

- трубки, у которых четыре зоны пересекаются на уровне Ферми в центре зоны Бриллюэна. На рисунке изображен случай, когда зоны двукратно вырождены, что обозначено жирными линиями;

- трубки, у которых четыре зоны пересекаются на уровне Ферми, но уже попарно на расстояниях $2/3$ от центра зоны Бриллюэна.

Плотность электронных состояний $D(E)$ получена численно по простым аналитическим формулам. Результаты для трубок (6,0) и (5,2) представлены на рис. 1.

Примечателен тот факт, что у нанотрубки (6,0) появляется бездисперсионная зона (прямая линия на уровне энергии 2,9 эВ). Подобные зоны появляются в данном приближении у zigzag трубок с четным индексом n , причем как у полупроводниковых, так и у металлических. Это связано с тем, что на дисперсионной поверхности графита из-за симметрии существуют области, полностью совпадающие с прямой линией, которая проходит на уровне 2,9 эВ. Некоторые зоны ввиду симметрии относительно центра зоны Бриллюэна графитового монослоя являются двукратно вырожденными. На рисунке эти зоны нарисованы жирной линией.

Благодарю доктора физ.-мат. наук Поклонского Н.А. и кандидата физ.-мат. наук Кислякова Е.Ф. за помощь в подготовке этой работы.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ И ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ СПЕКТРОМЕТРА КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

А. Е. Радько, А. В. Егоров

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) света является одним из наиболее эффективных методов исследования строения вещества. Аналитические возможности спектроскопии КР для молекул основаны на существовании зависимости между структурой и химическим составом молекулы и ее спектром. Эта зависимость четко проявляется при изучении колебательного спектра – спектра инфракрасного (ИК) поглощения и спектра комбинационного рассеяния. Существенно при этом, что зачастую спектры КР и ИК поглощения взаимно дополняют друг друга, т. е. полный набор колебательных частот молекулы может быть получен из опыта, строго говоря, только на основе анализа обоих спектров. Зная колебательный спектр молекулы, можно сделать существенные выводы о ее структуре. Именно этим обусловлен интерес к разработке и применению комплексов аппаратуры

для спектроскопии КР. Среди них можно отметить исследовательские комплексы, а также аппаратуру зарубежных фирм. [1, 2].

Аппаратный комплекс для регистрации спектров КР включает: источник излучения, как правило лазер, монохроматор, приемник излучения, а также устройство, обеспечивающее согласованную работу перечисленных узлов. Отечественный КР спектрометр ДФС-52 имеет существенные недостатки, связанные с установленной заводом-изготовителем системой управления и съема информации. Она оказалась весьма ненадежной, несовместимой с современными ЭВМ и неудобной в работе. В связи с этим нами произведена модернизация спектрометра.

Базовый вариант спектрометра ДФС-52 снабжен шаговым двигателем, фотоэлектронным умножителем (ФЭУ) с усилителем, каналом сравнения и концевыми датчиками положения дифракционных решеток. В качестве основного узла управления монохроматором разработано устройство на базе репрограммируемого микроконтроллера семейства MSC-51. Данный контроллер обладает широким набором периферийных возможностей, flash-ROM памятью объемом 4 килобайта с гарантией 1000 циклов перезаписи, прост в отладке и программировании. На контроллер возложены функции приема сигналов канала регистрации, формирования управляющих последовательностей для шагового двигателя монохроматора и обеспечения связи с компьютером. В данном устройстве присутствуют следующие структурные элементы:

- микроконтроллерное ядро, осуществляющее управление всем аппаратным комплексом;
- интерфейсная часть, отвечающая за обмен данными между персональным компьютером и устройством (последовательный асинхронный интерфейс RS-232);
- силовая часть управления шаговым двигателем реализована на четырех транзисторных ключах. Сканирование, выбор его скорости, плавный разгон и торможение шагового двигателя осуществляется путем выбора подходящего режима в программе управления сканированием;
- блок регистрации. В спектрометре ФЭУ работает в режиме счета фотонов.

Для обеспечения большого динамического диапазона канала регистрации (около 10^6) режим счета однофотонных импульсов в микроконтроллере реализован в два этапа: сначала регистрируемые импульсы поступают на внешний четырехразрядный счетчик-предделитель и затем на встроенный в микроконтроллер шестнадцати разрядный счетчик.

Информация с пределителя считывается в контроллер, который осуществляет «стыковку» полученных кодов.

Основными достоинствами такой системы являются: высокая гибкость, поскольку управляющая программа, находящаяся в микроконтроллере, легко может быть изменена даже без извлечения самого микроконтроллера; компактность, относительная простота реализации.

Микроконтроллер осуществляет, таким образом, непосредственное управление шаговым двигателем монохроматора и устройством регистрации. Для удобства использования, однако, необходима программа более высокого уровня приближения к физической сущности измерений. Хорошо известно, что пользователю предпочтительнее работать с длинами волн и волновыми числами, чем с шагами двигателя и углами поворота дифракционной решетки. Базовой для такой программы была выбрана операционная система семейства Windows9x, как наиболее распространенная и наиболее «дружественная» к пользователю. Написание программы осуществлялось на языке программирования Object Pascal в среде разработки Delphi 5 от фирмы Borland. Данное приложение является системой визуального объектно-ориентированного программирования, что позволяет значительно ускорить процесс написания программы и не отвлекаться на написание сложного графического интерфейса, соответствующего современным стандартам.[3]

Программа предназначена для регистрации спектров комбинационного рассеяния и спектрального состава светового потока в выбранном спектральном диапазоне, сохранения полученных данных в файл, а также для просмотра ранее полученных результатов и распечатки полученных спектров на принтере.

