

УДК 517.444

О ПРОДОЛЖЕНИИ РЕШЕНИЙ ИСКАЖЕННОГО УРАВНЕНИЯ СВЕРТКИ

Вит. В. Волчков

Исследуется задача о возможности периодического в среднем продолжения решений искаженного уравнения свертки. Получено решение этой задачи для широкого класса уравнений свертки. Доказано, что условия в определенном указанном классе являются необходимыми для возможности продолжения.

Ключевые слова: искаженное уравнение свертки, периодическое в среднем продолжение, группа Гейзенберга.

Введение. Пусть \mathbb{R}^n – вещественное евклидово пространство размерности n с евклидовой нормой $|\cdot|$. Обозначим $\mathcal{D}'(\mathcal{O})$ (соответственно $\mathcal{S}'(\mathcal{O})$) пространство распределений (соответственно распределений с компактным носителем) в области $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^n$, $\mathcal{D}(\mathcal{O})$ – пространство финитных бесконечно дифференцируемых в \mathcal{O} функций. Пусть $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$, $\text{supp } T$ – носитель T , $\mathcal{O}^T = \{x \in \mathbb{R}^n : x - y \in \mathcal{O} \ \forall y \in \text{supp } T\}$. Предположим, что $\mathcal{O}^T \neq \emptyset$. Тогда для всякого $f \in \mathcal{D}'(\mathcal{O})$ в \mathcal{O}^T определена свертка $f * T$ (см. [1, гл. 4]). Распределения из класса $\mathcal{D}'_T(\mathcal{O}) = \{f \in \mathcal{D}'(\mathcal{O}) : f * T = 0 \text{ в } \mathcal{O}^T\}$ называются периодическими в среднем в области \mathcal{O} относительно T . Если $\mathcal{W}(\mathcal{O})$ – некоторое подмножество в $\mathcal{D}'(\mathcal{O})$, то для пересечения $\mathcal{D}'_T(\mathcal{O}) \cap \mathcal{W}(\mathcal{O})$ будем использовать символ $\mathcal{W}_T(\mathcal{O})$. Например, $C_T^\infty(\mathcal{O}) = \mathcal{D}'_T(\mathcal{O}) \cap C^\infty(\mathcal{O})$.

Общая проблема периодического в среднем продолжения формулируется следующим образом.

Проблема 1. (i) Пусть $f \in \mathcal{W}_T(\mathcal{O})$ и область \mathcal{O}_1 содержит \mathcal{O} . При каких условиях существует $F \in \mathcal{W}_T(\mathcal{O}_1)$, совпадающее с f на \mathcal{O} ?

(ii) Если такое продолжение F существует, то будет ли оно единственным?

Даже одномерный случай проблемы 1 является весьма содержательным и имеет глубокие связи с различными разделами анализа. Он изучался в работах Ж. П. Кахана, В. Д. Головина, А. Ф. Леонтьева, А. М. Седлецкого и других (см. [2] и библиографию к этой работе). При этом ответ в проблеме 1 (ii) положителен для любого $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^1)$ в силу теоремы Титчмарша о носителях [1, теорема 4.3.3] (см. также [2, гл. 5, § 1], [3, часть 3, гл. 1, теорема 1.1]). В проблеме 1 (i) ответ существенно зависит от свойств T . В [2, гл. 5] установлен ряд результатов о возможности периодического в среднем продолжения функций классов C и L^p для распределений T вида

$$\langle T, \varphi \rangle = \int_{-q}^q \varphi(t) d\zeta(t), \quad \varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^1),$$

где ζ – функция ограниченной вариации на $[-q, q]$, имеющая скачок в одной из точек $\pm q$. Наличие скачков у ζ в точках $\pm q$ накладывает ряд ограничений на нули преобразования Фурье \hat{T} распределения T . Среди них отметим такие (см., например, [2, лемма 5.1.1]): (а) все нули $\{\lambda_\nu\}_{\nu=0}^\infty$ функции \hat{T} лежат в некоторой горизонтальной полосе; (б) последовательность кратностей $\{n_\nu\}_{\nu=0}^\infty$ нулей $\{\lambda_\nu\}_{\nu=0}^\infty$ является ограниченной; (с) для любого $\delta > 0$ существует постоянная $c_\delta > 0$ такая, что вне кружков радиуса δ с центрами в λ_ν справедливо неравенство

$$|\hat{T}(z)| \geq c_\delta e^{q|\text{Im } z|}.$$

В связи с этим представляет интерес следующая задача: для заданного класса $\mathcal{W}_T(\mathcal{O})$ найти точные условия, выраженные только в терминах нулей \hat{T} , обеспечивающие продолжение в проблеме 1 (i).

В частности, как влияют степень удаленности λ_ν от вещественной оси и рост n_ν на возможность периодического в среднем продолжения? Ряд результатов по этой проблеме получен в [4].

Постановка задачи. В данной работе рассматривается задача периодического в среднем продолжения на комплексном евклидовом пространстве \mathbb{C}^n для искаженного уравнения свертки вида

$$\langle f * T, \psi \rangle = \left\langle f(z), \left\langle T(w), \psi(z+w) e^{\frac{i}{2} \operatorname{Im} \langle z, w \rangle} \right\rangle \right\rangle = 0, \quad \psi \in \mathcal{D}(\mathbb{C}^n),$$

где $f \in \mathcal{D}'(\mathbb{C}^n)$, $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{C}^n)$. Интерес к изучению уравнений такого вида объясняется тем, что они тесно связаны с группой Гейзенберга, которая широко используется в современных исследованиях по гармоническому анализу. Кроме того, до настоящего времени не было ни одного нетривиального результата по рассматриваемой проблеме для этого случая.

Построение решения задачи. Для целой функции $f: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ положим $\mathcal{Z}(f) = \{z \in \mathbb{C} : f(z) = 0\}$. Если $f \neq 0$ и $\lambda \in \mathcal{Z}(f)$, обозначим через $n_\lambda(f)$ кратность нуля λ . Мы часто будем писать n_λ вместо $n_\lambda(f)$. Кроме того, положим

$$\sigma_\lambda(f) = \sum_{j=0}^{n_\lambda-1} |a_{j,\lambda}(f)|,$$

$$\text{где } a_{j,\lambda}(f) = \frac{1}{j!} \left(\frac{(z-\lambda)^{n_\lambda}}{f(z)} \right)^{(j)} \Big|_{z=\lambda}.$$

Пусть $\mathbb{S}^{2n-1} = \{z \in \mathbb{C}^n : |z|=1\}$, ρ и σ – полярные координаты точки $z \in \mathbb{C}^n$ ($\rho = |z|$, а если $z \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$, то $\sigma = z/\rho$). Обозначим $\mathcal{H}^{n,p,q}$ – пространство сферических гармоник бистепени (p, q) на \mathbb{S}^{2n-1} , рассматриваемое как подпространство $L^2(\mathbb{S}^{2n-1})$ (см. [5, гл. 12]), $d(n, p, q)$ – размерность $\mathcal{H}^{n,p,q}$, $\{Y_j^{p,q}\}$, $j \in \{1, \dots, d(n, p, q)\}$, – фиксированный ортонормированный базис в $\mathcal{H}^{n,p,q}$.

Пусть $0 < R \leq \infty$, $B_R = \{z \in \mathbb{C}^n : |z| < R\}$, $L^{1,loc}(B_R)$ – класс локально суммируемых в B_R функций. Ряд Фурье функции $f \in L^{1,loc}(B_R)$ по биградуированным сферическим гармоникам имеет вид

$$f(z) \sim \sum_{p,q=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{d(n,p,q)} f_{p,q,j}(\rho) Y_j^{p,q}(\sigma), \quad z \in B_R, \quad (1)$$

где $f_{p,q,j}(\rho) = \int_{\mathbb{S}^{2n-1}} f(\rho\sigma) Y_j^{p,q}(\sigma) d\omega(\sigma)$ и $d\omega$ – элемент площади на \mathbb{S}^{2n-1} . По теореме Фубини

функции $f_{p,q,j}$ корректно определены для почти всех $\rho \in (0, R)$. Более того, функции $f^{p,q,j}(x) = f_{p,q,j}(\rho) Y_j^{p,q}(\sigma)$ принадлежат $L^{1,loc}(B_R)$. Отображение $f \rightarrow f^{p,q,j}$ и разложение (1) можно продолжить на распределения $f \in \mathcal{D}'(B_R)$ следующим образом:

$$\langle f^{p,q,j}, \psi \rangle = \left\langle f, \overline{(\overline{\psi})}_{p,q,j}(\rho) Y_j^{p,q}(\sigma) \right\rangle, \quad \psi \in \mathcal{D}(B_R) \quad \text{и} \quad f \sim \sum_{p,q=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{d(n,p,q)} f^{p,q,j}. \quad (2)$$

Для любого $f \in \mathcal{D}'(B_R)$ (соответственно $f \in C^\infty(B_R)$) ряд в (2) сходится к f в $\mathcal{D}'(B_R)$ (соответственно $C^\infty(B_R)$).

Для всякого множества $\mathcal{W}(B_R) \subset \mathcal{D}'(B_R)$ положим

$$\mathcal{W}_{p,q,j}(B_R) = \{f \in \mathcal{W}(B_R) : f = f^{p,q,j}\}.$$

Отметим, что $\mathcal{W}_{0,0,1}(B_R)$ совпадает с множеством радиальных распределений из $\mathcal{W}(B_R)$. В дальнейшем мы пишем $\mathcal{W}_\rho(B_R)$ вместо $\mathcal{W}_{0,0,1}(B_R)$.

Пусть $T \in \mathcal{E}'(\mathbb{C}^n)$, \tilde{T} – сферическое преобразование распределения T , т.е.

$$\tilde{T}(\lambda) = \left\langle T, e^{-|z|^2/4} {}_1F_1((n-\lambda^2)/2; n; |z|^2/2) \right\rangle, \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

(${}_1F_1$ – вырожденная гипергеометрическая функция Куммера). Определим класс $\mathcal{N}(\mathbb{C}^n)$ как совокупность всех радиальных распределений $T \in \mathcal{E}'(\mathbb{C}^n)$ таких, что

$$\sup_{\lambda \in \mathcal{Z}(\tilde{T})} \frac{|\operatorname{Im} \lambda| + n_\lambda(\tilde{T}) + \ln(1 + \sigma_\lambda(\tilde{T}))}{\ln(2 + |\lambda|)} < +\infty.$$

Для $T \in \mathcal{E}'(\mathbb{C}^n)$ обозначим $r(T)$ – радиус наименьшего замкнутого шара в \mathbb{C}^n , содержащего $\operatorname{supp} T$. Далее символы \mathcal{D}'_T и C^∞_T имеют тот же смысл, что и в пространстве \mathbb{R}^n , но с заменой обычной свертки на искаженную.

Основные результаты работы формулируются следующим образом.

Теорема 1. Пусть $T \in \mathcal{N}(\mathbb{C}^n)$, $R > r(T)$, $p, q \in \mathbb{Z}_+$, $j \in \{1, \dots, d(n, p, q)\}$. Тогда для любого $f \in (\mathcal{D}'_T \cap \mathcal{D}'_{p,q,j})(B_R)$ существует единственное $F \in (\mathcal{D}'_T \cap \mathcal{D}'_{p,q,j})(\mathbb{C}^n)$, совпадающее с f в B_R .

Теорема 2. Пусть $p, q \in \mathbb{Z}_+$, $j \in \{1, \dots, d(n, p, q)\}$. Предположим, что $T \in \mathcal{E}'(\mathbb{C}^n)$, $T \neq 0$, $R > r(T)$ и

$$\sup_{\lambda \in \mathcal{Z}(\tilde{T})} \frac{n_\lambda(\tilde{T}) + |\operatorname{Im} \lambda|}{\ln(2 + |\lambda|)} = +\infty.$$

Тогда существует $f \in (C^\infty_T \cap \mathcal{D}'_{p,q,j})(B_R)$ такая, что $f \neq F|_{B_R}$, если $F \in \mathcal{D}'(B_{R+\varepsilon})$ при некотором $\varepsilon > 0$.

Анализ результатов. Из [6, теорема 8] и классической теоремы Пэли-Винера следует, что равенство

$$(\Lambda(T))^\wedge(\lambda) = \left\langle \Lambda(T), e^{-i\lambda t} \right\rangle = \tilde{T}(\lambda), \quad \lambda \in \mathbb{C},$$

корректно определяет распределение $\Lambda(T) \in E'_\phi(\mathbb{R}^1)$ и $r(\Lambda(T)) = r(T)$. В работе [6, п. 8] определены трансмутационные операторы $\mathcal{U}_{p,q,j}$, обладающие следующими свойствами:

(i) если $f \in \mathcal{D}'_{p,q,j}(B_R)$, $r \in (0, R]$, то $f = 0$ в B_r тогда и только тогда, когда $\mathcal{U}_{p,q,j}(f) = 0$ на $(-r, r)$;

(ii) отображение $\mathcal{U}_{p,q,j}$ является непрерывным из $\mathcal{D}'_{p,q,j}(B_R)$ в $\mathcal{D}'(-R, R)$ и из $C^\infty_{p,q,j}(B_R)$ в $C^\infty(-R, R)$;

(iii) если $f \in \mathcal{D}'_{p,q,j}(B_R)$, $T \in \mathcal{E}'(\mathbb{C}^n)$, $r(T) < R$, то

$$\mathcal{U}_{p,q,j}(f \times T) = \mathcal{U}_{p,q,j}(f) * \Lambda(T)$$

на интервале $(r(T) - R, R - r(T))$.

Далее, если $U \in \mathcal{N}(\mathbb{R}^1)$, $\operatorname{supp} U \subset [-r(U), r(U)]$, $R > r(U)$ и $f \in \mathcal{D}'_U(-R, R)$, то существует единственное $\Phi \in \mathcal{D}'_U(-\infty, +\infty)$ такое, что $\Phi = f$ на $(-R, R)$ (см. [5, теорема 1]). Кроме того, если $V \in \mathcal{E}'(\mathbb{R}^1)$, $R > r(V)$ и

$$\sup_{\lambda \in \mathcal{Z}(\hat{V})} \frac{n_\lambda + |\operatorname{Im} \lambda|}{\ln(2 + |\lambda|)} = +\infty,$$

то существует четная $f \in C^\infty_V(-R, R)$ такая, что $f \neq \Phi|_{(-R, R)}$, если $\Phi \in \mathcal{D}'(-R, R + \varepsilon)$ при некотором $\varepsilon > 0$ [5, теоремы 3,4]. Отсюда и из перечисленных выше свойств преобразований $\mathcal{U}_{p,q,j}$ получаем утверждения теорем 1, 2.

Выводы. Получены точные результаты о продолжении решений искаженного уравнения свертки на комплексном евклидовом пространстве. Метод доказательства использует развитую автором технику трансмутационных операторов и может быть применен для изучения задач, связанных с уравнениями свертки на однородных пространствах.

РЕЗЮМЕ

Досліджується задача про можливість періодичного в середньому продовження розв'язків викривленого рівняння згортки. Одержано розв'язання цієї задачі для широкого класу рівнянь згортки. Доведено, що умови в означенні цього класу є необхідними для можливості продовження.

Ключові слова: викривлене рівняння згортки, періодичне в середньому продовження, група Гейзенберга.

SUMMARY

The problem on possibility of mean periodic continuation of solutions of twisted convolution equations is investigated. A solution of this problem for a broad class of convolution equations is obtained. We prove that the conditions in the definition of the indicated class are necessary for possibility of the continuation.

Keywords: twisted convolution equations, mean periodic continuation, the Heisenberg group.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хермандер Л. Анализ линейных дифференциальных операторов с частными производными I / Л. Хермандер. – М.: Мир, 1986. – 462 с.
2. Леонтьев А. Ф. Последовательности полиномов из экспонент / А. Ф. Леонтьев. – М.: Наука, 1980. – 384 с.
3. Volchkov V. V. Integral geometry and convolution equations / V. V. Volchkov. – Dordrecht: Kluwer, 2003. – 454 p.
4. Волчков В. В. О проблеме периодического в среднем продолжения / В. В. Волчков, Вит. В. Волчков // Доклады Академии Наук. – 2009. – Т. 427, № 4. – С. 442-446.
5. Рудин У. Теория функций в единичном шаре из C^n / У. Рудин. – М.: Мир, 1984. – 455 с.
6. Волчков В. В. Уравнения свертки на многомерных областях и редуцированной группе Гейзенберга / В. В. Волчков, Вит. В. Волчков // Матем. сб. – 2008. – Т. 199, № 8. – С. 29-60.

Поступила в редакцию 24.05.2010 г.

УДК 517.5

ДИФФЕРЕНЦИРУЕМОСТЬ ПОЧТИ ВСЮДУ ГОМЕОМОРФИЗМОВ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ОБЛАСТЕЙ

В. И. Пайков

В данной работе вводятся новые классы гомеоморфизмов, являющиеся обобщением квазиконформных отображений. Устанавливается их упорядоченность по включению. Доказывается дифференцируемость почти всюду отображений принадлежащих этим классам. Приводится оценка сверху внешней дилатации отображения.

Ключевые слова: гомеоморфизм, квазиконформные отображения, дифференцируемость почти всюду, локальная интегрируемость, внешняя дилатация.

Введение. При изучении пространственных квазиконформных отображений, важную роль сыграли методы модулей семейств кривых и емкостей конденсаторов. Они явились основным инструментом исследований и позволили получить ряд важных результатов [1-3]. В дальнейшем, такие методы были использованы при изучении отображений квазиконформных в среднем, которые послужили обобщением квазиконформных отображений [4-8]. Следующим этапом развития теории выступили отображения, в которых, требование суммируемости функции от коэффициентов квазиконформности, заменяется геометрическими условиями, обобщающими известное характеристическое свойство квазиконформных отображений [9-12], выраженное в терминах модулей семейств кривых, такими явились введенные профессором Олли Мартио, Q -гомеоморфизмы [13-17].

Обозначения и определения. Напомним понятие α -модуля семейства кривых. Пусть D область в R^n , $n \geq 2$ и Γ семейство кривых γ лежащих в D . Будем говорить, что борелевская функция $\rho: R^n \rightarrow [0, \infty]$ допустима для семейства кривых Γ в D и обозначать $\rho \in adm \Gamma$, если $\int_{\gamma} \rho ds \geq 1$ для

всех $\gamma \in \Gamma$. Величину $M_{\alpha}(\Gamma) = \inf_{\rho \in adm \Gamma} \int_D \rho dm$ называют α -модулем семейства Γ .

Нам также потребуется емкость конденсатора. Приведём её определение в форме [5, 11, 16]. Под кольцевым конденсатором в R^n , $n \geq 2$ будем понимать пару множеств $A = (F, G)$, где G – область в R^n , а $F \subset G$ – непустое замкнутое множество. Его β -ёмкость ($1 \leq \beta \leq n$) определяется равенством

$$cap_{\beta}(F, G) = \inf_D \int |\nabla \varphi(x)|^{\beta} dx,$$

где точная нижняя грань берётся по всем непрерывным ACL -функциям $\varphi: R^n \rightarrow R^1$ таким, что $\varphi(x) \leq 0$ при $x \in F$ и $\varphi(x) \geq 1$ при $x \in CG$ (CG – дополнение области G).

Определение отображений. Пусть D – область в R^n , $n \geq 2$, и $Q: D \rightarrow [1, \infty]$ – измеримая функция. Тогда Q_{α} -гомеоморфизмом $1 \leq \alpha \leq n$ будем называть гомеоморфизм $f: D \rightarrow \overline{R^n}$, если для любого конденсатора $A = (F, G)$, лежащего в D , условие

$$M_{\alpha}(f(\Gamma))(m(f(G) \setminus \overline{f(F)}))^{\frac{\alpha-n}{n}} \leq \left(\int_D Q(x) \rho(x)^n dx \right)^{\frac{\alpha}{n}} \quad (1)$$

выполнено для любого семейства Γ кривых γ , соединяющих F с ∂G и любой функции $\rho \in adm \Gamma$.

Как известно $cap_{\alpha}(F, G) = M_{\alpha}(\Gamma)$ [16] и приведённое определение может быть записано в виде

$$cap_{\alpha}(\overline{f(F)}, f(G)) \leq (m(f(G) \setminus \overline{f(F)}))^{\frac{n-\alpha}{n}} \left(\int_D Q(x) \rho(x)^n dx \right)^{\frac{\alpha}{n}}, \quad (2)$$

где, как и в предыдущем определении, ρ – допустимая функция для произвольного семейства кривых Γ соединяющих F с ∂G .

Совокупность всех Q_α -гомеоморфизмов области D обозначим $Q_\alpha(D)$.

Далее изучим дифференциальные и метрические свойства отображений из этих классов.

Основные результаты. Теорема 1. Если $1 < \beta < \alpha \leq n$, то $Q_\alpha(D) \subset Q_\beta(D)$.

Доказательство. Воспользуемся неравенством связывающим α -емкости конденсаторов при различных α доказанным в работе [5]

$$\text{cap}_\beta^\alpha(F, G) \leq [m(G \setminus F)]^{\alpha-\beta} \text{cap}_\alpha^\beta(F, G).$$

Выразим из этого неравенства α -емкость

$$\text{cap}_\alpha(\overline{f(F)}, f(G)) \geq \frac{\text{cap}_\beta^{\alpha/\beta}(\overline{f(F)}, f(G))}{[m(f(G) \setminus \overline{f(F)})]^{\alpha/\beta-1}}$$

И результат подставим в определение (2), получим

$$\frac{\text{cap}_\beta^{\alpha/\beta}(\overline{f(F)}, f(G))}{[m(f(G) \setminus \overline{f(F)})]^{\alpha/\beta-1}} \leq (m(f(G) \setminus \overline{f(F)}))^{1-\alpha/n} \left(\int_D Q(x) \rho(x)^n dx \right)^{\alpha/n}.$$

Теперь умножаем обе части неравенства на знаменатель дроби, стоящей в левой части

$$\text{cap}_\beta^{\alpha/\beta}(\overline{f(F)}, f(G)) \leq (m(f(G) \setminus \overline{f(F)}))^{\alpha/\beta-\alpha/n} \left(\int_D Q(x) \rho(x)^n dx \right)^{\alpha/n}.$$

Возводим обе части неравенства в степень β/α и получаем окончательно

$$\text{cap}_\beta(\overline{f(F)}, f(G)) \leq (m(f(G) \setminus \overline{f(F)}))^{n/\beta-1} \left(\int_D Q(x) \rho(x)^n dx \right)^{\beta/n} \quad (3)$$

Таким образом мы показали, что функция удовлетворяющая неравенству (2) удовлетворяет также (3) и утверждение теоремы доказано.

Следствие. Учитывая что Q -гомеоморфизмы в области D образуют семейство функций $Q_n(D)$, то из теоремы 1 следует что все Q_α -гомеоморфизмы при $1 \leq \alpha \leq n$ включают в себя Q -гомеоморфизмы.

Покажем теперь, что в предположении локальной суммируемости функции $Q(x)$ в D

Q_α -гомеоморфизмы при $\alpha > n-1$ дифференцируемы почти всюду в D .

Пусть $x, y \in D$ определим величину

$$L(x, f) = \lim_{y \rightarrow x} \frac{|f(y) - f(x)|}{|y - x|}.$$

Докажем следующую лемму.

Лемма 1. Пусть D – область в R^n , $n \geq 2$ и $f: D \rightarrow R^n$ Q_α -гомеоморфизм $\alpha > n-1$ с $Q(x) \in L_{loc}^1$, тогда почти всюду справедливо неравенство

$$L(x, f) \leq \gamma_n \cdot (\varphi(x))_n^{\frac{1}{n}} (Q(x))_n^{\frac{n-1}{n}}.$$

Доказательство. В произвольной точке $x \in D$ построим конденсатор $A_\varepsilon = (F_\varepsilon, G_\varepsilon)$ лежащий в D , где $G_\varepsilon = \{y: |x-y| < 2\varepsilon\}$, а $F_\varepsilon = \{y: |x-y| \leq \varepsilon\}$. Тогда $f(A_\varepsilon) = (\overline{f(F_\varepsilon)}, f(G_\varepsilon))$ определяет конденсатор в D' образе D при отображении f . Для оценки α -емкости конденсатора $f(A_\varepsilon) = (\overline{f(F_\varepsilon)}, f(G_\varepsilon))$ воспользуемся неравенством полученным в работе [5]

$$\text{cap}_\alpha^{n-1}(\overline{f(F_\varepsilon)}, f(G_\varepsilon)) \geq c \frac{(\text{diam } \overline{f(F_\varepsilon)})^\alpha}{[mf(G_\varepsilon)]^{1-n+\alpha}}.$$

Это неравенство в сочетании с определением (2) позволяет записать следующую цепочку неравенств

$$\frac{\left(\overline{\text{diam} f(F_\varepsilon)}\right)^{\frac{\alpha}{n-1}}}{[mf(G_\varepsilon)]^{\frac{\alpha}{n-1}}} \leq c_1 \cdot \text{cap}_\alpha(f(F_\varepsilon), f(G_\varepsilon)) \leq c_1 \cdot \left(m(f(G) \setminus f(F))\right)^{\frac{n-\alpha}{n}} \left(\int_D Q(x) \rho(x)^n dx\right)^{\frac{\alpha}{n}},$$

где $c_1 = c^{-1/(n-1)}$ – положительная константа. В полученном неравенстве

$$\frac{\left(\overline{\text{diam} f(F_\varepsilon)}\right)^{\frac{\alpha}{n-1}}}{[mf(G_\varepsilon)]^{\frac{\alpha}{n-1}}} \leq c_1 \cdot \left(m(f(G_\varepsilon) \setminus f(F_\varepsilon))\right)^{\frac{n-\alpha}{n}} \left(\int_D Q(x) \rho(x)^n dx\right)^{\frac{\alpha}{n}} \quad (4)$$

положим

$$\rho(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon, & x \in G_\varepsilon \setminus F_\varepsilon \\ 0, & x \notin G_\varepsilon \setminus F_\varepsilon \end{cases}$$

В результате имеем соотношение

$$\frac{\overline{\text{diam} f(F_\varepsilon)}}{\varepsilon} \leq \gamma_n \cdot \left(\frac{m(f(G_\varepsilon) \setminus f(F_\varepsilon))}{m(G \setminus F)}\right)^{\frac{1}{n}} \cdot \left(\frac{1}{m(G \setminus F)} \int_D Q(x) dx\right)^{\frac{n-1}{n}},$$

где γ_n – константа зависящая только от n . Переходя к пределу, получим почти всюду оценку

$$L(x, f) \leq \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\overline{\text{diam} f(F_\varepsilon)}}{\varepsilon} \leq \gamma_n \cdot (\varphi(x))^{\frac{1}{n}} \cdot (Q(x))^{\frac{n-1}{n}}.$$

Под $\varphi(x)$ в этом равенстве понимаем объёмную производную, которая как следует из [2] конечна почти всюду.

Из леммы 1 легко получаются следующие утверждения:

Теорема 2. Пусть D и D' – области в R^n ($n \geq 2$) и $f: D \rightarrow D'$ является Q_α -гомеоморфизмом при $Q \in L^1_{loc}$ и $\alpha > n-1$. Тогда f дифференцируемо почти всюду в D .

Следствие 1. Пусть область D лежит в R^n ($n \geq 2$) и $f: D \rightarrow \overline{R^n}$ является Q_α -гомеоморфизмом с $\alpha > n-1$ и $Q(x) \in L^1_{loc}$, тогда f имеет локально суммируемые производные.

Следствие 2. Пусть область D лежит R^n ($n \geq 2$) и $f: D \rightarrow \overline{R^n}$ является Q_α -гомеоморфизмом с $\alpha > n-1$ и $Q(x) \in L^1_{loc}$. Тогда почти всюду $K_o(x, f) \leq C_n \cdot Q^{n-1}(x)$.

$K_o(x, f)$ как обычно обозначает внешнюю дилатацию отображения f в точках дифференцируемости x

$$K_o(x, f) = \begin{cases} \frac{|f'(x)|^n}{|J(x, f)|}, & |J(x, f)| \neq 0 \\ 1, & |J(x, f)| = 0 \end{cases}.$$

Доказательства теоремы 2 и следствий 1, 2 могут быть осуществлены на основании рассуждений, приведенных в работе [17].

РЕЗЮМЕ

В даній роботі дається ознака нових класів гомеоморфізмів, які є узагальненням квазиконформних відображень. Встановлюється порядок за вкладенням. Доказується диференційовність майже усюди відображень, що належать до цих класів. Наводиться оцінка зверху зовнішньої дилатації.

Ключові слова: гомеоморфізм, квазиконформні відображення, диференційовність майже усюди, локальна інтегрованість, зовнішня дилатація.

