai žurnālā *Physical Review A* [2]. Rezultātu piemērs ir redzams 4. attēlā.



Attēls 4. Eksperimentāli reģistrētās (punkti) un skaitliski modelētās LIF polarizācijas komponentes ( $I_{par}$  un  $I_{per}$  – augšējie attēli) un polarizācijas pakāpe (apakšējie attēli)  $K_2$  molekulu Q ierosmē. Pa labi: temperatūra šūnā  $150^{\circ}C$ . Pa kreisi: temperatūra šūnā:  $180^{\circ}C$ .

#### 4. Citi pētījumi

Projekta ietvaros tika pabeigta zinātniskā publikācija par koherenču pārnēsi Cs atomu ierosinātā stāvokļa kaskādes veida sabrukšanā [3]. Pētījumā tika analizēti skaitliskās modelēšanas un eksperimentālie rezultāti.

#### Zinātniskās publikācijas

1. M. Auzinsh, A. Berzins, R. Ferber, F. Gahbauer, L. Kalvans, A. Mozers, and D. Opalevs, *Conversion of bright magneto-optical resonance into dark for D2 excitation of atomic rubidium at fixed laser frequency*, manuskripts.
2. M. Auzinsh, R. Ferber, I. Fescenko, L. Kalvans, and M. Tamanis, *Nonlinear magneto-optical resonances for systems with  $J \sim 100$  observed in K2 molecule*, arXiv:1110.1255v1 [physics.atom-ph], iesniegts *Physical Review A*.
3. M. Auzinsh, R. Ferber, F. Gahbauer, A. Jarmola, L. Kalvans, A. Atvars, *Cascade coherence transfer and magneto-optical resonances at 455 nm excitation of cesium*, *Optics Communications* (20 February 2011) doi:10.1016/j.optcom.2011.01.088

#### Promocijas darbi

P1. L. Kalvāns, *Magneto-optisko rezonanšu signālu īpatnību izpēte sārnu metālu tvaikos*, Promocijas darbs, Latvijas Universitāte, Rīga, 2011.

## Bakalaura darbi

B1. A. Špīss, *Līmeņu krustošanās signālu modelēšana Rb D<sub>2</sub> ierosmē ārēja magnētiskā lauka klātbūtnē*, Bakalaura darbs, Latvijas Universitāte, Rīga, 2011.

## Ziņojumi zinātniskās konferencēs

- C1.L. Kalvāns, *Sārmu metālu D1 ierosmē novērojamo tumšo magneto-optisko rezonанšu piesātināšanās*, LU 69. Konference, Rīga, 2011. gada februāris.
- C2.A. Bērziņš, *<sup>85</sup>Rb un <sup>87</sup>Rb nelineārās magneto-optiskās rezonances pie D<sub>2</sub> ierosmes*, LU 69. Konference, Rīga, 2011. gada februāris.
- C3.A. Berzins, M. Auzinsh, R. Ferber, F. Gahbauer, A. Jarmola, L. Kalvans, A. Papoyan, and D. Sarkisyan, *Magneto-optical resonances in D<sub>2</sub> excitation of atomic rubidium vapour confined in an extremely thin cell*, EGAS43, Fraiburga, Šveice, 2011. gada jūlijs.
- C4.A. Berzins, M. Auzinsh, R. Ferber, F. Gahbauer, L. Kalvans, A. Mozers, and D. Opalevs, *Influence of laser power density on bright and dark magneto-optical resonances*, EGAS43, Fraiburga, Šveice, 2011. gada jūlijs.
- C5.L. Kalvans, M. Auzinsh, A. Berzinsh, R. Ferber, F. Gahbauer, A. Mozers and D. Opalevs, *Conversion of dark magneto-optical resonances to bright by controlled changes in the excitation parameters of the Rb D2 line at linearly polarized excitation*, Photonica 2011, Belgrada, 2011. gada augusts.

## Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.1.2: Divatomu molekulu Furjē transformācijas spektroskopija un struktūras noteikšana - Divatomu molekulu spektri Vadītājs – profesors Ruvins Ferbers

Lai izveidotu vienotu neadibātisko pieeju divatomu molekulu Furjē transformācijas spektru interpretācijai un to struktūras noteikšanai, tajā skaitā fotoasociācijas eksperimenta modelēšanai un optimizācijai, ir precīzi jāzina enerģijas un dinamiskās īpašības stipri saistītiem ierosinātiem stāvokļiem. Proti, ar labu precizitāti jāzina spinorbitālās  $\xi_{ij}^{SO}(R)$ , radiālās  $B_{ij}(R)$  un leņķiskās  $L_{ij}^{\pm}(R)$  mijiedarbības matricas elementi, lai padarītu šo neviennozīmīgo analīzi par ticamu procedūru. Tādēļ, piemēram, KCs molekulā jānovērtē vajadzīgie matricas elementi neadiabātiskajai mijiedarbībai starp desmit zemākajiem elektroniskiem stāvokļiem plašā starpkodolu attālumā, izmantojot pēc enerģijas un formas saskaņota mazā kodola (ar 9 elektroniem) efektīvo pseidopotenciālu kopā ar alternatīvām metodēm (kas ņem vērā elektronu korelāciju), lai varētu testēt ticamību šiem un iepriekšējiem kvazirelatīvistiskiem aprēķiniem. Pēc tam iegūtās potenciālās enerģijas līknes (PEL) un pārejas dipola moments (PDM) var izmantot ierosināto svārstību stāvokļu izstarpēšanas dzīves laiku un emisijas sazarošanās proporcijas aprēķiniem. Šīs dinamiskās īpašības var būt lietderīgas, piemēram, dzišanas ātruma novērtējumam stāvokļiem, kurus izmanto optiskā ciklā ultra- auksto molekulu veidošanai pamatstāvoklī ar fotoasociācijas metodi.

Kodola un iekšējā elektronu čaula kālija K un cēzija Cs atomiem tika aizvietota ar spinorbītas vidējiem neempīriskiem efektīviem kodola potenciāliem (EKP), atstājot 9 valences elektronus katram atomam tiešam aprēķinam. Gan formai (bāze A), gan enerģijai (bāze B) pieskaņotas bāzes tika izmantotas kvazirelatīvistiskiem aprēķiniem. Attiecīgās spina vidējotas un spinorbitālās gausiāna bāzes tika ņemtas no literatūras. Formas saskaņotie EKP tika



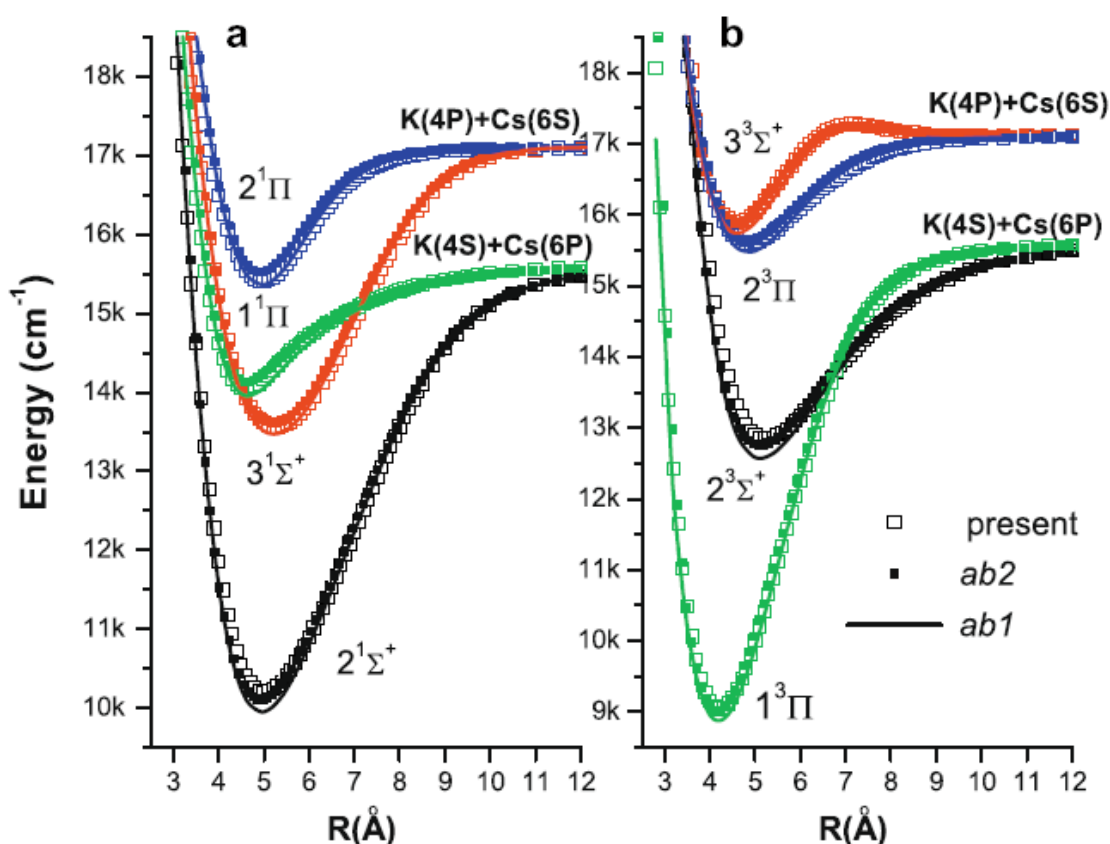
papildināti ar visu elektronu bāzu difūzo daļu elektrisko īpašību aprēķiniem un paplašināti ar papildus difūzām un polarizācijas funkcijām.

Optimizētas molekulārās orbitāles (MO) tika konstruētas no ar vienādu svaru ņemtiem stāvokļu viedējota pilna aktīvas telpas pašsaskaņota lauka uzdevuma atrisinājumiem zemākajiem  $(1-4)^{1,3}\square^+$  un  $(1-3)^{1,3}\square$  elektroniskajiem stāvokļiem. Dinamiskās korelācijas efekti tika ievesti ar iekšēji aprobežotu daudzreferenču konfigurācijas mijiedarbības metodi, kas tika pielietota tikai diviem ārējiem elektroniem (pa vienam katram atomam), saglabājot pārējos elektronus fiksētās vietās („iesaldētus”). Rezultējošā aktīvā telpa sastāv no  $14\square$  un  $10\square$  MO. No  $l$  neatkarīgie abu atomu kodolu polarizācijas potenciāli (KPP) ir pielietoti kopā ar minēto „maza kodola” EKP, lai automātiski ņemtu vērā palikušos kodola polarizācijas efektus. Atbilstošie EKP mērogošanas SO bāzes koeficienti un KPP apraušanas rādiuss bija pielāgoti tā, lai pareizi reproducētu katra atoma eksperimentālo sīkstruktūras sašķelšanos zemākajiem ierosinātajiem stāvokļiem, attiecīgi K ( $4^2P_{1/2,3/2}$ ) un Cs( $6^2P_{1/2,3/2}$ ). Visi elektroniskie aprēķini ir veikti, izmantojot MOPLRO v.2006.1 programmu paketi.

Tā kā sistemātiskā kļūda rezultējošai elektronu enerģijai ir maz atkarīga no vertikālās ierosmes enerģijas, palielošā R-atkarīgā kļūdas daļa oriģinālai (sākumā iegūtai) *ab initio* līknei  $U_i^{ab}(R)$  ierosinātiem stāvokļiem bija samazināta, izmantojot pusempīrisko sakarību:

$$U_i^{dif}(R) = [U_i^{ab}(R) - U_X^{ab}(R)] + U_X^{IPA}(R),$$

kur  $U_X^{IPA}(R)$  ir augstas precizitātes Inverted Perturbation Approach PEL, kas pieejams  $X^1\square^+$  pamatstāvoklim plašā R diapazonā. Iegūtās PEL ir parādītas 1. attēlā (tukšie simboli).

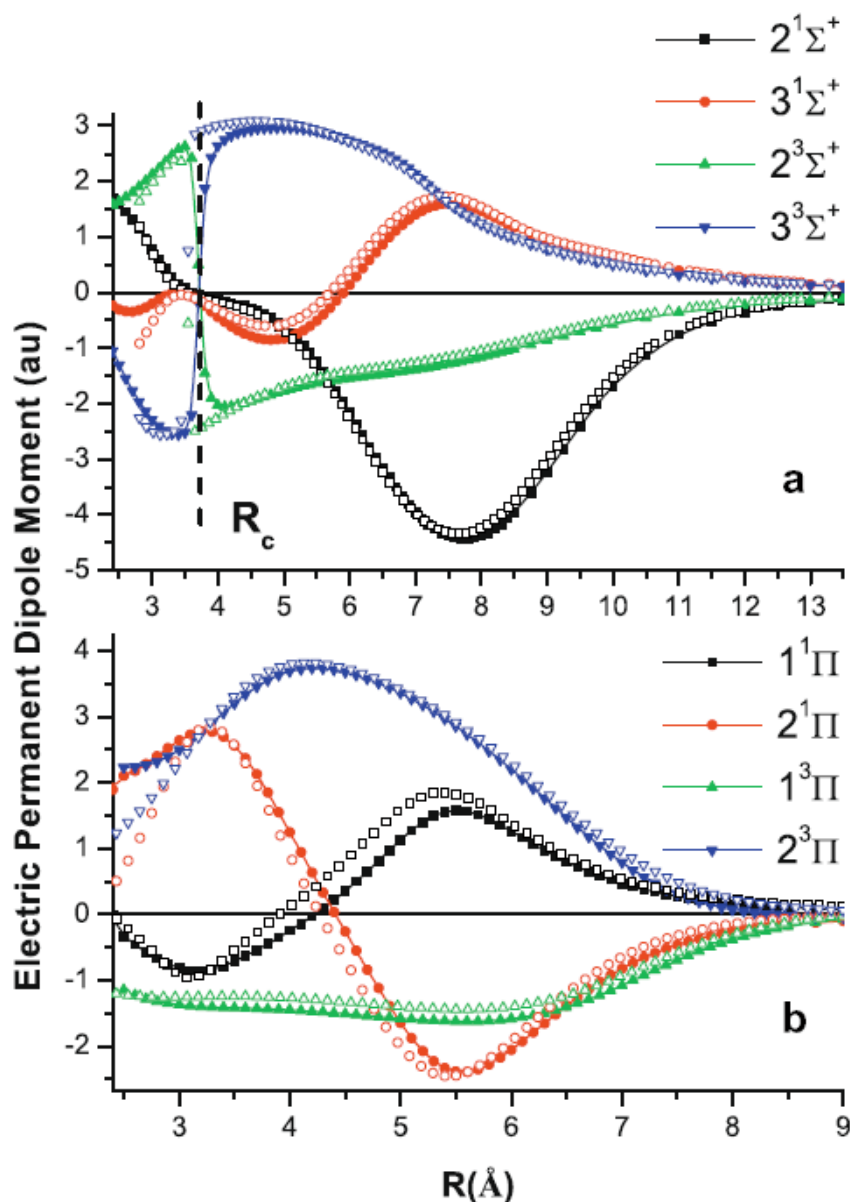


Att.1. Ierosināto singleta (a) un tripleta (b) *ab initio* PELi, kas kongverģē uz otro un trešo disociācijas robežu. Ar tukšiem simboliem apzīmēti PELi, kas izrēķināti šajā darbā.

