



Студенттер мен жас ғалымдардың  
**«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2018»**  
XIII Халықаралық ғылыми конференциясы

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ**

XIII Международная научная конференция  
студентов и молодых ученых  
**«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2018»**

The XIII International Scientific Conference  
for Students and Young Scientists  
**«SCIENCE AND EDUCATION - 2018»**



12<sup>th</sup> April 2018, Astana

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ  
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың  
«Ғылым және білім - 2018»  
атты XIII Халықаралық ғылыми конференциясының  
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ  
XIII Международной научной конференции  
студентов и молодых ученых  
«Наука и образование - 2018»**

**PROCEEDINGS  
of the XIII International Scientific Conference  
for students and young scholars  
«Science and education - 2018»**

**2018 жыл 12 сәуір**

**Астана**

**УДК 378**

**ББК 74.58**

**Ғ 96**

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2018» атты студенттер мен жас ғалымдардың XIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XIII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2018» = The XIII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2018». – Астана: <http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2018. – 7513 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

**ISBN 978-9965-31-997-6**

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-997-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия  
ұлттық университеті, 2018

## МЕЕР ПАКЕТІ АРҚЫЛЫ ЖАҚЫН ӨРІСТЕГІ СКАНЕРЛЕУШІ ОПТИКАЛЫҚ МИКРОСКОПИЯ ҮШІН ЖАҢА КОАКСИАЛДЫ ЗОНДТЫ МОДЕЛЬДЕУ

**Бешеев Даулет Маратұлы**

[d.a.u.l.e.t950728@gmail.com](mailto:d.a.u.l.e.t950728@gmail.com)

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Механика - математика факультетінің Математикалық және компьютерлік модельдеу кафедрасының магистранты, Астана, Қазақстан

**Кусаинова Айнұр Төлеубековна**

[ainurkussainova89@gmail.com](mailto:ainurkussainova89@gmail.com)

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Ақпараттық технологиялар факультетінің Есептеу техникасы кафедрасының докторанты, Астана, Қазақстан  
Ғылыми жетекшісі – м.- ф.ғ. докторы Муканова Б.Г.

Әр түрлі құрылымдарды нано масштабта зерттеу әдістерінің бірі жақын өрістегі оптикалық микроскопия және спектроскопия болып табылады. Ал ең маңызды мәселелердің бірі дәл позициялаудың қосымша мүмкіндіктері мен сканерлеу зондының геометриясын құру арқылы зондтау құрылғысының ажыратымдылығын арттыру.

Қазіргі таңда ажыратымдылықты арттыратын жақын өрістегі сканерлеуші жаңа коаксиалды зондты дамыту зондтау сигналының анықталған толқын ұзындықтары үшін қолда бар оптикалық микроскопия құрылғыларымен жүзеге асырылған. Зерттеу барысында келесі мәселелер кешенін шешу қажет: электродинамикада толқындық процесстерді математикалық модельдеу, электромагниттік сәулелену арқылы ортаны қоздыру әдістерін қарастыру, нанокұрылымдардың физикасын зерттеу, сондай-ақ зондтың моделін құруға қажетті сандық әдістерді көрсету. Зерттеудің объектісі ретінде күрделі конфигурациялы біртекті ортадағы нанометрлік толқындар диапазонында коаксиалды оптикалық зонд тудыратын электромагниттік толқындардың таралуы және олардың ортамен өзара әсер етуі қарастырылады.

Зерттеудің мақсаты жоғары өнімді есептеу технологияларын МЕЕР пакеті арқылы қолдана отырып, математикалық модельдеуге негізделген біртекті емес электр және магниттік қасиеттерге ие электромагниттік толқындардың ортада таралу заңдылықтарын зерттеу.

Жақын өрістегі сканерлеуші оптикалық микроскопия үшін жаңа коаксиалды зондты модельдеу үшін цилиндрлік координаталар жүйесіндегі Максвелл теңдеулерін қолданамыз[1]:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon \frac{\partial E_r}{\partial t} + \sigma E_r + j_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial H_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial H_\varphi}{\partial z}, \\
 \varepsilon \frac{\partial E_\varphi}{\partial t} + \sigma E_\varphi + j_\varphi &= \frac{\partial H_r}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial r}, \\
 \varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sigma E_z + j_z &= \frac{1}{r} \left( \frac{\partial(rH_\varphi)}{\partial r} - \frac{\partial H_r}{\partial \varphi} \right), \\
 -\mu \frac{\partial H_r}{\partial t} &= \frac{1}{r} \frac{\partial E_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial E_\varphi}{\partial z}, \\
 -\mu \frac{\partial H_\varphi}{\partial t} &= \frac{\partial E_r}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial r}, \\
 -\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{1}{r} \left( \frac{\partial(rE_\varphi)}{\partial r} - \frac{\partial E_r}{\partial \varphi} \right).
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

