

# АВТОМАТИЗАЦИЯ РАСЧЁТА КВАЗИСТАЦИОНАРНОЙ СКОРОСТИ ТЕПЛОВОГО РАСПАДА МЕТАСТАБИЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ

М. В. Чушнякова<sup>1</sup>, И. И. Гончар<sup>2</sup>, Н. А. Семенюк<sup>1</sup>

<sup>1</sup> — Омский государственный технический университет;

<sup>2</sup> — Омский государственный университет путей сообщения

Поступила в редакцию 05.08.2019 г.

**Аннотация.** Тепловой распад метастабильного состояния представляет собой широкий класс физических и химических процессов. Его примерами являются деление возбуждённых атомных ядер, реакции диссоциации двухатомных молекул и др. Главной характеристикой этих процессов является их скорость (например, скорость диссоциации — доля молекул от их начального числа, распадающихся в единицу времени), точнее её квазистационарное значение. Квазистационарная скорость теплового распада метастабильного состояния часто вычисляется с помощью приближённых аналитических формул (формулы Крамерса). Результаты таких вычислений, однако, содержат в себе неизбежные погрешности, связанные с приближениями, сделанными при выводе данных формул. Для более точного расчёта квазистационарной скорости теплового распада метастабильного состояния обычно используется численное решение дифференциальных стохастических уравнений Ланжевена. По результатам этого решения строится скорость распада как функция времени, которая, спустя некоторое время релаксации, достигает постоянного с точностью до флуктуаций (квазистационарного) значения. Для нахождения квазистационарной скорости приходится каждый раз решать, какой интервал времени взять для усреднения. Это решение обычно принимается на основе эмпирических соображений. В данной статье представлен разработанный авторами алгоритм для автоматизации нахождения квазистационарной скорости. Этот алгоритм позволяет найти оптимальный интервал усреднения и минимизировать погрешность квазистационарной скорости.

**Ключевые слова:** метастабильное состояние, квазистационарная скорость распада, время релаксации, уравнения Ланжевена.

## AUTOMATIC CALCULATION OF THE QUASISTATIONARY RATE OF THE METASTABLE STATE THERMAL DECAY

M. V. Chushnyakova, I. I. Gontchar, N. A. Semenyuk

**Abstract.** The thermal decay of a metastable state represents a wide range of physical and chemical processes. The examples of such process are the excited atomic nuclei fission, reaction of a diatomic molecular dissociation etc. The main characteristic of these processes is their rate (for example, the rate of dissociation: the portion of the molecules decaying per time unit with respect to the initial number of the molecules), namely its quasistationary value. The quasistationary rate of a metastable state thermal decay often might be calculated by means of the approximate analytical formulas (Kramers formulas). However, the results of such calculations possess inevitable errors caused by the approximations made during the derivation of the formulas. In order to calculate the quasistationary rate of a metastable state thermal decay more accurately, the numerical solution of the differential stochastic Langevin equations is usually applied. Using this solution one can construct the time-dependent decay rate which after some relaxation time achieves the constant within the fluctuations (quasistationary) value. In order to determine this quasistationary rate, every time it is necessary to decide which

time interval should be taken for averaging. Such decision is usually made basing on empirical reasons. Within the present work, the developed by authors algorithm for automatic calculation the quasistationary decay rate is demonstrated. This algorithm allows to find the optimal time interval for averaging procedure and to minimize the error of the quasistationary rate.

**Keywords:** metastable state, quasistationary decay rate, relaxation time, Langevin equations.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задача о нахождении квазистационарной скорости теплового распада метастабильного состояния при наличии трения была решена Крамерсом почти восемьдесят лет назад [1]. Эта задача встречается в различных отраслях естественных наук: в биофизике [2–4], химической кинетике [5, 6], физике деления атомных ядер [7–9], нанотехнологиях [10, 11]. Однако аналитические решения, полученные Крамерсом, являются приближёнными. Их соответствие точным значениям удалось проверить только с появлением мощных компьютеров [7, 9, 12]. Решая численно на этих компьютерах стохастические дифференциальные уравнения, описывающие убегание броуновской частицы из локального минимума потенциальной энергии, можно получить скорость распада как функцию времени:

$$R_{at}(t_j) = \frac{1}{N_{tot} - N_{at}(t_j)} \cdot \frac{\Delta N_{at}}{\Delta t}. \quad (1)$$