SUMMARY

In this work we introduce the new classes of homeomorphisms, which generalize quasiconformal mappings. Their orderliness on inclusion is established. Differentiability almost everywhere of mappings from this classes is proved. The estimation from above outer dilatation is present.

Keywords: homeomorphism, quasiconformal mappings, differentiability almost everywhere, locally enterable, outer dilatation.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Gehring F. W. Rings and quasiconformal mappings in space / F. W. Gehring // Transactions of the American Mathematical Society. – 1962. – Vol. 103. – P. 353-393.
2. Vaisala J. Lectures on n-Dimensional Quasiconformal Mappings, Lecture Notes in Math. 229 / J. Vaisala-Berlin Springer-Verlag, 1971. – 156 p.
3. Сычѳв А. В. Модули и пространственные квазиконформные отображения / А. В. Сычѳв. – Новосибирск: Наука, 1983. – 152 с.
4. Песин И. Н. Отображения квазиконформные в среднем /И. Н. Песин // ДАН СССР 1969. – Т. 187, № 4. – С.740-742.
5. Кругликов В. И. Ёмкости конденсаторов и отображения квазиконформные в среднем/ В. И. Кругликов // Математический сборник. – 1986. – Т. 130, № 2. – С. 185-206.
6. Perovich M. Isolated singularity of the mean quasiconformal mappings / M. Perovich // Lecture Notes in Math. – 1979. – Vol. 743. – P. 212-214
7. Кудьявин В. С. Поведение класса отображений, квазиконформных в среднем, в изолированной особой точке / В. С. Кудьявин // ДАН СССР 1984. – Т. 277, № 5. – С. 1056-1058.
8. Стругов Ю. Ф. О компактности семейств, квазиконформных в среднем / Ю. Ф. Стругов // ДАН СССР. – 1978. – Т. 243, № 4. – С. 859-861.
9. Gehring F. W. Rings and quasiconformal mappings in space / F. W. Gehring // Transactions of the American Mathematical Society. – 1962. – Vol. 103. – P. 353–393.
10. Rickman S. Quasiregular Mappings / S. Rickman. – Berlin: Springer-Verlag, 1993. – 213 p.
11. Решетняк Ю. Г. Пространственные отображения с ограниченным искажением / Ю. Г. Решетняк. – Новосибирск: Наука, СО АН СССР, 1982. – 286 с.
12. Caraman P. n-dimensional quasiconformal mappings / P. Caraman. – Newfoundland: NJ Haessner Publishing, 1974. – 585 p.
13. Q-homeomorphisms / O. Martio, V. Ryazanov, U. Srebro, E. Yakubov // Contemporary Math. – 2004. – Vol. 364. – P. 193-203.
14. On Q-homeomorphisms. / O. Martio, V. Ryazanov, U. Srebro, E. Yakubov // Annales Academiae Scientiarum Fennicae Mathematica. – 2005. – Vol. 30. – №.1. – P. 49-69.
15. On boundary behavior of Q-homeomorphisms / O. Martio, V. Ryazanov, U. Srebro, E. Yakubov // Department of Mathematics University of Helsinki Annual Report. – 2002. – Vol. 318. – P. 1-12.
16. Moduli in Modern Mapping Theory / O. Martio, V. Ryazanov, U. Srebro, E. Yakubov. – Berlin: Springer-Verlag, 2009. – 368 p.
17. Салимов Р. Р. Теория кольцевых Q-отображений в геометрической теории функций / Р. Р. Салимов, Е. А. Севастьянов // Математический сборник. – 2010. – Т. 201, № 6. – С. 131-158.

Поступила в редакцию 22.05.2010 г.

УДК 513.8

**О РАВНОМЕРНЫХ ВРАЩЕНИЯХ ОТНОСИТЕЛЬНО НАКЛОННОЙ
ОСИ ГИРОСТАТА С ПЕРЕМЕННЫМ ГИРОСТАТИЧЕСКИМ МОМЕНТОМ
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ И ГИРОСКОПИЧЕСКИХ СИЛ**

А. А. Возняк, Е. М. Миронова*

**Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского, г. Донецк*

При управлении современными механическими системами (роботами, манипуляторами и др.) широко используются свойства движения подвижных осциллирующих масс. В задачах о движении гиростата с неподвижной точкой применяется подход, использующий переменность гиростатического момента. В данной статье рассмотрена задача о движении гиростата с переменным гиростатическим моментом под действием потенциальных и гироскопических сил. На основе метода интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений найдены условия существования равномерных вращений относительно наклонной оси. Полученные результаты обобщают известные и могут быть применены в управлении стационарными движениями гиростата.

Ключевые слова: гиростат, потенциальные силы, гироскопические силы, гиростатический момент, равномерные вращения, угловая скорость, центр масс, сила тяжести.

Введение. Рассматривается механическая модель, которая называется гиростатом [1]. Предполагается, что гиростатический момент имеет вид $\bar{\lambda}(t) = \lambda(t)\bar{\alpha}$. Единичный вектор $\bar{\alpha}$ неизменно связан с телом-носителем. Следуя статье [2], считаем, что на гиростат действует специальный класс потенциальных и гироскопических сил. Ранее равномерные вращения гиростата относительно наклонной оси рассматривались в задаче о движении гиростата под действием силы тяжести [3-5]. Показано, что класс таких движений значительно шире класса равномерных вращений гиростата с постоянным гиростатическим моментом.

В статье изучены условия существования равномерных вращений гиростата в более общей задаче о движении гиростата под действием потенциальных гироскопических сил. Применен метод исследования прецессионных движений в динамике твердого тела, предложенный в книге [6].

Постановка задачи. Запишем уравнения движения гиростата с переменным гиростатическим моментом под действием потенциальных гироскопических сил [1, 2]

$$A\dot{\bar{\omega}} = A\bar{\omega} \times \bar{\omega} - \dot{\lambda}(t)\bar{\alpha} + \bar{\omega} \times (B\bar{v} - \lambda(t)\bar{\alpha}) + \bar{v} \times (C\bar{v} - \bar{s}), \quad (1)$$

$$\dot{\bar{v}} = \bar{v} \times \bar{\omega}. \quad (2)$$

В уравнениях (1), (2) введены следующие обозначения: $\bar{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ – вектор угловой скорости тела-носителя; $\bar{v} = (v_1, v_2, v_3)$ – единичный вектор, указывающий направление магнитного поля; $A = (A_{ij})$ – тензор инерции гиростата, компоненты которого формируются в зависимости от способа вращения носимых тел [1]; $\bar{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ – единичный вектор, неизменно связанный с телом-носителем; $\bar{s} = (s_1, s_2, s_3)$ – вектор, сонаправленный с вектором обобщенного центра масс гиростата; $B = (B_{ij}), C = (C_{ij})$ – постоянные матрицы третьего порядка; точка над переменными $\bar{\omega}$ и \bar{v} , $\lambda(t)$ обозначает относительную производную по времени.

Уравнения (1), (2) допускают два первых интеграла

$$\bar{v} \cdot \bar{v} = 1, \quad 2(A\bar{\omega} + \lambda(t)\bar{\alpha}) \cdot \bar{v} - (B\bar{v} \cdot \bar{v}) = 2k, \quad (3)$$

где k – произвольная постоянная.

Система (1), (2) не замкнута, так как не задан закон изменения функции $\lambda(t)$.

Пусть гиростат равномерно вращается относительно наклонной оси ℓ , неподвижной в пространстве. Считаем, что ℓ не параллельна вектору \bar{v} . То есть, если $\bar{\gamma} \in \ell$ и $|\bar{\gamma}| = 1$, то угол $\theta_0 \leq (\bar{\gamma}, \bar{v}) \neq 0$. Ось ℓ (и вектор $\bar{\gamma}$) неизменна и в гиростате. Обозначим через \bar{a} вектор, который совпадает с $\bar{\gamma}$. Тогда можно записать

$$\bar{a} \cdot \bar{v} = a_0, \quad (a_0 = \cos \theta_0). \quad (4)$$

Так как гиростат совершает равномерное вращение, то можно записать

$$\bar{\omega} = \omega_0 \bar{a}. \quad (5)$$

Подставив выражение (5) в уравнение (2), получим [6]

$$v_1 = a'_0 \sin \omega_0 t, \quad v_2 = a'_0 \cos \omega_0 t, \quad v_3 = a_0. \quad (6)$$

Выберем систему координат так, чтобы вектор \bar{a} имел вид $\bar{a} = (0, 0, 1)$. Отметим, что соотношения (5), (6) превращают уравнение (2) в тождество. Внесем выражение (5) в уравнение (1) и получим

$$\omega_0^2 (A\bar{a} \times \bar{a}) + \omega_0 \lambda(t) (\bar{a} \times \bar{a}) - \dot{\lambda}(t) \bar{a} + \omega_0 (\bar{a} \times B\bar{v}) + \bar{v} \times (C\bar{v} - \bar{s}) = 0. \quad (7)$$

Считая векторы \bar{a} , \bar{v} , $\bar{a} \times \bar{v}$ независимыми, рассмотрим проекции левой части (7) на эти вектора. Введем обозначения

$$\begin{aligned} 2C_2 &= a_0'^2 (C_{22} - C_{11}), \quad C_2' = a_0'^2 C_{12}, \quad C_1' = a_0' (s_1 - a_0 C_{13}), \quad C_1 = a_0' (s_2 - a_0 C_{23}), \\ 2B_2 &= a_0'^2 \omega_0 (B_{22} - B_{11}), \quad B_2' = a_0'^2 \omega_0 B_{12}, \quad B_1' = a_0' \omega_0 (a_0 B_{13} - \omega_0 a_{13}), \\ B_1 &= a_0' \omega_0 (a_0 B_{23} - \omega_0 A_{23}), \quad 2D_2 = a_0' [\omega_0 (B_{22} - B_{11}) + a_0 (C_{22} - C_{11})], \\ D_2' &= a_0' (\omega_0 B_{12} + a_0 C_{12}), \quad D_1 = a_0 \omega_0 B_{23} + C_{23} (2a_0^2 - 1) - a_0 s_2 - \omega_0^2 A_{23}, \\ D_1' &= a_0 \omega_0 B_{13} + C_{13} (2a_0^2 - 1) - a_0 s_1 - \omega_0^2 A_{13}, \\ 2D_0 &= a_0' \omega_0 (B_{11} + B_{22}) + 2a_0' s_3 + a_0 a_0' (C_{11} + C_{22} - 2C_{33}). \end{aligned} \quad (8)$$

Тогда, в силу обозначений (8) из уравнения (7) получим (выбором подвижной системы координат можно добиться условия $\alpha_2 = 0$)

$$\alpha_3 \dot{\lambda}(t) = C_2 \sin 2\omega_0 t - C_2' \cos 2\omega_0 t - C_1 \sin \omega_0 t + C_1' \cos \omega_0 t, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} &(\alpha_1 a_0' \sin \omega_0 t + \alpha_3 a_0) \dot{\lambda}(t) + a_0' \omega_0 \alpha_1 \lambda(t) \cos \omega_0 t + B_2 \sin 2\omega_0 t - \\ &- B_2' \cos 2\omega_0 t + B_1 \sin \omega_0 t - B_1' \cos \omega_0 t = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} &\alpha_1 \cos \omega_0 t \cdot \dot{\lambda}(t) - \omega_0 \alpha_1 \lambda(t) \sin \omega_0 t + D_2 \cos 2\omega_0 t + \\ &+ D_2' \sin 2\omega_0 t + D_1 \cos \omega_0 t + D_1' \sin \omega_0 t + D_0 = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Условия существования у системы (9) – (11) решения $\lambda(t)$, $\varphi(t)$ и определяют равномерные вращения гири относительно наклонной оси.

Случай 1. $\alpha_3 = 0$. Из уравнения (9) в силу (8) и $\alpha_3 = 0$ имеем

$$C_{11} = C_{22}, \quad C_{12} = 0, \quad s_1 = a_0 C_{13}, \quad s_2 = a_0 C_{23}. \quad (12)$$

Рассмотрим две комбинации уравнений (10) и (11)

$$\begin{aligned} a_0' \omega_0 \lambda(t) &= \cos \omega_0 t (B_2' \cos 2\omega_0 t - B_2 \sin 2\omega_0 t + B_1' \cos \omega_0 t - B_1 \sin \omega_0 t) + \\ &+ a_0' \sin \omega_0 t (D_2 \cos 2\omega_0 t + D_2' \sin 2\omega_0 t + D_1 \cos \omega_0 t + D_1' \sin \omega_0 t + D_0), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} a_0' \dot{\lambda}(t) &= \sin \omega_0 t (B_2' \cos 2\omega_0 t - B_2 \sin 2\omega_0 t + B_1' \cos \omega_0 t - B_1 \sin \omega_0 t) - \\ &+ a_0' \cos \omega_0 t (D_2 \cos 2\omega_0 t + D_2' \sin 2\omega_0 t + D_1 \cos \omega_0 t + D_1' \sin \omega_0 t + D_0). \end{aligned} \quad (14)$$

Подставляя $\lambda(t)$ из соотношения (13) в соотношение (14) и требуя, чтобы полученное равенство было тождеством по t с учетом условий (12) получим окончательные условия существования равномерных вращений гири

$$C_{11} = C_{22}, \quad C_{ij} = 0 \quad (i \neq j), \quad s_2 = s_1 = 0, \quad (15)$$

$$a_0 B_{23} - \omega_0 A_{23} = 0, \quad 2s_3 = 2a_0 (C_{33} - C_{11}) - \omega_0 (B_{11} + B_{22}) = 0.$$

Зависимость $\lambda(t)$ в силу условий (15) упрощается

$$\lambda(t) = a_0' B_{12} \cos \omega_0 t + \frac{a_0'}{2} (B_{11} - B_{22}) \sin \omega_0 t + a_0 B_{13} - \omega_0 A_{13}. \quad (16)$$

Классический случай ($B_{ij} = 0$, $C_{ij} = 0$, $i, j = 1, 2, 3$) приводит на основании равенств (15), (16) к условию $\bar{s} = \bar{0}$, $\lambda(t) = const$ и невозможности существования переменного гири статического момента.

Случай 2. $\alpha_3 \neq 0$. Из уравнения (9) найдем

$$\lambda(t) = \frac{1}{2\alpha_3 \omega_0} (2C_1 \cos \omega_0 t + 2C_1' \sin \omega_0 t - C_2 \cos 2\omega_0 t - C_2' \sin 2\omega_0 t + 2\lambda_*), \quad (17)$$

где λ_* – постоянная.

Подставим выражения (9), (16) в равенства (10) и (11), получим

$$\begin{aligned} & \omega_0(\alpha_1 a'_0 \sin \omega_0 t + \alpha_3 a_0)(C_2 \sin 2\omega_0 t - C'_2 \cos 2\omega_0 t - C_1 \sin \omega_0 t + C'_1 \cos \omega_0 t) + \\ & + a'_0 \omega_0 \alpha_1 \cos \omega_0 t \left(-\frac{C_2}{2} \cos 2\omega_0 t - \frac{C'_2}{2} \sin 2\omega_0 t + C_1 \cos \omega_0 t + C'_1 \sin \omega_0 t + \lambda_*\right) + \\ & + \alpha_3 \omega_0 (B_2 \sin 2\omega_0 t - B'_2 \cos 2\omega_0 t + B_1 \sin \omega_0 t - B'_1 \cos \omega_0 t) = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & \alpha_1 \omega_0 \cos \omega_0 t (C_2 \sin 2\omega_0 t - C'_2 \cos 2\omega_0 t - C_1 \sin \omega_0 t + C'_1 \cos \omega_0 t) - \\ & - \alpha_1 \omega_0 \sin \omega_0 t \left(-\frac{C_2}{2} \cos 2\omega_0 t - \frac{C'_2}{2} \sin 2\omega_0 t + C_1 \cos \omega_0 t + C'_1 \sin \omega_0 t + \lambda_*\right) + \\ & + \alpha_3 \omega_0 (D_2 \cos 2\omega_0 t + D'_2 \sin 2\omega_0 t + D_1 \cos \omega_0 t + D'_1 \sin \omega_0 t + D_0) = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Уравнения (18), (19) должны быть тождествами по t . Это требование приводит к двум различным случаям существования равномерных вращений гири относительно наклонной оси.

В первом случае выполняются условия

$$\begin{aligned} & \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = 0, \quad \alpha_3 = 1, \quad C_{23} = C_{13} = 0, \\ & \omega_0^2 A_{23} - a_0 \omega_0 B_{23} + a_0 s_2 = 0, \quad \omega_0^2 A_{13} - a_0 \omega_0 B_{13} + a_0 s_1 = 0, \\ & \omega_0 (B_{22} - B_{11}) + a_0 (C_{22} - C_{11}) = 0, \quad \omega_0 B_{12} + a_0 C_{12} = 0, \\ & 2s_3 = a_0 (2C_{33} - C_{11} - C_{22}) - \alpha_0 (B_{11} + B_{22}), \end{aligned} \quad (20)$$

а зависимость $\lambda(t)$ из (17) имеет вид

$$\lambda(t) = \frac{1}{\omega_0} \left(\frac{a_0'^2}{4} (C_{11} - C_{22}) \cos 2\omega_0 t - \frac{a_0'^2}{2} C_{12} \sin 2\omega_0 t + a_0' s_2 \cos \omega_0 t + a_0' s_1 \sin \omega_0 t + \lambda_* \right). \quad (21)$$

Во втором случае имеют место следующие ограничения на параметры

$$\begin{aligned} & C_{11} = C_{22}, \quad C_{ij} = 0 \quad (i \neq j), \\ & \alpha_1 s_1 - \frac{\omega_0}{2} \alpha_3 (B_{11} - B_{22}) = 0, \quad \alpha_1 s_2 - \omega_0 \alpha_3 B_{12} = 0, \\ & a_0 s_2 + \omega_0 (\omega_0 A_{23} - a_0 B_{23}) = 0, \quad \lambda_* = \frac{\alpha_3}{\alpha_1} (\omega_0 (a_0 B_{13} - \omega_0 A_{13}) - a_0 s_1), \\ & 2s_3 = 2a_0 (C_{33} - C_{11}) - \omega_0 (B_{11} + B_{22}). \end{aligned} \quad (22)$$

В силу условий (22) и обозначений (8) из формулы (16) получим

$$\lambda(t) = \frac{1}{\alpha_3 \omega_0} (a_0' s_2 \cos \omega_0 t - a_0' s_1 \sin \omega_0 t + \lambda_*). \quad (23)$$

Поскольку вариант (21), (22) получен при условии $\alpha_1 \neq 0$, то из формул (22), (23) вытекает, что этот вариант для классического случая ($B_{ij} = 0, C_{ij} = 0 \quad i, j = 1, 2, 3$) приводит к случаю постоянного гири статического момента.

Рассмотрим классическую задачу для случая (20), (21). Из первых трех равенств вытекает $\bar{\alpha} = \bar{a}$. Остальные условия дают

$$\omega_0^2 A_{23} + a_0 s_2 = 0, \quad \omega_0^2 A_{13} + a_0 s_1 = 0, \quad s_3 = 0. \quad (24)$$

Из соотношений (24) при $a_0 = 0$ следует, что ось равномерного вращения является главной. Функцию $\lambda(t)$ можно найти из формулы (21)

$$\lambda(t) = (a_0' s_2 \cos \omega_0 t + a_0' s_1 \sin \omega_0 t + \lambda_*) / \omega_0. \quad (25)$$

Условие $s_3 = 0$ показывает, что центр гири статических масс находится в главной плоскости эллипсоида инерции, то есть $\bar{s} \cdot \bar{a} = 0$.

В случае $a_0 \neq 0$ ($\theta_0 \neq \pi/2$) координаты s_1, s_2 центра масс примут конкретные значения, а ось вращения не будет являться главной осью эллипсоида инерции. Таким образом, вращение вокруг главной оси при $\bar{s} \neq 0$ может быть только в случае, если эта ось горизонтальна. Применение системы координат, связанной с вектором \bar{a} позволяет значительно упростить доказательства многих факторов [3]. Например, из системы (24) вытекает, что для любого по распределению масс гири статических (то есть для любых значений тензора инерции гири статических) координаты центра масс s_1, s_2 выбираются однозначно (при $a_0 \neq 0$).

Рассмотрим условия (20), (21) и (22), (23). Если случай (20), (21) может переходить в классический случай, то случай (22), (23) не имеет аналога в задаче о движении гири под действием силы тяжести. Пусть в системе (20) $\theta_0 = \pi/2$. Тогда должны выполняться условия

$$A_{13} = A_{23} = 0, B_{12} = 0, B_{22} = B_{11}, s_3 = -\omega_0 B_{11}. \quad (26)$$

Из (26) следует, что ось равномерного вращения является главной осью эллипсоида инерции. Параметры s_1, s_2 принимают произвольные значения. Для условий (22) вариант $\theta_0 = \pi/2$ существенных упрощений не приносит. Если выполнены условия

$$A_{13} = A_{23} = 0, B_{ij} = 0 \ (i, j = 1, 2, 3), s_3 = 0, a_0 = 0, C_{22} \neq C_{11}, C_{12} \neq 0, \quad (27)$$

то равномерные вращения относительно горизонтальной оси могут происходить с произвольной угловой скоростью. Вектор гири статического момента направлен по оси, параллельной оси вращения, а зависимость $\lambda(t)$ можно найти из формулы (21)

$$\lambda(t) = \frac{1}{\omega_0} \left(\frac{1}{4} (C_{11} - C_{22}) \cos 2\omega_0 t - \frac{1}{2} C_{12} \sin 2\omega_0 t + \lambda_* \right).$$

Отметим, что аналогичные движения с произвольной угловой скоростью для варианта (22) невозможны. Однако интерес случая (22), (23) состоит в том, что он возможен для произвольных значений θ_0 , то есть в случае, когда в системе (22) выполняются условия $A_{23} = 0, s_2 = \omega_0 B_{23}, C_{33} = C_{11}$. Ось вращения гири является главной, матрица C в уравнение (1) не входит. Но матрица B в уравнении (1) может считаться не нулевой, а значение λ_* в формуле (23) может принимать произвольные значения.

Выводы. В статье изучены условия существования равномерных вращений относительно наклонной оси гири в двух случаях. Первый случай характеризуется свойством, что вектор гири статического момента ортогонален вектору равномерного вращения. Во втором случае вектор гири статического момента коллинеарен вектору равномерного вращения. Дан анализ механических условий на параметры в указанных случаях.

РЕЗЮМЕ

При управлінні сучасними механічними системами (роботами, маніпуляторами тощо) широко використовуються властивості руху рухомих осцилюючих мас. У задачах про рух гіростата з нерухомою точкою застосовується підхід, який використовує змінність гіростатичного моменту. У даній статті розглянута задача про рух гіростата зі змінним гіростатичним моментом під дією потенційних і гіроскопічних сил. На основі методу інтегрування звичайних диференціальних рівнянь знайдені умови існування рівномірних обертань щодо похилої осі. Отримані результати узагальнюють відомі та можуть бути застосовані в управлінні стаціонарними рухами гіростата.

Ключові слова: гіростат, потенційні сили, гіроскопічні сили, гіростатичний момент, рівномірні обертання, кутова швидкість, центр мас, сила тяжіння.

SUMMARY

In the management of modern mechanical systems (robots, manipulators, etc.) are widely used properties of the motion of moving the oscillating masses. The problem of motion gyrostat with a fixed point approach is used, variable gyrostatic moment. In this paper we consider the motion gyrostat with variable gyrostatic moment under the influence of potential and gyroscopic forces. Based on the method of integrating ordinary differential equations are found conditions for the existence of uniform rotation about an inclined axis. The obtained results generalize the known ones and can be applied in the management of steady motion gyrostat.

Keywords: gyrostat, potential forces, gyroscopic forces, gyrostatic moment, uniform rotation, angular velocity, center of mass, gravity.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Харламов П. В. Об уравнениях движения системы твердых тел / П. В. Харламов // Механика твердого тела. – 1972. – Вып. 4. – С. 52-73.
2. Yehia H. M. On the motion of a rigid body acted upon by potential and gyroscopic forces I: The equations of motion and their transformations. / H. M. Yehia // J. Mecan. Theor. Appl. – 1986. – Vol. 5, No 5. – P. 742-754.
3. Волкова О. С. Равномерные вращения вокруг наклонной оси твердого тела, несущего маховик / О. С. Волкова // Механика твердого тела. – 2008. – Вып. 38. – С. 80-86.
4. Дружинин Э. И. О перманентных вращениях уравновешенного неавтономного гири / Э. И. Дружинин // Прикладная математика и механика. – 1999. – Т. 63, вып. 5. – С. 825-828.
5. Ковалева Л. М. Равномерные вращения вокруг наклонной оси твердого тела с одним маховиком / Л. М. Ковалева, Е. В. Позднякович // Механика твердого тела. – 2000. – Вып. 30. – С. 100-105.
6. Горр Г. В. Прецессионные движения в динамике твердого тела и динамике систем, связанных твердых тел / Г. В. Горр, А. В. Мазнев, Е. К. Щетинина. – Донецк: ДонНУ, 2009. – 222 с.

Поступила в редакцию 20.05.2010 г.

УДК 531.38

ОБ ОДНОМ КЛАССЕ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

А. В. Зыза

В работе исследуются специальные классы полиномиальных решений уравнений задачи о движении гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона. Условия существования этого класса получены в виде системы алгебраических уравнений на параметры задачи и параметры решения. Построено новое частное решение уравнений движения гироскопа, которое зависит от шести независимых параметров.

Ключевые слова: полиномиальное решение, первые интегралы, гиростат, инвариантное соотношение, эффект Барнетта-Лондона, элементарные функции времени, максимальная степень полинома.

Введение. Классическая задача о движении гиростата в поле силы тяжести [1] имеет многочисленные обобщения в динамике твердого тела [2]. Особый интерес представляет задача о движении гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона [3-5], поскольку уравнения движения допускают только два первых интеграла и к ним неприменима теория Якоби интегрирования уравнений динамики [1]. В связи с этим проводятся исследования по построению частных решений различных классов [6-8].

В данной работе продолжено изучение полиномиальных решений класса Докшевича [9] уравнений движения гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона. Полученные результаты дополняют классы полиномиальных решений вида Стеклова-Ковалевского-Горячева [1] уравнений динамики твердого тела, рассмотренные в работах [7, 10].

Постановка задачи. Рассмотрим движение гиростата с неподвижной точкой в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона. Эффект Барнетта-Лондона состоит в том, что первоначально немагнитные и сверхпроводящие твердые тела при движении в магнитном поле намагничиваются вдоль оси вращения. Возникающая при вращении намагниченность линейно зависит от угловой скорости тела. Магнитный момент тела при взаимодействии с внешним магнитным полем будет стремиться к направлению вектора напряженности магнитного поля. При этом взаимодействие вызванной вращением тела намагниченности с внешним магнитным полем приводит к прецессии вектора кинетического момента тела вокруг вектора поля [3-5].

Следуя работам [3, 4], запишем уравнения движения гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона

$$A\dot{\omega} = (A\omega + \lambda) \times \omega + B\omega \times \nu + \nu \times (C\nu - s), \quad \dot{\nu} = \nu \times \omega. \quad (1)$$

Первые интегралы уравнений (1) таковы

$$\nu \cdot \nu = 1, \quad (A\omega + \lambda) \cdot \nu = k. \quad (2)$$

Изменение полной энергии гиростата определяется соотношением

$$\left[(A\omega \cdot \omega) - 2(s \cdot \nu) + (C\nu \cdot \nu) \right]' = 2(B\omega \times \nu) \cdot \omega, \quad (3)$$

поэтому уравнения (1) не имеют интеграла энергии.

В уравнениях (1)-(3) приняты обозначения: A – тензор инерции гиростата; ω – угловая скорость гиростата; ν – единичный вектор, характеризующий направление магнитного поля; λ – гиростатический момент; s – вектор обобщенного центра масс; B и C – симметричные матрицы третьего порядка; k – постоянная интеграла; точка над переменными обозначает относительную производную. Поскольку для уравнений (1) в общем случае допустимы только два первых интеграла (2), то для этих дифференциальных уравнений неприменима теория последнего множителя Якоби [1]. Если же для динамического уравнения из (1) имеет место равенство $B = \alpha E$ (E – единичная матрица), то из соотношения (3) вытекает интеграл энергии для уравнений (1). Тогда уравнения (1) будут описывать задачу о движении гиростата в поле потенциальных и гироскопических сил.