Перед началом измерений пользователь должен задать ряд необходимых параметров в меню «Настройки»:

- Тип сканирования. В программе реализованы два способа измерения: регистрация спектров комбинационного рассеяния и регистрация спектрального состава светового потока в выбранном диапазоне. Последний способ был добавлен для расширения возможностей программы;
- Если пользователь планирует регистрацию спектров КР, он должен задать область сканирования – стоксову или антистоксову. Данный пункт был добавлен с целью не допустить повреждения ФЭУ при переходе монохроматором через область генерации лазера.
- Шаг сканирования – интервал между двумя ближайшими точками съема интенсивности.

- Время съема интенсивности – время, в течение которого ФЭУ будет производить счет импульсов.

- Волновое число, соответствующее нижней границе спектра.
- Волновое число, соответствующее верхней границе спектра.

В программе предусмотрена ситуация, когда пользователь введет ошибочные параметры, например значение верхней границы меньше значения нижней границы спектра, область сканирования меньше шага сканирования и т.д. В таком случае будет выдано соответствующее предупреждение.

В момент, когда монохроматор находится в области генерации источника излучения, необходимо закрыть входное отверстие, чтобы не допустить повреждения ФЭУ. Для этой цели на некоторых приборах серии ДФС-52 установлена шторка, однако она имеется не на всех приборах, и тем более не во всех экземплярах данной серии предусмотрено автоматическое управление этой шторкой. Поэтому, если в процессе движения монохроматор будет проходить через область генерации, программа попросит пользователя обеспечить безопасность прибора и предотвратить его повреждение.

Работа программы в процессе регистрации спектра зависит от выбранных настроек. В случае, если происходит регистрация спектра комбинационного рассеяния, монохроматор переводится в точку нижней границы спектра, т. е. в ближайшую к области генерации. Если же осуществляется регистрация спектрального состава в выбранном спектральном диапазоне, то монохроматор переводится в точку верхней границы, т. е. в точку, соответствующую максимальной частоте излучения. При этом на стартовую позицию монохроматор всегда приходит «сверху», т. е. со стороны больших частот для выборки мертвого хода механизма привода дифракционной решетки.

В ДФС-52 не предусмотрен датчик положения дифракционной решетки, поэтому координаты монохроматора отслеживаются программно. Привязку «виртуального монохроматора» к реальному монохроматору можно осуществить двумя способами: указать текущее положение монохроматора в соответствующем меню либо произвести автоматическую привязку с помощью концевых датчиков.

Для контроля состояния прибора в программе был реализован интенсивметр, отображающий в реальном времени количество фотонов, регистрируемых ФЭУ при текущем положении монохроматора в течение 0,1 или 1 секунды.

Таким образом, делая вывод о проведенной работе, можно отметить, что процесс регистрации спектров стал менее трудоемким, ин-

формация, получаемая модернизированной установкой, легко поддается последующей математической обработке, представляется в удобном для восприятия виде и может быть без проблем использована в других, более сложных программах и пакетах приложений (Origin, MathCad). Тем самым по существу обеспечиваются более широкие возможности регистрации спектров КР с улучшенными, за счет возможностей математической обработки, точностными техническими параметрами. В данном варианте спектрометр по своим возможностям близок к современным образцам спектрометров зарубежных фирм.

Литература

1. *Бенуэлл К.* Основы молекулярной спектроскопии: Пер. с англ. М.: Мир, 1985. 384 с.
2. *Бахшиев Н. Г.* Введение в молекулярную спектроскопию: Учеб. пособие. 2-е изд., испр. и доп. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1987. 216 с.
3. *Архангельский А. Я.* Программирование в Delphi 5 2-е изд., перераб. и доп. М.: ЗАО «Издательство БИНОМ», 2000. 1072 с.

СУЩНОСТЬ, ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ САМОВОСПИТАНИЯ

Д. В. Радюк

Выступающее в качестве фактора формирования личности самовоспитание не может быть понято как простая функция внешнего воздействия или только как результат чистого волеизъявления индивида. Оно есть общая результирующая, по крайней мере, трех взаимодействующих процессов: внешнего влияния, источником которого является сама жизнь, социальная среда; целенаправленного воспитания; деятельности самого человека, выступающего как бы в двух ипостасях: объекта воспитания и объекта собственного формирования, самовоспитания. Такая трактовка в известной мере совпадает с мнением ряда современных ученых. Так, А.Г. Ковалев пишет: «Сложный процесс формирования личности состоит из трех компонентов: влияния социальной среды, планомерного воспитательного воздействия общества на личность через его социальные институты, сознательного, целенаправленного воздействия человека на самого себя, т. е. самовоспитания».

Основные цели и задачи самовоспитания заключаются в его общественной направленности, связи личного самосовершенствования с осуществлением общественно-значимых задач. Человек посредством изменения своего внутреннего мира, своих качеств, привычек получает возможность изменять некоторые свои потребности, понимая свои особенности, четко представляя требования общества.