Здесь  $N_{tot}$  — полное число моделируемых броуновских частиц,  $N_{at}(t_j)$  — число броуновских частиц, которые достигли поглощающей границы (absorbing border) до момента времени  $t_j$ ,  $\Delta N_{at}$  — число частиц, которые пришли к этой границе в течение интервала времени  $\Delta t = t_j - t_{j-1}$ . Примеры зависимости  $R_{at}(t)$  можно найти во многих статьях (см., например, в [8, 9, 12, 13]): спустя некоторое время задержки, скорость стабилизируется, хотя флуктуации, разумеется, присутствуют. Чтобы найти квазистационарную скорость распада  $R_{dqs}$ , производится усреднение по нескольким бином шириной  $\Delta t_{dqs}$  с конца массива  $R_{at}(t_j)$ . Этот алгоритм и его погрешности детально описаны в [14, 15]. Эта часть обработки полученных при компьютерном моделировании данных производилась до сих пор эмпирически: число бинов, выбираемых для усреднения, определялось визуально по виду зависимости  $R_{at}(t)$ , и запуск программы, находящей  $R_{dqs}$ , приходилось осуществлять многократно. При этом никогда не было уверенности в том, что погрешность нахождения  $R_{dqs}$  минимизирована.

В данной работе излагается алгоритм, разработанный авторами для автоматизации нахождения  $R_{dqs}$  и минимизации её относительной погрешности  $\varepsilon$ .

## 2. МОДЕЛЬ

Численное моделирование осуществлялось с помощью уравнений Ланжевена, описывающих движение броуновской частицы, имеющей одну степень свободы. Этой степени свободы соответствуют безразмерная координата  $q$  и сопряжённый ей импульс  $p$ . В дискретном виде согласно методу Эйлера-Маруямы [16] уравнения Ланжевена принимают вид:

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} (1 - \eta m^{-1} \tau) + K \tau + g b^{(n)} \sqrt{\tau}, \quad (2)$$

$$q^{(n+1)} = q^{(n)} + (p^{(n)} + p^{(n+1)}) \tau / 2m. \quad (3)$$

Верхний индекс указывает на два последовательных момента времени, которые разделены шагом моделирования  $\tau$ . Случайные числа  $b^{(n)}$  имеют нормальное распределение с нулевым средним и дисперсией 2. В формуле (2)  $\eta$  и  $m$  — фрикционный и инерционный параметры

соответственно;  $K = -dU/dq$  представляет собой консервативную силу;  $g = \sqrt{\theta\eta}$  — амплитуда случайной силы;  $\theta$  — тепловая энергия, пропорциональная температуре термостата.

Вид зависимости потенциальной энергии от координаты взят из работы [17]:

$$U(q) = U_0(1 - \cos(\xi)) - F\xi + A. \quad (4)$$

Координата  $q$  связана с  $\xi$  соотношением:

$$\xi = (q - 1)\pi. \quad (5)$$

Коэффициенты в уравнении (4) подбирались таким образом, чтобы  $U_0$  совпадало с высотой барьера, дно потенциальной ямы соответствовало координате, близкой к единице, а вершина барьера — к координате, близкой к двум:  $F = 0.358U_0$ ,  $A = 0.0625U_0$ . Координата барьера при этом оказывается равной  $q_b = 1.88$ . Дно ямы, которая обеспечивает метастабильное состояние частиц, расположено в  $q_c = 1.09$ . Частицы начинают своё флуктуационное движение из этой точки с нулевым импульсом.

В результате динамических компьютерных расчётов получается последовательность из  $N_{tot}$  траекторий, моделирование каждой из которых продолжается до момента времени  $t_D$ . Некоторые траектории достигают поглощающей границы  $q_a = 3.0$  за время, меньшее чем  $t_D$ . В данной работе, в основном, представлены результаты расчётов, сделанных в режиме энергетической диффузии, т. е. при экстремально малом трении. В этом режиме результаты расчётов не зависят от положения поглощающей границы при условии, что  $q_a > q_b$  [12].