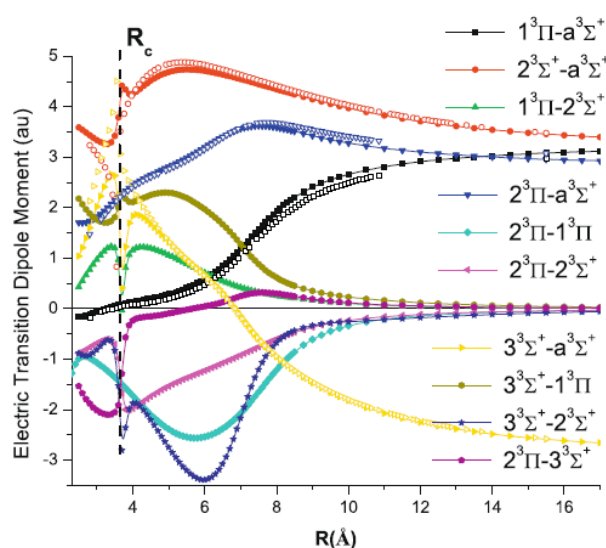
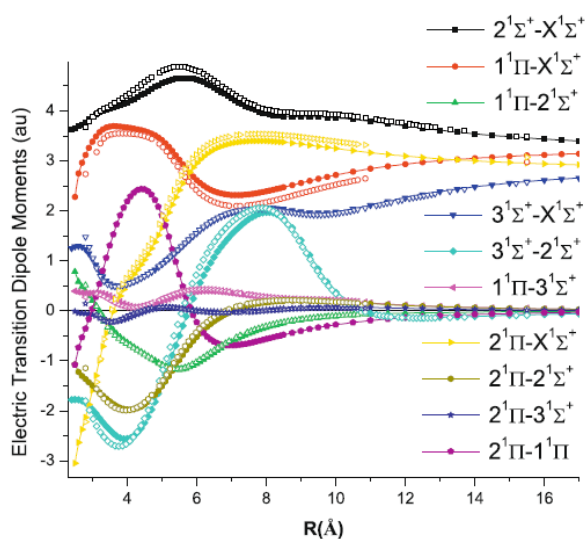
Lai iegūtu pastāvīgā dipola momenta un polarizējamību vērtības, papildus tika veikti noslēgto čaulu saistīto klāsteru aprēķini, lai iegūtu katras potenciālās enerģijas līknes katra punkta enerģijas ( $E_i$ ) atkarību no ārējā elektriskā lauka stipruma  $F$ . Katram punktam  $E_i$  tika izrēķināta trijām lauka vērtībām ( $F \in [0.0001, 0, -0.0001]$  a.u.) un divām lauka orientācijām: gar starpkodolu asi ( $F_z$ ) un perpendikulāri tai ( $F_x=F_y$ ). Pēc tam vajadzīgās vērtības izrēķinātas sekojoši:

$$d_i = -\left. \frac{\partial E_i}{\partial F_z} \right|_{F_x=0} ; \alpha_i^{\parallel} = \left. \frac{\partial^2 E_i}{\partial F_z^2} \right|_{F_x=0} ; \alpha_i^{\perp} = \left. \frac{\partial^2 E_i}{\partial F_x^2} \right|_{F_x=0} .$$

Iegūtā permanentā elektriskā dipola momenta vērtību atkarība no  $R$  ir parādīta 2. attēlā:



Att. 2. *Ab initio* pastāvīgā dipola momenta funkcijas  $^{1,3}\Sigma^+$  (a) un  $^{1,3}\Pi$  (b) stāvokļiem. Dipola momenta vērtības ir iegūtas kā dipola operatora sagaidāmas vērtības (expectation value).  $R_c$  ir  $2^3\Sigma^+$  un  $3^3\Sigma^+$  stāvokļu aizliegta krustojuma punkts.



Att. 3. Elektriskā pārejas dipola moments starp singleta stāvokļiem.

Att. 4. Elektriskā pārejas dipola moments starp tripleta stāvokļiem.

Elektriskais pārejas dipola moments

$$d_{ij}(R) = \langle \Psi_i^{el} | \sum_i e_i \vec{r}_i | \Psi_j^{el} \rangle_{\vec{r}}$$
 izrēķināts izmantojot nulltās kārtas (spina vidējoto) viļņu funkciju bāzi no PEL aprēķiniem. Rezultāti ir parādīti attēlos 3 un 4 singleta un tripleta pārejām.

### Raksti žurnālos 2010-2011

1. O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, H. Knöckel and E. Tiemann, *Singlet and triplet potentials of the ground-state atom pair Rb plus Cs studied by Fourier-transform spectroscopy*, Phys. Rev. A **83**, 052519 (2011)
2. Jianmei Bai, E. H. Ahmed, B. Beser, Y. Guan, S. Kotochigova, A. M. Lyyra, S. Ashman, C. M. Wolfe, J. Huennekens, Feng Xie, Dan Li, Li Li, M. Tamanis, R. Ferber, A. Drozdova, E. Pazyuk, A. V. Stolyarov, J. G. Danzl, H.-C. Nägerl, N. Bouloufa, O. Dulieu, C. Amiot, H. Salami, and T. Bergeman, *Global analysis of data on the spin-orbit-coupled  $A^1 \square^+ u$  and  $b^3 \square u$  states of  $Cs_2$* , Phys. Rev. A **83**, 032514 (2011)
3. L. Busevica, I. Klincare, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, V. V. Meshkov, E. A. Pazyuk, and A. V. Stolyarov, *Fourier transform spectroscopy and direct potential fit of a shelflike state: Application to  $E(4)^1 \square^+ KCs$* , J. Chem. Phys. **134**, 104307 (2011)
4. P. Zabawa, A. Wakim, A. Neukirch, C. Haimberger, N. P. Bigelow, A. V. Stolyarov, E. A. Pazyuk, M. Tamanis, and R. Ferber, *Near-dissociation photoassociative production of deeply bound NaCs molecules*, Phys. Rev. A **82**, 040501 (2010)
5. M. Tamanis, I. Klincare, A. Kruzins, O. Nikolayeva, R. Ferber, E. A. Pazyuk, and A. V. Stolyarov, *Direct excitation of the "dark"  $b^3 \square$  state predicted by deperturbation analysis of the  $A^1 \square^+ - b^3 \square$  complex in KCs*, Phys. Rev. A **82**, 032506 (2010)

## Konferenču tēzes

1. I. Birzniece, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, Fourier transform spectroscopy and molecular constants for low vibrational levels of  $B^1\Sigma^+$  state in KCs, *22nd Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy*, Dijon, France, August 29 – September 2, 2011.
2. V.I. Pupyshev, E.A. Pazyuk, A.V. Stolyarov, O. Nikolayeva, I. Klincare, M. Tamanis, R. Ferber, Insight into nodal structure of non-adiabatic diatomic states *22nd Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy*, Dijon, France, August 29 – September 2, 2011.
3. O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, KCs ground state revisited: observation of vibrational levels close to atomic asymptote through  $(4)^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$  transition, *22nd Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy*, Dijon, France, August 29 – September 2, 2011.
4. I. Birzniece, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, Fourier transform spectroscopy and potential construction for low vibrational levels of  $B^1\Sigma^+$  state in KCs, *43rd Congress of the European Group on Atomic Systems*, Fribourg, Switzerland, June 28--July 2, 2011.
5. A. Kruzins, I. Klincare, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, E.A. Pazyuk, and A.V. Stolyarov "Novel study of the  $A^1\Sigma^+-b^3\Sigma^-$  Complex in KCs and renement of deperturbation analysis", *43rd Congress of the European Group on Atomic Systems*, Fribourg, Switzerland, June 28--July 2, 2011.
6. A. Kruzins, I. Klincare, O. Nikolayeva, M. Tamanis, and R. Ferber "High Resolution Spectroscopic Study and Deperturbation Analysis of the  $^1\Sigma^+-b^3\Sigma^-$  Complex in KCs" *Developments in Optics and Communications*, Riga, April 28 - 30, 2011.
7. A.Stolyarov, E.Pazyuk, M.Tamanis, L.Busevica, R.Ferber, I. Klincare, O. Nikolayeva, *Experimental and computational study of the spin-orbit coupling effect in  $(2)^1\Pi$  KCs*, 10th European Conference on Atoms Molecules and Photons ECAMP X, Salamanca, Spain, July 4-9, 2010, Abstracts, p.123.
8. M. Tamanis, L. Busevica, R. Ferber, I. Klincare, V. V. Meshkov, O. Nikolayeva, E.A.Pazyuk, A.V.Stolyarov, Potential energy curve construction of the  $(4)^1\Sigma^+$  state of KCs based on  $(4)^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$  transition study, *10th European Conference on Atoms Molecules and Photons ECAMP X*, Salamanca, Spain, July 4-9, 2010, Abstracts, p.351.
9. M. Tamanis, O. Docenko, R. Ferber, H. Knöckel, E. Tiemann, Fourier transform spectroscopy of the  $a^3\Sigma^+$  and  $X^1\Sigma^+$  states in RbCs, *10th European Conference on Atoms Molecules and Photons ECAMP X*, Salamanca, Spain, July 4-9, 2010, Abstracts, p.477.

## Nobeiguma darbi

1. Brasovs, Artis. Rb<sub>2</sub> molekulas lāzeru inducētās fluorescences (A-b) → X joslas Furjē transformāciju spektru reģistrācija un analīze: Bakalaura darbs (2011)
2. Alps, Kalvis. RbCs molekulas A- b kompleksa detalizēta izpēte: Bakalaura darbs (2011)
3. Ceriņš, Harijs. Cs<sub>2</sub> molekulas A - b kompleksa augstas izšķirtspējas spektroskopija: Bakalaura darbs (2011)
4. Bērziņš, Andris. KCs molekulas 4(1)Sigma(+) stāvokļa pētījumi ar lāzeru inducētās fluorescences un Furjē spektroskopijas metodēm: Maģistra darbs (2010)
5. Krūziņš, Artis. KCs molekulas A - b kompleksa detalizēta izpēte : Maģistra darbs (2010)
6. Birzniece, Inese. KCs molekulas B(1)Pi stāvokļa pētījumi ar Furjē spektroskopijas metodi: Maģistra darbs (2010)
7. Zuters, Valdis. RbCs molekulas elektroniskā pamatstāvokļa augstas izšķirtspējas spektroskopija: Bakalaura darbs (2010)

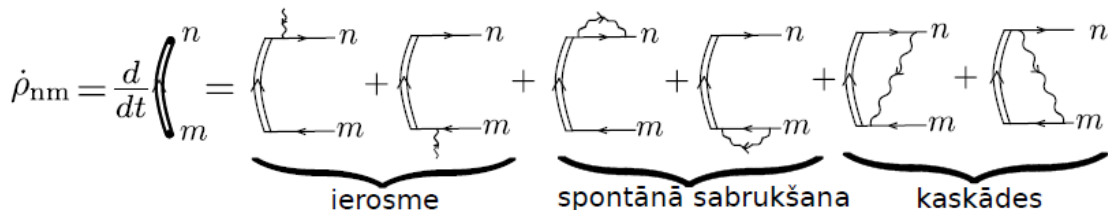
**Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.1.3: Ridberga kvantu stāvokļu lāzeru manipulācija**  
**Vadītāji – Dr. Phys. Vjačeslavs Kaščejevs, A. Ciniņš**

**1. Kompleksu diferenciālvienādojumu sistēmas modelēšana un aprēķini, lai noteiktu enerģijas līmeņu apdzīvotību dinamiku multilīmeņu shēmās**

Multilīmeņu sistēmās enerģijas līmeņu apdzīvotību dinamikas pētīšana notiek, aprēķinot sistēmai atbilstošo stāvokļu blīvuma matricu  $\hat{\rho}$ . Daļēji atvērtās sistēmās stāvokļu blīvuma matricas elementus var iegūt, atrisinot optiskās pumpēšanās ātruma vienādojumus,

$$\dot{\rho}_{nm}(t) = -i(\hat{\Omega}\hat{\rho})_{nm} + i(\hat{\rho}\hat{\Omega})_{nm} - \hat{\Gamma}\hat{\rho}$$

Šeit  $\rho_{ij}$  - stāvokļa blīvuma matricas elements,  $\hat{\Omega}$  - matrica, kuru veido kvantu sistēmas līmeņu un ārējā lauka mijiedarbības stiprumu raksturojošās Rabi frekvences,  $\hat{\Gamma}$  - ierosināto stāvokļu spontāno sabrukšanu raksturojoša matrica. Izmantojot Konstantinova – Perela diagrammu metodi, katram no 3 sistēmā iespējamajiem procesiem (koherenta ierosme, spontānā sabrukšana un kaskādes) ir iespējams piekārtot grafisko reprezentāciju (att. 1), un tādā veidā sastādīt uzskatāmu optiskās pumpēšanās ātruma vienādojumu sistēmu.

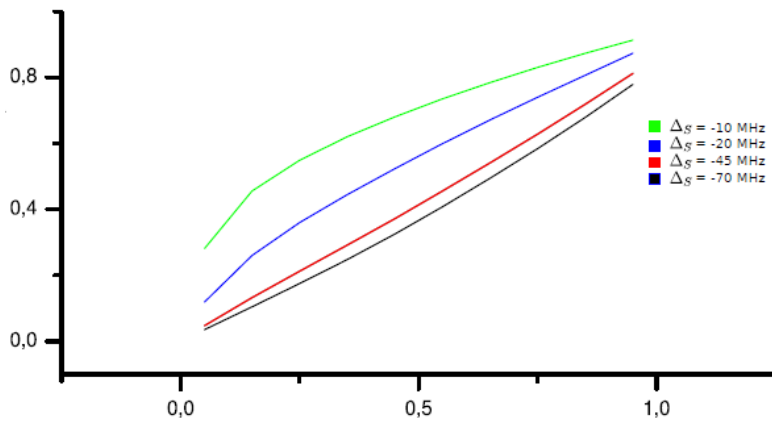


Att. 1. Optiskās pumpēšanās ātruma vienādojuma Konstantinova – Perela diagrammu pierakstā.

Analizējot optiskās pumpēšanas ātruma vienādojumus, adiabātiskajā tuvinājumā tika iegūta izteiksme, kas ļauj noteikt augsti ierosināta stāvokļa dzīveslaiku  $1/\Gamma_f$  no Autlera – Taunsa dubleta komponentu laukumu relatīvās attiecības  $\rho_f^{(area)}$ ,

$$\rho_f^{(area)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta_{10} I_f^{(1)}(\Delta_{10})}{\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta_{20} I_f^{(2)}(\Delta_{20})} = \frac{\Gamma_{t2}}{\Gamma_{t1}} = \frac{(\Gamma_{ef} + \Gamma_f) \sin^2 \Theta + \Gamma_e \cos^2 \Theta}{(\Gamma_{ef} + \Gamma_f) \cos^2 \Theta + \Gamma_e \sin^2 \Theta}$$

Šeit  $\Theta$  - Autlera – Taunsa dubletu veidojošo neietērpto stāvokļu sajaukšanās leņķis. Analizējot šo izteiksmi, tika iegūtas sakarības starp Autlera – Taunsa dubleta komponentu laukumu relatīvo attiecību un dubletu veidojošo neietērpto stāvokļu dzīveslaiku attiecību (att. 2) nātrija atomu virsskaņas kūļos lāzērierosmei no  $3P_{1/2}$  stāvokļa uz augsti Ridberga stāvokli. Aprēķinos tika izmantoti eksperimentālās kūļu iekārtas raksturīgie parametri; atoma mijiedarbību ar ārējo lauku raksturojošās Rabi frekvences pārejai no pamatstāvokļa  $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{1/2}$  un pārejai no  $3P_{1/2}$  uz augsti ierosinātu Ridberga stāvokli ir attiecīgi 10MHz un 100MHz.