Пусть в (1), (2) матрицы A, B, C имеют диагональный вид, $\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$, $\nu = (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$, $s = (s_1, s_2, s_3)$, $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$. Тогда уравнения движения (1) и интегралы (2) запишем в виде

$$\left. \begin{aligned} A_1 \dot{\omega}_1 &= (A_2 - A_3) \omega_2 \omega_3 + \lambda_2 \omega_3 - \lambda_3 \omega_2 + B_2 \omega_2 \nu_3 - B_3 \omega_3 \nu_2 + s_2 \nu_3 - s_3 \nu_2 + (C_3 - C_2) \nu_2 \nu_3, \\ A_2 \dot{\omega}_2 &= (A_3 - A_1) \omega_1 \omega_3 + \lambda_3 \omega_1 - \lambda_1 \omega_3 + B_3 \omega_3 \nu_1 - B_1 \omega_1 \nu_3 + s_3 \nu_1 - s_1 \nu_3 + (C_1 - C_3) \nu_1 \nu_3, \\ A_3 \dot{\omega}_3 &= (A_1 - A_2) \omega_1 \omega_2 + \lambda_1 \omega_2 - \lambda_2 \omega_1 + B_1 \omega_1 \nu_2 - B_2 \omega_2 \nu_1 + s_1 \nu_2 - s_2 \nu_1 + (C_2 - C_1) \nu_1 \nu_2; \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$\dot{v}_1 = \omega_3 v_2 - \omega_2 v_3, \quad \dot{v}_2 = \omega_1 v_3 - \omega_3 v_1, \quad \dot{v}_3 = \omega_2 v_1 - \omega_1 v_2; \quad (5)$$

$$v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = 1, \quad (A_1 \omega_1 + \lambda_1) v_1 + (A_2 \omega_2 + \lambda_2) v_2 + (A_3 \omega_3 + \lambda_3) v_3 = k. \quad (6)$$

Поставим задачу об исследовании условий существования у уравнений (4), (5) при $s_3 = 0, \lambda_3 = 0$ решений следующего вида

$$\omega_1 = p, \quad \omega_2 = Q(p) = \sum_{k=0}^n b_k p^k, \quad \omega_3^2 = R(p) = \sum_{i=0}^m c_i p^i, \quad v_1 = \varphi(p) = \sum_{j=0}^l a_j p^j, \quad (7)$$

$$v_2 = \psi(p) = \sum_{i=0}^{m_1} g_i p^i, \quad v_3 = r\kappa(p), \quad \kappa(p) = \sum_{j=0}^{m_1} f_j p^j,$$

где n, m, l, n_1, m_1 – натуральные числа или нули; b_k, c_i, a_j, g_i, f_j – неизвестные постоянные.

Указанным классом полиномов можно описать решение Докшевича [9]. Подставим выражения (7) в уравнения (4), (5) и геометрический интеграл из (6)

$$\dot{p} = (\varphi'(p))^{-1} (\psi(p) - Q(p)\kappa(p)) \sqrt{R(p)}; \quad (8)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi'(p)(\psi(p) - Q(p)\kappa(p)) &= \varphi'(p)(p\kappa(p) - \varphi(p)), \\ (R(p)\kappa^2(p))' (p\kappa(p) - \varphi(p)) &= 2\psi'(p)\kappa(p)(Q(p)\varphi(p) - p\psi(p)); \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} A_1(p\kappa(p) - \varphi(p)) &= \psi'(p)[Q(p)((A_2 - A_3) + B_2\kappa(p)) + \\ &+ \psi(p)((C_3 - C_2)\kappa(p) - B_3) + s_2\kappa(p) + \lambda_2]; \end{aligned} \quad (10)$$

$$\left. \begin{aligned} A_2 Q'(p)(p\kappa(p) - \varphi(p)) &= \psi'(p)[(C_1 - C_3)\kappa(p)\varphi(p) + B_3\varphi(p) - \\ &- B_1 p\kappa(p) - s_1\kappa(p) + (A_3 - A_1)p - \lambda_1], \\ A_3 R'(p)(p\kappa(p) - \varphi(p)) &= 2\psi'(p)[(C_2 - C_1)\varphi(p)\psi(p) + B_1\psi(p)p - \\ &- B_2 Q(p)\varphi(p) + (A_1 - A_2)pQ(p) + \lambda_1 Q(p) - \lambda_2 p + s_1\psi(p) - s_2\varphi(p)]; \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

$$\varphi^2(p) + \psi^2(p) + \kappa^2(p)R(p) = 1. \quad (12)$$

Здесь $A_i, B_i, C_i (i = \overline{1,3})$ – диагональные элементы матриц A, B, C ; штрихом обозначена производная по вспомогательной переменной p . Уравнение (8) устанавливает зависимость p от времени t .

Новое частное решение. Рассмотрим случай когда максимальные степени полиномов из (7) таковы: $n = 2, m = 2, l = 3, n_1 = 2, m_1 = 2$. Тогда полиномы из (7) примут вид

$$\begin{aligned} Q(p) &= b_2 p^2 + b_1 p + b_0, \quad R(p) = c_2 p^2 + c_1 p + c_0, \\ \varphi(p) &= a_3 p^3 + a_2 p^2 + a_1 p + a_0, \quad \psi(p) = g_2 p^2 + g_1 p + g_0, \quad \kappa(p) = f_2 p^2 + f_1 p + f_0. \end{aligned} \quad (13)$$

Подставим полиномы из (13) в динамическое уравнение (10). Требование того, чтобы полученное соотношение было тождеством по p приводит к условиям на параметры. Выпишем часть этих условий

$$\alpha = C_3 - C_2, \quad \alpha g_2 + B_2 b_2 = 0, \quad \alpha g_1 + B_2 b_1 = 0. \quad (14)$$

Тогда в силу (14) динамическое уравнение (10) примет вид

$$(p\kappa(p) - \varphi(p)) = A_1^{-1} \psi'(p) (D_2 p^2 + D_1 p + D_0), \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} D_2 &= (A_2 - A_3)b_2 - B_3 g_2 + f_2(s_2 + \alpha g_0 + B_2 b_0), \\ D_1 &= (A_2 - A_3)b_1 - B_3 g_1 + f_1(s_2 + \alpha g_0 + B_2 b_0), \\ D_0 &= (A_2 - A_3)b_0 - B_3 g_0 + f_0(s_2 + \alpha g_0 + B_2 b_0) + \lambda_2. \end{aligned} \quad (16)$$

Исключим из уравнений (9), (11) разность $(p\kappa(p) - \varphi(p))$ с помощью формулы (15). Подставим в полученные уравнения и уравнения (12), (15) полиномы из (13), и потребуем их выполнения при всех p . После преобразований получим систему условий на параметры задачи и параметры решения

$$\begin{aligned} C_1 &= C_3, \quad A_1(f_2 - a_3) = 2g_2 D_2, \quad A_1(f_1 - a_2) = 2g_2 D_1 + g_1 D_2, \\ A_1(f_0 - a_1) &= 2g_2 D_0 + g_1 D_1, \quad -A_1 a_0 = g_1 D_0, \quad -A_1 b_2 f_2 = 3a_3 D_2, \\ -A_1(b_2 f_1 + b_1 f_2) &= 3a_3 D_1 + 2a_2 D_2, \quad A_1(g_2 - (b_2 f_0 + b_1 f_1 + b_0 f_2)) = 3a_3 D_0 + 2a_2 D_1 + a_1 D_2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_1(g_0 - b_0 f_0) &= a_1 D_0, \quad A_1(g_1 - (b_1 f_0 + b_0 f_1)) = 2a_2 D_0 + a_1 D_1, \\
 A_1^{-1}[(4c_2 f_1 + 5c_1 f_2)D_2 + 6c_2 f_2 D_1] &= 2(b_2 a_2 + b_1 a_3), \\
 A_1^{-1}[(2c_2 f_0 + 3c_1 f_1 + 4c_0 f_2)D_2 + (4c_2 f_1 + 5c_1 f_2)D_1 + 6c_2 f_2 D_0] &= \\
 &= 2(b_2 a_1 + b_1 a_2 + b_0 a_3 - g_2), \\
 A_1^{-1}[(c_1 f_0 + 2c_0 f_1)D_2 + (2c_2 f_0 + 3c_1 f_1 + 4c_0 f_2)D_1 + (4c_2 f_1 + 5c_1 f_2)D_0] &= \\
 &= 2(b_2 a_0 + b_1 a_1 + b_0 a_2 - g_1), \quad A_1^{-1}D_0(c_1 f_0 + 2c_0 f_1) = 2b_0 a_0, \\
 A_1^{-1}[(c_1 f_0 + 2c_0 f_1)D_1 + (2c_2 f_0 + 3c_1 f_1 + 4c_0 f_2)D_0] &= 2(b_1 a_0 + b_0 a_1 - g_0), \\
 2A_2 A_1^{-1} b_2 D_2 = B_3 a_3 - B_1 f_2, \quad A_2 A_1^{-1}(D_2 b_1 + 2b_2 D_1) &= B_3 a_2 - B_1 f_1 - s_1 f_2, \\
 A_2 A_1^{-1}(D_1 b_1 + 2b_2 D_0) &= B_3 a_1 - B_1 f_0 - s_1 f_1 + (A_3 - A_1), \\
 A_2 A_1^{-1} D_0 b_1 &= B_3 a_0 - s_1 f_0 - \lambda_1, \\
 A_3 A_1^{-1} c_2 D_2 &= (A_1 - A_2) b_2 - (\alpha g_0 + B_2 b_0) a_3 - s_2 a_3 + B_1 g_2, \\
 A_3 A_1^{-1}(D_2 c_1 + 2c_2 D_1) &= 2[(A_1 - A_2) b_1 - (\alpha g_0 + B_2 b_0) a_2 + \lambda_1 b_2 + s_1 g_2 - s_2 a_2 + B_1 g_1], \\
 A_3 A_1^{-1}(D_1 c_1 + 2c_2 D_0) &= 2[(A_1 - A_2) b_0 - (\alpha g_0 + B_2 b_0) a_1 + \lambda_1 b_1 + s_1 g_1 - \lambda_2 - s_2 a_1 + B_1 g_0], \\
 A_3 A_1^{-1} D_0 c_1 &= 2[\lambda_1 b_0 - (\alpha g_0 + B_2 b_0) a_0 + s_1 g_0 - s_2 a_0], \\
 a_0^2 + g_0^2 + c_0 f_0^2 &= 1.
 \end{aligned} \tag{17}$$

Система алгебраических уравнений (14), (16), (17) разрешима относительно параметров $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$. При этом получим

$$\begin{aligned}
 b_1 &= 0, \quad c_1 = 0, \quad g_1 = 0, \quad f_1 = 0, \quad a_2 = 0, \quad a_0 = 0, \quad \lambda_1 = 0, \quad s_1 = 0, \\
 \alpha &= B_2 (B_1 (3A_2 - 2A_3) + B_3 (2A_1 - 3A_2)) (2A_2 (A_1 - A_3))^{-1}, \\
 g_2 &= 2(A_1 - A_3)^3 \sqrt{k} / \left((3A_2 - 2A_3)^2 (B_1 - B_3)^2 [B_1 (3A_2 - 2A_3) + B_3 (2A_1 - 3A_2)] \right), \\
 g_0 &= -(B_1 [3A_1 (A_2 - 2A_3) + A_3 (3A_2 + 2A_3)] + B_3 (2A_1 - 3A_2) (3A_1 - A_3)) / \sqrt{k}, \\
 c_2 &= -(3A_2 - 2A_1)^2 (3A_2 - 2A_3)^{-2}, \\
 c_0 &= \left[3A_2 (2A_1 - 3A_2)^2 (B_1 - B_3)^3 (B_1 (3A_2 - 4A_3) + B_3 (4A_1 - 3A_2)) \right] / \left(k (A_1 - A_3)^2 \right), \\
 b_2 &= -(A_1 - A_3)^2 \sqrt{k} \left(A_2 (3A_2 - 2A_3)^2 (B_1 - B_3)^2 \right)^{-1}, \\
 b_0 &= (B_1 - B_3) (B_1 (3A_1 (A_2 - 2A_3) + A_3 (3A_2 + 2A_3)) + B_3 (2A_1 - 3A_2) (3A_1 - A_3)) \cdot \\
 &\quad \cdot \left((A_1 - A_3) \sqrt{k} \right)^{-1}, \\
 f_2 &= -2(A_1 - A_3)^4 k \left(3A_2 (2A_1 - 3A_2) (3A_2 - 2A_3)^2 (B_1 - B_3)^4 \cdot \right. \\
 &\quad \left. \cdot [B_1 (3A_2 - 2A_3) + B_3 (2A_1 - 3A_2)] \right)^{-1}, \\
 a_3 &= 2(A_1 - A_3)^4 k \left(3A_2 (3A_2 - 2A_3)^3 (B_1 - B_3)^4 [B_1 (3A_2 - 2A_3) + B_3 (2A_1 - 3A_2)] \right)^{-1}, \\
 a_1 &= f_0 = (A_3 - A_1) (B_1 - B_3)^{-1}, \\
 \lambda_2 &= \left(B_1^2 [(A_3 - A_2) (27A_2^2 - 24A_2 A_3 - 4A_3^2) + A_1 (15A_2^2 - 36A_2 A_3 + 20A_3^2)] \right) + \\
 &+ 2B_1 B_3 \left[A_1 (18A_1 A_2 - 16A_1 A_3 + 34A_2 A_3 - 39A_2^2) + A_2 (27A_2^2 - 27A_2 A_3 + 4A_3^2) \right] + \\
 &+ B_3^2 (2A_1 - 3A_2) [3(A_1 - A_2) (2A_1 - 3A_2) + (2A_1 - A_2) A_3] \left(2\sqrt{k} (A_3 - A_1) \right)^{-1}, \\
 s_2 &= \left\{ B_1^2 \left[A_2 (9B_1 A_2 ((A_2 - A_3) (3A_2 - 2A_3) + A_1 (2A_3 - A_2))) - 8B_1 A_1 A_3^2 \right] \right. + \\
 &+ B_2 \left\{ A_3^2 ((2A_3 + 3A_2) (2A_3 - A_2) + 4A_1 (3A_1 + 2A_2 - 4A_3)) + 3A_1^2 A_2 (A_2 - 4A_3) \right\} \left. \right\} + \\
 &+ B_3^2 \left[A_2 (-9B_3 A_2 ((A_2 - A_1) (3A_2 - 2A_1) + A_3 (2A_1 - A_2))) + 8B_3 A_1^2 A_3 \right] + \\
 &+ B_2 \left\{ A_1^2 (4(A_3 - A_1) (A_3 - 3A_1) + A_2 (9A_2 - 24A_1 + 32A_3)) \right\} +
 \end{aligned} \tag{18}$$

$$+A_2A_3(3A_2(A_3 - A_1) - A_1(9A_2 + 8A_3))\} + B_1B_3A_2[9A_2^2(B_1(7A_1 + 11A_3) - B_3(11A_1 + 7A_3)) + \\ + 18A_2(B_3(2A_1^2 + A_3^2) - B_1(A_1^2 + 2A_3^2)) + 8A_1A_3(B_1(A_1 + 2A_3) - B_3(2A_1 + A_3)) + \\ + 27(B_3 - B_1)A_2(3A_2^2 + 2A_1A_3)] + 4B_1B_2B_3(A_1^2(2A_3(2A_2 - 3A_1 + 4A_3) + 3A_2(A_1 - A_2)) + \\ + A_3^2(2A_3(A_2 - A_1) - 9A_1A_2) + 3A_1A_2^2A_3)\}(2A_2(A_1 - A_3)^2\sqrt{k})^{-1}.$$

Здесь

$$k = (B_1(3A_2 - 2A_3) + B_3(2A_1 - 3A_2))\left(B_1[-2A_3(3A_1 - A_3)^2 + 3A_1A_2(5A_1 - 12A_2 + 10A_3) + \\ + 9A_2(A_2 - A_3)(3A_2 + A_3)] + B_3[3(2A_1 - 3A_2)(3A_1^2 - 4A_1A_2 + 3A_2^2) - \\ - A_3(2A_1(6A_1 - 9A_2 - A_3) + 3A_2A_3)]\right).$$

Из (18) вытекает, что одним из условий существования действительных значений параметров решения (7), (13) является система неравенств

$$(B_1 - B_3)(B_1(3A_2 - 4A_3) + B_3(4A_1 - 3A_2)) > 0, \quad k > 0. \quad (19)$$

Покажем, что примером действительности решения (7), (13) уравнений (8)-(11) при наличии равенств (18) и системы (19) могут служить следующие условия $A_1 = a$, $A_2 = 1,5a$, $A_3 = 2a$, $B_1 = b$, $B_2 = 2b$, $B_3 = 3b$, ($a > 0$, $b > 0$).

Тогда параметры задачи и решение (7) примут вид

$$\delta = \sqrt{1141}, \quad \alpha = \frac{14b^2}{3a}, \quad C_1 = C_3, \quad \lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -195b(2\delta)^{-1}, \quad s_1 = 0, \quad s_2 = -529b^2(3\delta a)^{-1}; \quad (20)$$

$$\xi = \frac{a}{b}, \quad \omega_1 = p, \quad \omega_2 = -3^{-1}\delta\xi p^2 + 8(\delta\xi)^{-1}, \quad \omega_3^2 = -25(p^2 - 180(\delta\xi)^{-2}), \\ v_1 = -2^{-1}\xi p\left(\frac{163}{9}\xi^2 p^2 + 1\right), \quad v_2 = 7^{-1}\delta\xi^2 p^2 - 4\delta^{-1}, \quad v_3 = -2^{-1}\xi\left(\frac{163}{45}\xi^2 p^2 + 1\right)\omega_3. \quad (21)$$

Так как функция $p(t)$ находится из уравнения

$$\dot{p} = 9^{-1}\delta\xi\sqrt{-p^2 + 180(\delta\xi)^{-2}} \cdot p^2, \quad (22)$$

где $|p| \leq 6\sqrt{5}(\delta\xi)^{-1}$ то действительность в данном примере показана.

В этом решении остается свободный параметр ξ , который является масштабной единицей и его можно устранить переходом к безразмерным величинам.

Сведем решение (20)-(22) к квадратурам. Дифференциальное уравнение (22) запишем так

$$dt = 9(\delta\xi)^{-1} \frac{dp}{p^2\sqrt{180(\delta\xi)^{-2} - p^2}} \quad (23)$$

Решение уравнения (23) дает зависимость p от времени

$$p^2 = 180 / \left(400(t - c)^2 + (\delta\xi)^2\right), \quad c \in R. \quad (24)$$

Это позволяет получить зависимость от времени всех переменных задачи.

Выводы. Решение (20), (21), (24) выражается через элементарные функции времени и характеризуется одним инвариантным соотношением, устанавливающим линейную зависимость между второй компонентой вектора угловой скорости гиростата и второй компонентой единичного вектора \mathbf{V} . Полученное решение является новым частным решением, которое не имеет аналога в задаче о движении тяжелого гиростата и в задаче о движении гиростата под действием потенциальных и гироскопических сил.

РЕЗЮМЕ

У роботі досліджується спеціальний клас поліноміальних розв'язків рівнянь задачі про рух гіростата у магнітному полі з врахуванням ефекту Барнетта-Лндона. Умови існування цього класу отримані у вигляді системи алгебраїчних рівнянь на параметри задачі і параметри розв'язка. Побудовано новий частинний розв'язок рівнянь руху гіростата, який залежить від шести незалежних параметрів.

Ключові слова: поліноміальний розв'язок, перші інтеграли, гіростат, інваріантне співвідношення, ефект Барнетта-Лндона, елементарні функції часу, максимальна степеь полінома.

SUMMARY

The paper deals with a special class of polynomial solutions of equations of the task about a gyrostat movement in a magnetic field with the allowance for the Barnett-London effect. The conditions of this class existence have been obtained in the form of algebraic equations for task and solution parameters. A new private solution of the gyrostat movement equation has been built which depends on six independent parameters.

Key words: polynomial solution, first integrals, gyrostat, invariant correlation, Barnett-London effect, elementary time functions, maximum degree of a polynomial.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРЫ

1. Харламов П. В. Лекции по динамике твердого тела / П.В. Харламов. – Новосибирск: Изд-во Новосибир. ун-та, 1965. – 221 с.
2. Горр Г. В. Динамика гиростата, имеющего неподвижную точку / Г. В. Горр, А. В. Мазнев. – Донецк: ДонНУ, 2010. – 364 с.
3. Самсонов В. А. О вращении твердого тела в магнитном поле / В. А. Самсонов // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 1984. – № 4. – С. 32-34.
4. Козлов В. В. К задаче о вращении твердого тела в магнитном поле / В. В. Козлов // Изв.РАН. Механика твердого тела. – 1985. – № 6. – С. 28-33.
5. Урман Ю. Н. Динамические эффекты, обусловленные вращательным движением сверхпроводника в магнитном подвесе / Ю. Н. Урман // Докл. АН СССР. – 1984. – Т. 276, № 6. – С. 1402-1404.
6. Миронова Е. Н. О решении уравнений движения тела в магнитном поле на основе полиномиальных решений / Е. Н. Миронова // Прикл. механика. – 2001. – 37, № 2. – С. 105-113.
7. Зыза А. В. Об одном классе полиномиальных решений уравнений Кирхгофа / А. В. Зыза // Вісник Донецького університету. Сер.А: Природничі науки. – 2006. – № 1. – С. 40-46.
8. Зыза А. В. О новом классе полиномиальных решений уравнений движения гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона / А. В. Зыза // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2010. – № 1. – С. 52-56.
9. Докшевич А. И. Новое частное решение уравнений движения гиростата, имеющего неподвижную точку / А. И. Докшевич // Механика твердого тела. – 1970. – Вып. 2. – С. 12-15.
10. Горр Г. В. Полиномиальные решения в одной задаче о движении гиростата с неподвижной точкой / Г. В. Горр, А. В. Зыза // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 1998. – № 6. – С. 12-21.

Поступила в редакцию 16.05.2010 г.

УДК 531.38

НОВЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ГРИОЛИ–ПУАССОНА В СЛУЧАЕ ИНВАРИАНТНОГО СООТНОШЕНИЯ

Е. К. Щетинина

Донецкий университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского, г. Донецк

Выполнено интегрирование дифференциальных уравнений Гриоли–Пуассона в случае, когда они допускают одно инвариантное соотношение, которое является линейным по компонентам кинетического момента и нелинейным по компонентам единичного вектора оси симметрии силового поля. На основании первых интегралов и исходного инвариантного соотношения система уравнений Гриоли–Пуассона преобразована к системе второго порядка. С помощью теории интегрирующего множителя для определенных классов инвариантных соотношений получены новые решения дифференциальных уравнений движения.

Ключевые слова: динамика твердого тела, гироскоп, уравнения Гриоли–Пуассона, инвариантное соотношение, первый интеграл, уравнение Леви-Чивиты, уравнение Риккати.

Введение и постановка задачи. Многие задачи динамики твердого тела, имеющего неподвижную точку, описываются системой шести дифференциальных уравнений, допускающих три первых интеграла. Наиболее общие дифференциальные уравнения задачи о движении твердого тела с неподвижной точкой под действием потенциальных и гироскопических сил, допускающие три первых интеграла, получены в 1963 году итальянским механиком Д.Гриоли. В векторном виде они таковы [1]

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \times \mathbf{a}\mathbf{x} + \mu(v_1, v_2, v_3)(\mathbf{v} \times \mathbf{a}\mathbf{x}) + \frac{\partial L(v_1, v_2, v_3)}{\partial \mathbf{v}} \times \mathbf{a}\mathbf{x} + \frac{\partial U(v_1, v_2, v_3)}{\partial \mathbf{v}} \times \mathbf{v}, \quad (1)$$

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{v} \times \mathbf{a}\mathbf{x}. \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ – вектор момента количества движения; $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$ – единичный вектор оси симметрии силового поля; $L(v_1, v_2, v_3)$, $U(v_1, v_2, v_3)$ – скалярные функции компонент вектора \mathbf{v} ; $\mu(\mathbf{a}\mathbf{x}, \mathbf{v})$ – скалярная дифференцируемая функция компонент вектора угловой скорости $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{a}\mathbf{x}$ и вектора \mathbf{v} ; \mathbf{a} – гиращионный тензор; $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial L}{\partial v_1}, \frac{\partial L}{\partial v_2}, \frac{\partial L}{\partial v_3} \right)$, $\frac{\partial U}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial U}{\partial v_1}, \frac{\partial U}{\partial v_2}, \frac{\partial U}{\partial v_3} \right)$.

Уравнения (1), (2) допускают три первых интеграла

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{a}\mathbf{x} - 2U(v_1, v_2, v_3) = 2E, \quad \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = 1, \quad \mathbf{x} \cdot \mathbf{v} + L(v_1, v_2, v_3) = k, \quad (3)$$

где E , k – произвольные постоянные.

Поскольку уравнения динамики твердого тела не интегрируемы в квадратурах, то в научной литературе по динамике твердого тела интенсивно изучаются инвариантные соотношения. При этом наиболее полно исследованы линейные инвариантные соотношения, которые обладают свойством, что производная в силу уравнений движения от инвариантного соотношения тождественно равна нулю на этом инвариантном соотношении. В.Гесс [2] изучал линейные инвариантные соотношения в классической задаче о движении тяжелого твердого тела, Л.Н.Сретенский [3] – в задаче о движении тяжелого гироскопа, С.А.Чаплыгин [4] и П.В.Харламов [5] – в задаче о движении твердого тела в жидкости. В работе [6] выполнено интегрирование уравнений Гриоли–М.П.Харламова и Пуассона (1), (2) в случае, когда эти уравнения допускают линейное инвариантное соотношение по всем переменным. Работы [7, 8] посвящены исследованию вопросов существования у уравнений (1), (2) инвариантного соотношения вида

$$x_1 - g(v_1, v_2, v_3) = 0, \quad (4)$$

где $g(v_1, v_2, v_3)$ – заданная дифференцируемая функция переменных v_1, v_2, v_3 .

В данной работе продолжено изучение соотношения (4), начатое в работе [8]. Интегрирование системы (1), (2) сведено к интегрированию скалярной системы третьего порядка. Для определенных типов инвариантного соотношения (4) выполнено интегрирование редуцированной системы [8], что позволяет получить зависимости основных переменных задачи (1), (2) от времени.

Условия существования инвариантного соотношения (4). Потребуем, чтобы производная от левой части инвариантного соотношения (4) в силу скалярных уравнений, вытекающих из векторной системы (1), (2) была тождественно равна нулю при $x_1 = g(v_1, v_2, v_3)$. Тогда получим условия

$$a_{23} = a_{12} = 0, \quad a_{33} = a_{22}, \quad (5)$$

$$a_{13}g(v_1, v_2, v_3) + a_{22} \left(v_3 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_1} - v_1 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_3} - \frac{\partial L(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_3} - v_3 \mu(v_1, v_2, v_3) \right) = 0, \quad (6)$$

$$a_{22} \left(v_1 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} - v_2 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_1} + \frac{\partial L(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} + v_2 \mu(v_1, v_2, v_3) \right) + a_{13} \left(v_2 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_3} - v_3 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} \right) = 0, \quad (7)$$

$$g(v_1, v_2, v_3) \left[a_{13} \left(v_1 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} - v_2 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_1} + \frac{\partial L(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} + v_2 \mu(v_1, v_2, v_3) \right) + a_{11} \left(v_2 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_3} - v_3 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} \right) \right] + v_3 \frac{\partial U(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} - v_2 \frac{\partial U(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_3} = 0. \quad (8)$$

Из равенств (5) вытекает, что первая координатная ось, проекция вектора \mathbf{x} на которую определена соотношением (4), перпендикулярна круговому сечению гирационного эллипсоида. То есть условия (5) являются аналогом условий Гесса [2].

Выпишем общее решение уравнений (6)–(8) на сфере Пуассона: $v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = 1$. С помощью теории интегрирования уравнений в частных производных получим

$$L(v_1, v_2, v_3) = \frac{1}{a_{22}} \left[g(v_1, v_2, v_3) (a_{13}v_3 - a_{22}v_1) + \Phi(v_1) \right], \quad (9)$$

$$U(v_1, v_2, v_3) = \frac{1}{2a_{22}} \left[(a_{11}a_{22} - a_{13}^2) g^2(v_1, v_2, v_3) + f(v_1) \right], \quad (10)$$

$$\mu(v_1, v_2, v_3) = \frac{1}{a_{22}} \left[a_{22} \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_1} - a_{13} \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_3} \right]. \quad (11)$$

Здесь $\Phi(v_1)$ и $f(v_1)$ – произвольные дифференцируемые функции переменной v_1 .

При наличии соотношений (9)–(11) из первого уравнения системы (1) и уравнений Пуассона (2) следует

$$\begin{aligned} (x_1 - g(v_1, v_2, v_3))^\bullet &= (x_1 - g(v_1, v_2, v_3)) \left[a_{13}x_2 + \frac{(a_{11}a_{22} - a_{13}^2)}{a_{22}} \right. \\ &\left. \cdot \left(v_2 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_3} - v_3 \frac{\partial g(v_1, v_2, v_3)}{\partial v_2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

Уравнение (12) является уравнением Леви-Чивиты [9] для инвариантного соотношения (4).