$H_{t<0} = 0, E_{t<0} = 0$ . деп есептейміз. Егер (1) жүйесі  $\varphi$  - ден тәуелсіз болса,  $j_r = 0$  деп алсақ және қарастырылып отырған облыста ортаның параметрлерін тұрақты деп санасақ, онда  $H_\varphi$  компоненті келесі теңдеуді қанағаттандырады:

$$\mu \frac{\partial^2 H_\varphi}{\partial t^2} + \sigma \mu \frac{\partial H_\varphi}{\partial t} + \frac{\partial j_z}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial (r H_\varphi)}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 H_\varphi}{\partial z^2}, H_\varphi|_{t=0} = 0.$$

Ал (1) жүйенің қалған компоненттері  $t$  бойынша интегралдау арқылы анықталады:

$$E_r(r, z, t) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^t e^{\sigma_0(\tau-t)} \frac{\partial H_\varphi}{\partial z} d\tau,$$

$$E_z(r, z, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^t e^{\sigma_0(\tau-t)} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial (r H_\varphi)}{\partial r} - j_z \right) d\tau.$$

Егер  $j_z$  тасымалдаушысы бірінші цилиндрлік қабаттың ішінде оқшауланған болса, онда  $H_\varphi$  функциясы үшін уақыт бойынша локальді емес шекаралық шарттарды аламыз:

$$[H_\varphi]_{r=r_k} = 0, \left[ \frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^t e^{\sigma_0(\tau-t)} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial (r H_\varphi)}{\partial r} \right) d\tau \right]_{r=r_k} = 0, k = 1, 2, \dots,$$

Осындай есепті сандық шешу үшін FDTD әдісін қолдандық. Уақыт облысында ақырлы айырымдар әдісі (Finite Difference Time Domain, одан әрі FDTD) - дифференциалдық түрде жазылған Максвелл теңдеулерін дискреттеуге негізделген сандық электродинамикасының ең танымал әдістерінің бірі. Бұл әдіс техникасын алғаш ұсынған К. Ий болатын, содан кейін 70-ші жылдардың басында басқалар жетілдірді. Электромагнитті проблемаларды шешу идеясы уақыт пен кеңістіктегі Максвелл теңдеулерін жай ғана орталық айырмашылықты жуықтау әдісімен дискреттеу болып табылады. Ий идеясының ерекшелігі электр және магнит өрістерінің компоненттерін кеңістікте бөліп және процедураны уақыт облысы бойынша жүріп орындау [2]. Бұл әдіс шекаралық эффекттерді және скринингтік әсерлерді тікелей модельдеуге мүмкіндік береді.

FDTD әдісімен есептеу алгоритмі келесідей:

1. Есептеу облысы өлшемі және шекаралық шарттары беріледі.
2. Есептеу облысына материалдық объектілер енгізіліп олардың оптикалық қасиеттері анықталады.
3. Ортаны қоздыру көзі таңдалады.
4. Қоздыру көзі, спектралдық құрамы қажетті жиілік диапазонын қамтитын, уақыт бойынша ақырлы электромагниттік толқындарды тудырады. Сосын, толқын денеге құлап, оған қайта шашырайды. Толқындардың таралу тарихы сақталды.
5. Фурье түрлендіруінің көмегімен, анықталған өріс мәндері, жиіліктік көрініске түрлендіріледі. Содан кейін оларды өңдей отырып, қарастырылып отырған дене құрылымының оптикалық сипаттамаларын алуға болады.

Модельдеу Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ-дегі қазақ-үнді жоғары өнімді есептеу орталығының PARAM-BILIM суперкомпьютерінде MEER пакетімен жүргізілді.