Att. 2. Autlera – Taunsa dubleta komponentu laukumu relatīvā attiecība  $\rho_f^{(area)}$  atkarībā no to veidojošo neietērpto stāvokļu dzīveslaiku attiecības  $\tau_e/\tau_f$  pie dažādiem lāzera starojuma izskaņojumiem  $\Delta_s$  no pārejas rezonanses frekvences. Šeit  $\tau_e = 16.23ns$

Pētījums tika veikts S. Mežinskas bakalaura darba „Atomu izstarošanas konstanšu mērījumi virsskaņas nātrija atomu kūlī, izmantojot nepārtrauktu lāzera starojuma ierosmi” ietvaros, piedāvātā metode prezentēta konferencē DOC 2011 Rīgā.

## 2. Skaitliskas diferencālviēnādoju risināšanas metodes šķērseniskā doplera spektrālīnijas profila aprēķiniem cirkulāras un kvadrātiskas kolimējošās apertūras gadījumā ņemot vērā dabīgo spektrālīnijas paplašināšanos un ierosmes lāzera starojuma paplašināšanos

Viens no faktoriem, kas nosaka spektrālo izšķirtspēju spektroskopijā, ir Doplera efekts. No fizikāliem kūļu iekārtas uzbūves un darbības apsvērumiem var pieņemt, ka:

1. No virsskaņas kūļa izejas sprauslas  $S'$  daļiņas (atomi vai molekulas) izlido izotropiski;
2. Virsskaņas atomu/molekulu kūlī sadursmju skaits apgabalā starp sprauslu un kolimējošo apertūru  $S$  ir neievērojams;
3. Atomu/molekulu lāzeriesomes virziens sakrīt ar izvēlētās koordinātu sistēmas vienības vektora  $e_x$  virzienu.

Šādā gadījumā Doplera efekta radīto spektrālīnijas paplašinājumu patvaļīgas formas kolimējošajai apertūrai, neņemot vērā citus spektrālīnijas paplašināšanās efektus, iespējams aprakstīt, izmantojot izteiksmi:

$$P_D(\nu) = P(\Delta\nu) = \frac{1}{S' \times S} \iint_{S'} dy' dx' \iint_S dy dx \int_0^\infty d\nu F(\nu) \times \delta\left(\Delta\nu - \frac{(x - x')\nu}{L\lambda}\right)$$

Šeit  $\Delta\nu$  - lāzera ierosmes starojuma frekvences nobīde no divlīmeņu ierosmes shēmas

rezonanses pārejas frekvences,  $\iint_{S'}$  - integrālis pa kūļa sprauslas laukumu,  $\iint_S$  - integrālis pa kūļa kolimējošās apertūras laukumu,  $L$  - attālums starp kolimējošo apertūru un sprauslu,  $\lambda$  - divlīmeņu ierosmes shēmas rezonanses pārejas viļņa garums,  $\nu$  - absolūtais atoma/molekulas ātrums kūlī,  $F(\nu)$  - atomu/molekulu ātrumu sadalījuma funkcija kūlī.

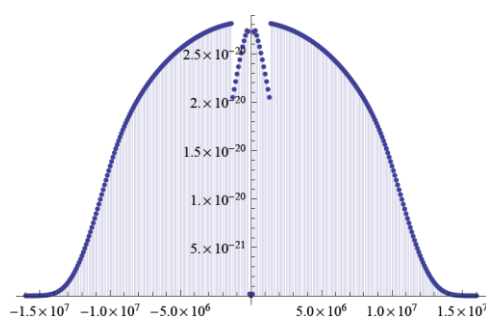
Aprēķini tika veikti speciālgadījumiem ar cirkulāru un ar kvadrātisku kolimējošo apertūru. Integrālā formula cirkulāras apertūras gadījumā ir:

$$P_{circ} = \int_{-r_1}^{r_1} \int_{-\sqrt{r_1^2-(x')^2}}^{\sqrt{r_1^2-(x')^2}} \int_{-r_2}^{r_2} \int_{-\sqrt{r_2^2-(x)^2}}^{\sqrt{r_2^2-(x)^2}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu) \times \delta\left(\nu - \frac{(x-x')^2}{L\lambda}\right) dv dy dx dy' dx'$$

Savukārt kvadrātiskai apertūrai:

$$P_{kvadr}(\nu) = \int_{-r_1}^{r_1} \int_{-\sqrt{r_1^2-(x')^2}}^{\sqrt{r_1^2-(x')^2}} \int_{-r_2}^{r_2} \int_{-r_2}^{r_2} \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu) \times \delta\left(\nu - \frac{(x-x')^2}{L\lambda}\right) dv dy dx dy' dx'$$

Šo formulu skaitliskajiem aprēķiniem ir nepieciešamas lielas skaitļošanas jaudas, pie tam pie mazām  $\Delta\nu$  vērtībām aprēķinu rezultātu nozīmīgi ietekmē izvēlēta skaitliskās risināšanas precizitāte (att. 3). No nestabilitātēm iespējams izvairīties, palielinot skaitļošanas precizitāti, kas savukārt ievērojami palielina metodes skaitļošanas resursu prasības. Tādēļ noteiktos tuvinājumos tika meklēti iespējamie spektrālīnijas profila analītiskie atrisinājumi.



Att. 3. Doplera profila un Lorenca profila konvolūcijas skaitliska simulācija. Mazām  $\Delta\nu$  vērtībām skaitliskā simulācija nedod pareizu rezultātu.

Pieņemot, ka kūļa sprausla ir ļoti maza, un, ka daļiņu ātrumu sadalījumu kūrī apraksta Dīraka Delta funkcija, cirkulāras kolimējošās apertūras gadījumā tika iegūta Doplera absorbcijas profila kodola analītiska izteiksme:

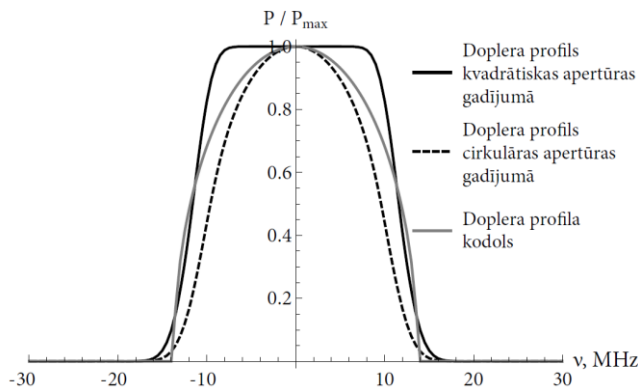
$$\tilde{P}(\Delta\nu) = \frac{2}{\Delta\nu_k \pi} \sqrt{1 - \frac{\Delta\nu^2}{\Delta\nu_k^2}}$$

Šeit  $\Delta\nu_k$  ir raksturīgais šķērseniskā Doplera profila platums. Salīdzinot analītiskās izteiksmes rezultātu ar skaitliskajiem aprēķiniem cirkulāras un kvadrātiskas apertūras gadījumā (att. 4), izrādās, ka analītiskais tuvinājums slikti apraksta Doplera profilu cirkulāras apertūras gadījumā, pie tam tā platums pie puses no maksimālās vērtības labāk atbilst Doplera profilam kvadrātiskas apertūras gadījumā.

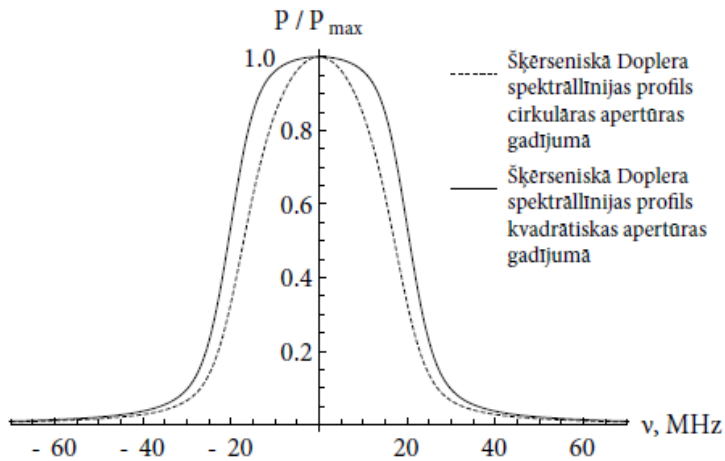
Tā kā aprēķinos nepieciešams ņemt vērā divpakāju ierosmes shēmas rezonanses līnijas dabīgo platumu, kā arī lāzera ierosmes līnijas platumu, kurus labi apraksta Lorenca kontūrs, tika meklēts analītisks atrisinājums Doplera profila kodola konvolūcijai ar Lorenca kontūru,

$$J_L(\nu) = \frac{2\Delta\nu_l}{\pi \times \Delta\nu_l^2 + 4\pi \times \nu^2}$$

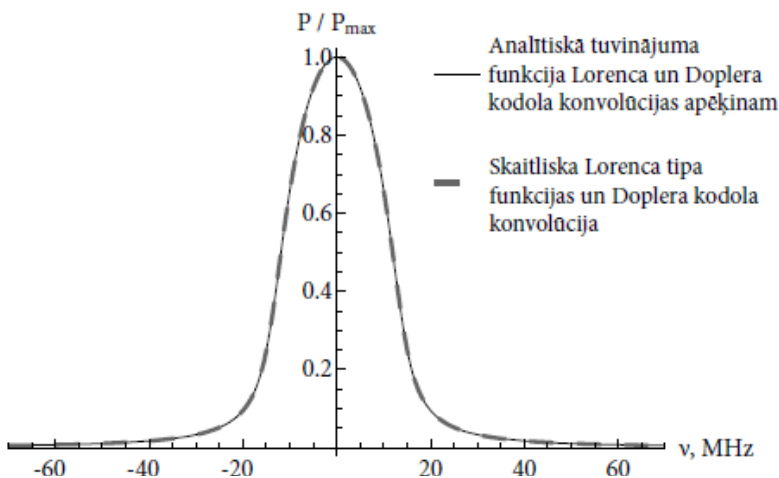
Analītiska atrisinājuma meklēšanu motivē arī fakts, ka Doplera profila un Lorenca kontūra skaitliskas konvolūcijas aprēķināšanai (att. 5) no precīzajām izteiksmēm nepieciešami lieli skaitļošanas resursi.



Att. 4. Uz maksimumu 1 normalizētu šķērsenisko Doplera profilu skaitliskā aprēķina rezultāti cirkulāras un kvadrātiskas apertūras gadījumā un salīdzinājums ar analītisko tuvinājumu cirkulāras apertūras gadījumā (t.s. Doplera profila kodols). Aprēķinos izmantoti eksperimentālās iekārtas raksturīgie parametri.



Att. 5. Skaitliski aprēķināta Doplera profila un Lorenca profila konvolūcija cirkulāras un kvadrātiskas kolimējošās apertūras gadījumā. Aprēķinos izmantoti eksperimentālās iekārtas raksturīgie parametri.



Att. 6. Skaitliski iegūtās Doplera profila kodola un Lorenca kontūra konvolūcijas salīdzinājums ar analītiskās izteiksmes rezultātu. Aprēķinos izmantoti eksperimentālās iekārtas raksturīgie parametri.



Tuvināti tika iegūta analītiska izteiksme kombinētās Doplera profila un dabīgā paplašinājuma ietekmes uz līnijas profilu aprēķināšanai,

$$J_L(\nu) = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \sqrt{\sqrt{(x_r^2 - a^2 - 1)^2 + 4x_r^2 a^2} + 1 - x_r^2 + a^2} - \frac{2a}{\pi}$$

Šeit  $a = \frac{\Delta v_{\text{lazera}}}{2\Delta v_k}$ ,  $x_r = \frac{\Delta v_{\text{lazera}}}{\Delta v_k}$ ,  $\Delta v_{\text{lazera}} = v_{\text{rezonanses}} - v_{\text{lazera}}$ . Iegūtā analītiskā izteiksme labi sakrīt ar skaitlisko simulāciju rezultātu (att. 6).

Priekšrocības analītiskās konvolūcijas formulas izmantošanai ir iespēja veikt ātrus profila formas aprēķinus. Tā kā eksperimentālajai konfigurācijai šķērseniskā Doplera profila kodols uzskatāmi atšķiras no skaitliski aprēķinātā, sagaidāmas divas atšķirības:

1. Konvolūcija ar Lorenca profilu vidusdaļā būs platāka par skaitliski aprēķināto, jo arī Doplera profila kodolam ir šāda īpatnība;
2. Analītiskajam tuvinājumam ir mazāk izteikti spārni (vērtības pie lieliem  $|v|$ ), kas izriet no konstantu ātrumu tuvinājuma, iegūstot Doplera profila kodola izteiksmi.

Pētījums tika veikts M. Brūveļa maģistra darba „Doplera nobīdes radītais spektrālais profils virsskaņas atomārajā/molekulārajā kūlī” un doktorantūras studiju ietvaros. Rezultāti prezentēti konferencē EGAS 43 Friburgā (Šveicē)<sup>1</sup>, kā arī publicēšanai tiek gatavots zinātniskais raksts<sup>2</sup>.

## Atsauces

- [1] M. Bruvelis, A. Cinins, S. Mezinska, N. N. Bezuglov, I. I. Ryabtsev and A. Ekers, *Particularities of Doppler profile for supersonic beams with circular, square, and arbitrary collimating apertures*, 43rd Conference of the European Group for Atomic Systems (EGAS), University of Fribourg, Fribourg, Switzerland, June 28 – July 2 2011;
- [2] M. Bruvelis, A. Cinins, S. Mezinska, K. Miculis, N. N. Bezuglov and A. Ekers, *Particularities of Doppler profile for supersonic beams with circular, square, and arbitrary collimating apertures*, nepublicēts raksts.

# Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.2: Tehnoloģisko procesu matemātiskā modelēšana

Vadītājs - asociētais profesors Andris Muižnieks

Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.2.1: Siltuma un vielas apmaiņas procesu elektromagnētiskā vadība stiklveida materiālu kausējumos, ievērojot procesu nelineāro mijiedarbību un starojuma siltuma apmaiņu - Indukcijas krāsns tīģeļa elektrovadītspējas ietekmes uz temperatūras sadalījumu tīģeļa sienā analīze

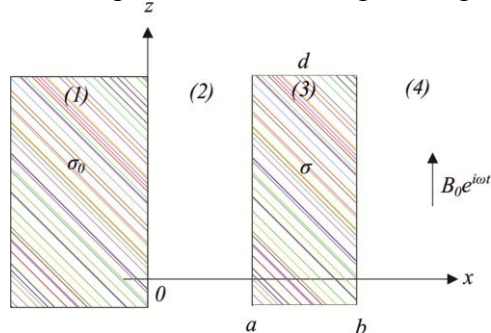
Vadītājs – asoci. prof. Andris Jakovičs

Kausējot cinku saturošus metālus keramiskā tīģelī ar elektromagnētiskās indukcijas metodi notiek cinka difūzija tīģeļa sienā, kuras rezultātā tajā izveidojas plāns (apmēram 3 mm) slānis ar palielinātu cinka koncentrāciju. Šī slāņa īpatnējā elektrovadītspēja  $\sigma = 1-10 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$  tomēr ir maza salīdzinot ar kausējuma vadītspēju  $\sigma_0 = 10^6 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$ . Elektromagnētiskā lauka frekvence ir intervālā no 50–200 Hz. Kausējuma temperatūra  $T_0 = 1100-1200^\circ C$ , kura atbilst temperatūrai uz tīģeļa iekšējās virsmas, bet temperatūru uz tīģeļa ārējās virsmas nosaka ūdens dzesēts induktors un tā ir  $T_k = 100-300^\circ C$ . Raksturīgais tīģeļa siltumvadītšanas koeficients ir  $\lambda \approx 2 W/m \cdot K$ . Tas palielinās cinka infiltrācijas joslā ar paaugstinātu elektrovadāmību, kur inducēto virpuļstrāvu dēļ veidojas papildus siltuma avots.