Интегрирование системы уравнений Гриоли–Пуассона. Для интегрирования системы уравнений (1), (2) с учетом соотношений (4), (5), (9)–(11) обратимся к интегралам (3). Из них найдем

$$x_2 = \frac{v_2 (a_{22}k - \Phi(v_1)) - v_3 \sqrt{D(v_1, v_2, v_3)}}{a_{22} (v_2^2 + v_3^2)}, \quad (13)$$

$$x_3 = \frac{v_3 (a_{22}k - \Phi(v_1)) - a_{13} (v_2^2 + v_3^2) g(v_1, v_2, v_3) + v_2 \sqrt{D(v_1, v_2, v_3)}}{a_{22} (v_2^2 + v_3^2)}, \quad (14)$$

где $D(v_1, v_2, v_3) = (v_2^2 + v_3^2) (2a_{22}E + f(v_1)) - (a_{22}k - \Phi(v_1))^2$. Поскольку выражения (13), (14) не содержат других особенностей, кроме случая $v_2^2 + v_3^2 = 0$, то в дальнейшем полагаем $|v_1| \neq 1$. Тогда вместо второго и третьего скалярных уравнений, вытекающих из динамического уравнения (1), можно рассмотреть соотношения (13), (14).

На сфере Пуассона введем вместо переменных v_1, v_2, v_3 переменные θ, φ по формулам

$$v_1 = \cos \theta, \quad v_2 = \sin \theta \cos \varphi, \quad v_3 = \sin \theta \sin \varphi. \quad (15)$$

Используя формулы (13)–(15), внесем выражение для x_1 из (4) в скалярные уравнения, вытекающие из уравнения Пуассона (2)

$$\dot{\theta} = -\sqrt{\Delta(\cos\theta)}/\sin\theta, \quad (16)$$

$$a_{22} \sin\theta \sqrt{\Delta(\cos\theta)} d\varphi - \left[(a_{11}a_{22} - a_{13}^2) g(\cos\theta, \sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi) \sin^2\theta + (a_{13} \sin\theta \sin\varphi - a_{22} \cos\theta)(a_{22}k - \Phi(\cos\theta)) + a_{13} \sin\theta \cos\varphi \sqrt{\Delta(\cos\theta)} \right] d\theta = 0, \quad (17)$$

где

$$\Delta(\cos\theta) = (1 - \cos^2\theta)(2a_{22}E + f(\cos\theta)) - (a_{22}k - \Phi(\cos\theta))^2. \quad (18)$$

Уравнение (16) интегрируется независимо от уравнения (17)

$$\int_{\cos\theta_0}^{\cos\theta} \frac{d\cos\theta}{\sqrt{\Delta(\cos\theta)}} = t - t_0. \quad (19)$$

Зависимость $\theta = \theta(t)$ находится путем обращения интеграла (19).

Для интегрирования уравнения (17) положим [8]

$$g(\cos\theta, \sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi) = G_0(\theta) + G_1(\theta) \cos\varphi + G_2(\theta) \sin\varphi, \quad (20)$$

где G_i ($i = 0, 1, 2$) – заданные функции от переменной θ . Тогда в силу (20) из соотношения (17) получим

$$a_{22} \sin\theta \sqrt{\Delta(\cos\theta)} d\varphi - (L_0(\theta) + L_1(\theta) \cos\varphi + L_2(\theta) \sin\varphi) d\theta = 0. \quad (21)$$

Здесь

$$\begin{aligned} L_0(\theta) &= a_0 G_0(\theta) \sin^2\theta - a_{22} (a_{22}k - \Phi(\cos\theta)) \cos\theta, & (a_0 = a_{11}a_{22} - a_{13}^2) \\ L_1(\theta) &= (a_0 G_1(\theta) \sin\theta + a_{13} \sqrt{\Delta(\cos\theta)}) \sin\theta, \\ L_2(\theta) &= [a_0 G_2(\theta) \sin\theta + a_{13} (a_{22}k - \Phi(\cos\theta))] \sin\theta. \end{aligned} \quad (22)$$

Известно, что уравнения типа (21) сводятся к уравнению Риккати. Например, замена $u = \text{tg}(\varphi/2)$ позволяет уравнение (21) привести к виду

$$2a_{22} \sin\theta \sqrt{\Delta(\cos\theta)} u' + (L_1(\theta) - L_0(\theta))u^2 - 2L_2(\theta)u - L_0(\theta) - L_1(\theta) = 0. \quad (23)$$

Случай 1. Пусть $L_1(\theta) + L_0(\theta) = 0$, то есть выполняется равенство

$$a_{22} (a_{22}k - \Phi(\cos\theta)) \cos\theta = [a_0 (G_0(\theta) + G_1(\theta)) \sin\theta + a_{13} \sqrt{\Delta(\cos\theta)}] \sin\theta. \quad (24)$$

Из соотношения (21) следует, что зависимость $\varphi(\theta)$ в случае (24) имеет вид

$$\varphi(\theta) = 2 \arctg \left[2a_{22} / \left(c - \int P(\theta) N(\theta) d\theta \right) \right], \quad (25)$$

где c – произвольная постоянная, а через $P(\theta)$ и $N(\theta)$ обозначены функции

$$P(\theta) = \frac{L_1(\theta) - L_0(\theta)}{\sqrt{\Delta(\cos\theta)} \sin\theta}, \quad N(\theta) = \exp \left(\frac{1}{a_{22}} \int \frac{L_2(\theta) d\theta}{\sqrt{\Delta(\cos\theta)} \sin\theta} \right).$$

Случай 2. Положим $L_1(\theta) + L_2(\theta) = 0$, то есть в силу (22) потребуем выполнения условия

$$\sin\theta [a_0 (G_1(\theta) + G_2(\theta)) \sin\theta + a_{13} \sqrt{\Delta(\cos\theta)} + a_{13} (a_{22}k - \Phi(\cos\theta))] = 0. \quad (26)$$

Зависимость $\varphi(\theta)$ в случае (26) такова

$$\varphi(\theta) = 2 \arctg \left[\frac{c + \int G(\theta) E(\theta) d\theta - a_{22} E(\theta)}{c + \int G(\theta) E(\theta) d\theta + a_{22} E(\theta)} \right], \quad (27)$$

где

$$G(\theta) = \frac{L_1(\theta)}{\sqrt{\Delta(\cos\theta)\sin\theta}}, \quad E(\theta) = \exp\left(-\frac{1}{a_{22}} \int \frac{L_0(\theta)}{\sqrt{\Delta(\cos\theta)\sin\theta}} d\theta\right),$$

c – произвольная постоянная.

Случай 3. Пусть выполнено условие

$$L_1(\theta) + L_0(\theta) = c^2 (L_1(\theta) - L_0(\theta)) \exp\left(\frac{2}{a_{22}} \int \frac{L_2(\theta)}{\sqrt{\Delta(\cos\theta)\sin\theta}} d\theta\right), \quad (28)$$

в котором $L_1^2(\theta) - L_0^2(\theta) > 0$. На основании обозначений (22) данное неравенство можно привести к виду

$$\begin{aligned} & (a_0 G_1(\theta) \sin\theta + a_{13} \sqrt{\Delta(\cos\theta)})^2 \sin^2\theta - \\ & - (a_0 G_0(\theta) \sin^2\theta - a_{22} (a_{22} k - \Phi(\cos\theta)) \cos\theta)^2 > 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Зависимость $\varphi(\theta)$ получим из уравнения (23)

$$\varphi(\theta) = 2 \operatorname{arctg} \left[\sqrt{-\frac{Z_1(\theta)}{Z_2(\theta)}} \operatorname{tg} \left(\frac{1}{2a_{22}} \int \frac{1}{\sin\theta} \sqrt{-\frac{Z_1(\theta)Z_2(\theta)}{\Delta(\cos\theta)}} d\theta + c \right) \right]. \quad (30)$$

Здесь $Z_1(\theta) = L_0(\theta) + L_1(\theta)$, $Z_2(\theta) = L_0(\theta) - L_1(\theta)$.

При выполнении условия (28) в случае $L_1^2(\theta) - L_0^2(\theta) < 0$ получим зависимость $\varphi(\theta)$

$$\varphi(\theta) = 2 \operatorname{arctg} \left[\sqrt{\frac{Z_1(\theta)}{Z_2(\theta)}} \operatorname{th} \left(\frac{1}{2a_{22}} \int \frac{1}{\sin\theta} \sqrt{\frac{Z_1(\theta)Z_2(\theta)}{\Delta(\cos\theta)}} d\theta + c \right) \right]. \quad (31)$$

В соотношениях (30) и (31) c – произвольная постоянная.

Случай 4. Уравнение (23) также легко интегрируется при условии $L_1(\theta) = L_0(\theta)$, то есть при выполнении равенства

$$a_{22} (a_{22} k - \Phi(\cos\theta)) \cos\theta = [a_0 (G_0(\theta) - G_1(\theta)) \sin\theta - a_{13} \sqrt{\Delta(\cos\theta)}] \sin\theta. \quad (32)$$

Зависимость $\varphi = \varphi(\theta)$ при этом определяется формулой

$$\varphi(\theta) = 2 \operatorname{arctg} \left[N(\theta) \left(\frac{1}{a_{22}} \int \frac{L_0(\theta) d\theta}{N(\theta) \sqrt{\Delta(\cos\theta)\sin\theta}} + c \right) \right], \quad (33)$$

где c – произвольная постоянная, а $N(\theta)$ введено выше.

Равенство (32) связывает функции $\Phi(\cos\theta)$ и $f(\cos\theta)$. Если $a_{13} = 0$, то из (32) имеем условие

$$\Phi(\cos\theta) = a_{22} k + a_{11} (G_0(\theta) - G_1(\theta)) \frac{1 - \cos^2\theta}{\cos\theta},$$

при этом функция $f(\cos\theta)$ остается произвольной. Поскольку выражение (18) принимает вид

$$\Delta(\cos\theta) = (2a_{22} E + f(\cos\theta)) (1 - \cos^2\theta) - (G_0(\theta) - G_1(\theta))^2 \frac{(1 - \cos^2\theta)^2}{\cos^2\theta},$$

то функции $\theta(t)$ и $\varphi(\theta)$ определяются соотношениями (19) и (33) и будут действительными, если постоянную E взять достаточно большой.

Выводы. Таким образом, на основе редукции исходной системы к системе второго порядка в четырех случаях проведено интегрирование в квадратурах дифференциальных уравнений Гриоли–Пуассона при условии, что они допускают одно инвариантное соотношение, которое является линейным по компонентам кинетического момента и нелинейным по компонентам единичного вектора вертикали.

РЕЗЮМЕ

Виконано інтегрування диференціальних рівнянь Гріолі–Пуассона у випадку, коли вони допускають одне інваріантне співвідношення, яке є лінійним по компонентах кінетичного моменту і нелінійним по компонентах одиничного вектора осі симетрії силового поля. На основі перших інтегралів і вихідного інваріантного співвідношення система рівнянь Гріолі–Пуассона перетворена до системи другого порядку. За допомогою теорії інтегруючого множника для певних класів інваріантних співвідношень отримано нові розв'язки диференціальних рівнянь руху.

Ключові слова: динаміка твердого тіла, гіростат, рівняння Гріолі–Пуассона, інваріантне співвідношення, перший інтеграл, рівняння Леві-Чивіті, рівняння Ріккати.

SUMMARY

The integration of the Grioli–Poisson differential equations in a case when they suppose one invariant relation which is linear on components of the kinetic moment and nonlinear on components of an unit vector of an axis of symmetry of a force field is fulfilled. On the basis of the first integrals and an initial invariant relation the system of the Grioli–Poisson equations is transformed to the second order system. By means of the theory integrating factor for certain classes of invariant relation the new solutions of the movement's differential equations are received.

Keywords: the rigid body dynamics, a gyrostat, the Grioli–Poisson's equations, the invariant relation, the first integral, the Levi-Civita's equation, the equation of Riccati.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Grioli G. Questioni di dinamica del corpo rigido / G. Grioli // Atti. Accad. Naz. Lincei, Rend. Cl. Sci. Fis., Mat. e Natur. – 1963. – V. 35, f. 1–2. – P. 35–39.
2. Hess W. Über das Gyroskop bei allgemeinsten Wahl des zur Bewegung anregenden Momentankräfte-system / W. Hess // Math. Ann. – 1887. – B. 29. – S. 500–582.
3. Сретенский Л. Н. О некоторых случаях интегрируемости уравнений движения гиростата / Л. Н. Сретенский // Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 149, №2. – С. 292–294.
4. Чаплыгин С. А. О некоторых случаях движения твердого тела в жидкости. Статья вторая / С. А. Чаплыгин // Мат. сб. Круга любителей мат. наук. – 1897. – Т. 20, вып. 1. – С. 115–170.
5. Харламов П. В. О решениях уравнений динамики твердого тела / П. В. Харламов // Прикл. математика и механика. – 1965. – Т. 29, вып. 3. – С. 567–572.
6. Щетинина Е. К. Об интегрировании уравнений Гриоли в случае линейного инвариантного соотношения / Е. К. Щетинина // Тр. ИПММ НАН Украины. – 2005. – Вып. 10. – С. 229–236.
7. Yehia H. M. Particular Integrable Cases in Rigid Body Dynamics / H. M. Yehia // Z. angew. Math., Mech. – 1988. – V. 68. – № 1. – P. 33–37.
8. Горр Г. В. Об интегрировании уравнений Гриоли в случае одного инвариантного соотношения / Г. В. Горр, Х. М. Яхья, Е. К. Щетинина // Механика твердого тела. – 2005. – Вып. 35. – С. 49–57.
9. Леви-Чивита Т. Курс теоретической механики: в 2 т. / Т. Леви-Чивита, У. Амальди. – М.: Изд-во иностр. литер, 1951. – Т. 2., ч. 2: Динамика систем с конечным числом степеней свободы. – 555 с.

Поступила в редакцию 15.05.2010 г.

УДК 539.3

НАПРЯЖЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ОРТОТРОПНОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПЛАСТИНЫ

Е. В. Алтухов, А. В. Винник

На основании ранее полученных систем двумерных уравнений равновесия ортотропного слоя предложена методика построения однородных решений краевых задач для прямоугольника при различных комбинациях граничных условий на его противоположных сторонах. Полученные результаты использованы для нахождения точного аналитического решения задачи о напряженном состоянии ортотропной прямоугольной пластины.

Ключевые слова: ортотропная прямоугольная пластина, смешанные граничные условия, однородные решения, точное аналитическое решение.

Введение. Решение многих двумерных задач теории упругости изотропного тела сводится к интегрированию бигармонического уравнения. Бигармоническая краевая задача для прямоугольника и в настоящее время представляет интерес [1-3]. В монографиях [4-6] и обзорных статьях [1, 3] проведен анализ аналитических методов построения точных решений плоских задач о напряженном состоянии изотропной полосы, полуполосы и прямоугольника. Для данного класса граничных задач получили наибольшее распространение аналитические методы однородных решений, суперпозиции и начальных функций. Задача построения точных и обоснованных приближенных аналитических решений для анизотропных пластин значительно усложняется [7-10]. Применение метода начальных функций к решению плоской задачи теории упругости ортотропного тела отражено в работе [11]. В работах [12, 13] рассматривается построение решения задач о плоском напряженном состоянии и изгибе ортотропных прямоугольных пластин по методу однородных решений. Построению строгих аналитических решений трехмерных задач статики анизотропных пластин посвящены работы [14-16]. В работе [16] получены однородные решения системы уравнений равновесия в перемещениях в виде тригонометрических рядов по толщине координате. Предполагалось, что на плоских гранях пластины нормальная составляющая вектора перемещений и касательные напряжения равны нулю. Коэффициенты тригонометрических рядов определяются из систем уравнений в частных производных двумерной теории упругости.

В данной работе получены однородные решения системы, соответствующей слагаемому с номером ноль ряда Фурье [16], при различных комбинациях граничных условий на противоположных сторонах прямоугольника. Полученные результаты использованы для построения точного аналитического решения задачи о напряженном состоянии ортотропного прямоугольника в случае действия постоянной по толщине нагрузки.

Постановка задачи и построение однородных решений. Рассматривается прямоугольная ортотропная пластинка с размерами оснований $2a \times 2b$ и толщиной $2h$ (рис.1). Пластинка отнесена к декартовой системе координат $Ox_1x_2x_3$.

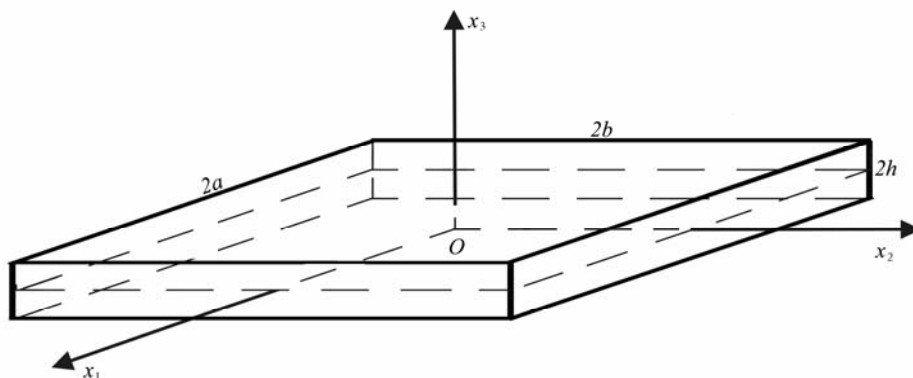


Рис. 1. Постановка задачи

Пусть на торцах пластины ($x_3 = \pm h$) заданы смешанные граничные условия

$$u_3(x_1, x_2, \pm h) = 0, \sigma_{j3}(x_1, x_2, \pm h) = 0 \quad (j = \overline{1, 2}), \quad (1)$$

а на боковых гранях ($x_2 = \pm b$) имеет место одно из следующих условий

$$u_1(x_1, \pm b, x_3) = 0, u_2(x_1, \pm b, x_3) = 0; \quad (2)$$

$$u_2(x_1, \pm b, x_3) = 0, \sigma_{12}(x_1, \pm b, x_3) = 0; \quad (3)$$

$$u_1(x_1, \pm b, x_3) = 0, \sigma_{22}(x_1, \pm b, x_3) = 0; \quad (4)$$

$$\sigma_{12}(x_1, \pm b, x_3) = 0, \sigma_{22}(x_1, \pm b, x_3) = 0. \quad (5)$$

Неоднородные граничные условия на оставшихся поверхностях пластины ($x_1 = \pm a$) считаются произвольными и на этапе построения однородных решений во внимание не принимаются.

Уравнения равновесия в перемещениях в данном случае имеют вид

$$\begin{aligned} (L_{11} + A_{55}\partial_3^2)u_1 + L_{12}u_2 + L_{13}\partial_3u_3 &= 0, \\ L_{21}u_1 + (L_{22} + A_{44}\partial_3^2)u_2 + L_{23}\partial_3u_3 &= 0, \\ L_{31}\partial_3u_1 + L_{32}\partial_3u_2 + (L_{33} + A_{33}\partial_3^2)u_3 &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь

$$L_{11} = A_{11}\partial_1^2 + A_{66}\partial_2^2, L_{12} = L_{21} = (A_{12} + A_{66})\partial_1\partial_2, L_{13} = L_{31} = (A_{13} + A_{55})\partial_1,$$

$$L_{22} = A_{66}\partial_1^2 + A_{22}\partial_2^2, L_{23} = L_{32} = (A_{23} + A_{44})\partial_2, L_{33} = A_{55}\partial_1^2 + A_{44}\partial_2^2, \partial_i = \partial/\partial x_i;$$

A_{ij} – модули упругости.

В случае симметричного деформирования относительно срединной плоскости пластины ($x_3 = 0$) компоненты вектора перемещения представляются в виде [16]

$$u_i = \sum_{k=0}^{\infty} u_{ik}(x_1, x_2) \cos(\delta_k x_3) \quad (i=1,2); u_3 = \sum_{k=0}^{\infty} u_{3k}(x_1, x_2) \sin(\delta_k x_3), \delta_k = k\pi/h.$$

При этом граничные условия (1) будут удовлетворены, а из уравнений (6) при $k=0$ следует

$$L_{11}u_{10} + L_{12}u_{20} = 0; L_{21}u_{10} + L_{22}u_{20} = 0. \quad (7)$$

Для $k \geq 1$ имеем систему уравнений в частных производных

$$\sum_{n=1}^3 D_{in}^{(k)} u_{nk} = 0 \quad (i=1,3).$$

Здесь $D_{in}^{(k)}$ – дифференциальные операторы:

$$\begin{aligned} D_{11}^{(k)} &= L_{11} - \delta_k^2 A_{55}; D_{12}^{(k)} = L_{12}; D_{13}^{(k)} = \delta_k L_{13}; D_{21}^{(k)} = L_{12}; D_{22}^{(k)} = L_{22} - \delta_k^2 A_{44}; \\ D_{23}^{(k)} &= \delta_k L_{23}; D_{31}^{(k)} = -\delta_k L_{13}; D_{32}^{(k)} = -\delta_k L_{23}; D_{33}^{(k)} = L_{33} - \delta_k^2 A_{33}. \end{aligned}$$

Решение системы уравнений (7). Характеристики напряженно-деформированного состояния при $k=0$ принимают вид

$$u_i(x_1, x_2, x_3) = u_{i0}(x_1, x_2) \quad (i=1,2), u_3(x_1, x_2, x_3) \equiv 0; \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11}(x_1, x_2, x_3) &= A_{11}u_{1,1} + A_{12}u_{2,2}, \sigma_{22}(x_1, x_2, x_3) = A_{12}u_{1,1} + A_{22}u_{2,2}, \\ \sigma_{33}(x_1, x_2, x_3) &= A_{13}u_{1,1} + A_{23}u_{2,2}, \sigma_{23}(x_1, x_2, x_3) \equiv 0, \\ \sigma_{13}(x_1, x_2, x_3) &\equiv 0, \sigma_{12}(x_1, x_2, x_3) = A_{66}(u_{1,2} + u_{2,1}). \end{aligned} \quad (9)$$

Для построения однородных решений уравнений (7), удовлетворяющих одному из граничных условий (2)-(5), представим компоненты вектора перемещений в виде

$$u_{10}(x_1, x_2) = e^{\lambda x_1} f_{10}(x_2), u_{20}(x_1, x_2) = e^{\lambda x_1} f_{20}(x_2), \quad (10)$$

где λ – параметр разделения переменных, $f_{10}(x_2)$, $f_{20}(x_2)$ – функции, подлежащие определению.

Тогда из уравнений (7) получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$f_{10}''(x_2) + a_1 f_{10}(x_2) + a_2 f_{20}'(x_2) = 0, f_{20}''(x_2) + a_3 f_{20}(x_2) + a_4 f_{10}'(x_2) = 0; \quad (11)$$

с коэффициентами

$$a_1 = \lambda^2 A_{11}/A_{66}, a_2 = \lambda(1 + A_{12}/A_{66}), a_3 = \lambda^2 A_{66}/A_{22}, a_4 = \lambda(A_{66} + A_{12})/A_{22}.$$

Из граничных условий (2)-(5) и соотношений (8), (9) следует

$$f_{10}(\pm b) = 0, f_{20}(\pm b) = 0; \tag{12}$$

$$f_{20}(\pm b) = 0, f'_{10}(\pm b) = 0; \tag{13}$$

$$f_{10}(\pm b) = 0, f'_{20}(\pm b) = 0; \tag{14}$$

$$f'_{10}(\pm b) + \lambda f_{20}(\pm b) = 0, A_{12}\lambda f_{10}(\pm b) + A_{22}f'_{20}(\pm b) = 0. \tag{15}$$

Таким образом, приходим к задаче о собственных значениях для системы уравнений (11) с учетом одного из граничных условий (12)-(15).

Частные решения системы (11) представим в виде

$$f_{10}(x_2) = He^{\mu x_2}, f_{20}(x_2) = Qe^{\mu x_2}, \tag{16}$$

где μ, H, Q – неизвестные величины, подлежащие определению. Тогда из системы (11) с учетом (16) следует

$$(\mu^2 + a_1)H + a_2\mu Q = 0, a_4\mu H + (\mu^2 + a_3)Q = 0. \tag{17}$$

Приравнявая определитель системы (17) нулю, получаем характеристическое уравнение

$$\mu^4 + 2b_1\lambda^2\mu^2 + b_2\lambda^4 = 0, b_1 = (A_{11}A_{22} - 2A_{12}A_{66} - A_{12}^2)/(2A_{22}A_{66}), b_2 = A_{11}/A_{22}.$$

Параметры b_1, b_2 зависят от характеристик материала ($A_{11}, A_{12}, A_{22}, A_{66}$), что влечет за собой различные формы записи решений системы (11). Все возможные сочетания значений b_1, b_2 и соответствующие им решения представлены в табл.1.

Таблица 1

Собственные значения и собственные функции системы (11)

№	значения b_1, b_2	собственные значения μ	собственные функции $f_{10}(x_2), f_{20}(x_2)$
1	$b_1 > 0$ и $b_1^2 - b_2 \neq 0$	$\mu_{1,2} = \pm i\lambda s_1, \mu_{3,4} = \pm i\lambda s_2$ $s_{1,2} = \sqrt{b_1 \pm \sqrt{b_1^2 - b_2}}$, где s_m ($m = 1, 2$) – действительные, если $b_1^2 > b_2$, и комплексно-сопряженные, если $b_1^2 < b_2$.	$f_{10}^+(x_2) = H_1^+ \cos(\lambda^+ s_1 x_2) + H_2^+ \cos(\lambda^+ s_2 x_2),$ $f_{20}^+(x_2) = Q_1^+ \sin(\lambda^+ s_1 x_2) + Q_2^+ \sin(\lambda^+ s_2 x_2),$ $f_{10}^-(x_2) = H_1^- \sin(\lambda^- s_1 x_2) + H_2^- \sin(\lambda^- s_2 x_2),$ $f_{20}^-(x_2) = Q_1^- \cos(\lambda^- s_1 x_2) + Q_2^- \cos(\lambda^- s_2 x_2).$
2	$b_1 > 0$ и $b_1^2 = b_2$	$\mu_{1,2} = \mu_{3,4} = \pm i\lambda s_1, s_1 = \sqrt{b_1}$	$f_{10}^+(x_2) = H_1^+ \cos(\lambda^+ s_1 x_2) + H_2^+ x_2 \sin(\lambda^+ s_1 x_2),$ $f_{20}^+(x_2) = Q_1^+ \sin(\lambda^+ s_1 x_2) + Q_2^+ x_2 \cos(\lambda^+ s_1 x_2),$ $f_{10}^-(x_2) = H_1^- \sin(\lambda^- s_1 x_2) + H_2^- x_2 \cos(\lambda^- s_1 x_2),$ $f_{20}^-(x_2) = Q_1^- \cos(\lambda^- s_1 x_2) + Q_2^- x_2 \sin(\lambda^- s_1 x_2).$
3	$b_1 < 0$ и $b_1^2 - b_2 \neq 0$	$\mu_{1,2} = \pm \lambda s_1, \mu_{3,4} = \pm \lambda s_2,$ $s_{1,2} = \sqrt{ b_1 \pm \sqrt{b_1^2 - b_2}}$, где s_m ($m = 1, 2$) – действительные, если $b_1^2 > b_2$, и комплексно-сопряженные, если $b_1^2 < b_2$.	$f_{10}^+(x_2) = H_1^+ \operatorname{ch}(\lambda^+ s_1 x_2) + H_2^+ \operatorname{ch}(\lambda^+ s_2 x_2),$ $f_{20}^+(x_2) = Q_1^+ \operatorname{sh}(\lambda^+ s_1 x_2) + Q_2^+ \operatorname{sh}(\lambda^+ s_2 x_2),$ $f_{10}^-(x_2) = H_1^- \operatorname{sh}(\lambda^- s_1 x_2) + H_2^- \operatorname{sh}(\lambda^- s_2 x_2),$ $f_{20}^-(x_2) = Q_1^- \operatorname{ch}(\lambda^- s_1 x_2) + Q_2^- \operatorname{ch}(\lambda^- s_2 x_2).$
4	$b_1 < 0$ и $b_1^2 = b_2$	$\mu_{1,2} = \mu_{3,4} = \pm \lambda s_1, s_1 = \sqrt{ b_1 }$	$f_{10}^+(x_2) = H_1^+ \operatorname{ch}(\lambda^+ s_1 x_2) + H_2^+ x_2 \operatorname{sh}(\lambda^+ s_1 x_2),$ $f_{20}^+(x_2) = Q_1^+ \operatorname{sh}(\lambda^+ s_1 x_2) + Q_2^+ x_2 \operatorname{ch}(\lambda^+ s_1 x_2),$ $f_{10}^-(x_2) = H_1^- \operatorname{sh}(\lambda^- s_1 x_2) + H_2^- x_2 \operatorname{ch}(\lambda^- s_1 x_2),$ $f_{20}^-(x_2) = Q_1^- \operatorname{ch}(\lambda^- s_1 x_2) + Q_2^- x_2 \operatorname{sh}(\lambda^- s_1 x_2).$

Последний столбец табл. 1 содержит общий вид собственных функций $f_{10}(x_2)$, $f_{20}(x_2)$ для симметричного и кососимметричного относительно оси x_2 деформирования пластины (знак «+» и «-» соответственно). В случае симметричного деформирования функция $u_1(x_1, x_2)$ – четная, а $u_2(x_1, x_2)$ – нечетная по переменной x_2 . В случае кососимметричного деформирования – наоборот. Как видно из табл. 1, результаты для случаев 3, 4 получаются из 1, 2 заменой s_1, s_2 на is_1, is_2 . Поэтому дальнейшие исследования проводятся только для двух первых случаев. Произвольные постоянные H_m^\pm, Q_m^\pm ($m=1,2$) в собственных функциях выражаются друг через друга (табл. 2). В качестве независимых констант приняты H_m^\pm .