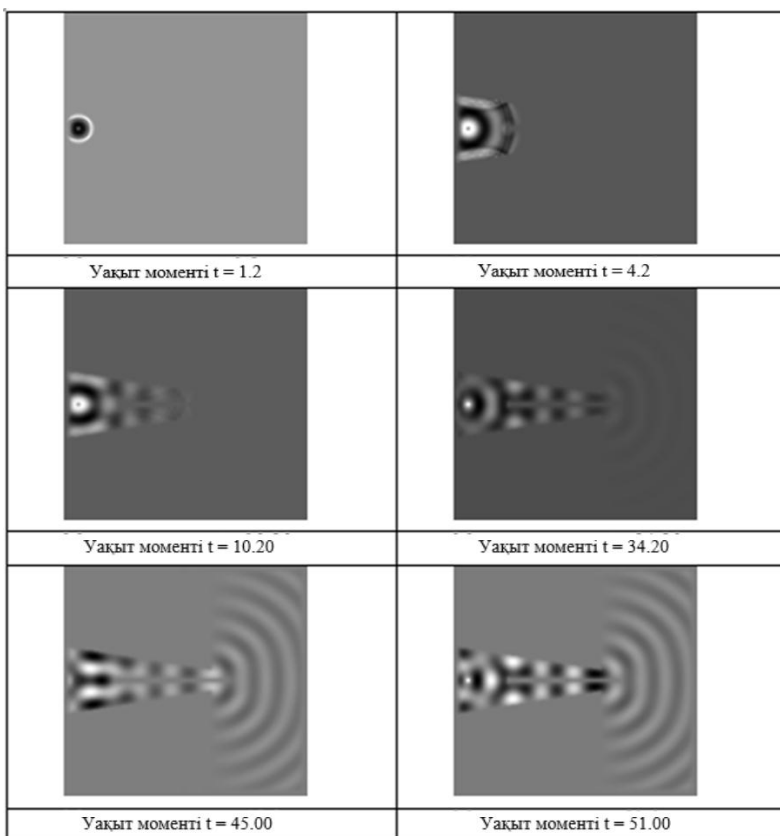
MEER (MIT Electromagnetic Equation Propagation) – электромагниттік жүйелерді уақыт облысында ақырлы айырымдар әдісімен модельдеу үшін арналған тегін бағдарламалық пакет. Пакет Массачусеттік технологиялық институтінде шығарылды. MEER пакеті GNU GPL лицензиясымен таратылады. Ол бірөлшемді, екіөлшемді, үшөлшемді жүйелерде және цилиндрлік координаталар жүйелерінде модельдеуге мүмкіндік береді. Сонымен қоса онымен MPI стандарттарын қолдайтын кез - келген жүйеде үлестірілген жадымен параллельді есептеулерді орындауға болады [3].

Процестер мен құбылыстарды модельдеу үрдісінде бірқатар эксперименттер жүргізілді. Әртүрлі қасиеттері бар МEEP бағдарламалық пакетінің түрлі геометриялық объектілері пайдаланылды. Төменде сипатталған тәжірибелер және олардың негізгі параметрлері берілген. Көрнекілік үшін HDF5 форматындағы еркін және тасымалы ғылыми деректерді түрлендіруге және визуализациялауға арналған H5utils утилиталар жиынтығы қолданылды.

Эксперимент № 1. Ортасынан метал ине орналасқан жақын өрістегі сканерлеуші оптикалық микроскопия үшін жаңа коаксиалды зондтың моделі. Негізгі параметрлер Кесте - 1 көрсетілген.

Кесте -1. Эксперименттің негізгі параметрлері

Параметрлер	Шамалар
Есептеу облысының өлшемі	20*20
Шекаралық шарттар	PML(Perfectly Matched Layers) – барлық түскен толқындар жұтылатын шарт
Облыс ортасы	Ауа
Материалды объект моделі (геометриялық объектілер типі) , өлшемі және олардың орналасуы	<p>Конус 1: радиустар 10 және 6,8, центрі ( -4 0 0) биіктігі 12</p> <p>Конус 2: радиустар 4 және 2, центрі ( -4 0 0) биіктігі 12</p> <p>Конус 3 (Ине): радиустар 0,2 және 0,02, центрі ( -1 0 0), биіктігі 9</p>
Материалды объект типі	<p>Конус 1: метал</p> <p>Конус 2: ауа</p> <p>Конус 3: алтын</p>
Қоздыру көзі типі, ұзындығы, ені	Continuous-src, 5, 10
Қоздыру көзі орналасуы	<p>X – (-8,8)</p> <p>У – 0</p>
Есептеу уақыты	2597,8 секунд
Суперкомпьютер параметрі	4 ядро
Тор ажыратымдылығы (бірліктегі түйіндер саны)	100