Lai noteiktu tā ietekmi uz temperatūras sadalījumu tīģeļa sienā, nepieciešams risināt elektrodinamikas problēmu, atrodot virpuļstrāvu sadalījumu un disipēto Džoula siltumu. Ar aprēķināto siltuma avotu tīģeļa sienas slānī tālāk var atrisināt termisko problēmu pie uzdotā siltuma avota  $q$  un temperatūrām  $T_0$  un  $T_k$  attiecīgi uz iekšējās un ārējās tīģeļa sienas.

## 1. Džoula siltuma zudumu aprēķins tīģeļa sienā

Lai aprēķinātu virpuļstrāvas radītos siltuma zudumus, aplūkosim plakānu divslāņu modeli (Att. 1), kur pie  $x < 0$  uzdots bezgalīgs kausējuma slānis (1) ar īpatnējo vadāmību  $\sigma_0$ . Apgabali (2) un (4) nevadoši, bet (3) ir pētāmais vadošais slānis ar paaugstinātu cinka saturu. Izmēri  $a$  un  $b$  nosaka tā iekšējās un ārējās virsmas attālumus no kausējuma. Ārējā apgabalā (4) uzdots homogēns magnētiskais lauks ar indukcijas amplitūdi  $B_0$ , ko nosaka induktorā plūstošā strāva. Magnētiskajam laukam ir harmoniska atkarība no laika. Pie šādas modeļa izvēles neievērojam virsmu liekumu rādiusus, kuri ir pietiekami lieli, salīdzinot ar apskatāmo slāņu (2) – (3) biezumu. Savukārt virsmas efekta dēļ lauka iespiešanās dziļums kausējumā ir mazāks par tā rādiusu un tāpēc var pieņemt eksponenciālu lauka dilšanu kausējumā.



Pie šiem nosacījumiem elektrodinamikas uzdevumu var risināt izmantojot vektorpotenciālu, kura vienīgā komponente  $A_y = A$  ir perpendikulārai zīmējuma plaknei un apmierina vienādojumu:

$$\frac{\partial^2 A_i}{\partial x^2} = \begin{cases} k_0^2 A_i, & x < 0, & i = 1; \\ 0, & 0 < x < a, & i = 2; \\ k^2 A_i, & a < x < b, & i = 3; \\ 0, & x > b, & i = 4, \end{cases} \quad (1)$$

kur  $k_0 = \sqrt{i\omega\sigma_0\mu_0}$ ,  $k = \sqrt{i\omega\sigma\mu_0}$

un robežnosacījumus

$$\begin{aligned} A_1 &= A_2, & \frac{\partial A_1}{\partial x} &= \frac{\partial A_2}{\partial x}, & x &= 0; \\ A_2 &= A_3, & \frac{\partial A_2}{\partial x} &= \frac{\partial A_3}{\partial x}, & x &= a; \\ A_3 &= A_4 + A_0, & \frac{\partial A_3}{\partial x} &= \frac{\partial A_4}{\partial x} + \frac{\partial A_0}{\partial x}, & x &= b, \end{aligned} \quad (2)$$

kur  $A_0 = B_0 x e^{i\omega t}$  ārējā homogēnā lauka vektorpotenciāls. Bbezgalīga solenoīda tuvinājumā  $B_0 = \mu_0 w I$ , kur  $w$  – vijumu skaits uz garuma vienību,  $I$  – strāvas amplitūda vijumā.

Vienādojuma (1) atrisinājumi pie dotajiem nosacījumiem (2) visos četros apgabalos ir sekojoši:

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{\tau B_0}{\Delta} e^{k_0 x + i\omega t}; \\ A_2 &= \frac{B_0}{\Delta} (\tau + kx) e^{i\omega t}; \\ A_3 &= \frac{B_0}{\Delta} [(\tau + ka) \operatorname{ch} k(x-a) + \operatorname{sh} k(x-a)] e^{i\omega t}; \\ A_4 &= B_0 \left\{ \frac{1}{\Delta} [(\tau + ka) \operatorname{sh} kd + \operatorname{ch} k(x-a)] - b \right\} e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (3)$$

kur  $\tau = \sqrt{\frac{\sigma}{\sigma_0}}$ ,  $\Delta = k[(\tau + ka) \operatorname{sh} kd + \operatorname{ch} kd]$ ;  $d = b - a$

un  $\operatorname{sh}$  un  $\operatorname{ch}$  ir hiperboliskā sinusa un kosinusa funkcijas.

Trešajā slānī inducētās strāvas blīvums, saskaņā ar iegūto atrisinājumu (3) ir

$$j_3 = -i\omega\sigma A_3 = -\frac{k^2}{\mu_0} A_3 = -k \frac{B_0}{\mu_0} \frac{(\tau + ka) \operatorname{ch}[k(x-a)] + \operatorname{sh} k(x-a)}{(\tau + ka) \operatorname{sh}(kd) + \operatorname{ch}(kd)}. \quad (4)$$

Savukārt siltuma daudzums, kas izdalās trešajā slānī laika vienībā uz tilpuma vienību (Džoula siltumu avota blīvums), ir:

$$q = \frac{1}{2\sigma} j_3 j_3^* =$$

$$= \omega \frac{B_0^2}{2\mu_0^2} \cdot \frac{(\alpha^2 + \beta^2 + 1)\text{ch}\theta + (\alpha^2 + \beta^2 + 1)\cos\theta + 2\beta\text{sh}\theta + 2\alpha\sin\theta}{(\alpha^2 + \beta^2 + 1)\text{ch}\gamma - (\alpha^2 + \beta^2 - 1)\cos\gamma + 2\beta\text{sh}\gamma - 2\alpha\sin\gamma}, \quad (5)$$

kur  $\gamma = \frac{2d}{\delta}$ ,  $\delta = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\sigma\mu_0}\omega}$  - EM lauka iespiešanās dziļums,

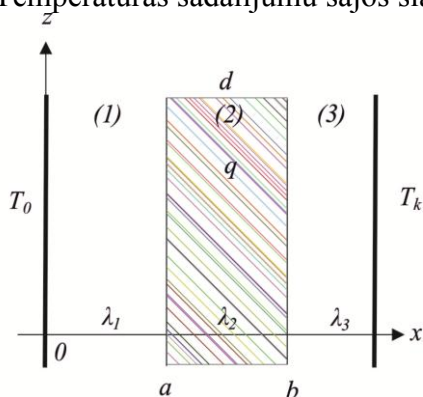
$$\alpha = \frac{a}{\delta} = \frac{\gamma a}{2d}; \quad \beta = \tau + \alpha; \quad \theta = \theta(x) = \frac{2(x-a)}{\delta} = \gamma \frac{x-a}{b-a}.$$

## 2. Temperatūras sadalījums tīģeļa sienā

Apskatāmo tīģeļa sienu sadalīsim trīs slāņos ar dažādām siltuma vadītspējām:

- (1) pie  $0 < x < a$  bez siltuma avota,
- (2) pie  $a < x < b$  ar siltuma avotu  $q$ , kuru nosaka formula (5),
- $b < x < c$  bez siltuma avota.

Temperatūras sadalījumu šajos slāņos nosaka stacionārs siltuma vadīšanas vienādojums:



Att.2. Modelis temperatūras sadalījuma aprēķinam.

$$\frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, & i = 1; \\ -\frac{q}{\lambda_2}, & a < x < b, & i = 2; \\ 0, & b < x < c, & i = 3 \end{cases} \quad (6)$$

un robežnosacījumi

$$T_1 \Big|_{x=0} = T_0;$$

$$T_1 \Big|_{x=a} = T_2 \Big|_{x=a} : \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=a} = \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=a};$$

$$T_2 \Big|_{x=b} = T_3 \Big|_{x=b} : \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=b} = \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial x} \Big|_{x=b};$$

$$T_3 \Big|_{x=c} = T_k;$$

Vienādojuma (6) atrisinājums visos trijos slāņos, saskaņā ar robežnosacījumiem (7), var uzrakstīt sekojošā formā:

$$u_1 = \frac{r_1 x}{aR} \left\{ u_k + u_e \left[ p - \left( 1 + \frac{r_3}{r_2} \right) v + \frac{r_3}{r_2} w \right] \right\};$$

$$u_2 = \frac{1}{R} \left( r_1 + r_2 \frac{a-x}{a-b} \right) u_k + u_e \left\{ \frac{r_3}{r_2} w + 1 - f(x) - \frac{1}{R} \left( r_3 + r_2 \frac{x-b}{a-b} \right) \left( p + \frac{r_1}{r_2} v + \frac{r_3}{r_2} w \right) \right\}; \quad (8)$$

$$u_3 = u_k - \frac{x-c}{b-c} \cdot \frac{r_3}{R} \left\{ u_k + u_e \left[ p + \frac{r_1}{r_2} v - \left( 1 + \frac{r_1}{r_2} \right) w \right] \right\},$$

kur  $r_1 = \frac{a}{\lambda_1}$ ;  $r_2 = \frac{b-a}{\lambda_2}$ ;  $r_3 = \frac{c-b}{\lambda_3}$  - visu triju slāņu siltumpretestības,  $R = r_1 + r_2 + r_3$  šo slāņu rezultējošā pretestība. Pārējie lielumi ir definēti šādi:

$$u_i = T_i - T_0, \quad i = 1, 2, 3, k; \quad u_e = \frac{B_0^2}{4\mu_0^2 \sigma \lambda_2};$$

$$p = 1 - \frac{2}{\Delta_0}; \quad v = 2\tau \frac{\gamma}{\Delta_0}; \quad w = \gamma \frac{\Delta_1}{\Delta_0};$$

$$f(x) = \frac{1}{\Delta_0} \left[ (\alpha^2 + \beta^2 + 1) \operatorname{ch} \theta - (\alpha^2 + \beta^2 - 1) \cos \theta + 2\beta \operatorname{sh} \theta - 2\alpha \sin \theta \right];$$

$$\Delta_0 = (\alpha^2 + \beta^2 + 1) \operatorname{ch} \gamma - (\alpha^2 + \beta^2 - 1) \cos \gamma + 2\beta \operatorname{sh} \gamma - 2\alpha \sin \gamma;$$

$$\Delta_1 = (\alpha^2 + \beta^2 + 1) \operatorname{sh} \gamma - (\alpha^2 + \beta^2 - 1) \sin \gamma + 2\beta \operatorname{ch} \gamma - 2\alpha \cos \gamma.$$

Kā viegli pārlicināties, tad

$$1 - f(a) = 1 - \frac{2}{\Delta_0} = p; \quad 1 - f(b) = 0 \quad (9)$$

$$\lambda_2 f'(a) = 2\tau \frac{\gamma}{\Delta_0 r_2} = \frac{v}{r_2}; \quad \lambda_2 f'(b) = \frac{\gamma \Delta_1}{\Delta_0 r_2} = \frac{w}{r_2}.$$

Tas atbilst mazam vadošam slāņa biezumam salīdzinājumā ar EM laika iespīšanās dziļumu  $\delta$ .

### 3. Asimptotiskais novērtējums

Vēl aplūkosim asimptotiskās formulas pie maziem  $\gamma$ . Izvirzot rindā formulas (8) pa  $\gamma$  pakāpēm un aprobežojoties ar saskaitāmajiem, kuri satur pakāpes ne augstākas par  $\gamma^2$ , iegūstam šādas parametru  $p$ ,  $v$ , un  $w$  vērtības:

$$p = \tau\gamma - \frac{1}{2}(\tau\gamma)^2; \quad v = \tau\gamma - (\tau\gamma)^2; \quad w = \tau\gamma. \quad (10)$$

Tad no formulām (8) seko:

$$\begin{aligned}
u_1 &= \frac{r_1 x}{aR} \left[ u_k + \frac{1}{2} u_e (\tau\gamma)^2 \left( 1 + 2 \frac{r_3}{r_2} \right) \right]; \\
u_2 &= \frac{1}{R} \left( r_1 + r_2 \frac{a-x}{a-b} \right) u_k + \frac{1}{2} u_e (\tau\gamma)^2 \left[ \frac{1}{R} \left( r_3 + r_2 \frac{x-b}{a-b} \right) \left( 1 + 2 \frac{r_1}{r_2} \right) - \left( \frac{b-x}{b-a} \right)^2 \right]; \\
u_3 &= u_k - \frac{x-c}{b-c} \cdot \frac{r_3}{R} \left[ u_k - \frac{1}{2} u_e (\tau\gamma)^2 \left( 1 + 2 \frac{r_1}{r_2} \right) \right].
\end{aligned} \quad (11)$$

Ievēdot vēl bezdimensionālo frekvenci  $\omega_* = \sigma \mu_0 \omega d^2$ , iegūstam, ka  $\frac{1}{2} \gamma^2 = \omega_*$ . Ja

$\omega = 0$ , tad iegūstam problēmas atrisinājumu bez siltuma avota ( $q = 0$ )  $u_i^0$ :

$$u_1^0 = \frac{x r_1}{a R} u_k; \quad u_2^0 = \frac{1}{R} \left( r_1 + r_2 \frac{a-x}{a-b} \right) u_k; \quad u_3^0 = \left( 1 - \frac{x-c}{b-c} \cdot \frac{r_3}{R} \right) u_k. \quad (12)$$

Ņemot starpību  $\Delta u_i = u_i - u_i^0 = \Delta T_i$ , iegūstam temperatūras pieaugumu visos trijos tīģeļa sienas slāņos, kuru izraisa inducētās virpuļstrāvas. Tās uzskatāmības labad pierakstīsim sekojošā formā:

$$\begin{aligned}
\Delta T_1 &= T_e \frac{r_1 x}{a R} \left( 1 + 2 \frac{r_3}{r_2} \right); \\
\Delta T_2 &= T_e \left[ \frac{1}{R} \left( r_3 + r_2 \frac{x-b}{a-b} \right) \left( 1 + 2 \frac{r_1}{r_2} \right) - \left( \frac{b-x}{b-a} \right)^2 \right]; \\
\Delta T_3 &= T_e \frac{x-c}{b-c} \cdot \frac{r_3}{R} \left( 1 + 2 \frac{r_1}{r_2} \right),
\end{aligned} \quad (13)$$

kur

$$T_e = \frac{B_0^2 \sigma \omega d^2}{4 \mu_0 \sigma_0 \lambda_2}. \quad (14)$$

Vienkāršākajā gadījumā pieņemot, ka  $\lambda_1 \approx \lambda_3 \approx \lambda \approx 2 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ , tomēr nav zināms  $\lambda_2$ , kurš atkarīgs no cinka koncentrācijas šajā slānī.  $\lambda_2$  noteikšanai izmantosim Videmana – Franca likumu, ka metāliem  $\frac{\lambda}{\sigma T_0} = \text{const}$  ( $T_0$  – absolūtā temperatūra). Ja cinka īpatnējās elektrovadāmības un siltuma vadāmības koeficienti attiecīgi ir  $\sigma_z$  un  $\lambda_z$ , tad cinka pavedieni, kas radušies difūzijas rezultātā keramikas slānī, nodrošina šīs vadāmības attiecīgi  $\sigma$  un  $\lambda_s$ .

