

боров и интегральных схем, оказывает большое влияние на экономичность процесса в целом. В связи с этим, актуальным является разработка устройств активного контроля и управления процессом резки, с помощью которых возможно реализовать алгоритмы оптимального адаптивного управления аналитическим модулем резки монокристаллов сапфира.

Наиболее эффективным подходом для решения проблемы оптимального адаптивного управления является использование гибридных нейронных сетей (нейронечеткие системы).

Анализ последних исследований показал, что в настоящее время повышение быстродействия адаптивных систем управления систем обеспечивается за счет построения и использования многопроцессорных систем параллельной архитектуры; разработки и реализации алгоритмов параллельных вычислений на соответствующем аппаратном обеспечении (нейрочипах); комбинированного использования генетических алгоритмов и методов минимизации, для которых характерна сверхлинейная скорость сходимости. При этом используются угрощенные математические модели (в первую очередь линеаризованные), а решение задач выполняется, как правило, в режиме on-line; обеспечения хорошей обусловленности задачи различными методами; использования робастных методов, устойчивых к наличию погрешностей в исходной информации; обучения нейронной сети вне реального времени, но при обеспечении учета сложной поверхности функции качества и адаптации к изменениям влияния технологических факторов на процесс алмазной резки слитков сапфира; использования рекуррентных нейронных сетей типа Хопфилда–Лагранжа, в которых точные измерения учитываются в виде ограничений типа равенств и многослойных рекуррентных нейронных сетей, в которых реализуется распараллеливание вычислительного процесса и используется преимущественно аналоговая или аналогово-цифровая элементная база с высоким быстродействием.

УДК 539.326.621

### **Индукцированная адсорбцией реконструкция поверхностей некоторых металлов и ее влияние на работу выхода.**

#### **Теория функционала плотности**

Зайцев А.Л.

Белорусский национальный технический университет

Реконструкция поверхности и поверхностных слоев металлов, индуцированная адсорбцией, приводит к изменению электронных свойств, химической активности, электромагнитных и других важных технических характеристик.

Адсорбционное взаимодействие простых молекул с поверхностью металла сопровождается консервативной и неконсервативной реконструкцией, когда наблюдается незначительное смещение поверхностных атомов относительно положения равновесия, либо полная перестройка геометрии поверхности.

Вследствие изменения положений поверхностных атомов, нарушается исходная электронная структура, включая энергетические уровни и положение уровня Ферми. В этой связи представляло интерес установить зависимость энергии Ферми и работы выхода электронов от расстояния молекулы до поверхности металла при адсорбционном взаимодействии водорода, воды и оксида углерода с поверхностью (100) ГЦК Al и ОЦК Fe.

Для проведения исследований использовалась теория функционала плотности (ТФП), которая является наиболее совершенной теорией описания многэлектронных систем кристаллических структур. Формализм ТФП и теории псевдопотенциалов реализован в вычислительном коде АВ-INIT, позволяющий моделировать структуру атомно-молекулярных систем и оценивать их характеристики.

Результаты квантовых расчетов показывают, что реконструкция поверхности и электронно-энергетические эффекты существенно зависят от характера адсорбции (физическая, молекулярная, диссоциативная). Причем в зависимости от природы адсорбата, а также его положения и геометрической конфигурации относительно поверхности металла изменение энергии Ферми и, соответственно, работы выхода может достигать 50 % и более. В некоторых случаях адсорбции наблюдается скачкообразное изменение энергии Ферми на расстоянии порядка 1 Å от поверхности, что обусловлено различными структурными конфигурациями адсорбата.