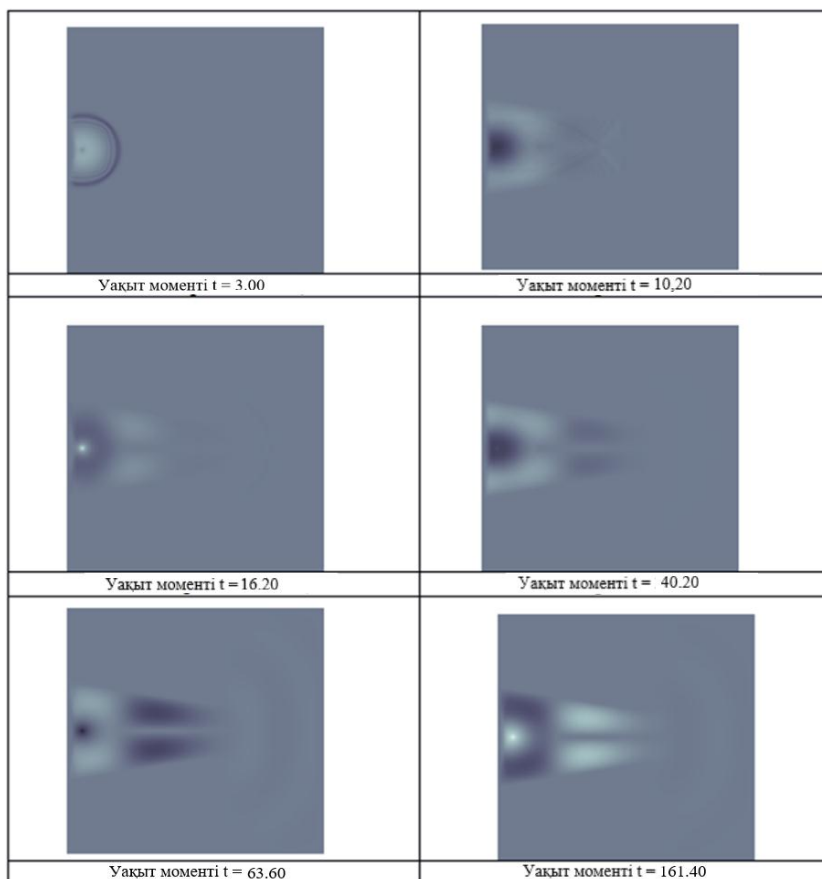
Сурет 1 - Эксперимент № 1 нәтижесі. Өр -түрлі уақыт моментінде Ez өрісінің шамасы

Эксперимент № 2. Ортасынан алтын ине орналасқан жақын өрістегі сканерлеуші оптикалық микроскопия үшін жаңа коаксиалды зондтың моделі. Бұның параметрлері эксперимент № 1 – дікіне ұқсас, тек қана ине алтынның жасалған және есептеу уақыты 2597,8 секундты құрады. Сурет 2-де электр өрісінің өзгерісі көрсетілген.

Жоғарыда айтылғандай, жоғары өнімді технологиялар мен Максвелл тендеулерінің толық жүйесін шешуге арналған МЕЕР пакеті күрделі конфигурация жағдайында электромагниттік өрісті егжей-тегжейлі модельдеуге мүмкіндік береді. Алайда, бұл пакет бірыңғай тор үшін жасалғанын атап өткен жөн. Бұл дегеніміз, егер сканерленетін объектінің маңында жоғары дәлдіктегі есептеулерді орындау қажет болса, онда біз алгоритмнің ажыратымдылығын арттыруымыз керек, яғни тор қадамын азайта отырып, есептеу санын көбейтеміз. Үш өлшемді есептерде қадамның тек екі есе азырақ есептеу санын сегіз есе өсіреді. Сонымен қатар, жоғарыда келтірілген сандық экспериментте есептеу облысының бірлік ұзындығына 100 нүкте келетін ажыратымдылықта есептеу уақыты шамамен бір сағатты құрады. Екінші жағынан, бізге қажетті ақпарат зондтың шағын маңында және есептік облысының оң жағында шоғырланған. Шын мәнінде, есептеу облысының жартысы үшін тордың мұндай бөлшектеуі талап етілмейді.

Зерттеу жұмысын қорытындылай келе келесі тұжырымдамаларды жасауға болады:

- МЕЕР бағдарламалық пакеті және пайдаланылатын жоғары өнімді есептеу технологиялары әрі қарайғы есептеулер мен үш өлшемді нанофотоника есептерін модельдеу үшін адекватты құрал болып табылады.



Сурет 2 - Эксперимент № 2 нәтижесі. Әр -түрлі уақыт моментінде Ez өрісінің шамасы

- Зерттеу барысында алынған нәтижелер зондтың әртүрлі геометриялық сипаттамалары мен зонд материалдарының физикалық параметрлері үшін қосымша жүйелі есептеулер жүргізуді қажет етеді.

- FDTD арқылы коаксиалды зондты модельдеу нәтижелерін талдау барысында жаңа мәселелер мен бағыттар тұжырымдалды, атап айтқанда, өлшемдері сигнал толқыны ұзындығынан әлдеқайда кіші объектілерді зондтау үшін жоғары дәлдікті модельдеу серияларын орындау.

- Тағыда бір жұмыстың әрі қарай жалғасуының жаңа бағытының бірі – зондтау деректерін интерпретациялау процесінде туындайтын кері есепті зерттеу және оны шешу үшін сандық әдістерді дамыту болып табылады.

#### Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Taflove A., Hagness S. C. Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method. —3rd edition. — Artech House, 2005.
2. Yee K.S, «Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media» // IEEE Trans. on Antennas and Propagation.— 1966.— V. AP14, No3. — P. 302–307.
3. Интернет ресурсы. Meep Tutorial - [http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep\\_manual](http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep_manual)