Pieņemot par spēkā esošu attiecību vienādību:

$$\frac{\sigma}{\sigma_z} = \frac{\lambda_s}{\lambda_z}, \quad (15)$$

iegūstam  $\lambda_s = \lambda_z \frac{\sigma}{\sigma_z}$ . Pie  $\sigma = 0$ ,  $\lambda_s = 0$ , t. i., kad tīģeļa sienā cinka nav, keramikas siltuma

vadāmības koeficients ir  $\lambda$ . Tāpēc rezultējošais īpatnējās siltumvadāmības koeficients, kuru veido keramikas siltuma vadāmība kopā ar cinka piemaisījumu ir:

$$\lambda_2 = \lambda + \lambda_z \frac{\sigma}{\sigma_z} \quad (16)$$

un, ja zināma īpatnējā elektrovadāmība  $\sigma$ , var aprēķināt  $\lambda_2$ . Tomēr, piemēram, ja  $\sigma_z = 1,7 \cdot 10^7 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$ ,  $\lambda_z = 112 W/m \cdot K$ ,  $\sigma = 10^3 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$ ,  $\lambda = 2 W/m \cdot K$ , no formulas (16) seko, ka  $\lambda_2 \approx \lambda$ .

Savukārt, saskaņā ar formulu (14), pie  $B_0 \approx 0,3 T$ ,  $\sigma \approx 10^3 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$ ,  $\sigma_0 \approx 10^6 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$ ,  $f = 200 Hz$ ,  $\lambda_2 \approx 2 W/m \cdot K$ ,  $d \approx 3 \cdot 10^{-3} m$  iegūstam:

$$T_e = 0,1 K.$$

Saskaņā ar formulām (13), ja  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $r_3$  pēc lielumiem maz atšķiras, tad  $0,1^0 K$  raksturo temperatūras novirzi, kuru rada virpuļstrāvu radītā siltuma izdalīšanās tīģeļu sienā. Pie šīm parametru vērtībām relatīvā frekvence  $\frac{1}{2} \gamma^2 = \omega_* \approx 0,14 \cdot 10^{-4}$ , kas šai gadījumā ir ļoti mazs lielums un pilnībā nodrošina asimptotisko formulu precizitāti. Tomēr, palielinoties  $\sigma$  un  $d$  vērtībām, var būtiski palielināties  $T_e$ . Lai iegūtu novērtējumu šai situācijai jāizmanto pilnās atrisinājuma izteiksmes (8) – (9) vai arī risinājumam jālieto skaitliska pieeja.

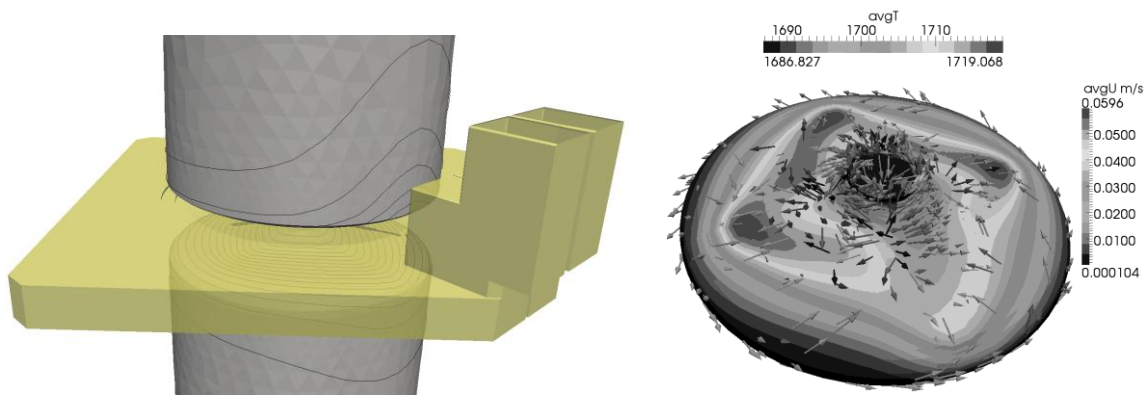
## **Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.2.2: Silīcija monokristālu izdustriālās audzēšanas matemātiskā modelēšana**

**Vadītājs – asoc. prof. Andris Muižnieks**

### **1. Ievads**

Peldošās zonas (*floating zone*) metodei, ko izmanto silīcija monokristālu audzēšanā jaudas elektronikas vajadzībām ir raksturīga zināma līmeņa aksiālā simetrija, jo gan monokristāls, gan polikristāls procesa laikā tiek griezti ap savām simetrijas asīm, kas noved pie temperatūras lauka un fāzu robežu simetrizācijas minētajos objektos. Tāpēc temperatūras lauku tajos var aprakstīt labā tuvinājumā ar aksiāli simetriskiem matemātiskiem modeļiem.

Tomēr augstfrekvences elektromagnētiskā (EM) lauka sadalījums ir būtiski trīsdimensionāls, jo pielietotie augstfrekvences induktori ir ar vienu vijumu un nesimetriskiem ģeometriskiem elementiem (spraugas, izvīzījumi). Tāpēc ir nepieciešams EM lauku modelēt ar trīsdimensionālu modeli. Otrs būtisks nesimetrijas avots ir kausējuma forma, kas var būt bez aksiālas simetrijas nesimetriskā EM spiediena vai polikristāla un monokristāla savstarpējā novietojuma dēļ, skat. att. 1.



Att. 1. Nesimetriska induktora inducēts nesimetrisks augstfrekvences strāvu sadalījums uz silīcija virsmas (pa kreisi) un nesimetrisks temperatūras lauks uz kausējuma virsmas (pa labi).

Tāpēc tika izstrādāts nesimetrisks kausējuma matemātiskais modelis, kas: 1) kura ārējā virsma tika aprakstīta ar nesimetrisku brīvās virsmas modeli; 2) uz kura virsmas tika risināts nesimetrisks augstfrekvences strāvu sadalījums; 3) kura iekšpusē tika risināts nesimetrisks temperatūras difūzijas uzdevums.

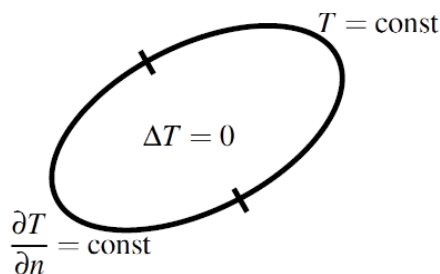
Šāda nesimetriska modeļa izveidei bija ērti pielietot robeželementu metodi (*boundary element method*) temperatūras lauka aprēķinam kausējuma iekšpusē. Tika izveidots atbilstošs programmu modulis, kas tika iebūvēts programmu sistēmā *FZone*. Tālāk seko robeželementu metodes pielietojumam izstrādāto matemātisko sakarību izklāsts.

## 2. Robeželementu metodes matemātiskās pamatsakarības

Aplūkojam temperatūras lauku, ko paraksta difūzijas process trīsdimensionālā apgabalā, ko apraksta vienādojums

$$\Delta T = 0,$$

pie kam līdzšinējie aprēķini ir parādījuši, ka parasti difūzijas tuvinājums ir ar samērā labu precizitāti modelētajos procesos. Uz daļas no apgabala virsmas ir uzdoti pirmā veida robežnosacījumi, uz citas daļas otrā veida robežnosacījumi, skat. att. 2.



Att. 2. apgabals ar divu veidu robežnosacījumiem.



Šis matemātiskās fizikas problēmas risinājumam pielietojam netiešo robeželementu metodi. Kā fundamentālo atrisinājumu izvēlamies sekojošu funkciju ar atbilstošu gradientu un atvasinājumu virsmas normāles virzienā

$$G(\vec{x}, \vec{\xi}) = \frac{1}{4\pi r},$$

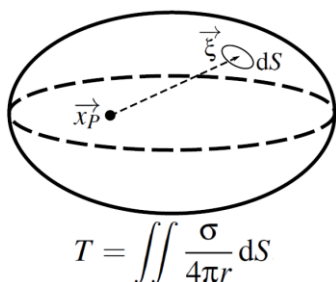
$$F(\vec{x}, \vec{\xi}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{4\pi r} = -\frac{x_i - \xi_i}{4\pi r^3}.$$

$$\frac{\partial G}{\partial n} = -\frac{(x_i - \xi_i)n_i}{4\pi r^3},$$

Tad temperatūras lauks un tā normāles atvasinājums katrā apgabala punktā izsakās sekojoši, skat. att. 3.

$$T(\vec{x}) = \iint_S G(\vec{x}, \vec{\xi}) \sigma(\vec{\xi}) dS(\vec{\xi}),$$

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \iint_S F(\vec{x}, \vec{\xi}) \sigma(\vec{\xi}) dS(\vec{\xi}).$$

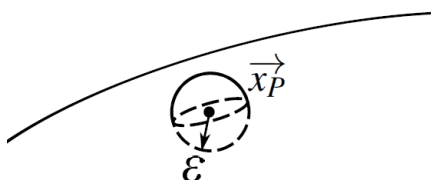


Att. 3. Netiešās robeželementu metodes ilustrācija.

Singularitātes integrēšanai virsmu sadala aplūkotā punkta mazā apkārtņē un pārējā virsmā, skat. att. 4.

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \iint_{S_\epsilon} F(\vec{x}, \vec{\xi}) \sigma(\vec{\xi}) dS(\vec{\xi}) + \iint_{S_c} F(\vec{x}, \vec{\xi}) \sigma(\vec{\xi}) dS(\vec{\xi}) \right).$$

$$\frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\vec{x}} = \frac{\Theta(\vec{x})}{4\pi} + \iint_{S^*} F(\vec{x}, \vec{\xi}) \sigma(\vec{\xi}) dS(\vec{\xi}),$$

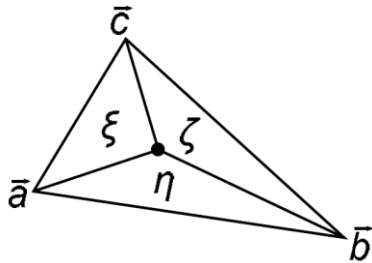


Att. 4. Punkta apkārtnes izdalīšana uz virsmas.

### 3. Virsmu diskretizācija

Virsmu diskretizācijai tiek pielietotas lineāras funkcijas trīsstūrveida robeželementos, skat. att. 5.

$$\sigma(\vec{\xi}) = \sum \sigma_i \lambda_i(\vec{\xi}),$$



Att. 5. Trīsstūrveida robeželements un lokālās koordinātes tajā.

Lokālajām koordinātēm ir spēkā sekojošas sakarības

$$\xi = \frac{S_{\bar{a}\xi\bar{c}}}{S_{\bar{a}\bar{b}\bar{c}}},$$

$$\xi + \eta + \zeta = 1.$$

$$\lambda_a = 1 - \xi - \eta,$$

$$\lambda_b = \xi,$$

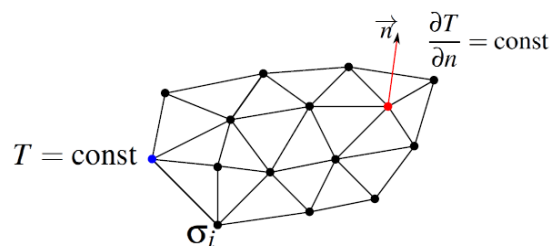
$$\lambda_c = \eta.$$

### 4. Temperatūras vienādojuma diskretizācija

Temperatūras vienādojums tiek diskretizēts sekojošā veidā, skat. att. 6.

$$T(\vec{x}_p) = \iint_{\Delta S} \frac{\sum \sigma_i \lambda_i(\vec{\xi})}{4\pi|\vec{x}_p - \vec{\xi}|} ds = \sum \sigma_i \iint_{\Delta S} \frac{\lambda_i(\vec{\xi})}{4\pi|\vec{x}_p - \vec{\xi}|} ds,$$

pie kam ir spēkā 
$$\sum \iint_{\Delta S} \frac{\lambda_i(\vec{\xi})}{4\pi|\vec{x}_p - \vec{\xi}|} ds,$$

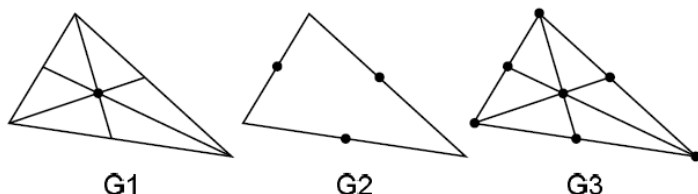


Att. 6. Temperatūras vienādojuma diskretizācija uz apgabala virsmas.

## 5. Gausa kvadrāturu pielietošana

Virsmas integrāļu aprēķināšanai tiek izmantota Gausa kvadrātūras formulas, ilustrācijai skat. att. 7 un tabulu 1, kurā ir apkopotas punktu koordinātes un atbilstošie svara koeficienti.

$$\iint_{\Delta S} \frac{\lambda_i(\vec{\xi})}{4\pi|\vec{x}_p - \vec{\xi}|} ds$$



Att. 7. Gausa kvadrātūras formulās izmantotie punkti.

First order, G1	
Integration points	Weight
(0.3333333333333333,0.3333333333333333,0.3333333333333333)	1

First order, G2	
Integration points	Weight
( 0.5 , 0.5 , 0 )	0.3333333333333333
( 0.5 , 0 , 0.5 )	0.3333333333333333
( 0 , 0.5 , 0.5 )	0.3333333333333333

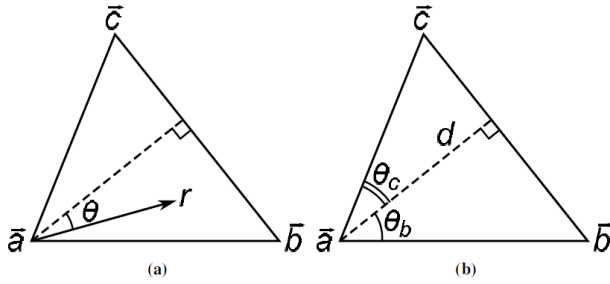
First order, G3	
Integration points	Weight
(0.3333333333333333,0.3333333333333333,0.3333333333333333)	0.45
( 0.5 , 0.5 , 0 )	0.1333333333333333
( 0.5 , 0 , 0.5 )	0.1333333333333333
( 0 , 0.5 , 0.5 )	0.1333333333333333
( 1 , 0 , 0 )	0.05
( 0 , 1 , 0 )	0.05
( 0 , 0 , 1 )	0.05

First order, G12	
Integration points	Weight
( 0.873821971016996 , 0.063089014491502 , 0.063089014491502 )	0.050844906370207
( 0.063089014491502 , 0.873821971016996 , 0.063089014491502 )	0.050844906370207
( 0.063089014491502 , 0.063089014491502 , 0.873821971016996 )	0.050844906370207
( 0.501426509658179 , 0.249286745170910 , 0.249286745170910 )	0.116786275726379
( 0.249286745170910 , 0.501426509658179 , 0.249286745170910 )	0.116786275726379
( 0.249286745170910 , 0.249286745170910 , 0.501426509658179 )	0.116786275726379
( 0.636502499121399 , 0.310352451033785 , 0.053145049844816 )	0.082851075618374
( 0.636502499121399 , 0.053145049844816 , 0.310352451033785 )	0.082851075618374
( 0.310352451033785 , 0.636502499121399 , 0.053145049844816 )	0.082851075618374
( 0.310352451033785 , 0.053145049844816 , 0.636502499121399 )	0.082851075618374
( 0.053145049844816 , 0.636502499121399 , 0.310352451033785 )	0.082851075618374
( 0.053145049844816 , 0.310352451033785 , 0.636502499121399 )	0.082851075618374

Tab. 1. Gausa kvadrātūtu punktu koordinātes un atbilstošie svara koeficienti.

Integrējot konkrētā robeželementa ietekmi uz savu virsotni, tika izmantota polārā koordinātu sistēma, skat. att. 8.



Att. 8. Polārās koordinātu sistēmas izmantošana integrēšanā.