Таблица 2

Зависимость между коэффициентами H_m^\pm, Q_m^\pm ($m=1,2$)

№	значения b_1, b_2	зависимость между коэффициентами
1	$b_1 > 0$ и $b_1^2 - b_2 \neq 0$	$Q_m^+ = P_m^+ H_m^+, Q_m^- = -P_m^- H_m^-, P_m^\pm = \frac{a_4 \lambda^\pm s_m}{a_3 - (\lambda^\pm s_m)^2}$
2	$b_1 > 0$ и $b_1^2 = b_2$	$Q_1^\pm = \pm P_1^\pm H_1^\pm - P_1^\pm P_2^\pm H_2^\pm, Q_2^\pm = \mp P_1^\pm H_2^\pm, P_1^\pm = \frac{a_4 \lambda^\pm s_1}{a_3 - (\lambda^\pm s_1)^2}, P_2^\pm = \frac{1}{\lambda^\pm s_1} \cdot \frac{a_3 + (\lambda^\pm s_1)^2}{a_3 - (\lambda^\pm s_1)^2}$

Рассматривая каждый из случаев граничных условий на боковой поверхности ($x_2 = \pm b$), приходим к трансцендентным уравнениям для определения λ (табл. 3).

Таблица 3

Трансцендентные уравнения для определения λ

граничные условия	значения b_1, b_2	
	$b_1 > 0$ и $b_1^2 - b_2 \neq 0$	$b_1 > 0$ и $b_1^2 = b_2$
$f_{10}(\pm b) = 0, f_{20}(\pm b) = 0$	$\beta_1 \sin(2\alpha b \lambda^\pm) \pm \alpha_1 \sin(2\beta b \lambda^\pm) = 0$	$\sin(2\lambda^\pm s_1 b) \pm 2\lambda^\pm s_1 b \cdot t_1 = 0$
$f_{20}(\pm b) = 0, f'_{10}(\pm b) = 0$	$\sin(\lambda^+ b s_1) \sin(\lambda^+ b s_2) = 0,$ $\cos(\lambda^- b s_1) \cos(\lambda^- b s_2) = 0$	$\sin^2(\lambda^+ b s_1) = 0,$ $\cos^2(\lambda^- b s_1) = 0$
$f_{10}(\pm b) = 0, f'_{20}(\pm b) = 0$	$\cos(\lambda^+ b s_1) \cos(\lambda^+ b s_2) = 0,$ $\sin(\lambda^- b s_1) \sin(\lambda^- b s_2) = 0$	$\cos^2(\lambda^+ b s_1) = 0,$ $\sin^2(\lambda^- b s_1) = 0$
$f'_{10}(\pm b) + \lambda f_{20}(\pm b) = 0,$ $A_{12} \lambda f_{10}(\pm b) + A_{22} f'_{20}(\pm b) = 0$	$\beta \sin(2\alpha b \lambda^\pm) \pm \alpha \sin(2\beta b \lambda^\pm) = 0$	$\sin(2\lambda^\pm s_1 b) \pm 2\lambda^\pm s_1 b \cdot t_3 = 0$

Здесь

$$\alpha = \frac{s_1 - s_2}{2}, \beta = \frac{s_1 + s_2}{2}, \alpha_1 = \alpha \left[a_3 + s_1 s_2 (\lambda^\pm)^2 \right], \beta_1 = \beta \left[a_3 - s_1 s_2 (\lambda^\pm)^2 \right], t_1 = \frac{a_3 - (\lambda^\pm s_1)^2}{a_3 + (\lambda^\pm s_1)^2},$$

$$t_3 = (s_3 + s_4) / (s_3 + s_4 + s_5), s_3 = s_1^4 A_{22}^2 - A_{12} A_{66}, s_4 = s_1^2 A_{22} (A_{12} - A_{66}), s_5 = 2s_1^2 A_{22} (A_{12} + A_{66}).$$

Случай $b_1^2 = b_2$ получается из случая $b_1^2 - b_2 \neq 0$ предельным переходом от s_2 к s_1 . Поэтому дальнейшие исследования проводятся только для случая $b_1^2 - b_2 \neq 0$.

Собственные значения λ_p^\pm определяются из трансцендентных уравнений (табл. 3). Этим собст-

венным значениям соответствуют собственные функции $f_{10p}^{\pm}(x_2)$, $f_{20p}^{\pm}(x_2)$, а также функции $u_{10}^{(p)\pm}(x_1, x_2)$, $u_{20}^{(p)\pm}(x_1, x_2)$. Тогда перемещения можно представить в виде

$$u_{i0}^{\pm}(x_1, x_2) = u_{i0}^{(0)\pm}(x_1, x_2) + \sum_{p=-\infty}^{-1} u_{i0}^{(p)\pm}(x_1, x_2) + \sum_{p=1}^{\infty} u_{i0}^{(p)\pm}(x_1, x_2), \quad (i = \overline{1, 2}) \quad (18)$$

где $u_{i0}^{(0)\pm}(x_1, x_2)$ соответствует случаю нулевого собственного значения ($\lambda_0^{\pm} = 0$) и носит название элементарного решения. Элементарные решения для каждого вида граничных условий представлены в табл. 4.

Таблица 4

Общий вид перемещений в случае нулевого собственного значения

граничные условия	$u_{10}^{(0)+}(x_1, x_2) + u_{10}^{(0)-}(x_1, x_2)$	$u_{20}^{(0)+}(x_1, x_2) + u_{20}^{(0)-}(x_1, x_2)$
$u_{10}(x_1, \pm b) = 0, u_{20}(x_1, \pm b) = 0$	0	0
$u_{20}(x_1, \pm b) = 0, \sigma_{12}(x_1, \pm b) = 0$	$C_0 + C_1 x_1$	0
$u_{10}(x_1, \pm b) = 0, \sigma_{22}(x_1, \pm b) = 0$	0	$C_0 + C_1 x_1$
$\sigma_{12}(x_1, \pm b) = 0, \sigma_{22}(x_1, \pm b) = 0$	$(C_0 - C_0^* C_1 x_1) + (C_2 - 2C_0^* C_3 x_1 + 3C_1^* C_4 x_1^2) x_2 + C_4 x_2^3$	$(C_5 + (3b^2 C_2^* C_4 - C_4 - C_2) x_1 + C_0^* C_3 x_1^2 - C_1^* C_4 x_1^3) + C_1 x_2 + (C_3 - 3C_2^* C_4 x_1) x_2^2$

Здесь $C_0, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5$ – линейно независимые постоянные, а

$$C_0^* = A_{22}/A_{12}, \quad C_1^* = A_{22}A_{66}/\Delta, \quad C_2^* = A_{12}A_{66}/\Delta,$$

$$\Delta = A_{12}^2 + A_{12}A_{66} - A_{11}A_{22}.$$

В качестве примера рассмотрим задачу о напряженном состоянии прямоугольной пластинки, которая деформируется внешними усилиями, приложенными по боковой поверхности ($x_1 = \pm a$)

$$\sigma_{12}(\pm a, x_2) = 0, \quad \sigma_{11}(\pm a, x_2) = \cos(x_2 \pi / b). \quad (19)$$

При этом на плоских гранях пластины ($x_3 = \pm h$) и на боковых поверхностях ($x_2 = \pm b$) имеют место однородные граничные условия (1) и (3).

Задача в данной постановке соответствует случаю симметричного относительно оси x_2 деформирования. Собственные значения в данном случае таковы:

$$\{\lambda_p^+\} = \{\lambda_{1p}^+, \lambda_{2p}^+\}, \quad \{\lambda_{1p}^+\} = \{\pi p / (bs_1)\}, \quad \{\lambda_{2p}^+\} = \{\pi p / (bs_2)\}, \quad p \in Z. \quad (20)$$

Исходя из четности собственных функций $f_{10p}^{\pm}(x_2)$, $f_{20p}^{\pm}(x_2)$ и выражений (18) перемещения можно представить в виде:

$$u_{10}^{\pm}(x_1, x_2) = u_{10}^{(0)\pm}(x_1, x_2) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} f_{10p}^{\pm}(x_2) \frac{\text{ch}(\lambda_p^+ x_1)}{\text{sh}(\lambda_p^- x_1)},$$

$$u_{20}^{\pm}(x_1, x_2) = u_{20}^{(0)\pm}(x_1, x_2) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} f_{20p}^{\pm}(x_2) \frac{\text{sh}(\lambda_p^+ x_1)}{\text{ch}(\lambda_p^- x_1)} \quad (21)$$

Из (9), (10), (20) и (21) следуют представления характеристик напряженно-деформированного состояния:

$$u_{10}^+(x_1, x_2) = C_0 + C_1 x_1 + 2 \sum_{p=1}^{+\infty} \left[H_{1p}^+ \text{ch}\left(\frac{\pi p}{s_1 b} x_1\right) + H_{2p}^+ \text{ch}\left(\frac{\pi p}{s_2 b} x_1\right) \right] \cos\left(\frac{\pi p}{b} x_2\right),$$

$$\begin{aligned}
 u_{20}^+(x_1, x_2) &= 2 \sum_{p=1}^{+\infty} \left[H_{1p}^+ P_{1p}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi p}{s_1 b} x_1 \right) + H_{2p}^+ P_{2p}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi p}{s_2 b} x_1 \right) \right] \sin \left(\frac{\pi p}{b} x_2 \right); \\
 \sigma_{11}^+(x_1, x_2) &= A_{11} C_1 + 2 \sum_{p=1}^{+\infty} \sum_{i=1}^2 \frac{\pi p}{b} H_{ip}^+ B_{ip}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi p}{b s_i} x_1 \right) \cos \left(\frac{\pi p}{b} x_2 \right) \\
 \sigma_{22}^+(x_1, x_2) &= A_{12} C_1 + 2 \sum_{p=1}^{+\infty} \sum_{i=1}^2 \frac{\pi p}{b} H_{ip}^+ D_{ip}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi p}{b s_i} x_1 \right) \cos \left(\frac{\pi p}{b} x_2 \right), \\
 \sigma_{33}^+(x_1, x_2) &= A_{13} C_1 + 2 \sum_{p=1}^{+\infty} \sum_{i=1}^2 \frac{\pi p}{b} H_{ip}^+ E_{ip}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi p}{b s_i} x_1 \right) \cos \left(\frac{\pi p}{b} x_2 \right), \\
 \sigma_{12}^+(x_1, x_2) &= -2 A_{66} \sum_{p=1}^{+\infty} \sum_{i=1}^2 \frac{\pi p}{b} H_{ip}^+ K_{ip}^+ \operatorname{ch} \left(\frac{\pi p}{b s_i} x_1 \right) \sin \left(\frac{\pi p}{b} x_2 \right). \tag{22}
 \end{aligned}$$

Здесь

$$B_{ip}^+ = \left(A_{11}/s_i + A_{12} P_{ip}^+ \right), \quad D_{ip}^+ = \left(A_{12}/s_i + A_{22} P_{ip}^+ \right), \quad E_{ip}^+ = \left(A_{13}/s_i + A_{23} P_{ip}^+ \right), \quad K_{ip}^+ = \left(1 - P_{ip}^+/s_i \right).$$

После подстановки выражений для σ_{11}^+ и σ_{12}^+ из (22) в граничные условия (19) приходим к системе линейных алгебраических уравнений относительно H_{i1} , C_0 , C_1

$$\begin{cases}
 H_{11}^+ B_{11}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi a}{b s_1} \right) + H_{21}^+ B_{21}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi a}{b s_2} \right) = \frac{b}{2\pi}, \\
 H_{11}^+ K_{11}^+ \operatorname{ch} \left(\frac{\pi a}{b s_1} \right) + H_{21}^+ K_{21}^+ \operatorname{ch} \left(\frac{\pi a}{b s_2} \right) = 0, \\
 C_0 = C_1 = 0,
 \end{cases} \tag{23}$$

решение которой

$$H_{i1}^+ = \frac{b}{2\pi \Delta_1} \left[\delta_i^1 K_{21}^+ \operatorname{ch} \left(\frac{\pi a}{b s_2} \right) - \delta_i^2 K_{11}^+ \operatorname{ch} \left(\frac{\pi a}{b s_1} \right) \right], \quad i = \overline{1, 2}.$$

Здесь $\Delta_1 = B_{11}^+ K_{21}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi a}{b s_1} \right) \operatorname{ch} \left(\frac{\pi a}{b s_2} \right) - B_{21}^+ K_{11}^+ \operatorname{sh} \left(\frac{\pi a}{b s_2} \right) \operatorname{ch} \left(\frac{\pi a}{b s_1} \right)$ – определитель системы (23), δ_n^m –

символ Кронекера.

В результате получено точное аналитическое решение задачи.

Результаты численных исследований. Расчеты напряженного состояния в пластине проведены с использованием полученных выше аналитических решений задачи (22), (23) для материалов, представленных в табл. 5.

Таблица 5

Ортогогранные материалы

$E_{ij}/E, G_{ij}/E, \nu_{ij}$	Материалы			
	M1	M2	M3	M4
E_1/E	13,200	14,370	4,552	4,544
E_2/E	1,080	7,555	4,574	4,574
E_3/E	1,080	8,199	8,755	8,755
G_{12}/E	0,565	2,135	1,330	1,397
G_{23}/E	0,338	2,060	0,675	0,675
G_{31}/E	0,565	1,280	1,395	1,395
ν_{12}	0,240	0,231	0,634	0,634
ν_{23}	0,490	0,195	0,350	0,350
ν_{31}	0,240	-0,035	0,320	0,320
s_1/s_2	8,704	4,098	1,518	1,011

В табл. 5 приведены технические упругие постоянные для некоторых ортотропных материалов: M_1 (однонаправленный эпоксидный углепластик) [17], M_2 (арагонит), M_3 (сернокислый стронций или целестит) [18]. Псевдоортотропный материал M_4 смоделирован на основе M_3 таким образом, чтобы по своим свойствам быть близким к изотропному материалу. Об этом свидетельствует отношение s_1/s_2 , примерно равное единице, приведенное последней строкой в табл.5. В расчетах использованы материалы M_1, M_2, M_4 . В табл. 5 значения модулей упругости и модулей сдвига отнесены к величине $E = 10^4 \text{ МПа}$.

На рис. 2-4 изображены зависимости напряжений $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$ от переменной x_1 на границе пластины ($x_2 = b$). При этом кривые 1-4 соответствуют значениям величины b , равным 1; 0,5; 0,1; 0,01. Значение $a = 1$ всюду. Данные рис.2-4 отражают влияние размеров пластины и упругих свойств материала на напряженное состояние.

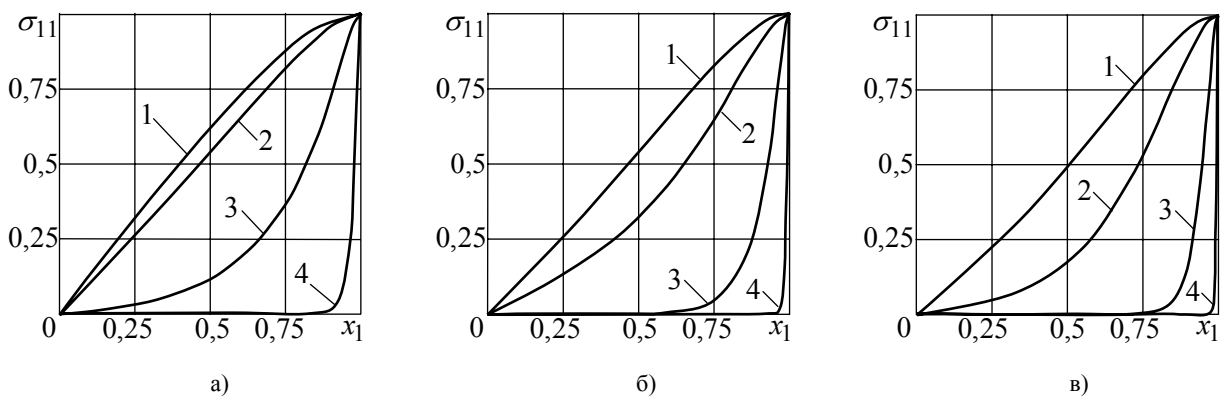


Рис. 2. Зависимость σ_{11} от x_1 на границе пластины ($x_2 = b$) для материалов: а) M_1 ; б) M_2 ; в) M_4

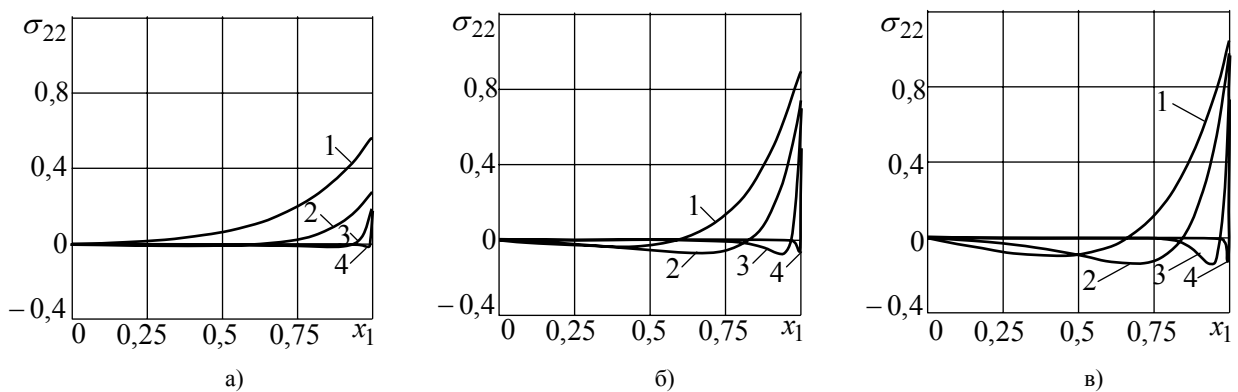


Рис. 3. Зависимость σ_{22} от x_1 на границе пластины ($x_2 = b$) для материалов: а) M_1 ; б) M_2 ; в) M_4

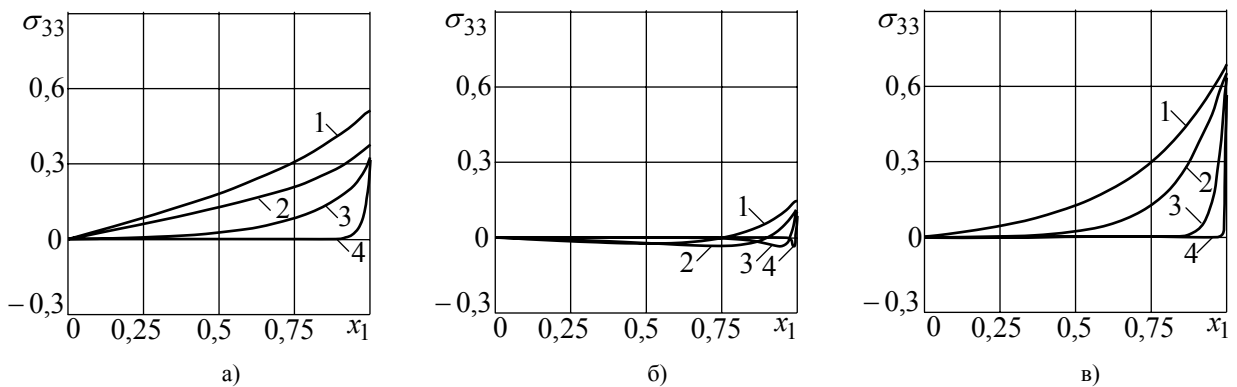


Рис. 4. Зависимость σ_{33} от x_1 на границе пластины ($x_2 = b$) для материалов: а) M_1 ; б) M_2 ; в) M_4

На рис.5 показано изменение напряжения σ_{12} в сечении ($x_2 = b/2$). Кривые 1-4 соответствуют значениям величины b , равным 1; 0,5; 0,1; 0,01.

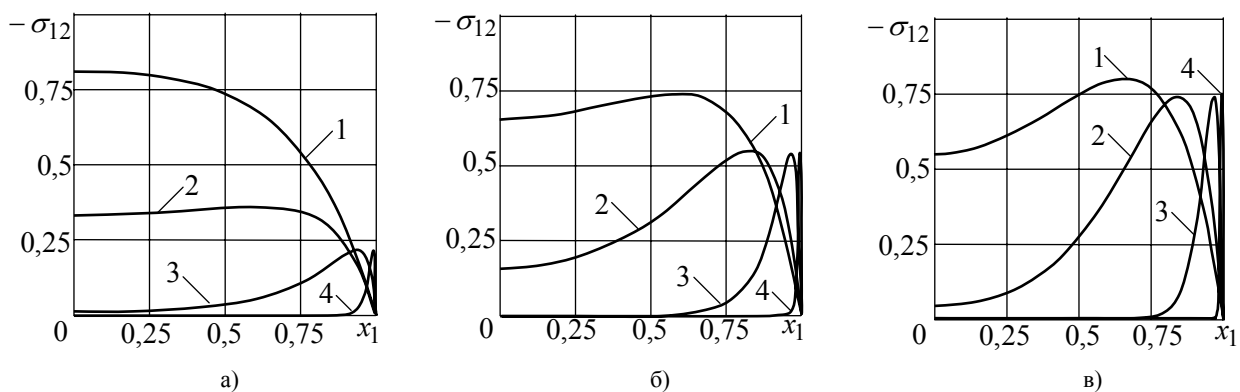


Рис. 5. Зависимость σ_{12} от x_1 в сечении пластины ($x_2 = b/2$) для материалов: а) $M1$; б) $M2$; в) $M4$

Данные рис.6 иллюстрируют изменение напряжений σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} на границе $x_1 = 1$ (кривая 1), в сечениях $x_1 = 0,5$ (кривая 2) и $x_1 = 0,25$ (кривая 3) в квадратной пластине ($a = b = 1$) из материала $M1$. Следует отметить, что при отходе от границы в область происходит затухание напряжений.

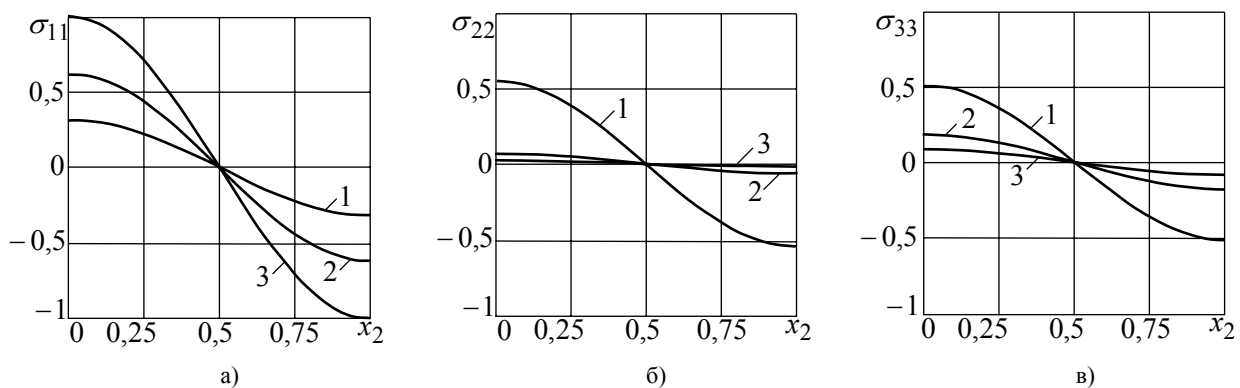


Рис. 6. Зависимости а) σ_{11} ; б) σ_{22} ; в) σ_{33} от переменной x_2 на границе $x_1 = 1$ и в сечениях пластины $x_1 = 0,5$ и $x_1 = 0,25$

Выводы. С помощью метода однородных решений получено точное аналитическое решение задачи о напряженном состоянии ортотропной пластины. Исследовано влияние изменения размеров и упругих свойств материала на напряженное состояние пластины. Установлено, что нормальные компоненты тензора напряжений достигают максимального значения в окрестности угловой точки пластины и с уменьшением одного из размеров пластины происходит их локализация у границы. Иной характер поведения имеет касательное напряжение, которое равно нулю на границе пластины и достигает максимального значения в области. Следует отметить, что в окрестности угловой точки нет особенностей в напряженном состоянии.

РЕЗЮМЕ

На базі отриманої раніше системи двовірних рівнянь рівноваги ортотропного слою запропонована методика побудовання однорідних розв'язків крайових задач для прямокутника при різних комбінаціях граничних умов на його протилежних сторонах. Отримані результати використані для пошуку точного аналітичного розв'язку задачі про напружений стан ортотропної прямокутної пластины.

Ключові слова: ортотропна прямокутна пластина, змішані граничні умови, однорідні розв'язки, точний аналітичний розв'язок.

SUMMARY

By means of the systems obtained earlier of two-dimensional equations of elastic equilibrium the technique are proposed for boundary problems homogeneous solutions construction for rectangle with different boundary conditions on its opposite edges. Obtained results are used for searching of the exact analytical solution for the problem on the stress state of the orthotropic rectangular plate.

Keywords: orthotropic rectangular plate, mixed boundary conditions, homogeneous solutions, exact analytical solution.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Мелешко В. В. Бигармоническая задача для прямоугольника: история и современность / В. В. Мелешко // Матем. методи та фіз.-мех. поля. – 2004. – Т. 47, № 3. – С. 45-68.
2. Мелешко В. В. Метод суперпозиций в задач о тепловых напряжениях в прямоугольных пластинах / В. В. Мелешко // Прикладная механика. – 2005. – Т. 41, № 9. – С. 101-117.
3. Meleshko V. V. Biharmonic problem in a rectangle / V. V. Meleshko // Applied Scientific Research. – 1998. – Vol. 58. – P. 217-249.
4. Гринченко В. Т. Равновесие и установившиеся колебания упругих тел конечных размеров / В. Т. Гринченко. – К.: Наук. думка, 1978. – 264 с.
5. Власов В. В. Метод начальных функций в задачах теории упругости и строительной механики / В. В. Власов. – М.: Стройиздат, 1975. – 223 с.
6. Lurie S. A. The Biharmonic Problem in the Theory of Elasticity / S. A. Lurie, V. V. Vasiliev. – Luxembourg: Gordon and Breach, 1995. – 265 p.
7. Лехницкий С. Г. Анизотропные пластинки / С. Г. Лехницкий. – М.: ГИТТЛ, 1957. – 464 с.
8. Лехницкий С. Г. Теория упругости анизотропного тела / С. Г. Лехницкий. – М.: Наука, 1977. – 416 с.
9. Немиш Ю. Н. Развитие аналитических методов в трехмерных задач статики анизотропных тел (обзор) / Ю. Н. Немиш // Прикладная механика. – 2000. – Т. 36, № 2. – С. 3-38.
10. Космодамианский А. С. Концентрация внутренней энергии в многосвязных телах / А. С. Космодамианский // Прикладная механика. – 2002. – Т. 38, № 4. – С. 21-48.
11. Елпатьевский А. Н. Применение метода начальных функций к плоской задаче теории упругости для тела с прямоугольной ортотропией / А. Н. Елпатьевский, Н. Н. Зимин // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1974. – № 5. – С. 94-101.
12. Лурье С. А. Изгиб прямоугольной ортотропной пластинки, защемленной по контуру / С. А. Лурье // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1982. – № 1. – С. 159-168.
13. Лурье С. А. Метод однородных решений в задач о плоском напряженном состоянии и изгибе ортотропных пластин / С. А. Лурье // Изв. АН Арм. ССР. – 1984. – Т. 37, № 6. – С. 27-38.
14. Алтухов Е. В. Однородные решения трехмерных задач равновесия ортотропных пластин с граничными условиями на торцах типа диафрагмы / Е. В. Алтухов, Н. М. Нескородев, Р. Н. Нескородев // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2008. – Вип. 6. – С. 139-145.
15. Шевченко В. П. Однородные решения задачи о равновесии анизотропных пластин с одной плоскостью упругой симметрии / В. П. Шевченко, Е. В. Алтухов, Р. Н. Нескородев // Доповіді НАН України – 2008. – № 2. – С. 73-79.
16. Altukhov E. V. Solving three-dimensional static problems for orthotropic plates with sliding edge conditions / E. V. Altukhov, R. N. Neskorojev // International Applied Mechanics. – 2008. – Vol. 44, No 8. – P. 927-937.
17. Прикладная механика композитов: сб. статей / Ред.: А. Ю. Ишлинский, Г. Г. Черный – М.: Мир, 1989. – 358 с.
18. Хантингтон Г. Упругие постоянные кристаллов / Г. Хантингтон // Успехи физических наук. – 1961. – Вып. 3. – С. 461-520.