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 1 в правой колонке как функции времени показаны скорости распада для нескольких значений безразмерного параметра затухания

$$\varphi = \frac{\eta}{\sqrt{mC}}. \quad (6)$$

В этой формуле  $C$  — жёсткость потенциала  $U(q)$  в точках экстремума. Форма потенциала (4) подразумевает одинаковые по модулю жёсткости в точках  $q_b$  и  $q_c$ . Расчёты также характеризуются управляющим параметром  $G$ , который равен отношению высоты потенциального барьера к тепловой энергии:

$$G = \frac{U_0}{\theta}. \quad (7)$$

Значения  $\varphi$  и  $G$  указаны на каждой панели рис. 1.

Динамические скорости  $R_{at}(t)$ , которые вычисляются по формуле (1) на основе уравнений Ланжевена (ломаные линии со значками), всегда подвержены флуктуациям. Квазистационарные скорости  $R_{dqs}$ , извлечённые из динамических скоростей, показаны в левой колонке рис. 1 вместе с погрешностями, с которыми эти значения определены. Обе эти величины —  $R_{dqs}$  и её погрешность — зависят от промежутка времени  $\Delta t_{dqs}$ , по которому проводилось усреднение. Этот промежуток используется в качестве аргумента для графиков в левой колонке. На панелях 1(а) и 1(с) видно, что увеличение интервала усреднения приводит одновременно к уменьшению погрешностей и монотонному убыванию значения  $R_{dqs}$ . Это убывание вызвано тем, что промежуток усреднения слишком велик, он захватывает переходную стадию. В этом случае  $R_{dqs}$  определяется неверно — результат оказывается заниженным. С другой стороны, недостаточный интервал усреднения позволяет оценить скорость распада с необоснованно большими погрешностями. Оставаясь в рамках ручного усреднения трудно решить, на каком значении  $\Delta t_{dqs}$  остановиться. На это можно возразить, что следует просто увеличить длину

временного интервала моделирования. Однако, сделать это не так-то просто: уже приведённые расчёты требуют предельно больших компьютерных ресурсов из-за экстремально малого значения  $\varphi$ .

Случай, соответствующий панелям 1(e), 1(f), намного благоприятнее: видно, что при изменении значения  $\Delta t_{dqs}$  от 600 до 1400 погрешность нахождения  $R_{dqs}$  уменьшается, а сама скорость лишь флуктуирует в пределах погрешностей. Разумеется, этот случай не представляет труда для ручного определения  $R_{dqs}$ , хотя вопрос о том, на каком  $\Delta t_{dqs}$  остановиться, всё же остаётся.