Integrēšanā tika izmantotas sekojošas sakarības.

$$\lambda_a = 1 - \frac{r}{r_{max}}$$

$$\begin{aligned} T(\vec{x}_p)_{\vec{a}} &= \frac{1}{4\pi} \int_{\theta_b}^{\theta_c} d\theta \int_0^{r_{max}} \frac{\left(1 - \frac{r}{r_{max}}\right)}{|\vec{x}_p - \vec{\xi}|} r dr = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\theta_b}^{\theta_c} d\theta \left( \int_0^{r_{max}} \frac{r dr}{|\vec{x}_p - \vec{\xi}|} - \frac{1}{r_{max}} \int_0^{r_{max}} \frac{r^2 dr}{|\vec{x}_p - \vec{\xi}|} \right), \end{aligned}$$

$$\vec{R} = \vec{x} - \vec{\xi} = (x - r \cos \theta, y - r \sin \theta, z).$$

$$R = \left( \left( \frac{B}{2} + r \right)^2 + D \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$D = A - \frac{B^2}{4},$$

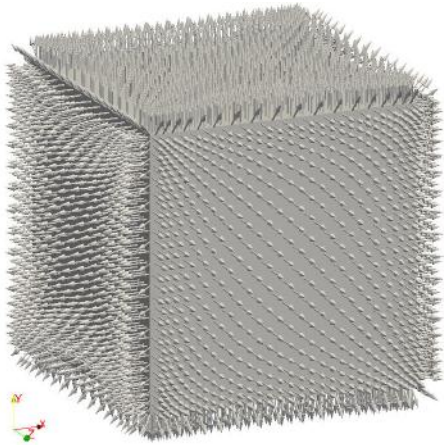
$$A = x^2 + y^2 + z^2,$$

$$B = -2(x \cos \theta + y \sin \theta).$$

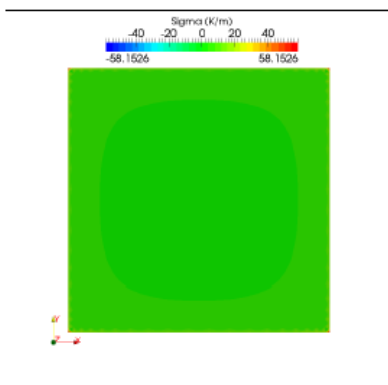
$$\begin{aligned} & \int_0^{r_{max}} \frac{r dr}{\left( \left( \frac{B}{2} + r \right)^2 + D \right)^{\frac{1}{2}}} = \\ &= \frac{1}{2} \left( \sqrt{(B + 2r_{max})^2 + 4D} - \sqrt{B^2 + 4D} - B \ln \frac{\sqrt{(B + 2r_{max})^2 + 4D} + B + 2r_{max}}{\sqrt{B^2 + 4D} + B} \right) \\ & \int_0^{r_{max}} \frac{r^2 dr}{\left( \left( \frac{B}{2} + r \right)^2 + D \right)^{\frac{1}{2}}} = \\ &= \frac{1}{8} \left( (2r_{max} - 3B) \sqrt{(B + 2r_{max})^2 + 4D} + 3B \sqrt{B^2 + 4D} + \right. \\ & \quad \left. + 2(B^2 - 2D) \ln \frac{\sqrt{(B + 2r_{max})^2 + 4D} + B + 2r_{max}}{\sqrt{B^2 + 4D} + B} \right) \end{aligned}$$

## 6. Testa aprēķini

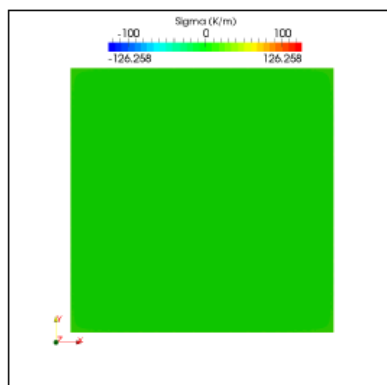
Lai pārbaudītu metodes precizitāti, tika veikti vairāki testa aprēķini. Daži piemēri tiek parādīti zemāk. Tiek aplūkots lineārs temperatūras sadalījums kubā, skat. att. 9, 10, 11, 12, 13.



Att. 9. Rupjā režģā ( $N=20$ ) normāles vektori.

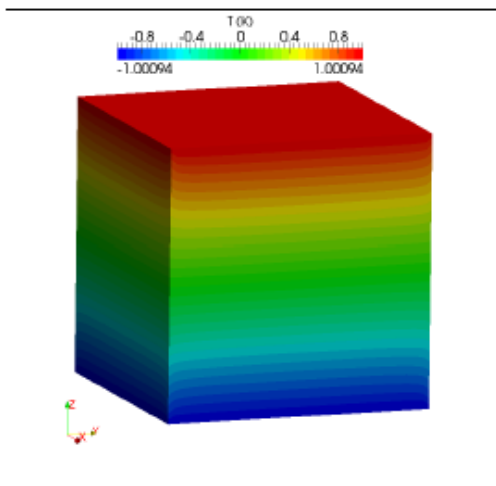


(a)  $N = 20$

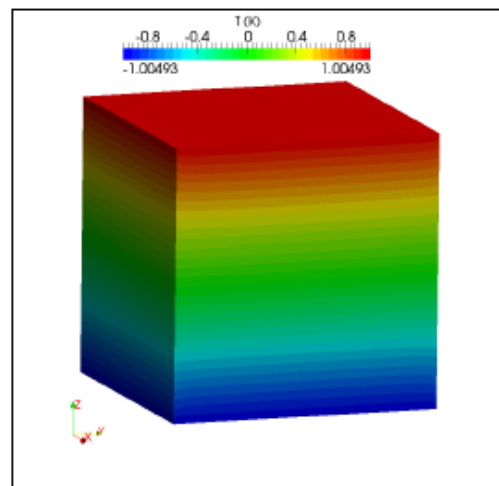


(b)  $N = 30$

Att. 10. Avotu sadalījums, skats no augšas.

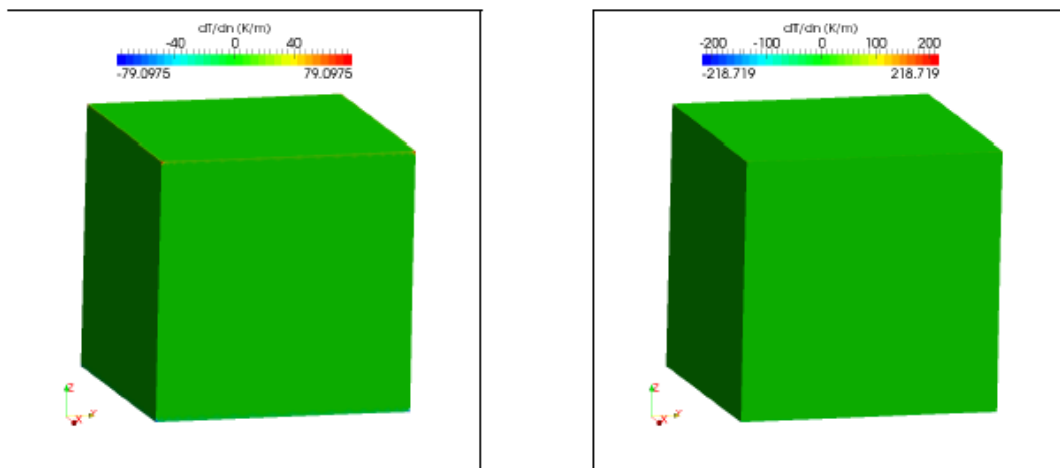


(a)  $N = 20$

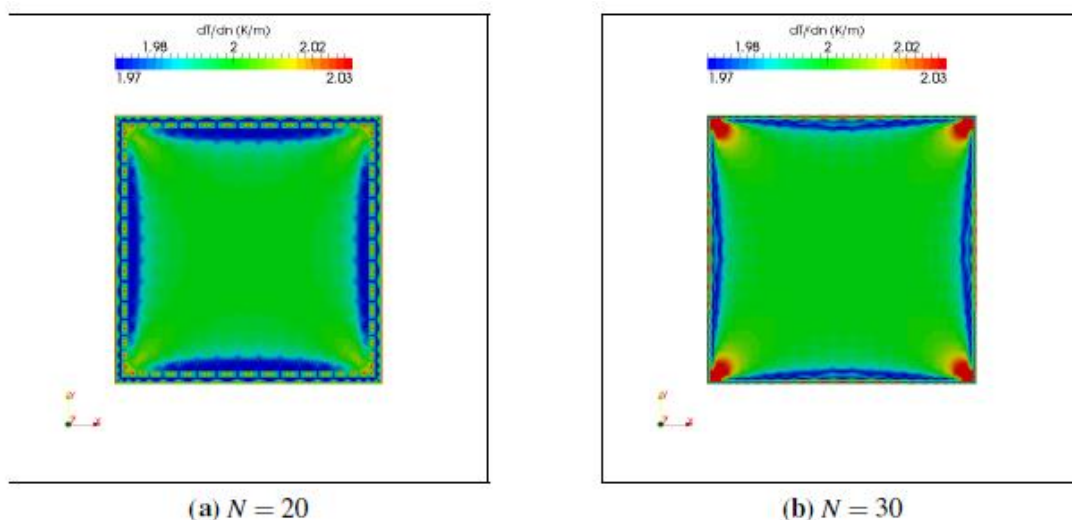


(b)  $N = 30$

Att. 11. Temperatūras sadalījums.

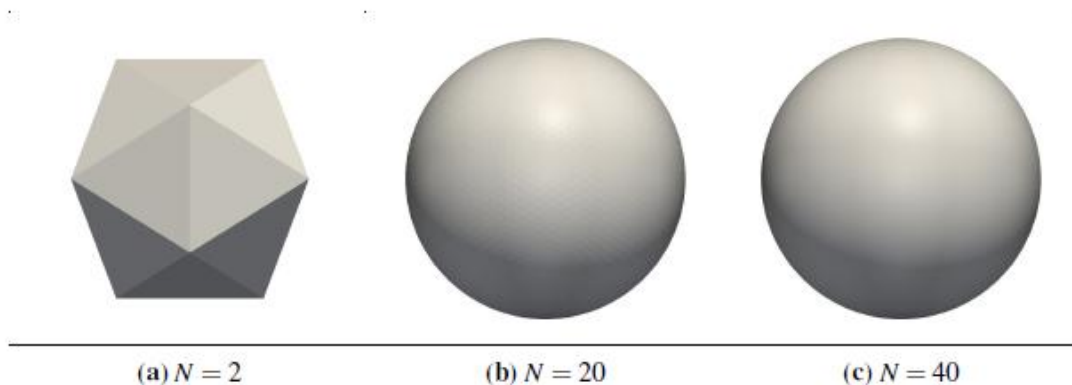


Att. 12. Temperatūras vertikālais atvasinājums.

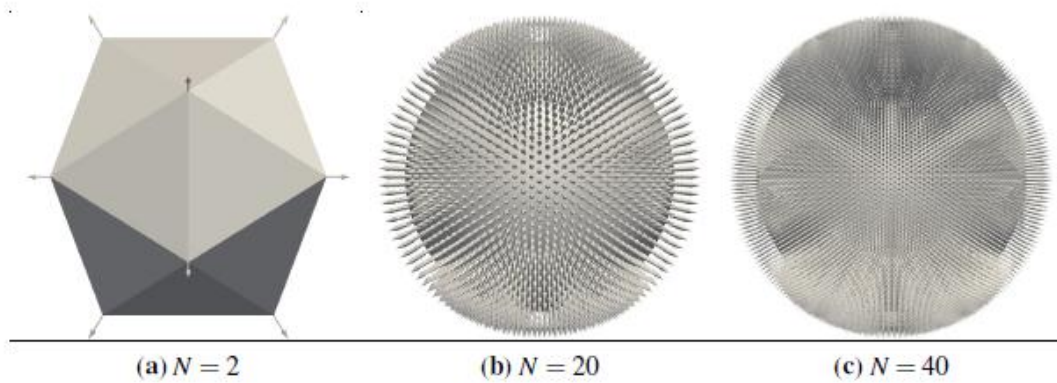


Att. 13. Temperatūras vertikālais atvasinājums, skats no augšas ar sašaurinātu skalu.

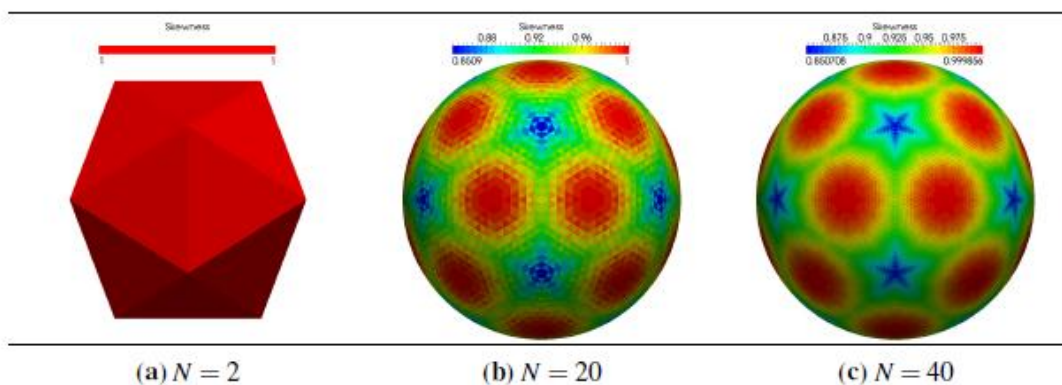
Kā otrs testa piemērs tiek aplūkots potenciāla aprēķins uz lodes virsmas, pie kam tiek uzdots, ka potenciālam uz lodes virsmas ir jābūt konstantam. Lode tuvināti tiek konstruēta no regulāra daudzskaldņa, palielinot tā skaldņu skaitu, skat. att. 14 -20.



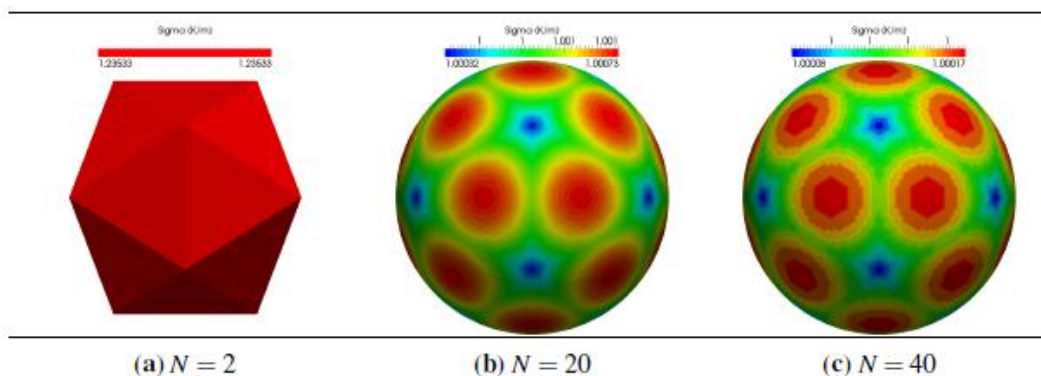
Att. 14. Tuvināta lodes ģeometrija.



