

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМООБЕСЦВЕЧИВАНИЕ ДЫРОЧНЫХ АГ-ЦЕНТРОВ ОКРАСКИ В КРИСТАЛЛАХ NaCl С РАЗЛИЧНЫМИ КОНЦЕНТРАЦИЯМИ АГ.

¹Осконбаев М. Ч.
²Арстанбек кызы А.
³Ураимова К.
⁴Осмоналиев А. Б.
²Абдимуталипова З. К.

Ошский государственный университет, Кыргызстан, г.Ош
¹ ОшМУ, физика-техника факультетинин деканы, ф.-м.и.к.,
ЭТФ кафедрасынын доценти, ² ОшМУ, физика-техника факультетинин
магистри, ЭТФ кафедрасынын лаборатория башчысы,
³ ОшМУ, физика-техника факультетинин физика адистигинин магистри,
⁴ ОшМУ, математика жана информациялык технологиялар
факультетиндеги ИТАС кафедрасынын доценти, ф.-м.и.к.
⁵ ОшМУ, физика-техника факультетинин магистри.

***Abstract.** The mathematical model and the program is made to study the behavior and thermoobestsvechivanie hole color centers in ionic crystals.*

***Keywords:** crystal, mathematical model, color center, hole, ion, polynomial.*

При решении задачи на ЭВМ основная роль все – таки принадлежит человеку. Машина лишь выполняет его задание по разработанной программе. Роль человека и машины легко уяснить, если процесс решения задачи разбить на перечисленные здесь этапы.

1. Постановка задачи. Этот этап в нашем случае заключается в физической постановке задачи и определении конечных целей решения

2. Построение математической модели. Модель должна правильно (адекватно) описывать основные законы физического процесса. Построение или выбор математической модели из существующих требует глубокого понимания проблемы и знания соответствующих разделов математики.

3. Разработка численного метода. Поскольку ЭВМ может выполнять лишь простейшие операции, они «не понимает» постановки задачи, даже в математической формулировке. Для ее решение должен быть найден численный метод, позволяющий свести задачу к некоторому вычислительному алгоритму.

4. Разработка алгоритма и построение блок – схемы. Процесс решения задачи записывается в виде последовательности элементарных арифметических и логических операций, приводящей к конечному результату и называемой алгоритмом решение задачи. Алгоритм можно изобразить в виде блок-схемы.

5. Программирование. Алгоритм решение задачи записывается на понятном машинном языке в виде точно определенной последовательности операций – программы для ЭВМ. Составление программы (программирование) обычно производится с помощью некоторого промежуточного (алгоритмического) языка, а ее трансляция осуществляется самой вычислительной машиной.

Мы в своих исследованиях имеем четкую адекватную постановку физической задачи. Для решения этой задачи построена математическая модель, в которой использован интерполяционный полином Ньютона. На основании построенной модели составлена программа для решения задачи на ЭВМ.

Экспериментальное и теоретическое исследования процессов распада и преобразование различных по структуре радиационных центров показали, что в процессе распада и

взаимопревращения радиационных дефектов в области высоких температур основную роль играют ионные процессы, протекающие в ЩГК [1-2].

В работе [3] была рассмотрена математическое моделирование термолюминесценции в кристаллах NaCl с различной концентрацией серебра. В работе [4] была рассмотрена математическое моделирование термообесцвечивания электронных F - центров окраски в кристаллах NaCl с различной концентрацией серебра.

В данной работе было попытка определить с помощью первой интерполяционной формулы Ньютона начальное и конечное значения функции и поведение термообесцвечивания дырочных Ag-центров окраски в кристаллах NaCl с различными концентрациями Ag.

Если принять полученные экспериментальные данные за узловые точки, то можно провести анализ поведения распада и взаимодействия дырочных Ag - центров окраски в близлежащих к узловым точкам, используя современные методы интерполяции.

Считая J функцией от температуры и принимая значения температуры за узлы интерполирования, интерполируем заданную табличную функцию J. Так как в нашем случае узлы равноотстоящие, будем пользоваться интерполированным полиномом Ньютона в следующем виде:

$$P_n(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \dots + \frac{q(q-1)\dots(q-n+1)}{n!} \Delta^n y_0 \quad (1)$$

где $q = \frac{x - x_0}{h}$, $x_i = x_0 + ih (i = 0, 1, 2, \dots, h)$

$$\Delta^n y_i = \Delta^{n-1} y_{i+1}$$

На рисунке 1 показаны экспериментальные результаты термообесцвечивания дырочных Ag- центров окраски в кристаллах NaCl с различными концентрациями серебра.

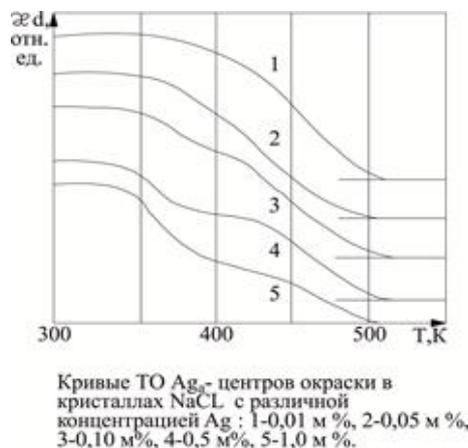


Рис. 1

В зависимости от концентрации серебра термический отжиг дырочных центров окраски происходит в трех интервалах температур.