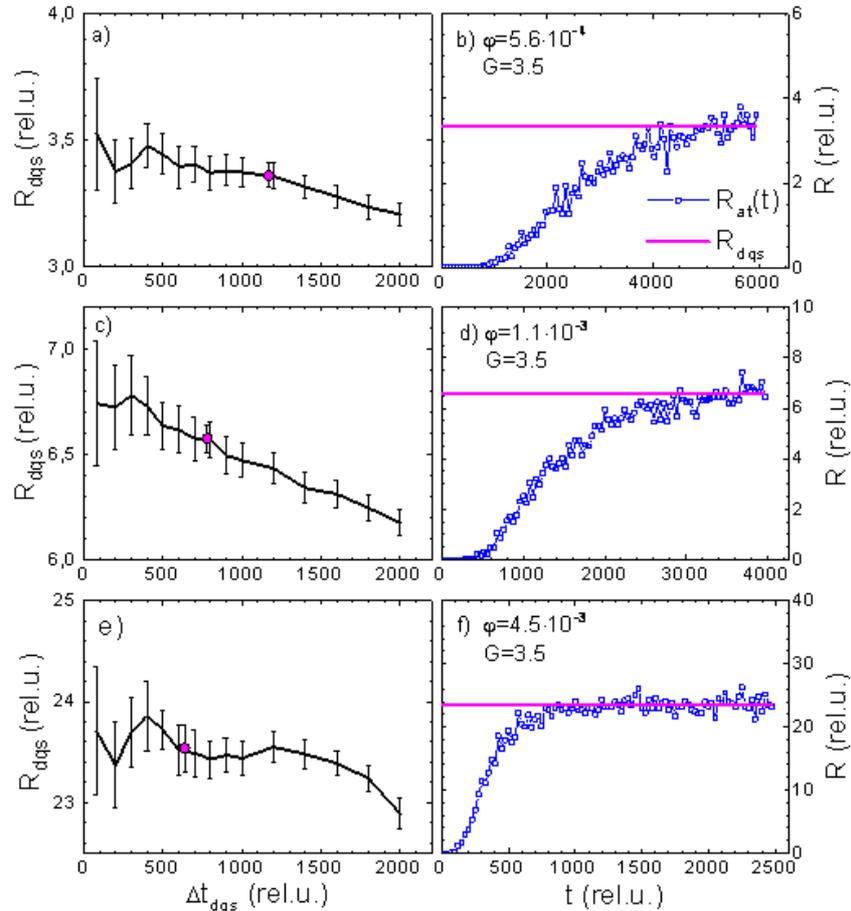


Рис. 1. Левый столбец: квазистационарная скорость в зависимости от величины временного интервала усреднения; кружком показано значение, полученное с помощью автоматизированной процедуры, предлагаемой в данной работе. Правый столбец: временная зависимость динамической скорости распада (осциллирующая линия с символами) и квазистационарная скорость (горизонтальная линия), соответствующая кружку слева. Параметр затухания  $\varphi$  и управляющий параметр  $G$  определены формулами (6) и (7) соответственно. Полное число частиц (траекторий) для каждого из этих расчётов составляет  $10^5$ , а число полезных траекторий (т. е. таких, которые достигли поглощающей границы за время моделирования) для верхнего ряда составило  $11 \cdot 10^3$ , для среднего —  $16 \cdot 10^3$ , а для нижнего —  $39 \cdot 10^3$ .

Алгоритм, предлагаемый нами, состоит в следующем.

- 1) Интервал моделирования  $t_D$  разбивается всегда на одно и то же число бинов (100). Таким образом, ширина бина сильно варьируется в зависимости от  $\varphi$ , т. е. от длительности переходной стадии: на рис. 1(b) ширина бина равна 60, на рис. 1(d) — 40, на рис. 1(f) —

25.

- 2) Производится вычисление скорости распада  $R_{at}(t_j)$  по формуле (1) для каждого бина.
- 3) Устанавливается максимальная допустимая погрешность  $\varepsilon_m = 0.01$ .
- 4) Устанавливается вспомогательный целочисленный счётчик  $k = 0$ .
- 5) Вычисляются  $R_{dqsi}$  и  $\varepsilon_i$  при  $\Delta t_{dqs} = 0.1t_D(1 + 0.1i)$  для  $i_0 = k$ ;  $i_1 = k + 1$ ;  $i_2 = k + 2$ .
- 6) Вычисляются  $R_{dqs} = (R_{dqsi2} + R_{dqsi0})/2$ ,  $\Delta R_{dqs} = (\Delta R_{dqsi2} + \Delta R_{dqsi0})/2$ .
- 7) Если  $|R_{dqsi2} - R_{dqsi0}| < \Delta R_{dqs}$  и  $\Delta R_{dqs} < \varepsilon_m R_{dqs}$ , процесс нахождения  $R_{dqs}$  считается успешно законченным (метка GOOD в конце файла, содержащего  $R_{at}(t_j)$ ).
- 8) Если условия 7 не выполнены, то  $k$  увеличивается на 1, и этапы 5-7 повторяются. Максимально допустимое значение  $k$  равно 80.
- 9) Если  $k = 80$  достигнуто, а условия 7 всё ещё не выполнены, то  $\varepsilon_m$  увеличивается на 0.001 и этапы 4-8 повторяются.
- 10) Если  $\varepsilon_m$  превышает значение 0.02, процесс нахождения  $R_{dqs}$  считается завершённым неудачно (метка BAD в конце файла, содержащего  $R_{at}(t_j)$ ); тогда необходимо либо повторить динамическое моделирование с большим значением  $t_D$ , либо увеличить число траекторий  $N_{tot}$  при том же значении  $t_D$ .