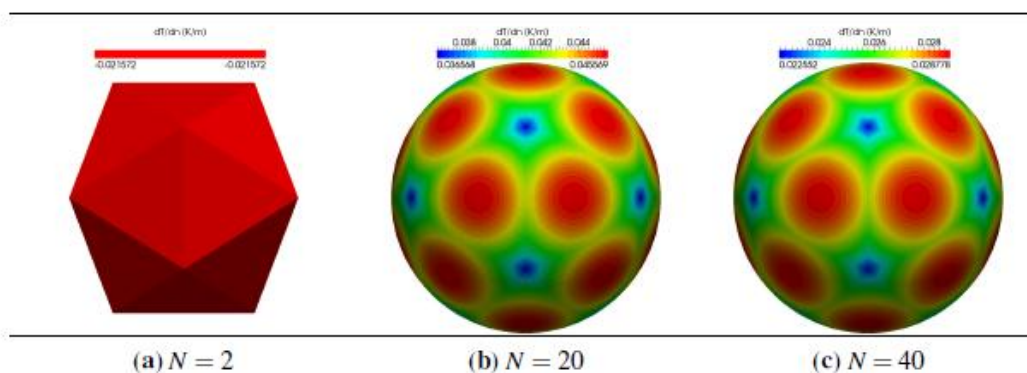
Att. 15. Normāles mezglpunktos.



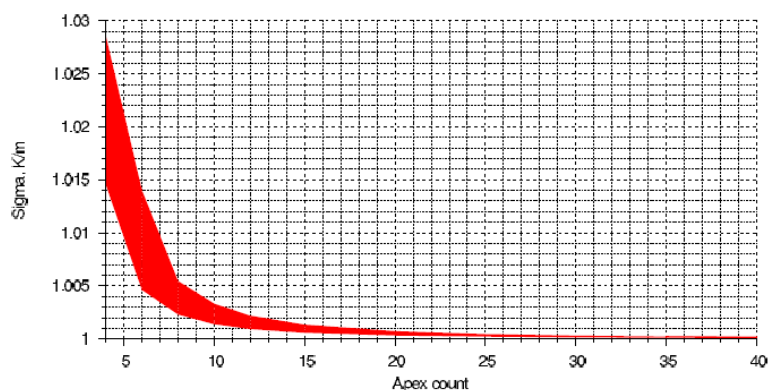
Att. 16. Trīsstūru izstiepums, t.i., attiecība starp garāko un īsāko malu.



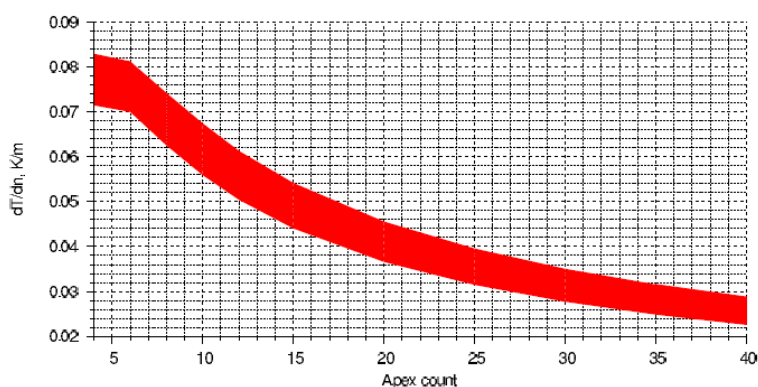
Att. 17. Aprēķinātie avoti.



Att. 18. Aprēķinātais temperatūras normālais atvasinājums uz virsmas.



Att. 19. Aprēķināto avotu atkarība no režģa smalkuma



Att. 20. Režģa smalkuma ietekme uz temperatūras normālo atvasinājumu.

Ar minēto tematiku ir saistītas sekojošas projekta ietvaros tapušas publikācijas:

1. K. Lacis, A. Muiznieks, A. Rudevics, A. Sabanskis. Influence of DC and AC magnetic fields on melt motion in FZ large Si crystal growth. *Magnetohydrodynamics*, Vol. 46(2), 199-218 (2010).
2. A. Muiznieks, K. Lacis, A. Rudevics, U. Lācis, A. Sabanskis, M. Plāte. Development of numerical calculation of electromagnetic fields in FZ silicon crystal growth process. *Magnetohydrodynamics*, Vol. 46(4), 475-486 (2010).
3. A. Krauze, A. Muiznieks, K. Bergfelds, K. Janisels, G. Chikvaidze. Reduction of silicon crust on the crucible walls in silicon melt purifying processes with electron beam technology by low-frequency travelling magnetic fields. *Magnetohydrodynamics*, Vol. 47(4), 369-383 (2011).

Ir pieņemtas sekojošas referātu tēzes, kas ir saistītas ar minēto tematiku:

1. Kārlis Janisels, Andris Muiznieks, Armands Krauze, Andrejs Sabanskis, Kaspars Lācis. Further development of 3D modeling of FZ silicon single crystal growth system. DGKK Tagung 2012, 6.-9. of March, Freiberg, Germany.
2. Andrejs Sabanskis, Andris Muiznieks, Armands Krauze. Modeling of argon flow heat transfer influence in FZ silicon single crystal growth. DGKK Tagung 2012, 6.-9. of March, Freiberg, Germany.
3. Kristaps Bergfelds, Andris Muiznieks, Armands Krauze. Modeling of silicon melt purifying process with electron beam technology. DGKK Tagung 2012, 6.-9. of March, Freiberg, Germany.



## **Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.2.3: Magnetoreoloģisko suspensiju īpašību matemātiskā modelēšana izmantojot kombinētu īpašību aprakstu mikro- un makromērogā**

**Vadītājs – docents Sandris Lācis**

Sadarbība ar matemātiķiem bija nepieciešama sekojošos virzienos:

- 1) magnētiskās mijiedarbības aprēķinu testa piemēros (izmantojot sfēriskās harmonikas),
- 2) magnētiskās mijiedarbības galīgo elementu aprēķinu precizitātes novērtēšana, režģa optimizācija un simetrijas nosacījumu ievērošana,
- 3) skaitliskās integrēšanas formulu uzlabošana aksiāli simetriskam uzdevumam,
- 4) stieņveida magnetizētu daļiņu magnētiskās mijiedarbības vienkāršots aprēķins,
- 5) daļiņu cietās virsmas ievērošana suspensiju modelēšanā – jāizstrādā efektīvi algoritmi, kas novērš cietu daļiņu „pārklāšanos” nefizikālu pārvietojumu rezultātā.

### **Magnētiskās mijiedarbības aprēķinu testa piemēri.**

Magnētiskās mijiedarbības testa piemēri nepieciešami lai varētu veikt galīgo elementu metodes (GEM) (vai citas metodikas) modelēšanas programmatūras testēšanu. Uzdevums ir pie konstantas magnētiskās caurlaidības ir lineārs, to var risināt, aplūkojot vairākas sfēru patvaļīgu izvietojumu ārējā magnētiskā un atrisinājumu iegūt, balstoties uz potenciālu teoriju un Laplasa vienādojuma atrisinājuma izvirzījumu sfēriskajās harmonikās. Problēmsituāciju rada neskaidrais metodikas apraksts pieejamā literatūrā (M. van Gelderen, The shift operators and translations of spherical harmonics, DEOS Progress Letter 1. 1998, pp57–67; C Seberino, H N Bertram, Concise, efficient three-dimensional fast multipole method for micromagnetics, IEEE Transactions on Magnetics, 37, 2001, pp1078-1086; M. Washizu, T. B. Jones, Dielectrophoretic interaction of two spherical particles calculated by equivalent multipole-moment method, IEEE Trans. IA, 32, 1996, pp233-242), dažādo notāciju lietošana speciālajām funkcijām, kā arī principiāli kļūdaini pieraksts.

Kopā ar **asoc.prof. Mihailu Belovu** ir veikta formulu pārbaude, koriģētas kļūdainās vietas un iegūta lietošanai gatava metodika, kas ļauj noteikt ložu magnetizāciju, potenciālus un magnētisko lauku. Tā rezultātā iespējams noteikt arī mijiedarbības spēkus ar augstu (praktiski neierobežotu) precizitāti. Šos rezultātus tālāk var izmantot pašrakstītas galīgo elementu programmatūras testēšanai un precizitātes noteikšanai spēku aprēķinos, kā arī pētīt režģa smalcināšanas ietekmi uz gala rezultātu. Uz izstrādāto algoritmu un iegūto rezultātu bāzes paredzēts sagatavot publikāciju.

### **Magnētiskās mijiedarbības galīgo elementu aprēķinu precizitātes novērtēšana, režģa optimizācija un simetrijas nosacījumu ievērošana**

Magnētiskās mijiedarbības testa piemēri ļauj novērtēt GEM programmatūras precizitāti pie konstantas magnētiskās caurlaidības un paplašināt novērtējumu pie nelineāras magnetizācijas. Iespēju šādai novērtējuma paplašināšanai rada „aso” magnētiskās caurlaidības lēciena uz materiāla robežām „mīkstināšanās”, materiāla magnetizācijai piesātinoties magnētiskā lauka koncentrācijas vietās. Tā rezultātā sagaidāms, ka, ieviešot piesātināšanos, precizitāte uzlabojas un precizitātes novērtējums pie konstantas magnētiskās caurlaidības var tikt vispārināts arī magnetizācijas piesātināšanās gadījumam.

Ieviestā metodika balstās uz „Magnētiskās mijiedarbības aprēķinu testa piemēri.” Atziņām.

## **Skaitliskās integrēšanas formulu uzlabošana aksiāli simetriskam uzdevumam,**

Skaitliskās integrēšanas formulas aksiāli simetriskam uzdevumam sarežģī reizinātāja  $1/r$  klātbūtne. Tradicionālajai polinomiālajai aproksimācijai atsevišķos gadījumos ir zema precizitāte. Ir nepieciešamība pēc precīzākām formulām, šāds gadījums literatūrā nav atrasts aprakstīts, problemātika tika apspriesta ar matemātiķiem seminārā ar plašāku problemātiku, tomēr šai jomā neviens FMF Matemātikas nodaļā nestrādā, tāpēc jautājums paliek atklāts. Aksiāli simetriskajam gadījumam bez reizinātāja  $1/r$  ir aplūkots kvadrātiskas aproksimācijas galīgo elementu gadījums (sadarbībā ar asoc.prof. M.Belovu), kas ļāva uzlabot precizitāti. Tomēr paliek neatrisināts gadījums ar  $P(x)/r$  tipa zemintegrāļa funkciju.

## **Stieņveida magnetizētu daļiņu magnētiskās mijiedarbības vienkāršots aprēķins.**

Stieņveida daļiņu magnētiskās mijiedarbības aprēķins ir būtisks elements modelējot stieņveida daļiņu magnetoreoloģiskās suspensijas. Vispārīgā gadījumā iespējama precīza analītiskā integrēšana, bet iegūtais rezultāts pēc sava apjoma ir milzīgi garas formulas bez praktiskā pielietojuma. Līdzšinējie tuvinājumi strādā pārāk šauros parametru diapazonos. Sadarbībā ar asoc.prof. M.Belovu ir atrastas praksē pielietojamas precīzās formulas atsevišķiem speciālgadījumiem, kad vismaz viena stieņa magnetizācija ir paralēla stienim. Uz šo formulu bāzes paredzēts atrast tuvinājumu vispārīgā gadījumā, darbs pie šīs problemātikas turpinās.

## **Daļiņu cietās virsmas ievērošana suspensiju modelēšanā – jāizstrādā efektīvi algoritmi, kas novērš cietu daļiņu „pārklāšanos” nefizikālu pārvietojumu rezultātā.**

Profesoru H.Kaļa un A.Reinfelds vadītā seminārā tika apspriestas sadarbības iespējas ar matemātiķiem, piedaloties arī Uldim Strautiņam, kuram ir liela kompetence šķiedru suspensiju modelēšanā (publikācijas A.Latz, U.Strautins, D.Niedziela, Comparative numerical study of two concentrated fiber suspension models, JOURNAL OF NON-NEWTONIAN FLUID MECHANICS, 165, 2010, pp764-781; U.Strautins, A.Latz, Flow-driven orientation dynamics of semiflexible fiber systems, RHEOLOGICA ACTA, 46, 2007, pp1057-1064).

Cieto daļiņu virsmas ģeometrijas ievērošanai (savstarpējās pārklāšanās novēršanai) tika piedāvāts aglomerātu modelis, kas aplūko savstarpēji pieguļošās daļiņas, kurām dotajā momentā spēki neļauj atrauties. Šāds aglomerāts pārvietojas kā vienots veselums un tieši tāds tas arī jāmodelē līdz brīdim, kad no tā atraujas kāda daļiņa.

Norit darbs pie šī modeļa ieviešanas.

## Pētījuma apakšaktivitāte Nr. 4.3: Mīkstu materiālu matemātiskie modeļi un to verifikācija.

Vadītājs - profesors Andrejs Cēbers

Produktīva sadarbība ir notikusi vairākos virzienos. Zemāk tiek atzīmēti svarīgākie.

### 1. Sinhronizācija dipolu sistēmās

Gadījumā, ja vairāki dipoli atrodas pietiekami tuvu, to svārstības mainīgā magnētiskā laukā sinhronizējas. Kvalitatīvu ieskatu par doto parādību sniedz viduvējoto vienādojumu analīze, kura, sadarbībā ar Prof.M.Belovu, veikta izmantojot daudzizmēroga laiku metodi. Rezultātā atrasta virkne jaunu bifurkāciju: pāreja no 2D dipolu kustības uz 3D kustību, dipolu sinhrona rotācija. Var atzīmēt „pudeles kakliņa” efektu, kurš novērojams pie frekvencēm, kuras tuvas kritiskai frekvencei, kad oscilāciju režīmā novērojami dipolu fāzes lēcieni par 180 grādiem. Šī parādība raksturīga tā saucamajām bezgalīga perioda bifurkācijām un attēlota Fig.1. Negaidītas parādības atrastas apskatot vairāku dipolu ķēdes. Atrasts, ka šajā gadījumā regulāri mijas sinhronas kustības režīms, kad dipolu sistēmas sakārtotības parametrs ir tuvs vienam, ar desinhronizācijas posmiem, kuri ir daudz īsāki un periodiski atkārtojas. Šo parādību ilustrē Fig.2, kur parādīta dipolu sistēmas sakārtotības parametra atkarība no laika.

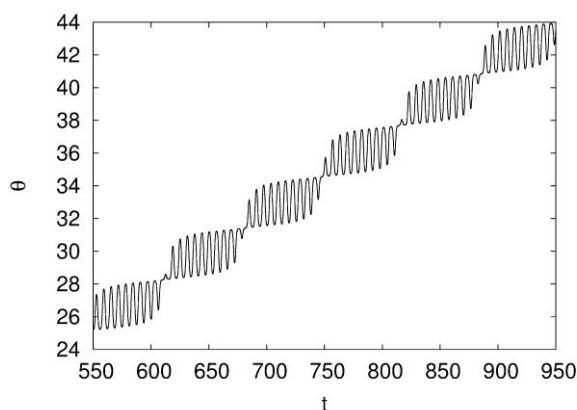


Fig.1

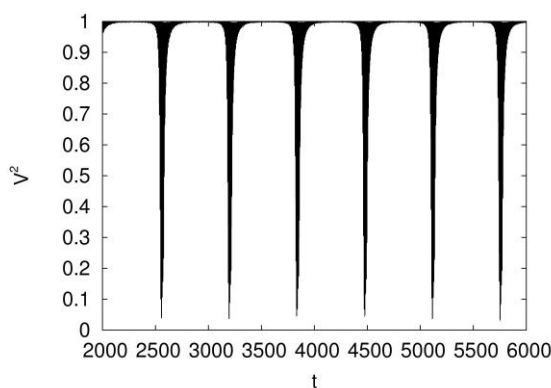


Fig.2

Dotie rezultāti publicēti rakstā

1. M.Belovs,A.Cēbers. Synchronization of magnetic dipole rotation in an ac magnetic field. J.Phys.A:Math.Theor., - 2011, v.44, 295101

un ziņoti konferencēs

1. M.Belovs,A.Cēbers. Synchronization phenomena in dipolar systems. Euromech Colloquium 526:Patterns in soft matter,P.13-14, 2011
2. A.Cebers,M.Belovs. Synchronization phenomena in systems with magnetodipolar interactions. APS March Meeting, Dallas,2011. Abstract X9.4
3. A.Cēbers, M.Belovs. Dipolar colloids in ac magnetic field. Moscow International Symposium on Magnetism. P.866-867,2011.
4. A.Cebers, M.Belovs. Synchronization phenomena in dipolar systems. 8<sup>th</sup> international pamir Conference on Fundamental and applied MHD., Borgo, France e, P.939-943, 2011.