На рисунке 2 показаны результаты, полученные на основании математической модели для кривых термообесцвечивания дырочных Ag- центров окраски в кристаллах NaCl – Ag(0,01 м%).

На рисунке 3 показаны результаты, полученные на основании математической модели для кривых термообесцвечивания дырочных Ag - центров окраски в кристаллах NaCl – Ag(0,05 м%).

На рисунке 4 показаны результаты, полученные на основании математической модели для кривых термообесцвечивания дырочных Ag - центров окраски в кристаллах NaCl – Ag(0,10 м%).

На рисунке 5 показаны результаты, полученные на основании математической модели для кривых термообесцвечивания дырочных Ag - центров окраски в кристаллах NaCl – Ag(0,5 м%).

На рисунке 6 показаны результаты, полученные на основании математической модели для кривых термообесцвечивания дырочных Ag - центров окраски в кристаллах NaCl – Ag(1,0 м%).

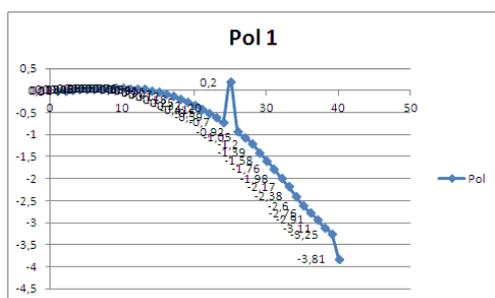


Рис.2

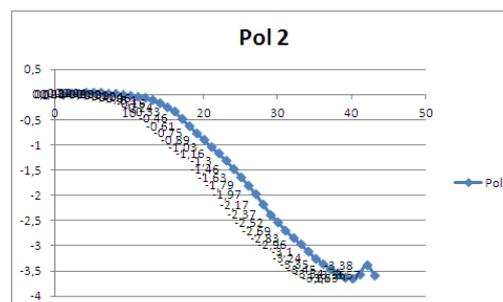


Рис. 3

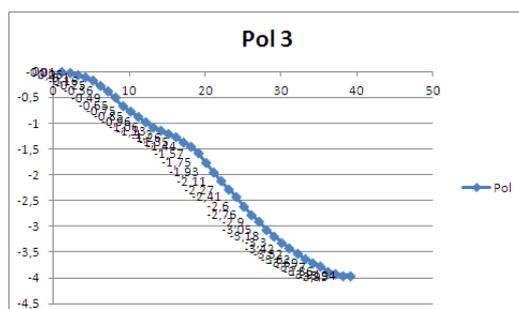


Рис.4

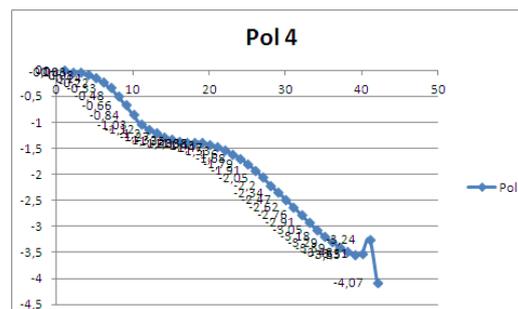


Рис. 5

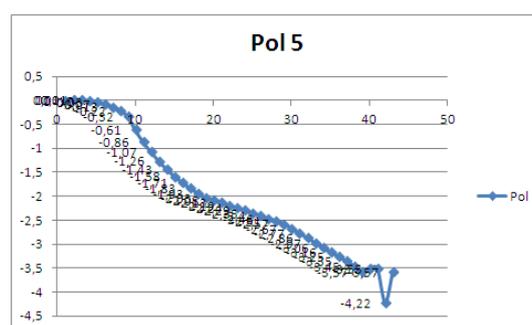


Рис. 6

Сопоставление экспериментальных данных термообесцвечивания дырочных центров окраски с результатами, полученными на ЭВМ показывают, что построенная математическая модель достоверно описывает исследуемый физический процесс.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.Ч.Осконбаев «Роль вакансионных дефектов в распаде и преобразовании радиационных центров в кристаллах NaCl и KCl». Диссертация на соискании ученой степени кандидаты физика математических наук, - Ош: 1996.
2. Б. Арапов Ионные, ионно-дырочные и ионно-электронные процессы в ЩГК. Диссерт. Соискание доктора ф.-м.н. - Ош, 1993.
3. М.Ч.Осконбаев, Арстанбек кызы А., К.Ураимова, А.Б.Осмоналиев «Математическое моделирование электронных F-центров окраски в кристаллах NaCl с различными концентрациями Ag». Сборник трудов XI Иссык-Кульская международная конференция по радиационной физике твердого тела. SCORPH -2015. Бишкек, 2015, стр.174-177.
4. М.Ч.Осконбаев, Арстанбек кызы А., К.Ураимова, А.Б.Осмоналиев «Математическое моделирование термообесцвечивание электронных F-центров окраски в кристаллах NaCl с различными концентрациями Ag». Тезисы докладов 5-международной научной конференции посвященной 80-летию профессора О.Шаршекева. –Бишкек,21-сентябрь 2015. Стр.32-33.