Значения  $R_{dqs}$  для обсуждаемых трёх случаев получены успешно. Эти значения показаны кружками на рис. 1(а), 1(с), 1(е). Относительные погрешности вычисления оказались равны 1.4%, 1.0% и 1.0% соответственно.

Рисунок 2 иллюстрирует более сложный случай, соответствующий экстремально большой скорости деления (режим пространственной диффузии с низким барьером). Промежуток моделирования  $t_D$  велик для данных условий, поэтому флуктуации  $R_{at}(t)$  в конце процесса огромны. Применение нашего алгоритма с  $t_D = 200$  закончилось неудачно и привело к значению  $R_{dqs}$ , показанному длинным горизонтальным отрезком. Из рисунка видно, что имеется временной интервал ( $t < 100$ ), в течение которого, флуктуации имеют приемлемую амплитуду. Установив в файле результатов динамического моделирования значение  $t_D = 100$ , мы снова применили наш алгоритм и успешно получили значение  $R_{dqs}$ , которое показано на рисунке коротким горизонтальным отрезком. Относительная погрешность этого значения  $R_{dqs}$  оказалась равна 0.8%.

С помощью изложенного алгоритма было проанализировано более сорока результатов динамического моделирования процесса распада для  $G = 5.7$  и  $3.5$  в интервале параметра затухания  $0.001 < \varphi < 10$ . В одном случае процесс нахождения квазистационарной скорости распада закончился неудачно; таким образом, выяснилась необходимость дополнительного динамического моделирования. В остальных случаях алгоритм привел к успешному нахождению  $R_{dqs}$ . При тестировании алгоритма не было обнаружено ни одного отказа.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложен разработанный авторами автоматизированный алгоритм для нахождения квазистационарной скорости распада метастабильного состояния, моделируемого стохастическими дифференциальными уравнениями. Этот алгоритм позволяет автоматизировать выбор временного интервала, по которому происходит усреднение, и оптимизировать нахождение погрешности, с которой квазистационарная скорость определена. В случае недостаточной статистики в проведённых динамических расчётах и/или недостаточной

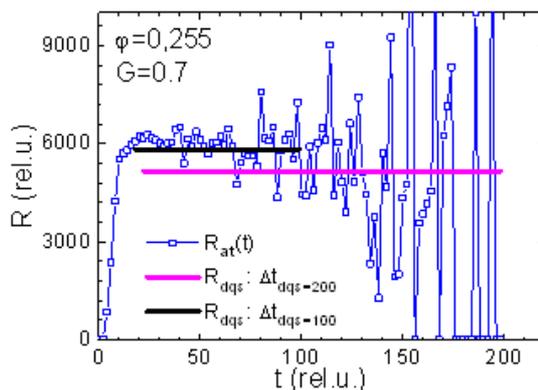


Рис. 2. Временная зависимость скорости  $R_{at}$  (осциллирующая линия с символами) и две квазистационарные скорости (горизонтальные отрезки). Длина каждого отрезка соответствует промежутку времени, использованному для вычисления  $R_{dqs}$ . Полное число траекторий в этом расчёте совпадает с числом полезных траекторий и составляет  $5 \cdot 10^4$ .

длины временного промежутка моделирования алгоритм указывает, что требуемая точность недостижима.

Предложенный алгоритм протестирован на большом количестве динамических расчётов в широком диапазоне основных параметров моделирования, влияющих на длительность переходного процесса — параметра затухания ( $10^{-3} < \varphi < 10$ ) и управляющего параметра ( $0.7 < G < 5.7$ ). Ни в одном случае не было обнаружено ни одного отказа.