## 2. Parametriskās svārstības nepārtrauktās vidēs

Šobrīd noskaidrots, ka ja elastīgam stienim pielikti periodiski vērpes momenti, tad stienis var veikt pašdzenošu kustību, jo vērpes deformācijas izsauc stieņa liekuma deformācijas. Rezultātā, ja izpildās noteikti sinhronizācijas nosacījumi, laikā mainīgi vērpes momenti var parametriski ierosināt stieņa lieces svārstības. Sadarbībā ar Prof.Belovu izanalizēti iespējamie parametriskās rezonanses nosacījumi. Prof.Belovs izveidojis skaitlisku algoritmu, kurš ļauj aprēķināt tā saucamos Flokē reizinātājus, kuri parāda parametriskās nestabilitātes apgabalus. Jāatzīmē, ka atrastais parametriskās nestabilitātes mehānisms ir visai neparasts un autoriem nav zināmi citi līdzīgu parādību piemēri. Dotajā gadījumā mainīgie vērpes momenti modulē mijiedarbību starp oscilatoriem, kuriem atbilst stieņa liekuma svārstības divos perpendikulāros virzienos. Teorētiski aprēķinātie Arnolda apgabali kopā ar parametru vērtībām, pie kurām Flokē reizinātājs ir viens parādīti Fig.3.

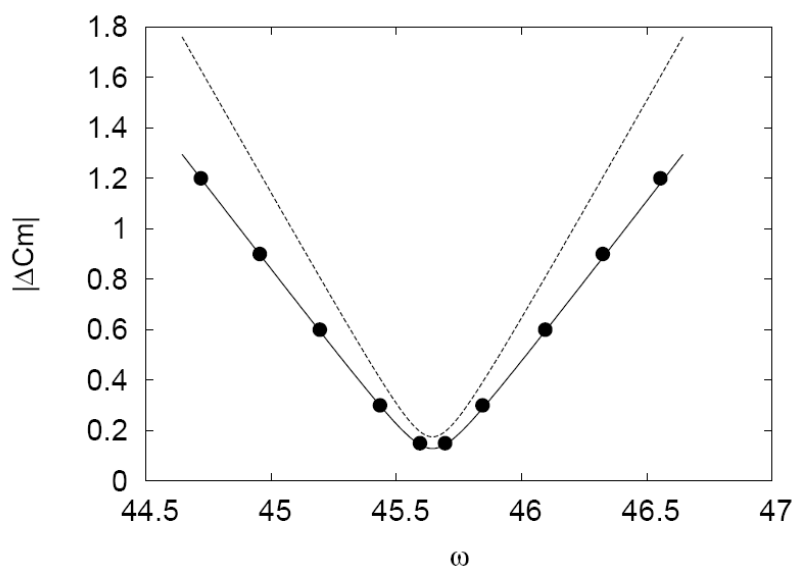


Fig.3

Apgabalā, kuru ierobežo vienlaicīgi nepārtrauktās un pārtrauktās līnijas, iespējama modu ar dažādu paritāti ierosināšana. Rezultātā stienis ir hirāls (nav spoguļsimetrisks). Tādi objekti,

kā zināms no hidrodinamikas, var būt pašdzenoši mehānismi. Literatūrā var atrast apgalvojumus, ka hirālu objektu pārvietošanās ātrumi ir proporcionāli pieliktam griezes momentam. Tā kā šāda atkarība ir novērota arī eksperimentā, tad ir pamats apgalvot, ka atrastais parametriskās nestabilitātes var kalpot par pamatu ar vērpes palīdzību darbināma mikromehānisma modelim. Par dotiem jautājumiem iesniegta publikācija

1. M.Belovs, A.Cēbers. Parametric excitation of bending deformations of rod by periodic twist (iesniegts Phys.Rev.E).

### 3. Stieņa dinamika dissipatīvu spēka momenta darbības gadījumā

Balstoties uz agrāk izveidotiem magnētisku stieņu modeļiem tika aprakstīta stieņa deformācija, kuru izsauc galīga magnētiskās relaksācijas laika izsauktie spēka momenti rotējošā magnētiskā laukā. Sadarbībā ar Prof.Kali uz Matlab bāzes tika izveidots skaitliskas algoritms stieņa deformāciju dinamikas aprēķinam. Iegūtās konfigurācijas atkarībā no laika parādītas Fig.4

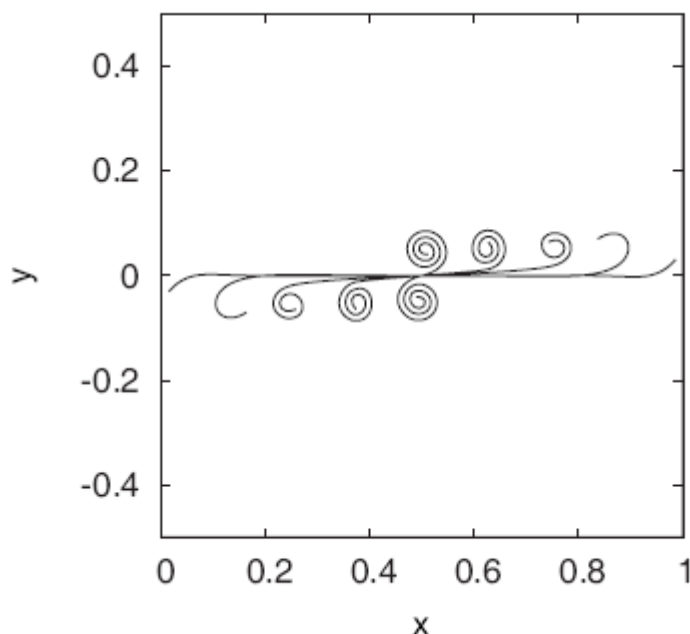


Fig.4

Novērojama raksturīga spirāles forma, kura pārvietojas virzienā uz stīgas centru. Piezīmēsim, ka, lai novērstu stieņa elementu krustošanos, tika ņemti vērā atgrūšanās spēki starp tuviem stieņa elementiem. Interesanti ir atzīmēt, ka konfigurācijas līdzīgas Fig.4 parādītajām ir novērotas arī eksperimentāli superparamagnētisku daļiņu ķēdītēm rotējošā magnētiskā laukā. Lai arī jautājums par šādas uzvedības cēloņiem šobrīd paliek atklāts, tomēr zināma līdzība skaitliski atrastai dinamikai ar eksperimentu ir. Ja atgrūšanās spēki no apraksta tiek izslēgti, tad mazos laika intervālos novērojama neparasta parādība – uz stīgas veidojas solitonlīdzīgas cilpas, kuras kustoties uz stieņa centru tur anihilē, kā parādīts Fig.5.

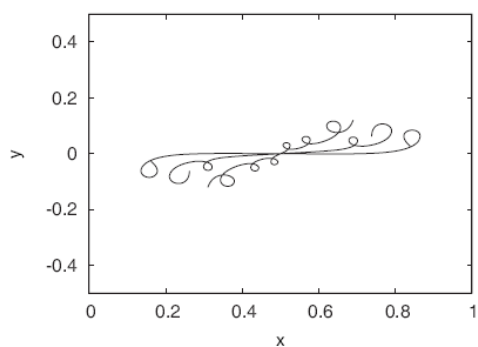


Fig.5

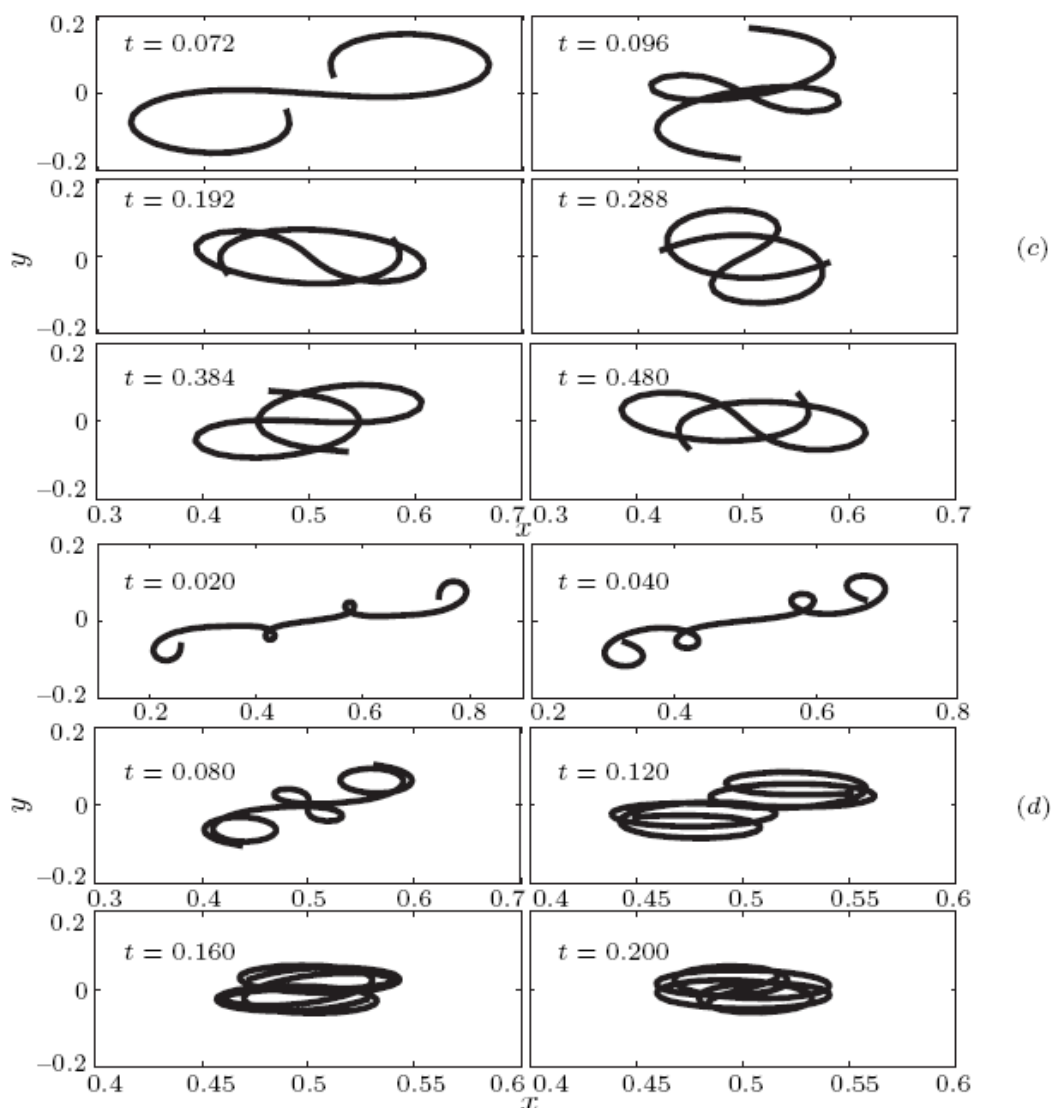


Fig.6

Aplūkojot tuvāk stieņa kustības vienādojumus tika atrasts, ka dotajā gadījumā tie pieļauj neatkarīgu no koordinātēm formulējumu, kad stieņa dinamika tiek aprakstīta izmantojot līnijas iekšējos parametrus - liekumu un sastiepumu. Šajā gadījumā iegūtie rezultāti aplūkoti nākamajā sadaļā. Rezultāti par magnētiska stieņa dinamiku rotējošā magnētiskā laukā publicēti rakstā

1. A.Cēbers, H.Kalis. Dynamics of superparamagnetic filaments with finite magnetic relaxation time. European Physical Journal E- 2011,v.34:30.

#### 4. Lokanu stieņu dinamika līnijas iekšējo parametru formulējumā

Kā tika norādīts iepriekšējā sadaļā stīgas dinamiskie vienādojumi, uz to darbojoties dissipatīva rakstura spēka momentiem, var tikt formulēti kā vienādojumi stīgas iekšējiem parametriem. Sadarbībā ar Prof.Kali izveidoti skaitliski algoritmi Matlab vidē do to nelineāro parciāldiferenciālvienādojumu skaitliskai risināšanai. Tos izmantojot, piemēram, tika atrasts, ka Fig.5 parādītā dinamika pietiekami lielos laika intervālos noved pie sarežģītas samudžinātas konfigurācijas izveidošanās, kura rotē pieliktā lauka virzienā, kā tas attēlots Fig.6. Tika salīdzināti rezultāti, kurus iegūst koordinātu formulējumā un iekšējā formulējumā un parādīta to sakritība. Izveidotais algoritms ļāva apskatīt arī stīgas dinamiku aktīvās vidēs, kad uz to darbojas spēki stīgas pieskares vektora virzienā. Atrisinot šos vienādojumus stīgai ar vienu nostiprinātu galu tika atrastas agrāk nezināmas konstantes scaling tipa sakarībām stīgas liekuma rādiusam un tās rotācijas leņķiskam ātrumam. Leņķiskā ātruma atkarība no iedarbības parametra parādīta Fig.7 un to saskaņā ar eksperimentu apraksta pakāpes funkcija pietiekoši lieliem iedarbības parametriem.

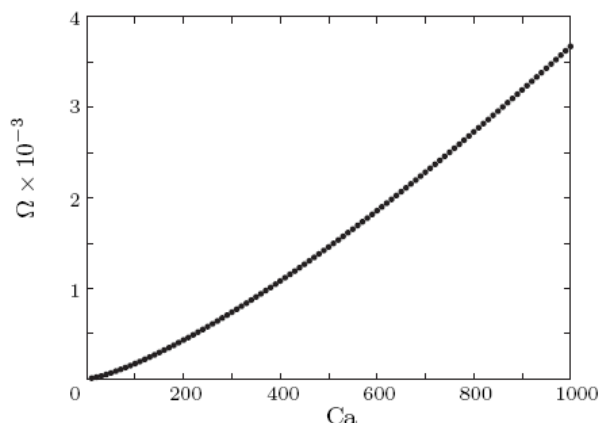


Fig.7

Par dotiem jautājumiem iesniegts raksts

- 1 A.Cēbers,H.Kalis. Intrinsic curve dynamics of magnetic filaments (iesniegts Magnetohydrodynamics)

un ziņots konferencē

1. A.Cēbers, and H.Kalis. Intrinsic curve dynamics of magnetic filaments. 16<sup>th</sup> International Conference on Mathematical Modelling and Analysis, Sigulda,Latvia, P.25, 2011.

#### 5. Šķidrums stīgas kustības vienādojumu regularizācija

Agrāk darbā (A.Cebers. Dynamics of an elongated magnetic droplet in a rotating field. Phys. Rev. E – 2002, v.66 – P.061402-1-6.) tika parādīts, ka kustības vienādojumus šķidrai stīgai var regularizēt apskatot viskozo spriegumu momentus. Prof.Kalis izveidojis skaitlisku algoritmu, kurā regularizācija veikta jaunā veidā – risinot galīga skaita parasto diferenciālvienādojumu sistēmu Matlab vidē.