Поступила в редакцию 30.04.2010 г.

УСТАНОВИВШИЕСЯ КОЛЕБАНИЯ УПРУГИХ ДВУХСЛОЙНЫХ ПЛАСТИН С ЖЕСТКИМИ ПЛОСКИМИ ГРАНЯМИ

Е. В. Алтухов, Е. В. Куцай, М. В. Фоменко

В трехмерной постановке рассмотрена задача о гармонических колебаниях упругой двухслойной пластины. Плоские грани пластины жестко защемлены. Слои находятся в условиях идеального контакта и являются изотропными. Полуобратным методом получены в виде суммы вихревого и потенциального состояний однородные решения систем уравнений движения в перемещениях. Исследованы дисперсионные уравнения вихревого и потенциального состояний. Проведен анализ характеристик волнового процесса.

Ключевые слова: двухслойная пластина, гармонические колебания, однородные решения, дисперсионные уравнения, критические частоты дисперсионных кривых, фазовые и групповые скорости.

Введение. Актуальным для науки и практических приложений является изучение волновых полей в слоистых средах на основе уравнений трехмерной теории упругости. Из библиографических указателей [1-3] и обзорных статей [4-11] можно получить достаточно полную информацию об исследованиях в области механики неоднородных тел. Следует отметить, что большинство научных результатов получено на основе приближенных теорий. В работах [12-14] на основе уравнений двумерной теории упругости исследованы зависимости характеристик нормальных волн в двухслойной изотропной среде от физических свойств и геометрических параметров слоев, проанализированы формы колебаний нормальных волн и особенности распределения энергии.

Важную роль в развитии аналитических методов исследования напряженного состояния однородных и поперечно-неоднородных плит сыграли однородные решения [15-21]. В работах [15,18] получены общие решения уравнений равновесия и установившихся колебаний однослойной пластины с жестко зашеченными плоскими гранями. В трехмерной постановке [16] рассмотрена аналогичная задача упругого равновесия двухслойной пластины.

Настоящая работа развивает подход [16] на случай установившихся колебаний двухслойной пластины.

Постановка задачи и решение. Рассмотрим пластину с жестко зашеченными плоскими гранями, составленную из двух изотропных слоев (рис. 1). Координатную плоскость $O\tilde{x}_1\tilde{x}_2$ совмести с плоскостью их спая, ось $O\tilde{x}_3$ направим перпендикулярно к торцам. В дальнейшем величины, относящиеся к

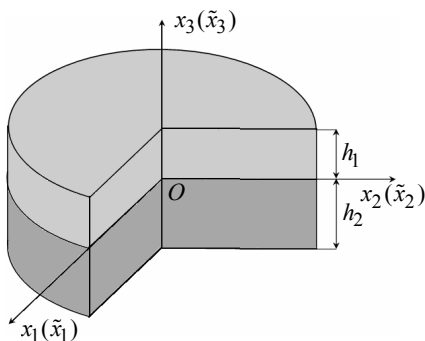


Рис. 1. Двухслойная изотропная пластина поперечно-неоднородного строения

верхнему слою, будем обозначать индексом (1), к нижнему – индексом (2). Физико-механические характеристики материалов обозначим: \tilde{G}_m – модуль сдвига, ν_m – коэффициент Пуассона (отношение деформаций), ρ_m – плотность материала, m – номер слоя.

Введем следующие безразмерные величины:

$$x_1 = \tilde{x}_1/R, \quad x_2 = \tilde{x}_2/R, \quad x_3 = \tilde{x}_3/h = \tilde{x}_3/(\lambda R),$$

$$\lambda = h/R, \quad h = h_1 + h_2, \quad \lambda_1 = h_1/h, \quad \lambda_2 = h_2/h,$$

$$u_{i(m)}(x_1, x_2, x_3) = \tilde{u}_{i(m)}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)/R,$$

$$\sigma_{ij(m)}(x_1, x_2, x_3) = \tilde{\sigma}_{ij(m)}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) / (2\tilde{G}_2) \quad (i, j = \overline{1,3}),$$

$$G_m = \tilde{G}_m/\tilde{G}_2, \quad G_1 = G \quad (m = 1, 2), \tag{1}$$

где h – толщина пластины, λ – безразмерная толщина пластины, R – характерный линейный размер в срединной плоскости пластины, λ_m – относительные толщины слоев. За счет такого перехода сокращается число рассматриваемых в дальнейшем геометрических и физических параметров.

Введем обозначения операций дифференцирования, положив

$$\partial_1 = \frac{\partial}{\partial x_1}, \quad \partial_2 = \frac{\partial}{\partial x_2}, \quad \partial_1^2 = \partial_1 \partial_1 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \quad \partial_2^2 = \partial_2 \partial_2, \quad D^2 = \partial_1^2 + \partial_2^2,$$

где D^2 – двумерный оператор Лапласа.

С учетом введенных обозначений (1) задача построения однородных решений сводится к интегрированию системы уравнений движения в перемещениях

$$\begin{aligned} \lambda^{-2} \partial_3^2 u_{1(m)} + \left(D^2 + \Omega_m^2 / \lambda^2 \right) u_{1(m)} + \nu_{0(m)} \partial_1 \theta_m &= 0, \\ \lambda^{-2} \partial_3^2 u_{2(m)} + \left(D^2 + \Omega_m^2 / \lambda^2 \right) u_{2(m)} + \nu_{0(m)} \partial_2 \theta_m &= 0, \\ \lambda^{-2} \partial_3^2 u_{3(m)} + \left(D^2 + \Omega_m^2 / \lambda^2 \right) u_{3(m)} + \lambda^{-1} \nu_{0(m)} \partial_3 \theta_m &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} u_{i(1)}(x_1, x_2, \lambda_1) &= 0, \\ u_{i(2)}(x_1, x_2, -\lambda_2) &= 0, \\ u_{i(1)}(x_1, x_2, 0) &= u_{i(2)}(x_1, x_2, 0), \\ \sigma_{i3(1)}(x_1, x_2, 0) &= \sigma_{i3(2)}(x_1, x_2, 0), \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\theta_m = \partial_1 u_{1(m)} + \partial_2 u_{2(m)} + \lambda^{-1} \partial_3 u_{3(m)}, \quad \nu_{0(m)} = 1 / (1 - 2\nu_m), \quad \Omega_m = \omega h / c_{S(m)}, \quad c_{S(m)} = \sqrt{\tilde{G}_m / \rho_m},$$

ω – круговая частота колебаний.

Представим однородные решения краевой задачи (2), (3) в виде суммы вихревого и потенциально-го состояний [17]

$$u_{i(m)}(x_1, x_2, x_3) = u_{i(m)B}(x_1, x_2, x_3) + u_{i(m)\Pi}(x_1, x_2, x_3) \quad (i = \overline{1,3}, m = \overline{1,2}),$$

Вихревое решение. Перемещения вихревого состояния имеют вид

$$\begin{aligned} u_{1(m)B}(x_1, x_2, x_3) &= p_{(m)}(x_3) \partial_2 B(x_1, x_2), \\ u_{2(m)B}(x_1, x_2, x_3) &= -p_{(m)}(x_3) \partial_1 B(x_1, x_2), \\ u_{3(m)B}(x_1, x_2, x_3) &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Подставим (4) в краевую задачу (2), (3). В результате получим уравнения для определения функций $B(x_1, x_2)$

$$D^2 B(x_1, x_2) - \left(\frac{\delta}{\lambda} \right)^2 B(x_1, x_2) = 0 \quad (5)$$

и спектральную задачу для нахождения собственных функций $p_{(m)}(x_3)$ и параметра δ :

$$\begin{aligned} \partial_3^2 p_{(m)}(x_3) + l_{(m)}^2 p_{(m)}(x_3) &= 0, \\ p_{(1)}(\lambda_1) = 0, \quad p_{(2)}(-\lambda_2) = 0, \quad p_{(1)}(0) = p_{(2)}(0), \quad G \partial_3 p_{(1)}(0) = \partial_3 p_{(2)}(0), \end{aligned} \quad (6)$$

где $l_{(m)}^2 = \Omega_m^2 + \delta^2$.

Собственные функции спектральной задачи (6) получаются такими

$$\begin{aligned} p_{(1)k}(x_3) &= \sin(\lambda_1 - x_3) l_{(1)k}, \\ p_{(2)k}(x_3) &= \sin(l_{(1)k} \lambda_1) \cos(l_{(2)k} x_3) - \frac{G l_{(1)}}{l_{(2)}} \cos(l_{(1)k} \lambda_1) \sin(l_{(2)k} x_3), \end{aligned} \quad (7)$$

а собственные значения δ находим из трансцендентного уравнения

$$G l_{(1)} \cos(l_{(1)} \lambda_1) \sin(l_{(2)} \lambda_2) + l_{(2)} \sin(l_{(1)} \lambda_1) \cos(l_{(2)} \lambda_2) = 0. \quad (8)$$

В результате однородные решения вихревого состояния примут вид

$$u_{1(m)B} = \sum_{k=1}^{\infty} p_{(m)k} \partial_2 B_k, \quad u_{2(m)B} = - \sum_{k=1}^{\infty} p_{(m)k} \partial_1 B_k, \quad u_{3(m)B} = 0. \quad (9)$$

Полагая $\omega = 0$, уравнение (8) в преобразуется к виду

$$(G - 1) \sin \delta (\lambda_1 - \lambda_2) + (G + 1) \sin \delta = 0$$

и совпадает с известным [16].

Когда $\lambda_2 = 0$, $G = 0$, уравнение (8) примет вид [15]

$$\sin l_{(1)} = 0.$$

Потенциальное решение. Для построения потенциального решения полагаем

$$\begin{aligned} u_{1(m)II}(x_1, x_2, x_3) &= n_{(m)}(x_3) \partial_1 C(x_1, x_2), \\ u_{2(m)II}(x_1, x_2, x_3) &= n_{(m)}(x_3) \partial_2 C(x_1, x_2), \\ u_{3(m)II}(x_1, x_2, x_3) &= q_{(m)}(x_3) C(x_1, x_2). \end{aligned} \quad (10)$$

Из выражений (2), (3), (10) следует, что функция $C(x_1, x_2)$ удовлетворяет уравнению

$$D^2 C(x_1, x_2) - \left(\frac{\gamma}{\lambda}\right)^2 C(x_1, x_2) = 0, \quad (11)$$

а для определения функций $n_{(m)}(x_3)$, $q_{(m)}(x_3)$ и параметра γ получаем системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} n''_{(m)}(x_3) + \left[\Omega_m^2 + \gamma^2 (1 + \nu_{0(m)}) \right] n_{(m)}(x_3) + \lambda \nu_{0(m)} q'_{(m)}(x_3) &= 0, \\ q''_{(m)}(x_3) + \frac{\Omega_m^2 + \gamma^2}{1 + \nu_{0(m)}} q_{(m)}(x_3) + \frac{\gamma^2 \nu_{0(m)}}{\lambda (1 + \nu_{0(m)})} n'_{(m)}(x_3) &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

и граничные условия

$$\begin{aligned} n_{(1)}(\lambda_1) = 0, \quad q_{(1)}(\lambda_1) = 0, \quad n_{(2)}(-\lambda_2) = 0, \quad q_{(2)}(-\lambda_2) = 0, \\ n_{(1)}(0) = n_{(2)}(0), \quad q_{(1)}(0) = q_{(2)}(0), \\ G(\lambda q_{(1)}(0) + n'_{(1)}(0)) = \lambda q_{(2)}(0) + n'_{(2)}(0), \\ G((\nu_{0(m)} - 1)\gamma^2 n_{(1)}(0) + \lambda(1 + \nu_{0(m)})q'_{(1)}(0)) = (\nu_{0(m)} - 1)\gamma^2 n_{(2)}(0) + \lambda(1 + \nu_{0(m)})q'_{(2)}(0). \end{aligned} \quad (13)$$

Общее решение системы (13) имеет вид

$$\begin{aligned} n_{(m)}(x_3) &= H_{1(m)} \cos \gamma_{1(m)} x_3 + H_{2(m)} \sin \gamma_{1(m)} x_3 + H_{3(m)} \cos \gamma_{2(m)} x_3 + H_{4(m)} \sin \gamma_{2(m)} x_3, \\ q_{(m)}(x_3) &= Q_{1(m)} \sin \gamma_{1(m)} x_3 + Q_{2(m)} \cos \gamma_{1(m)} x_3 + Q_{3(m)} \sin \gamma_{2(m)} x_3 + Q_{4(m)} \cos \gamma_{2(m)} x_3. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \gamma_{1(m)} &= \Omega_m^2 / (1 + \nu_{0(m)}) + \gamma^2, \quad \gamma_{2(m)} = \Omega_m^2 + \gamma^2. \\ Q_{1(m)} &= -\frac{\gamma_{1(m)}}{\lambda} H_{1(m)}, \quad Q_{2(m)} = \frac{\gamma_{1(m)}}{\lambda} H_{2(m)}, \quad Q_{3(m)} = -\frac{\gamma^2}{\lambda \gamma_{2(m)}} H_{3(m)}, \quad Q_{4(m)} = \frac{\gamma^2}{\lambda \gamma_{2(m)}} H_{4(m)} \end{aligned} \quad (15)$$

Подставляя выражения (14) в граничные условия (13) с учетом (15), получим однородную систему линейных алгебраических уравнений относительно $H_{i(m)}$ ($i = \overline{1, 4}$). Элементы определителя $\det \{A_{ij}\}$ ($i, j = \overline{1, 8}$) этой системы имеют вид

$$\begin{aligned} A_{11} &= \cos \gamma_{1(1)} \lambda_1, \quad A_{12} = \sin \gamma_{1(1)} \lambda_1, \quad A_{13} = \cos \gamma_{2(1)} \lambda_1, \quad A_{14} = \sin \gamma_{2(1)} \lambda_1, \quad A_{15} = 0, \quad A_{16} = 0, \\ A_{17} &= 0, \quad A_{18} = 0, \quad A_{21} = -\gamma_{1(1)} \sin \gamma_{1(1)} \lambda_1, \quad A_{22} = \gamma_{1(1)} \cos \gamma_{1(1)} \lambda_1, \quad A_{23} = -\frac{\gamma^2}{\gamma_{2(1)}} \sin \gamma_{2(1)} \lambda_1, \\ A_{24} &= \frac{\gamma^2}{\gamma_{2(1)}} \cos \gamma_{2(1)} \lambda_1, \quad A_{25} = 0, \quad A_{26} = 0, \quad A_{27} = 0, \quad A_{28} = 0, \quad A_{31} = 1, \quad A_{32} = 0, \quad A_{33} = 1, \quad A_{34} = 0, \\ A_{35} &= -1, \quad A_{36} = 0, \quad A_{37} = -1, \quad A_{38} = 0, \quad A_{41} = 0, \quad A_{42} = \gamma_{1(1)}, \quad A_{43} = 0, \quad A_{44} = \frac{\gamma^2}{\gamma_{2(1)}}, \quad A_{45} = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_{46} &= -\gamma_{1(2)}, \quad A_{47} = 0, \quad A_{48} = -\frac{\gamma^2}{\gamma_{2(2)}}, \quad A_{51} = 0, \quad A_{52} = 2G\gamma_{1(1)}, \quad A_{53} = 0, \quad A_{54} = G\frac{\gamma^2 + \gamma_{2(1)}^2}{\gamma_{2(1)}}, \quad A_{55} = 0, \\
 A_{56} &= -2\gamma_{1(2)}, \quad A_{57} = 0, \quad A_{58} = -\frac{\gamma^2 + \gamma_{2(2)}^2}{\gamma_{2(2)}}, \quad A_{61} = G\left(\left(\nu_{0(1)} - 1\right)\gamma^2 - \gamma_{1(1)}^2\left(1 + \nu_{0(1)}\right)\right), \quad A_{62} = 0, \\
 A_{63} &= -2G\gamma^2, \quad A_{64} = 0, \quad A_{65} = -\left(\nu_{0(2)} - 1\right)\gamma^2 + \gamma_{1(2)}^2\left(\nu_{0(2)} + 1\right), \quad A_{66} = 0, \quad A_{67} = 2\gamma^2, \quad A_{68} = 0, \\
 A_{71} &= 0, \quad A_{72} = 0, \quad A_{73} = 0, \quad A_{74} = 0, \quad A_{75} = \cos \gamma_{1(2)}\lambda_2, \quad A_{76} = -\sin \gamma_{1(2)}\lambda_2, \quad A_{77} = \cos \gamma_{2(2)}\lambda_2, \\
 A_{78} &= -\sin \gamma_{2(2)}\lambda_2, \quad A_{81} = 0, \quad A_{82} = 0, \quad A_{83} = 0, \quad A_{84} = 0, \quad A_{85} = \gamma_{1(2)} \sin \gamma_{1(2)}\lambda_2, \\
 A_{86} &= \gamma_{1(2)} \cos \gamma_{1(2)}\lambda_2, \quad A_{87} = \frac{\gamma^2}{\gamma_{2(2)}} \sin \gamma_{2(2)}\lambda_2, \quad A_{88} = \frac{\gamma^2}{\gamma_{2(2)}} \cos \gamma_{2(2)}\lambda_2.
 \end{aligned}$$

Из условия равенства нулю данного определителя получаем дисперсионное уравнение

$$\begin{aligned}
 r_1 &\left(d_1(G-1)^2 + e_1(G-1) + f_1\right)C_{11}C_{21}C_{12}C_{22} + r_2\left(d_2(G-1)^2 + e_2(G-1) + f_2\right)C_{11}C_{21}S_{12}S_{22} + \\
 &+ r_3e_3GC_{11}S_{21}C_{12}S_{22} + r_4e_4GC_{11}S_{21}S_{12}C_{22} + r_5e_5GS_{11}C_{21}C_{12}S_{22} + r_6e_6GS_{11}C_{21}S_{12}C_{22} + \\
 &+ r_7\left(d_7(G-1)^2 + e_7(G-1) + f_7\right)S_{11}S_{21}C_{12}C_{22} + r_8\left(d_8(G-1)^2 + e_8(G-1) + f_8\right)S_{11}S_{21}S_{12}S_{22} + \\
 &+ r_9\left(d_9(G-1)^2 + e_9(G-1) + f_9\right)C_{11}C_{21} + r_{10}\left(d_{10}(G-1)^2 + e_{10}(G-1) + f_{10}\right)S_{11}S_{21} + \\
 &+ r_{11}\left(d_{11}(G-1)^2 + e_{11}(G-1) + f_{11}\right)C_{12}C_{22} + r_{12}\left(d_{12}(G-1)^2 + e_{12}(G-1) + f_{12}\right)S_{12}S_{22} + \\
 &+ r_{13}\left(d_{13}(G-1)^2 + e_{13}(G-1) + f_{13}\right) = 0.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 r_1 &= 2\gamma^2\gamma_{1(1)}\gamma_{1(2)} / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}\right), \quad d_1 = \zeta_1^2 + 4\gamma^4, \quad e_1 = \Delta\left(4\gamma^2 + \Omega_1^2\right) + \Omega_1^4, \quad f_1 = \Delta^2 + \Omega_1^2\Omega_2^2, \\
 r_2 &= \gamma_{1(1)} / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}^2\right), \quad d_2 = \xi_2\left(\zeta_2^2 + 4\gamma^4\right), \quad e_2 = 2\zeta_1\xi_2\Omega_1^2 - 8\gamma^6\Omega_2^2 - 2\gamma^4\Omega_1^2\Omega_2^2, \\
 f_2 &= \gamma^4\left(\Delta^2 + \Omega_2^4\right) + \tau_2\Omega_1^4, \quad r_3 = -\gamma^2\gamma_{1(1)}\gamma_{1(2)} / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}^2\right), \quad e_3 = \Omega_1^2\Omega_2^2\left(\gamma_{2(1)}^2 + \gamma_{2(2)}^2\right), \\
 r_4 &= \gamma_{1(1)} / \left(\gamma_{2(1)}^2\gamma_{2(2)}\right), \quad e_4 = \Omega_1^2\Omega_2^2\xi_{21}, \quad r_5 = \gamma_{1(2)} / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}^2\right), \quad e_5 = \Omega_1^2\Omega_2^2\xi_{12}, \\
 r_6 &= -\gamma^2 / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}\right), \quad e_6 = \Omega_1^2\Omega_2^2\left(\gamma_{1(1)}^2 + \gamma_{1(2)}^2\right), \quad r_7 = \gamma_{1(2)} / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}\right), \quad d_7 = 2\gamma^4\left(\zeta_1^2 + 4\tau_1\right), \\
 e_7 &= 2\gamma^2\left(2\gamma^2\zeta_1\Omega_1^2 - 2\xi_1\Omega_2^2 - \gamma^2\Omega_1^2\Omega_2^2\right), \quad f_7 = \gamma^4\left(\Delta^2 + \Omega_1^4\right) + \tau_1\Omega_2^4, \quad r_8 = \gamma^2 / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}^2\right), \\
 d_8 &= \xi_2\left(\zeta_1^2 + 4\tau_1\right), \quad e_8 = 2\zeta_1\xi_2\Omega_1^2 - 4\gamma^2\xi_1\Omega_2^2 - 2\gamma^4\Omega_1^2\Omega_2^2, \quad f_8 = \gamma^4\Delta^2 + \tau_2\Omega_1^4 + \tau_1\Omega_2^4, \\
 r_9 &= -2\gamma_{1(1)}\gamma_{1(2)}\gamma^2 / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}\right), \quad d_9 = \zeta_1^2 + 4\gamma^4, \quad e_9 = \Delta\left(4\gamma^2 + \Omega_1^2\right) + \Omega_1^4, \quad f_9 = \Omega_1^2\Delta, \\
 r_{10} &= -2\gamma_{1(2)}\gamma^2 / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}\right), \quad d_{10} = \gamma^2\left(\zeta_1^2 + 4\tau_1\right), \quad e_{10} = 2\gamma^2\zeta_1\Omega_1^2 - 2\xi_1\Omega_2^2 - \gamma^2\Omega_1^2\Omega_2^2, \\
 f_{10} &= \gamma^2\Omega_1^2\Delta, \quad r_{11} = -2\gamma_{1(1)}\gamma_{1(2)}\gamma^2 / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}\right), \quad d_{11} = 4\gamma^2\zeta_1, \quad e_{11} = 4\gamma^2\Delta - \Omega_1^2\Omega_2^2, \quad f_{11} = -\Delta\Omega_2^2, \\
 r_{12} &= -2\gamma_{1(1)}\gamma^2 / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}^2\right), \quad d_{12} = 2\zeta_1\xi_2, \quad e_{12} = 2\xi_2\Omega_1^2 - 4\gamma^4\Omega_2^2 - \gamma^2\Omega_1^2\Omega_2^2, \quad f_{12} = -\gamma^2\Delta\Omega_2^2, \\
 r_{13} &= 2\gamma_{1(1)}\gamma_{1(2)}\gamma^2 / \left(\gamma_{2(1)}\gamma_{2(2)}\right), \quad d_{13} = 4\gamma^2\zeta_1, \quad e_{13} = 4\gamma^2\Delta - \Omega_1^2\Omega_2^2, \quad f_{13} = -\Omega_1^2\Omega_2^2; \\
 \Delta &= \Omega_1^2 - \Omega_2^2, \quad \zeta_1 = \gamma^2 + \gamma_{2(1)}^2, \quad \tau_1 = \gamma_{1(1)}^2\gamma_{2(1)}^2, \quad \tau_2 = \gamma_{1(2)}^2\gamma_{2(2)}^2, \\
 \xi_1 &= \gamma^4 + \gamma_{1(1)}^2\gamma_{2(1)}^2, \quad \xi_2 = \gamma^4 + \gamma_{1(2)}^2\gamma_{2(2)}^2, \quad \xi_{12} = \gamma^4 + \gamma_{1(1)}^2\gamma_{2(2)}^2, \quad \xi_{21} = \gamma^4 + \gamma_{2(1)}^2\gamma_{1(2)}^2; \\
 S_{jm} &= \sin \gamma_{j(m)}\lambda_m, \quad C_{jm} = \cos \gamma_{j(m)}\lambda_m \quad (j, m = 1, 2).
 \end{aligned}$$

Если $\omega \rightarrow 0$, тогда уравнение (16) преобразуется к виду

$$E_1 r_1 r_2 s_1^2 s_2^2 - E_2 g_2^2 r_1 s_1^2 - E_3 g_1^2 r_2 s_2^2 + E_4 (g_1^2 - r_1^2 s_1^2) + E_5 (g_2^2 - r_2^2 s_2^2) + E_6 (g_1 g_2 - r_1 r_2 s_1 c_1 s_2 c_2) + E_7 g_1^2 g_2^2 = 0,$$

где

$$E_1 = r_2 G^2 + 2k_1 k_2 G + r_1, \quad E_2 = (G-1)(G+r_1), \quad E_3 = -(G-1)(r_2 G + 1), \\ E_4 = (1+k_2)^2, \quad E_5 = G^2(1+k_1)^2, \quad E_6 = 2G(1+k_1)(1+k_2); \quad E_7 = -(G-1)^2; \\ k_m = 1 - 2\nu_m, \quad r_m = 1 + 2k_m, \quad g_m = \gamma \lambda_m, \quad c_m = \cos g_m, \quad s_m = \sin g_m.$$

и совпадает с известным [16].

Таким образом, потенциальное решение примет вид

$$u_{1(m)\Pi}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{p=1}^{\infty} n_{(m)p}(x_3) \partial_1 C_p(x_1, x_2) \\ u_{2(m)\Pi}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{p=1}^{\infty} n_{(m)p}(x_3) \partial_2 C_p(x_1, x_2) \\ u_{3(m)\Pi}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{p=1}^{\infty} q_{(m)p}(x_3) C_p(x_1, x_2)$$

Для длинных волн при $\gamma = 0$ уравнение (16) принимает вид

$$F(\Omega) \equiv (G \Omega_1 c_{21} s_{22} + \Omega_2 s_{21} c_{22}) (G k_1^{-1} \Omega_1 c_{11} s_{12} + k_2^{-1} \Omega_2 s_{11} c_{12}) = 0, \quad (17)$$

где

$$k_m = \sqrt{(1-2\nu_m)/(2-2\nu_m)}; \\ s_{1m} = \sin(k_m \Omega_m \lambda_m), \quad s_{2m} = \sin(\Omega_m \lambda_m), \\ c_{1m} = \cos(k_m \Omega_m \lambda_m), \quad c_{2m} = \cos(\Omega_m \lambda_m) \quad (m = 1, 2).$$

Трансцендентное уравнение (17) определяет две независимые системы критических частот:

$$G \Omega_1 c_{21} s_{22} + \Omega_2 s_{21} c_{22} = 0, \quad (18)$$

$$G k_1^{-1} \Omega_1 c_{11} s_{12} + k_2^{-1} \Omega_2 s_{11} c_{12} = 0. \quad (19)$$

Частоты, задаваемые уравнением (18), не зависят от значений коэффициентов Пуассона ν_1, ν_2 , в отличие от корней уравнения (19), образующих второе семейство критических частот. При некоторых ν_1, ν_2 частоты из соседних семейств могут совпадать.

Для исследования процесса переноса энергии основное значение имеют распространяющиеся моды, соответствующие мнимым участкам дисперсионных ветвей. Важнейшие характеристики распространяющихся мод – фазовая и групповая скорости. В каждой точке ветви кривой фазовая скорость представляется в виде $c_p = \omega / k = ic \Omega / \gamma$, где $\Omega = \omega h / c$, $k = -i\gamma / h$, $i = \sqrt{-1}$. Групповая скорость c_g распространяющихся мод согласно кинематическому определению задается равенством $c_g = d\omega / dk = ic d\Omega / d\gamma$ и представляет собой тангенс угла наклона касательной к мнимому участку ветви в данной точке.