Разработанный алгоритм позволяет ускорить обработку результатов динамических расчётов и оптимизировать нахождение погрешности в том смысле, что по имеющимся результатам моделирования находится такое значение квазистационарной скорости распада, которое даёт наименьшую погрешность.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kramers, H. A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions / H. A. Kramers // *Physica*. — 1940. — V. 7. — P. 284–304.
2. Dudko, O. K. Intrinsic rates and activation free energies from single-molecule pulling experiments / O. K. Dudko, G. Hummer, A. Szabo // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — V. 96(10). — P. 108101.
3. Zhou, H. X. Rate theories for biologists / H. X. Zhou // *Q. Rev. Biophys.* — 2010. — V. 43. — P. 219–293.
4. Vrusch, C. Catch bonding in the forced dissociation of a polymer endpoint / C. Vrusch, C. Storm // *Phys. Rev. E*. — 2018. — V. 97. — P. 042405.
5. Talkner, P. *New Trends in Kramers' Reaction Rate Theory* / P. Talkner, P. Hänggi. — Berlin : Springer, 2012. — 251 p.
6. Aquino, T. Chemical Continuous Time Random Walks / T. Aquino, M. Dentz // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — V. 119. — P. 230601.
7. Grangé, P. Induced nuclear fission viewed as a diffusion process: Transients / P. Grangé, L. Jun-Qing, H. A. Weidenmüller // *Phys. Rev. C*. — 1983. — V. 27. — P. 2063–2077.
8. Consistent application of the finite-range liquid-drop model to Langevin fission dynamics of hot rotating nuclei / A. V. Karpov, P. N. Nadtochy, E. G. Ryabov, G. D. Adeev // *J. Phys. G Nucl. Part. Phys.* — 2003. — V. 29. — P. 2365–2380.
9. Disentangling effects of potential shape in the fission rate of heated nuclei / I. I. Gontchar et. al. // *Phys. Rev.* — 2010. — V. 82. — P. 064606.

10. Arutyunov, K. Y. Superconductivity in one dimension / K. Y. Arutyunov, D. S. Golubev, A. D. Zaikin // *Phys. Rep.* — 2008. — V. 464. — P. 1–70.
11. Saad, W. S. Principles of nanoparticle formation by flash nanoprecipitation / W. S. Saad, R. K. Prud'homme // *Nano Today.* — 2016. — V. 11. — P. 212–227.
12. Chushnyakova, M. V. Thermal decay of a metastable state: Influence of rescattering on the quasistationary dynamical rate / M. V. Chushnyakova, I. I. Gontchar // *Phys. Rev. E.* — 2018. — V. 97. — P. 032107.
13. Nadtochy, P. N. Fission rate in multi-dimensional Langevin calculations / P. N. Nadtochy, A. Kelіж, K-H. Schmidt // *Phys. Rev. C.* — 2007. — V. 75. — P. 064614.
14. Гончар, И. И. Прецизионные вычисления скорости деления возбуждённых атомных ядер / И. И. Гончар, С. Н. Крохин // *Вестник Омского университета.* — 2012. — № 4. — С. 84–87.
15. Gontchar, I. I. Thermal decay rate of a metastable state with two degrees of freedom: Dynamical modelling versus approximate analytical formula / I. I. Gontchar, M. V. Chushnyakova // *Pramana – J. Phys.* — 2017. — V. 88. — P. 90.
16. Kloeden, P. E. Numerical Solution of Stochastic Differential Equations / P. E. Kloeden, E. Platen. — Heidelberg: Springer-Verlag, 1992. — 636 p.
17. Büttiker, M. Thermal activation in extremely underdamped Josephson-junction circuits / M. Büttiker, E. P. Harris, R. Landauer // *Phys. Rev. B.* — 1983. — V. 28. — P. 1268–1275.