Результаты численных исследований. Пусть верхний слой пластины изготовлен из алюминия и характеризуется параметрами среды $\rho_1 = 2,7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $\tilde{G}_1 = 2,61 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$, $\nu_1 = 0,35$, $c_{S1} = 3110 \text{ м/с}$, а нижний – из вольфрама: $\rho_2 = 18,7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $\tilde{G}_2 = 15,3 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$, $\nu_2 = 0,29$, $c_{S2} = 2860 \text{ м/с}$. Расчеты производились для таких вариантов:

1. $\lambda_1 = 1/3$, $\lambda_2 = 2/3$;
2. $\lambda_1 = 2/3$, $\lambda_2 = 1/3$;
3. $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$.

При этом входящие в приведенное решение безразмерные частоты Ω_1 , Ω_2 , и нормирующая размерная скорость c выбирались следующими:

$$\Omega_1 = \Omega c_{S2} / c_{S1}, \Omega_2 = \Omega, c = c_{S2}.$$

В табл. 1 приведены первые пятнадцать критических частот ($\delta = 0$ или $\gamma = 0$) дисперсионного уравнения (8) – столбцы 1-3, и дисперсионного уравнения (16) – столбцы 4-6. Столбцы 1, 4 соответствуют варианту 1; столбцы 2, 5 – варианту 2; столбцы 3, 6 – однослойной пластине из вольфрама.

Таблица 1

Номер частоты	Значение критических частот					
	1	2	3	4	5	6
1	2,58619	4,08457	3,14159	2,58619	4,08457	3,14159
2	6,92388	5,77598	6,28318	4,88420	5,77598	5,77656
3	10,0273	10,1787	9,42478	6,92388	7,79971	6,28319
4	12,1340	13,8066	12,5664	10,0273	10,1787	9,42478
5	16,4150	15,7779	15,7080	12,1340	11,6415	11,5531
6	19,9995	20,3493	18,8496	12,8350	13,8066	12,5664
7	21,7551	23,4455	21,9911	16,4150	15,7779	15,7080
8	25,8974	25,8724	25,1327	19,8207	20,3493	17,3297
9	29,8550	30,5001	28,2743	19,9995	20,8762	18,8496
10	31,5001	33,0560	31,4159	21,7551	23,4455	21,9911
11	35,3776	36,0156	34,5575	23,2039	25,8724	23,1062
12	39,5647	40,6101	37,6991	25,8974	26,1437	25,1327
13	41,3899	42,6832	40,8407	29,8550	30,5001	28,2743
14	44,8615	46,1826	43,9823	30,4406	32,2667	28,8828
15	49,1629	50,6403	47,1239	31,5001	33,0560	31,4159

В табл. 2 отражено влияние относительных толщин слоев на первые десять критических частот вихревого и потенциального решений.

Таблица 2

Влияние относительной толщины на критические частоты вихревого и потенциального состояний

Номер частоты	Значение критических частот							
	$\lambda_1 = 0,01$	$\lambda_1 = 0,1$	$\lambda_1 = 0,9$	$\lambda_1 = 0,99$	$\lambda_1 = 0,01$	$\lambda_1 = 0,1$	$\lambda_1 = 0,9$	$\lambda_1 = 0,99$
1	2,99758	2,41905	3,72034	3,44334	2,99758	2,41905	3,72034	3,44334
2	6,00447	5,54013	7,41597	6,88667	5,57876	4,65107	7,41597	6,88667
3	9,02737	8,88892	11,0197	10,3300	6,00447	5,54013	7,69986	7,16441
4	12,0694	12,2991	14,2062	13,7732	9,02737	8,88892	11,0197	10,3300
5	15,1305	15,7296	16,5052	17,2164	11,1662	10,3363	14,2062	13,7732
6	18,2090	19,1647	19,4324	20,6596	12,0694	12,2991	15,3115	14,3288
7	21,3023	22,5925	22,9762	24,1026	15,1305	15,7296	16,5052	17,2164
8	24,4081	25,9945	26,6569	27,5455	16,7695	16,4488	19,4324	20,6596
9	27,5239	29,3169	30,3735	30,9884	18,2090	19,1647	22,5402	21,4931
10	30,6481	32,3293	34,0958	34,4310	21,3023	22,5925	22,9762	24,1026

В табл. 3 приведены первые десять критических частот уравнения (17) для двухслойной пластины в зависимости от изменения коэффициента Пуассона ν_2 нижнего слоя. При этом значения параметров следующие: $G = 1$, $\rho_1 / \rho_2 = 1$, $\lambda_1 = \lambda_2 = 0,5$, $\nu_1 = 0,3$.

Таблица 3

Влияние коэффициента Пуассона на критические частоты потенциального решения

Номер частоты	Значение частот записания					
	$\nu_2 = 0,05$	$\nu_2 = 0,1$	$\nu_2 = 0,2$	$\nu_2 = 0,3$	$\nu_2 = 0,4$	$\nu_2 = 0,45$
1	3,14159	3,14159	3,14159	3,14159	3,14159	3,14159
2	5,21881	5,29359	5,50360	5,87738	6,28318	6,28318
3	6,28318	6,28318	6,28318	6,28318	6,78265	8,05807
4	9,42478	9,42478	9,42478	9,42478	9,42478	9,42478
5	10,1323	10,3458	10,9081	11,7548	12,5664	12,5664
6	12,5664	12,5664	12,5664	12,5664	13,1195	14,3589
7	15,6075	15,7080	15,7080	15,7080	15,7080	15,7080
8	15,7080	15,8513	16,5062	17,6321	18,8496	18,8496
9	18,8496	18,8496	18,8496	18,8496	20,2667	21,9911
10	20,3478	20,7434	21,8248	21,9911	21,9911	22,8545

Уравнения (8) и (16) определяют счетное множество дисперсионных кривых – зависимостей частоты Ω от параметра δ или γ . На рис. 2 и 3 соответственно для вариантов 1, 2 представлены спектральные кривые зависимостей параметра δ от частоты Ω , соответствующие дисперсионному уравнению вихревого состояния (8).

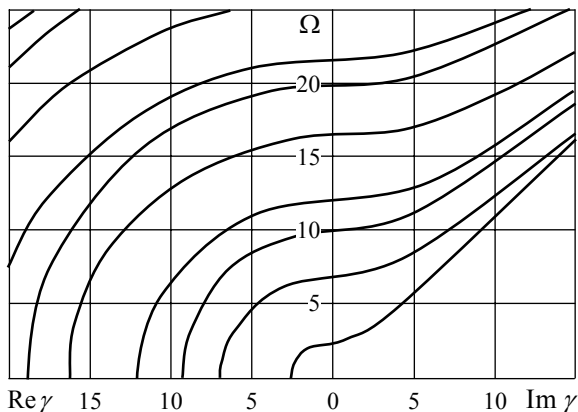


Рис. 2

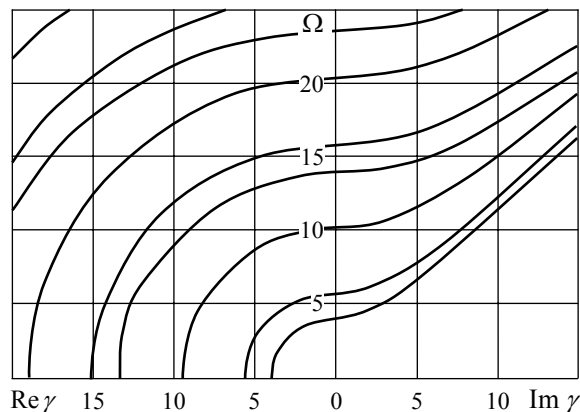


Рис. 3

На рис. 4 и 5 представлены спектральные кривые зависимостей частоты Ω от параметра γ , соответствующие дисперсионному уравнению потенциального состояния (16) для варианта 1 и варианта 2.

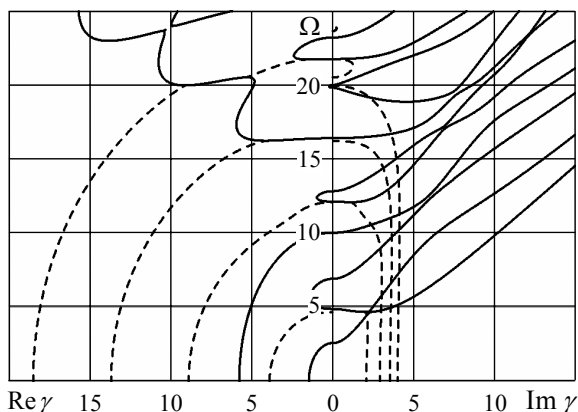


Рис. 4

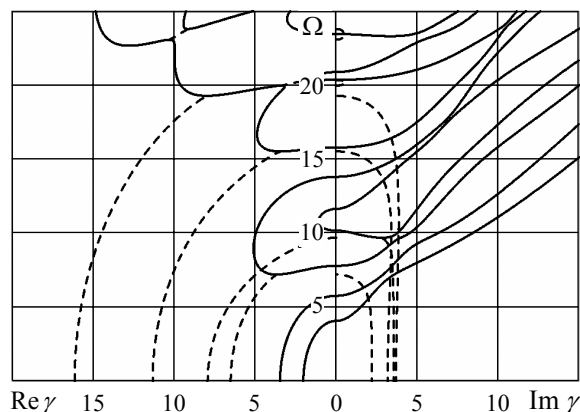
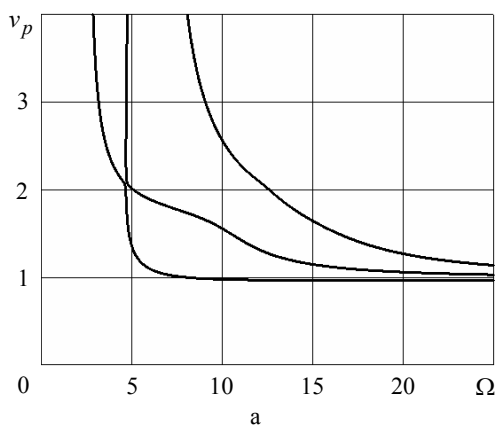


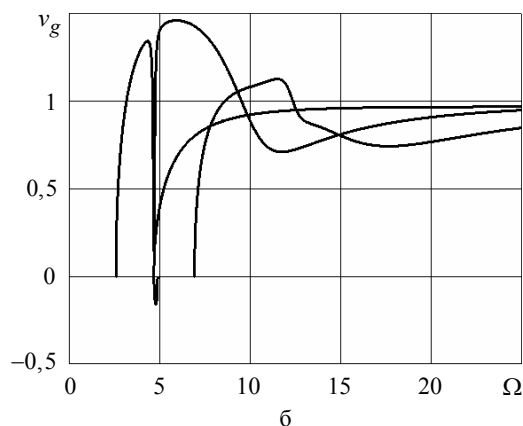
Рис. 5

На диаграммах дисперсионных кривых сплошные линии соответствуют вещественным и чисто мнимым корням, штриховые – проекциям комплексных дисперсионных кривых на действительную ($Re\gamma, \Omega$) и мнимую ($Im\gamma, \Omega$) плоскости. Уравнение (16) при фиксированной частоте имеет конечное число действительных и чисто мнимых корней и счетное множество комплексных корней.

Для потенциального состояния на рис. 6 и 7 соответственно для варианта 1 и варианта 2 приведены графики изменения безразмерных фазовых $v_p = c_p / c$ (рис. 6, а и рис. 7, а) и групповых $v_g = c_g / c$ (рис. 6, б и рис. 7, б) скоростей первых трех распространяющихся мод.



а



б

Рис. 6

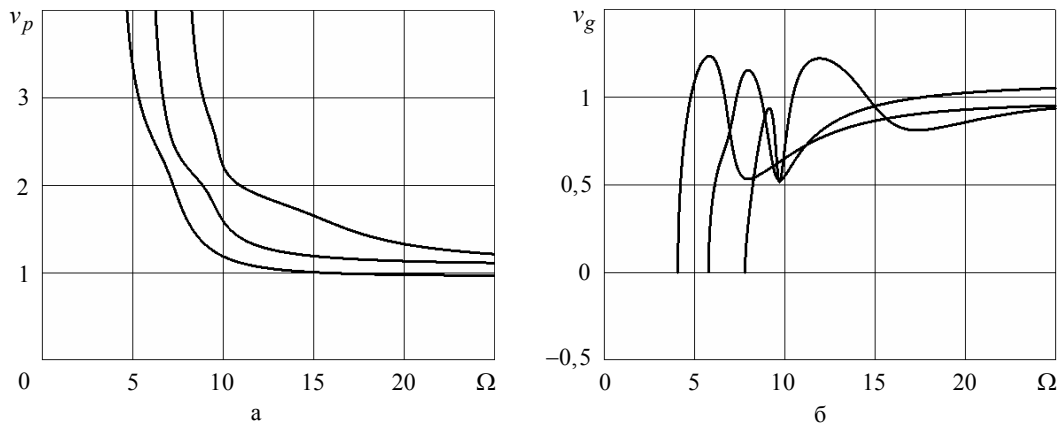


Рис. 7

На рис. 8 представлены графики изменения безразмерных фазовых и групповых скоростей первых двух мод для варианта 3 (сплошные линии), а также первой симметричной (штриховая линия) и антисимметричной (штрих-пунктирная линия) моды в однослойной пластине, изготовленной из материала второго слоя. Первая мода в двухслойной пластине вначале (при длинных волнах) приближается к пер-

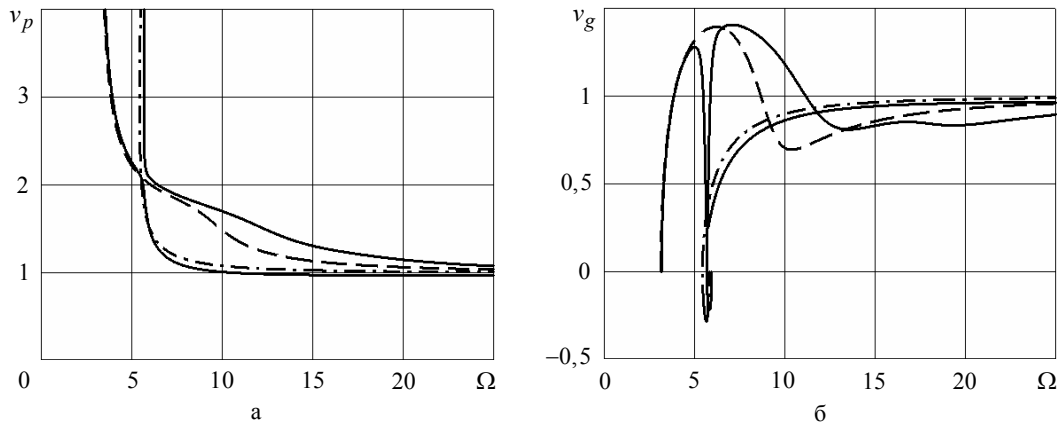


Рис. 8

вой симметричной моде, а затем к антисимметричной моде однослойной пластины. Поведение второй моды носит противоположный характер – приближается вначале к антисимметричной, затем к симметричной моде однослойной пластины.

Видно, что вблизи критических частот фазовая скорость $c_p \rightarrow \infty$, а групповая $c_g = 0$. Как для фазовой, так и для групповой скоростей наблюдается сильная зависимость их от величин λ_1, λ_2 . В высокочастотном диапазоне все распространяющиеся моды двухслойной пластины становятся бездисперсными, и значения групповой скорости моды мало отличается от значений фазовой скорости.

Выводы. Получены однородные решения системы уравнений движения в перемещениях для двухслойной пластины в случае жестко защемленных плоских граней и идеального контакта слоев. Однородные решения состоят из вихревого и потенциального состояний.

Собственные функции вихревого решения находится в явном виде. Для определения собственных значений вихревого и потенциального состояний получены дисперсионные уравнения в формах, приспособленных для численных исследований. Дисперсионные уравнения имеют, как и в случае упругого слоя, действительные, мнимые и комплексные корни.

Дисперсионное уравнение вихревого решения по форме совпадает с дисперсионным уравнением, полученным в двумерной задаче о колебаниях пластины [12].

Получено трансцендентное уравнение для определения критических частот, множество которых состоит из двух независимых серий.

На основании численных исследований изучены изменения собственных значений вихревого и потенциального решений, фазовых и групповых скоростей от частоты колебаний. Показано влияние коэффициента Пуассона и относительной толщины на изменение критических частот. Построены диаграммы дисперсионных кривых и графики изменения фазовых и групповых скоростей бегущих мод.

Установлено, что в области низких частот появляются одновременно две действительные моды. Одна из них является аналогом низкочастотной симметричной действительной моды в однослойной изотропной пластине из материала первого слоя, а другая – второго слоя.

РЕЗЮМЕ

У тривимірній постановці розглянута задача про гармонійні коливання пружної двошарової пластини. Плоскі грані пластини жорстко затиснені. Шари знаходяться в умовах ідеального контакту і є ізотропними. Напівоберненим методом отримані у вигляді суми вихрового та потенційного станів однорідні розв'язки системи рівнянь руху в переміщеннях. Досліджені дисперсійні рівняння вихрового та потенційного станів. Проведено аналіз характеристик хвильового процесу.

Ключові слова: двошарова пластина, гармонійні коливання, однорідні розв'язки, дисперсійні рівняння, критичні частоти дисперсійних кривих, фазові та групові швидкості.

SUMMARY

In three-dimensional statement the problem of steady-state vibration of elastic two-layer plate is considered. Planar faces of the plate is rigidly clamped. Layers are in conditions of ideal contact and are isotropic. Homogeneous solutions of system of motion equations in displacements are constructed by semi-inverse method in sum of a vortical and potential states. The dispersion equation of vortical and potential states are investigated. The analysis of the characteristics of the wave process is carry out.

Key words: two-layer plate, harmonic vibration, homogeneous solutions, dispersion equations, cut-off frequencies of dispersion curves, phase and group velocities.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Колчин Г. Б. Теория упругости неоднородных тел: Библиографический указатель отечественной и иностранной литературы / Г. Б. Колчин, Э. А. Фаверман. – Кишинев: Штиница, 1972. – 248 с.
2. Колчин Г. Б. Теория упругости неоднородных тел: Библиографический указатель отечественной и иностранной литературы за 1970-1973 г. / Г. Б. Колчин, Э. А. Фаверман. – Кишинев: Штиница, 1977. – 146 с.
3. Колчин Г. Б. Теория упругости неоднородных тел: Библиографический указатель отечественной и иностранной литературы за 1974-1979 г. / Г. Б. Колчин, Э. А. Фаверман. – Кишинев: Штиница, 1987. – 167 с.
4. Пискунов В. Г. Итерационная аналитическая теория в механике слоистых композитных систем / В. Г. Пискунов // Мех. композитных материалов. – 2003. – Т. 39, № 1. – С. 3-24.
5. Пискунов В. Г. Развитие теории слоистых пластин и оболочек / В. Г. Пискунов, А. О. Рассказов // Прикл. механика. – 2002. – Т. 38, № 2. – С. 22-56.
6. Шульга Н. А. Распространение упругих волн в периодически-неоднородных средах / Н. А. Шульга // Прикл. механика. – 2003. – Т. 39, № 7. – С. 15-56.
7. Altenbach H. Theories for laminated and sandwich plates. A review / H. Altenbach // Mechanics of composite materials. – 1998. – Vol. 34, No 3. – P. 243-252.
8. Birmon V. Modeling and Analysis of Functionally Graded Materials and Structures // Applied mechanics reviews. – 2007. – Vol. 60, No 5. – P. 195-216.
9. Carrera E. Historical review of Zig-Zag theories for multilayered plates and shells / E. Carrera // Applied mechanics reviews. – 2003. – Vol. 56, No 3. – P. 287-308.
10. Carrera E. A survey with numerical assessment of classical and refined theories for the analysis of sandwich plates / E. Carrera, S. Brischetto // Applied mechanics reviews. – 2009. – Vol. 62, No 1. – P. 1-17.
11. Reddy J. N. Theories and computational models for composite laminates / J. N. Reddy, D. H. Jr. Robbins // Applied mechanics reviews. – 1994. – Vol. 47, No 6, pt.1. – P. 147-169.
12. Джонс Р. П. Распространение волн в двухслойной среде / Р. П. Джонс // Прикл. механика (Trans. ASME). Сер.Е. – 1964. – Т. 31, № 2. – С. 62-70.
13. Жарков К. В. Групповые скорости сдвиговых нормальных волн в двухслойной среде / К. В. Жарков // Изв. Ленинградского электротехнического ин-та. – 1987. – Вып. 385. – С. 72-75.
14. Комиссарова Г. Л. Особенности распределения энергии в двухслойной среде при распространении нормальных волн / Г. Л. Комиссарова // Прикл. Механика. – 1995. – Т. 38, № 2. – С. 38-45.
15. Алтухов Е. В. Трехмерные задачи установившихся колебаний изотропных пластин / Е. В. Алтухов, Ю. В. Мысовский, Ю. В. Панченко // Теор. и прикл. механика. – 1996. – Вып. 26. – С. 13-19.
16. Алтухов Е. В. Равновесие двухслойных пластин с жесткими торцами / Е. В. Алтухов, В. Н. Неспирный // Теор. и прикл. механика. – 2001. – Вып. 34. – С. 43-47.
17. Ворovich И. И. Напряженное состояние толстой плиты / И. И. Ворovich, О. С. Малкина // Прикл. математика и механика. – 1967. – Т. 37, № 2. – С. 230-241.
18. Космодамианский А. С. Метод однородных решений в смешанных задачах теории упругости и термоупругости для толстых многосвязных пластин / А. С. Космодамианский, Е. В. Алтухов, В. А. Галич // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1981. – № 11. – С. 62-65.
19. Лурье А. И. К теории толстых плит / А. И. Лурье // Прикл. математика и механика. – 1942. – Т. 6, вып. 2-3. – С. 151-168.
20. Устинов Ю. А. О полноте системы однородных решений теории плит / Ю. А. Устинов // Прикл. математика и механика. – 1976. – Т. 40, вып. 3. – С. 902-919.
21. Устинов Ю. А. Математическая теория поперечно-неоднородных плит / Ю. А. Устинов. – Ростов н/Д.: ООО ЦВВР, 2006. – 257 с.

Поступила в редакцию 25.04.2010 г.

УДК 534.3+611:539

**ГЕНЕРАЦІЯ ШУМУ ОБМЕЖЕНОЮ ОБЛАСТЮ ТУРБУЛЕНТНОЇ ТЕЧІЇ
В ЖОРСТКОСТІННОМУ КАНАЛІ КРУГОВОГО ПОПЕРЕЧНОГО ПЕРЕРІЗУ.
ЧАСТИНА 2. ДОМІНУВАННЯ ВНЕСКУ КВАДРУПОЛІВ**

А. О. Борисюк

Інститут гідромеханіки НАН України, м. Київ

Розглядається частинний випадок теорії генерації шуму обмеженою областю турбулентної течії в нескінченному прямому жорсткостінному каналі кругового поперечного перерізу. В ньому досліджується ситуація, коли у згенерованому акустичному полі домінує внесок об'ємних квадруполів. При цьому інтерес становлять такі потоки і форми локальних неоднорідностей геометрії каналів, при яких регіон турбулентної за неоднорідністю течії займають рівномірно розподілені великі або малі вихори. Для цих випадків одержано відповідні спрощені вирази для згенерованої акустичної енергії і проведено їхні оцінки для характерних масштабів в області турбулентності.

Ключові слова: шум, турбулентність, канал, квадруполі.

Вступ. Дослідження течій у каналах є актуальною задачею в машинобудуванні, нафто-газовій промисловості, архітектурі, комунальному господарстві, медицині тощо. Значний інтерес тут становлять турбулізація течій і поява акустичних ефектів у місцях локальних нерегулярностей геометрії каналів, таких як налипання на стінках, зварювальні шви, стенози тощо. Пояснюється він тим, що в цьому випадку акустичне поле містить дані про параметри конструкції і середовища в зоні виникнення шумів, а отже існує можливість розроблення неінвазивних методів знаходження таких місць за аналізом зазначеного поля [1-6].

Розроблення таких методів може вестись за наявності теорій, які, адекватно описуючи реологію, динаміку й акустику течій в околі геометричної неоднорідності каналу, встановлювали б кількісний зв'язок між характеристиками потоку і згенерованого акустичного поля.

У попередній роботі [7] було розроблено загальну теорію генерації шуму обмеженою областю турбулентної течії в нескінченному прямому жорсткостінному каналі кругового поперечного перерізу. В рамках цієї теорії було встановлено кількісні зв'язки між характеристиками згенерованого акустичного поля та параметрами каналу і течії в ньому. Область турбулентної течії моделювалася розподіленими в ній квадрупольними і дипольними джерелами шуму (характеристики яких вважалися відомими), і було розглянуто випадки рівномірного та нерівномірного розподілу джерел.

У даному дослідженні розглядається частинний випадок цієї теорії. В ньому досліджується ситуація, коли у згенерованому акустичному полі домінує внесок квадруполів. При цьому інтерес становлять такі потоки і форми локальних нерегулярностей геометрії каналів, при яких регіон турбулентної за неоднорідністю течії займають рівномірно розподілені великомасштабні або дрібномасштабні вихорові утворення.

Постановка і загальний розв'язок задачі. Розглядається нескінченний прямий жорсткостінний канал кругового поперечного перерізу радіусу a (рис.1), в якому з осередненою осью швидкістю U тече рідина густини ρ і кінематичної в'язкості ν . Течія характеризується малим числом Маха M ($M = U/c_0 \ll 1$, де c_0 – швидкість звуку в незбуреній рідині). У скінченному регіоні V_0 течія турбулентна, і цей регіон створює в каналі поле шуму. Необхідно знайти це поле і встановити кількісний зв'язок між його характеристиками та параметрами каналу і потоку.

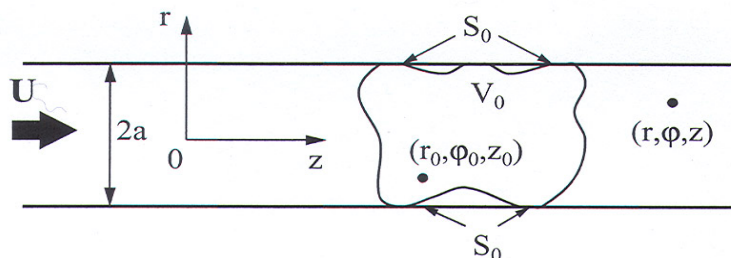


Рис. 1. Геометрія задачі

Шукане поле шуму описується рівнянням Лайтхіла, в якому права частина містить як об'ємні квадрупольні $\partial^2 T_{ij} / \partial y_i \partial y_j$, так і зумовлені наявністю стінки каналу поверхневі дипольні $\partial F_i / \partial y_i$ джерела [7-9]:

$$\frac{\partial^2 \rho_a}{\partial t^2} - c_0^2 \nabla^2 \rho_a = \frac{\partial^2 T_{ij}}{\partial y_i \partial y_j} + \frac{\partial F_i}{\partial y_i}, \quad 0 < r < a, \quad 0 < \phi < 2\pi, \quad |z| < \infty. \quad (1)$$

Граничними умовами є рівність нулеві радіальної швидкості на стінці каналу:

$$\left. \frac{\partial p_a}{\partial r} \right|_{r=a} = 0 \quad (2)$$

і умова випромінювання у нескінченність.

У співвідношеннях (1) і (2) введено такі позначення: ρ_a і p_a – акустичні флуктуації густини й тиску (які зв’язані співвідношенням $p_a = c_0^2 \rho_a$ [7-9]); $T_{ij} \approx \rho u_i u_j$ та $F_i = n_j (\tau_{ij} + p \delta_{ij})$ – напруження Лайтхіла та i -та компонента прикладених до стінки каналу сил (T_{ij} та F_i зникають відповідно за межами об’єму V_0 і поверхні S_0 , котра його обмежує), $\tau_{ij} = (2/3)\mu \varepsilon_{kk} \delta_{ij} - 2\mu \varepsilon_{ij}$ – дотичні напруження; $\varepsilon_{ij} = (1/2)(\partial u_i / \partial y_j + \partial u_j / \partial y_i)$ – швидкості деформації; n_j – j -та компонента зовнішньої нормалі до стінки каналу; u_i – i -та компонента швидкості рідини; p – тиск; $\mu = \rho \nu$ – динамічна в’язкість рідини; а δ_{ij} – символ Кронекера. Крім цього, тут і надалі передбачається підсумовування по індексах, що повторюються.