## REFERENCES

1. Kramers H.A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 1940, vol. 7, pp. 284–304.
2. Dudko O.K., Hummer G., Szabo A. Intrinsic rates and activation free energies from single-molecule pulling experiments. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, vol. 96(10), p. 108101.
3. Zhou H.X. Rate theories for biologists. *Q. Rev. Biophys.*, 2010, vol. 43, pp. 219–293.
4. Vrusch C., Storm C. Catch bonding in the forced dissociation of a polymer endpoint. *Phys. Rev. E*, 2018, vol. 97, p. 042405.
5. Talkner P., Hänggi P. *New Trends in Kramers' Reaction Rate Theory.* Berlin: Springer, 2012, 251 p.
6. Aquino T., Dentz M. Chemical Continuous Time Random Walks. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, vol. 119, p. 230601.
7. Grangé P., Jun-Qing L., Weidenmüller H.A. Induced nuclear fission viewed as a diffusion process: Transients. *Phys. Rev. C*, 1983, vol. 27, pp. 2063–2077.
8. Karpov A.V., Nadtochy P.N., Ryabov E.G., Adeev G.D. Consistent application of the finite-range liquid-drop model to Langevin fission dynamics of hot rotating nuclei. *J. Phys. G Nucl. Part. Phys.*, 2003, vol. 29, pp. 2365–2380.
9. Gontchar I.I., Chushnyakova M.V., Aktaev N.E., Litnevsky A. L., Pavlova E.G. Disentangling effects of potential shape in the fission rate of heated nuclei. *Phys. Rev.*, 2010, vol. 82, p. 064606.
10. Arutyunov K.Y., Golubev D.S., Zaikin A.D. Superconductivity in one dimension. *Phys. Rep.*, 2008, vol. 464, pp. 1–70.
11. Saad W.S., Prud'homme R.K. Principles of nanoparticle formation by flash nanoprecipitation. *Nano Today*, 2016, vol. 11, pp. 212–227.
12. Chushnyakova M.V., Gontchar I.I. Thermal decay of a metastable state: Influence of rescattering on the quasistationary dynamical rate. *Phys. Rev. E*, 2018, vol. 97, p. 032107.
13. Nadtochy P.N., Kelix A., Schmidt K-H. Fission rate in multi-dimensional Langevin calculations. *Phys. Rev. C*, 2007, vol. 75, p. 064614.
14. Gonchar I.I., Krokhin S.N. Precision calculations of the fission rate of excited atomic nuclei. [Gonchar I.I., Krokhin S.N. Precizionnye vychisleniya skorosti deleniya vzbuzhdyonnykh atomnykh

yader]. *Bulletin of Omsk University – Vestnik Omskogo universiteta*, 2012, no. 4, pp. 84–87.

15. Gontchar I.I., Chushnyakova M.V. Thermal decay rate of a metastable state with two degrees of freedom: Dynamical modelling versus approximate analytical formula. *Pramana – J. Phys.*, 2017, vol. 88, p. 90.

16. Kloeden P.E., Platen E. *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*. Heidelberg: Springer-Verlag, 1992, 636 p.

17. Büttiker M., Harris E.P., Landauer R. Thermal activation in extremely underdamped Josephson-junction circuits. *Phys. Rev. B*, 1983, vol. 28, pp. 1268–1275.

*Чушнякова М. В., кандидат физико-математических наук, доцент кафедры “Физика”, Омский государственный технический университет, Омск, Россия  
E-mail: maria.chushnyakova@gmail.com*

*Chushnyakova M. V., candidate of technical sciences, associated professor of Physics Department, Omsk State Technical University, Omsk, Russia  
E-mail: maria.chushnyakova@gmail.com*

*Гончар И. И., доктор физико-математических наук, профессор кафедры “Физика и химия”, Омский государственный университет путей сообщения, Омск, Россия  
E-mail: vigichar@hotmail.com*

*Gontchar I. I., doctor of physical-mathematical sciences, Professor of Physics and Chemistry Department, Omsk State Transport University, Omsk, Russia  
E-mail: vigichar@hotmail.com*

*Семенюк Н. А., старший преподаватель кафедры “Физика”, Омский государственный технический университет, Омск, Россия  
E-mail: sem-natal@mail.ru*

*Semenyuk N. A., senior lecturer of Physics Department, Omsk State Technical University, Omsk, Russia  
E-mail: sem-natal@mail.ru*