Гранична задача (1), (2) розв’язується в циліндричних координатах (r, ϕ, z) методом функцій Гріна [7, 9, 10], і загальний вираз для акустичної енергії $P(\omega)$, згенерованої на частоті ω нерівномірно розподіленими в об’ємі V_0 квадрупольними і на поверхні S_0 дипольними джерелами, має такий вигляд [7]:

$$\begin{aligned} P(\omega) = & \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} P_{nm}(\omega) = \sum_{q=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{4 \|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2 k_{nm} \rho_0 \omega} \left[\iiint_{V_0} dV_0(\vec{r}_0) \iiint_{V_0} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^{TF}(\vec{r}_0, \vec{r}'_0, \omega)}{\partial y_i \partial y_j \partial y_k \partial y_l} \times \right. \\ & \times \Psi_{nm}^{(q)}(r_0, \phi_0) \Psi_{nm}^{(q)}(r'_0, \phi'_0) e^{-\text{sign}(z-z_0) i k_{nm} (z'_0 - z_0)} dV_0(\vec{r}'_0) + \iint_{S_0} dS_0(\vec{r}_{0a}) \iint_{S_0} \frac{\partial^2 S_{ik}^F(\vec{r}_{0a}, \vec{r}'_{0a}, \omega)}{\partial y_i \partial y_k} \times \\ & \times \Psi_{nm}^{(q)}(a, \phi_0) \Psi_{nm}^{(q)}(a, \phi'_0) e^{-\text{sign}(z-z_0) i k_{nm} (z'_0 - z_0)} dS_0(\vec{r}'_{0a}) + 2 \text{Re} \left[\iiint_{V_0} dV_0(\vec{r}_0) \times \right. \\ & \left. \left. \times \iint_{S_0} \frac{\partial^3 S_{ijk}^{TF}(\vec{r}_0, \vec{r}'_{0a}, \omega)}{\partial y_i \partial y_j \partial y_k} \Psi_{nm}^{(q)}(r_0, \phi_0) \Psi_{nm}^{(q)}(a, \phi'_0) e^{-\text{sign}(z-z_0) i k_{nm} (z'_0 - z_0)} dS_0(\vec{r}'_{0a}) \right] \right]. \quad (3) \end{aligned}$$

Тут $\vec{r} = (r, \phi, z)$ – радіус-вектор точки поля; $\vec{r}_0 = (r_0, \phi_0, z_0) \in V_0$ і $\vec{r}'_0 = (r'_0, \phi'_0, z'_0) \in V_0$ – радіус-вектори розташованих в об’ємі V_0 квадрупольних джерел; $\vec{y} = (y_i)_{i=1}^3$ та $\vec{y}' = (y'_i)_{i=1}^3$ – інші позначання векторів \vec{r}_0 та \vec{r}'_0 відповідно; $\vec{r}_{0a} = \vec{r}_0|_{r_0=a} = (a, \phi_0, z_0) \in S_0$ і $\vec{r}'_{0a} = \vec{r}'_0|_{r'_0=a} = (a, \phi'_0, z'_0) \in S_0$ – радіус-вектори дипольних джерел на поверхні S_0 ; $dV_0(\vec{r}_0) = r_0 dr_0 d\phi_0 dz_0$ і $dS_0(\vec{r}_{0a}) = a d\phi_0 dz_0$ – елементи об’єму та площі; $\Psi_{nm} = \{\Psi_{nm}^{(1)}, \Psi_{nm}^{(2)}\}$, $\Psi_{nm}^{(1)} = J_n(\alpha_{nm} r) \cos(n\phi)$, $\Psi_{nm}^{(2)} = J_n(\alpha_{nm} r) \sin(n\phi)$ – акустичні моди каналу, квадрати норм яких $\|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2$ даються співвідношеннями

$$\|\Psi_{nm}^{(1)}\|^2 = \begin{cases} \pi a^2 J_0^2(\alpha_{0m} a), n=0, \\ (\pi a^2 / 2) J_n^2(\alpha_{nm} a) [1 - (n^2 / \alpha_{nm}^2 a^2)], n \geq 1, \end{cases} \quad \|\Psi_{nm}^{(2)}\|^2 = \begin{cases} 0, n=0, \\ \|\Psi_{nm}^{(1)}\|^2, n \geq 1, \end{cases}$$

J_n – циліндричні функції Бесселя першого роду порядку n ; $\alpha_{nm} = \zeta_{nm} / a$ – радіальні хвильові числа; ζ_{nm} – корені рівняння $J'_n(\zeta_{nm}) = 0$, $m = 1, 2, \dots$; $k_{nm} = \sqrt{k_0^2 - \alpha_{nm}^2}$ – осьові хвильові числа; a – радіус каналу; $k_0 = \omega / c_0$ – акустичне хвильове число. Крім цього, у співвідношенні (3) функції S_{ijkl}^T та S_{ik}^F є взаємними спектрами образів Фур'є відповідно напружень Лайтхіла T_{ij} :

$$S_{ijkl}^T(\vec{r}_0, \vec{r}'_0, \omega) \delta(\omega - \omega') = \langle \vec{T}_{ij}^*(\vec{r}_0, \omega) \vec{T}_{kl}(\vec{r}'_0, \omega') \rangle,$$

та сил F_k :

$$S_{ik}^F(\vec{r}_{0a}, \vec{r}'_{0a}, \omega) \delta(\omega - \omega') = \langle \vec{F}_i^*(\vec{r}_{0a}, \omega) \vec{F}_k(\vec{r}'_{0a}, \omega') \rangle,$$

S_{ijk}^{TF} – взаємним спектром образів Фур'є напружень T_{ij} і сил F_k :

$$S_{ijk}^{TF}(\vec{r}_0, \vec{r}'_{0a}, \omega) \delta(\omega - \omega') = \langle \vec{T}_{ij}^*(\vec{r}_0, \omega) \vec{F}_k(\vec{r}'_{0a}, \omega') \rangle,$$

$\text{Re}(\dots)$ означає дійсну частину вказаної в дужках комплексної величини, а функція знаку $\text{sign}(z - z_0)$ є позитивною, якщо оцінки енергії проводяться вниз за течією від розташованих у поперечному перерізі каналу $z = z_0$ джерел, і негативною, якщо вгору за течією від них. Положення ж частоти ω відносно критичних частот каналу:

$$\omega_{nm} = c_0 \alpha_{nm} \quad (4)$$

визначає (через хвильові числа k_{nm} в експоненті $\exp(-\text{sign}(z - z_0) i k_{nm} (z'_0 - z_0))$) випадки однорідних ($\omega \geq \omega_{nm}$) і неоднорідних ($0 < \omega < \omega_{nm}$) хвиль у формулі (3).

Якщо квадруполи і диполі розподілені *рівномірно* у займаних ними областях, формула (3) спрощується за рахунок спрощення виразів для спектрів S_{ijkl}^T , S_{ik}^F і S_{ijk}^{TF} , які стають функціями лише відстані між джерелами (відповідно $\vec{\xi} = \vec{r}'_0 - \vec{r}_0$, $\vec{\xi}_{aa} = \vec{r}'_{0a} - \vec{r}_{0a}$ та $\vec{\xi}_a = \vec{r}'_{0a} - \vec{r}_0$) і частоти [7,8]:

$$S_{ijkl}^T(\vec{r}_0, \vec{r}'_0, \omega) = S_{ijkl}^T(\vec{\xi}, \omega), \quad S_{ik}^F(\vec{r}_{0a}, \vec{r}'_{0a}, \omega) = S_{ik}^F(\vec{\xi}_{aa}, \omega), \quad S_{ijk}^{TF}(\vec{r}_0, \vec{r}'_{0a}, \omega) = S_{ijk}^{TF}(\vec{\xi}_a, \omega). \quad (5)$$

Аналіз співвідношення (3) показує, що акустична енергія P дорівнює сумі енергій P_{nm} акустичних мод каналу Ψ_{nm} . Енергія ж окремої моди P_{nm} складається з трьох доданків. Перший являє собою акустичну енергію, згенеровану квадруполями $\partial^2 T_{ij} / \partial y_i \partial y_j$, другий – енергію, випромінену диполями $\partial F_i / \partial y_i$, а третій доданок зумовлений взаємодією квадруполів і диполів.

Подальший аналіз формули (3) показує, що відносний внесок кожного доданку різний у різних областях значень числа Маха M . Справді, якщо M таке, що у полі шуму домінує внесок квадруполів, то у виразі для P_{nm} залишається лише перший доданок, і співвідношення (3) набуває такого вигляду:

$$P(\omega) = \sum_{q=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{4 \|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2 k_{nm} \rho_0 \omega} \iiint_{V_0} dV_0(\vec{r}_0) \iiint_{V_0} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^T(\vec{r}_0, \vec{r}'_0, \omega)}{\partial y_i \partial y_j \partial y_k \partial y_l} \Psi_{nm}^{(q)}(r_0, \phi_0) \times \\ \times \Psi_{nm}^{(q)}(r'_0, \phi'_0) e^{-\text{sign}(z-z_0) i k_{nm} (z'_0 - z_0)} dV_0(\vec{r}'_0). \quad (6)$$

Коли число Маха попадає в діапазон, де домінують диполі, то визначальним у виразі для P_{nm} є другий доданок, і замість співвідношення (6) маємо

$$P(\omega) = \sum_{q=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{4 \|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2 k_{nm} \rho_0 \omega S_0} \iint_{S_0} dS_0(\vec{r}_{0a}) \iint_{S_0} \frac{\partial^2 S_{ik}^F(\vec{r}_{0a}, \vec{r}'_{0a}, \omega)}{\partial y_i \partial y_k} \Psi_{nm}^{(q)}(a, \phi_0) \times \\ \times \Psi_{nm}^{(q)}(a, \phi'_0) e^{-\text{sign}(z-z_0) i k_{nm} (z'_0 - z_0)} dS_0(\vec{r}'_{0a}). \quad (7)$$

Домінування внеску квадруполів. Розглянемо випадок домінування в акустичному полі внеску квадруполів. При цьому вважатимемо, що вони розташовані рівномірно в регіоні турбулентної течії V_0 . На практиці така ситуація може виникнути за умов: значного перевищення числом Рейнольдса Re кри-

тичного значення Re_{cr} в регіоні турбулентної за локальним звуженням каналу течії ($Re \gg Re_{cr}$, $M \ll 1$); осесиметричності незбуреної течії та параболічності профілю її швидкості перед звуженням каналу; наявності плавної осесиметричної форми звуження.

Перша умова забезпечує досягнення числом Маха значень, при яких домінуючим в акустичному полі у каналі є внесок квадрупольних джерел (як правило, вона виконується у легких рідинах, рухи яких зазвичай характеризуються значно більшими числами Маха порівняно з рухами важких рідин). Друга ж і третя умови сприяють рівномірному розподілу квадрупольних джерел в регіоні турбулентної за звуженням течії.

В окресленій ситуації вираз (3) зводиться до співвідношення (6), яке, у свою чергу, спрощується за рахунок спрощення виразів для спектрів S_{ijkl}^T (див. формули (5)):

$$P(\omega) = \sum_{q=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{4 \|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2 k_{nm} \rho_0 \omega V_0} \iiint_{V_0} \Psi_{nm}^{(q)}(r_0, \phi_0) dV_0(\vec{r}_0) \int_{z_{0i}-z_0}^{z_{0e}-z_0} e^{-\text{sign}(z-z_0)ik_{nm}\xi_z} d\xi_z \times$$

$$\times \int_{-r_0}^{a-r_0} (r_0 + \xi_r) d\xi_r \int_{-\phi_0}^{2\pi-\phi_0} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^T(\vec{\xi}, \omega)}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k \partial \xi_l} \Psi_{nm}^{(q)}(r_0 + \xi_r, \phi_0 + \xi_\phi) d\xi_\phi \quad (8)$$

(тут z_{0i} та z_{0e} – початкова та кінцева осові координати регіону V_0 ; $\xi_z = z'_0 - z_0$, $\xi_r = r'_0 - r_0$ і $\xi_\phi = \phi'_0 - \phi_0$ – осьова, радіальна й кутова відстані між квадрупольними джерелами відповідно).

Бачимо, що інтегрування по ξ_r , ξ_ϕ та ξ_z у формулі (8) залежить від координат джерела r_0 , ϕ_0 та z_0 , а відтак загалом тут не можна суттєво спростити вираз для енергії P . Проте існують випадки, коли інтеграли по \vec{r}_0 та $\vec{\xi}$ у співвідношенні (8) стають незалежними, що приводить до бажаного спрощення. Це відбувається при домінуванні в регіоні V_0 великих або малих вихорів, і зумовлюється відповідно великим або малим значенням відношення діаметрів локального звуження і каналу. Розглянемо окремо кожен з цих випадків.

Великі вихори. Нехай в регіоні турбулентної течії V_0 домінують великі вихори. При цьому вважатимемо їх настільки великими, що рух буде повністю корельованим у поперечному перерізі каналу. Це означає, що взаємні спектри напружень Лайтхіла S_{ijkl}^T не змінюватимуться у поперечному перерізі каналу і будуть функціями лише осьової відстані між джерелами ξ_z та частоти ω . За цієї умови серед всіх похідних функцій S_{ijkl}^T у (8) залишиться лише похідна функції S_{zzzz}^T по ξ_z , і (8) набуде такого вигляду:

$$P(\omega) = \sum_{q=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{4 \|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2 k_{nm} \rho_0 \omega V_0} \iiint_{V_0} \Psi_{nm}^{(q)}(r_0, \phi_0) dV_0(\vec{r}_0) \int_{z_{0i}-z_0}^{z_{0e}-z_0} \frac{\partial^4 S_{zzzz}^T(\xi_z, \omega)}{\partial \xi_z^4} \times$$

$$\times e^{-\text{sign}(z-z_0)ik_{nm}\xi_z} d\xi_z \int_{-r_0}^{a-r_0} \int_{-\phi_0}^{2\pi-\phi_0} \Psi_{nm}^{(q)}(r_0 + \xi_r, \phi_0 + \xi_\phi) (r_0 + \xi_r) d\xi_r d\xi_\phi \quad (9)$$

Оскільки в одержаному виразі подвійний інтеграл по ξ_r та ξ_ϕ відмінний від нуля лише у випадку $(q, n, m) = (1, 0, 1)$ (тобто для першої акустичної моди каналу $\Psi_{01}^{(1)} = 1$):

$$\int_{-r_0}^{a-r_0} \int_{-\phi_0}^{2\pi-\phi_0} \Psi_{nm}^{(q)}(r_0 + \xi_r, \phi_0 + \xi_\phi) (r_0 + \xi_r) d\xi_r d\xi_\phi = \begin{cases} \pi a^2, & (q, n, m) = (1, 0, 1), \\ 0, & (q, n, m) \neq (1, 0, 1), \end{cases}$$

то (9) значно спрощується, і згенерована квадрупольними акустична енергія на частоті ω стає пропорційною об'ємові регіону турбулентної течії $|V_0|$ та одновимірному інтегралу від похідної взаємного спектра нормальних осьових напружень Лайтхіла T_{zz} :

$$P(\omega) = P_{01}^{(1)}(\omega) = \frac{|V_0|}{4k_0 \rho_0 \omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^4 S_{zzzz}^T(\xi_z, \omega)}{\partial \xi_z^4} e^{-\text{sign}(z-z_0)ik_0\xi_z} d\xi_z \quad (10)$$

(при одержанні формули (10) було враховано, що квадруполі зникають за межами регіону V_0 ; це дозволило перейти до нескінченних меж інтегрування по ξ_z).

Аналіз співвідношення (10) показує, що у випадку домінування в регіоні турбулентної течії великих вихорів шум генерують лише поздовжні квадруполі $\partial^2 T_{zz} / \partial z_0^2$, осі яких паралельні до осі каналу. При цьому згенерований ними шум поширюється в осьовому напрямку у вигляді плоскої хвилі зі швидкістю c_0 .

Повна акустична енергія Π , випромінена цими джерелами, визначається інтегралом

$$\Pi = \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) d\omega, \text{ і після підстановки сюди співвідношення (10) набуває такого вигляду:}$$

$$\Pi = \frac{|V_0|}{4\rho_0 c_0^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 K_{zzzz}^T(\xi_z, \tau)}{\partial \tau^2} d\xi_z, \quad (11)$$

де $K_{zzzz}^T(\xi_z, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S_{zzzz}^T(\xi_z, \omega) e^{-i\omega\tau} d\omega$ – кореляція напружень Лайтхіла T_{zz} , а $\tau = \xi_z / c_0$ – час

проходження акустичною хвилею осьової відстані ξ_z між квадрупольними джерелами.

Введення в області турбулентної течії V_0 масштабів довжини

$$L_t = \alpha a \quad (12)$$

і частоти

$$f_t = \beta U/a \quad (13)$$

де α і β – відповідно коефіцієнти цих масштабів, а також відношення характерної швидкості турбулентної течії u_t до швидкості незбуреної течії U

$$\gamma_t = u_t/U \quad (14)$$

дозволяє одержати оцінку повної акустичної енергії (11)

$$\Pi \propto \frac{|V_0|}{4a} \rho_0 U^3 M^3 \alpha \beta^2 \gamma_t^4, \quad \alpha \propto 1, \quad \beta \propto 1. \quad (15)$$

Бачимо, що у випадку великих вихорів інтенсивність акустичного випромінювання квадруполів у каналі пропорційна третьому степеневі числа Маха, а не п'ятому, як очікувалось би з теорії генерації шуму вільною турбулентністю [8, 9, 11]. Така зміна характеру випромінювання квадрупольних джерел пояснюється впливом стінок каналу.

Малі вихори. У цьому випадку вважаємо, що в регіоні турбулентної течії V_0 домінують вихори, малі порівняно з радіусом каналу a . Це означає, що довжини кореляцій λ_r в радіальному, λ_ϕ азимутальному і λ_z осьовому напрямках, а також масштаб довжини L_t в області V_0 значно менші від a :

$$\lambda_r \propto \lambda_\phi \propto \lambda_z \propto L_t = \alpha a \ll a, \quad \alpha \ll 1. \quad (16)$$

Для таких малих довжин кореляцій можна перейти до нескінченних меж інтегрування по $\bar{\xi}$ у співвідношенні (8), знехтувавши при цьому граничними ефектами течії біля стінки каналу:

$$P(\omega) = \sum_{q=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{4 \|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2 k_{nm} \rho_0 \omega V_0} \iiint \Psi_{nm}^{(q)}(r_0, \phi_0) dV_0(\bar{r}_0) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^T(\bar{\xi}, \omega)}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k \partial \xi_l} \times \\ \times \Psi_{nm}^{(q)}(r_0 + \xi_r, \phi_0 + \xi_\phi) e^{-\text{sign}(z-z_0) i k_{nm} \xi_z} (r_0 + \xi_r) d\xi_r d\xi_\phi d\xi_z. \quad (17)$$

Можливість такого нехтування зумовлена тим, що напруження Лайтхіла T_{ij} зникають на нерухомій жорсткій стінці каналу (внаслідок відсутності там будь-якого руху рідини), і всі вихори мають там нульову енергію. Крім цього, зайнятий вихорами об'єм $|V_1|$ біля стінки є малою величиною порівняно з

об'ємом $|V_0|$ регіону турбулентної течії: $\frac{|V_1|}{|V_0|} = \frac{L_t 2\pi a (z_{0e} - z_{0i})}{\pi a^2 (z_{0e} - z_{0i})} = 2\alpha \ll 1$.

У співвідношенні (17) розглянемо випадки низьких та високих частот.

Низькі частоти. Під низькими розумітимемо частоти, нижчі за всі критичні частоти каналу (4), окрім першої ω_{01} . Оскільки для вибраного каналу ω_{01} дорівнює нулеві, то це – частоти, які задовольняють умову: $0 < \omega < \omega_{nm}$, $(n, m) \neq (0, 1)$. За цієї умови всі акустичні моди, окрім першої $\Psi_{01}^{(1)} = 1$, будуть неоднорідними, і їхнім внеском в акустичне поле можна знехтувати. Це приводить до значного спрощення виразу (17):

$$P(\omega) = P_{01}^{(1)}(\omega) = \frac{|V_0|}{4\pi a^2 k_0 \rho_0 \omega} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^T(\vec{\xi}, \omega)}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k \partial \xi_l} e^{-\text{sign}(z-z_0)ik_0 \xi_z} \xi_r d\xi_r d\xi_\phi d\xi_z. \quad (18)$$

Бачимо, що, як і при домінуванні в регіоні V_0 великих вихорів, у випадку малих вихорів і низьких частот шум генерується у вигляді плоскої хвилі, яка поширюється в осьовому напрямку зі швидкістю c_0 . Проте, на відміну від формули (10), у співвідношенні (18) внесок в акустичне поле роблять всі, а не лише поздовжні осьові квадруполі.

Застосування теореми про середнє [12] до інтегралів по ξ_r та ξ_ϕ у (18) дає такий вираз для P :

$$P(\omega) = P_{01}^{(1)}(\omega) \approx \frac{|V_0| \alpha^2}{\pi k_0 \rho_0 \omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^T(\vec{\xi}, \omega)}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k \partial \xi_l} \Bigg|_{\xi_r = \xi_{r*}, \xi_\phi = \xi_{\phi*}} e^{-\text{sign}(z-z_0)ik_0 \xi_z} d\xi_z, \quad \alpha \ll 1, \quad (19)$$

де ξ_{r*} і $\xi_{\phi*}$ – точки з відрізків $[0, \lambda_r]$ і $[0, \lambda_\phi]$ відповідно.

Співставлення виразів (10) і (19) показує, що згенерована малими вихорами в діапазоні низьких частот акустична енергія є малою величиною порядку α^2 ($\alpha \ll 1$) від акустичної енергії, згенерованої в тому ж діапазоні великомасштабними вихоровими утвореннями. Тоді доходимо висновку, що повна акустична енергія Π наближено даватиметься співвідношенням (11), помноженим на α^2 , а її оцінка відрізнятиметься від оцінки (15) практично лише додатковим множником α^2 :

$$\Pi \propto \frac{|V_0|}{\pi a} \rho_0 U^3 M^3 \alpha^3 \beta^2 \gamma_t^4, \quad \alpha \ll 1. \quad (20)$$

Аналіз виразу (20) засвідчує, що, як і у випадку великих вихорів (див. оцінку (15)), згенерована малими вихорами на низьких частотах повна акустична енергія Π формально пропорційна третьому степеневі числа Маха ($M \ll 1$). Проте наявність у співвідношенні (20) додаткового порівняно з формулою (15) квадрату малого параметра α^2 фактично вказує на пропорційність енергії Π п'ятому степеневі числа M : $M^3 \alpha^2 \propto M^5$ ($M \ll 1, \alpha \ll 1$), тобто на квадрупольний (а не дипольний) характер випромінювання малих вихорів у каналі. З іншого боку, практично однаковий характер випромінювання малих вихорів у вільному просторі і каналі вказує на відсутність істотного впливу стінки каналу на процес генерації шуму малими вихорами в ньому. Останній ефект підтверджується також і наведеними після формули (17) міркуваннями.

Високі частоти. Під високими розумітимемо такі частоти, для яких всі акустичні моди каналу Ψ_{nm} будуть однорідними: $\omega > \omega_{nm}$, $n \geq 0, m \geq 1$. Це означає, що всі вони братимуть участь у формуванні дальнього акустичного поля в каналі, і їх треба враховувати при подальшому аналізі виразу (17).

У такій ситуації доцільно виконати певні операції зі співвідношенням (17), які дозволять переписати його у прийнятнішому для подальшої роботи вигляді. Їх суть полягає у розписуванні косінусів $\cos n(\phi_0 + \xi_\phi)$, синусів $\sin n(\phi_0 + \xi_\phi)$ та функцій Бесселя $J_n(\alpha_{nm}(r_0 + \xi_r))$ з подальшим врахуванням ортогональності одержаних при цьому тригонометричних і циліндричних функцій, а також парності/непарності їхніх добутків на симетричному відносно початку координат відрізка.

Наслідком розписування косінуса та синуса суми аргументів є спрощена форма запису співвідношення (17):

$$P(\omega) = \sum_{q=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(z_{0e} - z_{0i})c_q}{4 \|\Psi_{nm}^{(q)}\|^2 k_{nm} \rho_0 \omega} \int_0^a J_n(\alpha_{nm} r_0) r_0 dr_0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^T(\vec{\xi}, \omega)}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k \partial \xi_l} \times J_n(\alpha_{nm}(r_0 + \xi_r)) \cos(n \xi_\phi) e^{-\text{sign}(z-z_0)ik_{nm} \xi_z} (r_0 + \xi_r) d\xi_r d\xi_\phi d\xi_z, \quad (21)$$

де коефіцієнти c_q мають такий вигляд:

$$c_1 = \int_0^{2\pi} \cos^2(n\phi_0) d\phi_0 = \begin{cases} 2\pi, n = 0, \\ \pi, n \geq 1, \end{cases} \quad c_2 = \int_0^{2\pi} \sin^2(n\phi_0) d\phi_0 = \begin{cases} 0, n = 0, \\ \pi, n \geq 1. \end{cases}$$

Застосування теореми додавання [13]

$$J_n(u+v) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_{n-k}(u) J_k(v)$$

до функцій Бесселя $J_n(\alpha_{nm}(r_0 + \xi_r))$ у формулі (21) приводить до такого виразу для P :

$$P(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{|V_0|}{2\pi a^2 k_{nm} \rho_0 \omega} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^4 S_{ijkl}^T(\vec{\xi}, \omega)}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k \partial \xi_l} J_0(\alpha_{nm} \xi_r) \cos(n \xi_\phi) \times \\ \times e^{-\text{sign}(z-z_0) i k_{nm} \xi_z} \xi_r d\xi_r d\xi_\phi d\xi_z. \quad (22)$$

Аналіз співвідношення (22) показує, що в разі домінування в регіоні турбулентної течії V_0 малих вихорів внесок у високочастотну область спектра P роблять всі квадруполі. При цьому участь у формуванні акустичного поля беруть всі акустичні моди каналу, а не лише його перша мода, як було у випадку великих вихорів (див. підрозділ 3.1) та малих вихорів і низьких частот (див. підрозділ 3.2.1).

Інтегрування співвідношення (22) по частоті і введення в одержаний вираз масштабів турбулентної течії (12)-(14) дає оцінку для акустичної енергії Π :

$$\Pi \propto \frac{|V_0|}{\pi a} \rho_0 U^3 M^5 \alpha^3 \beta^4 \gamma_t^4, \quad \alpha \ll 1. \quad (23)$$

Бачимо, що в разі малих вихорів і високих частот інтенсивність акустичного випромінювання квадруполів у каналі визначається п'ятим степенем числа Маха. Оскільки такий же степінь числа Маха характеризує і акустичне випромінювання квадруполів у вільному просторі [8,11], то ця обставина свідчить про незначний вплив стінки каналу на процес генерації шуму малими вихорами в ньому (аналогічний висновок було зроблено і в кінці підрозділу 3.2.1).

Співставлення оцінок (23) і (20), а також врахування наведеної після формули (20) пропорційності $M^3 \alpha^2 \propto M^5$ ($M \ll 1$, $\alpha \ll 1$) показує, що при домінуванні в регіоні турбулентної течії V_0 малих вихорів згенерована квадрупольями у діапазоні високих частот акустична енергія є малою величиною порядку $\alpha^2 \beta^2$ від енергії, згенерованої цими ж квадрупольями на низьких частотах.

Висновок. У даній статті розглянуто частинний випадок розробленої в роботі [7] теорії генерації шуму обмеженою областю турбулентної течії в нескінченному прямому жорсткостінному каналі кругового поперечного перерізу. В ньому досліджено ситуацію, коли у згенерованому акустичному полі домінує внесок квадруполів. При цьому інтерес становили такі потоки і форми локальних неоднорідностей геометрії каналів, при яких регіон турбулентної за неоднорідністю течії займають рівномірно розподілені великі або малі вихори. Для цих випадків одержано відповідні спрощені вирази для згенерованої акустичної енергії і проведено їхні оцінки для характерних масштабів в області турбулентності.

РЕЗЮМЕ

Рассматривается частный случай теории генерации шума ограниченной областью турбулентного течения в бесконечном прямом жесткостенном канале кругового поперечного сечения. В нем исследуется ситуация, когда в сгенерированном акустическом поле доминирует вклад объемных квадруполей. При этом интерес представляют такие потоки и формы локальных неоднородностей геометрии каналов, при которых регион турбулентного за неоднородностью течения занимают равномерно распределенные большие либо малые вихри. Для этих случаев получены соответствующие упрощенные выражения для генерируемой акустической энергии и проведены их оценки для характерных масштабов в области турбулентности.

Ключевые слова: шум, турбулентность, канал, квадрупольи.

SUMMARY

A particular case of the theory of noise generation by a limited region of turbulent flow in an infinite straight rigid channel of a circular cross-section is considered. In this case, the situations are studied in which the generated acoustic field is dominated by the contribution made by volume quadrupoles. Those flows and shapes of the channel local geometrical inhomogeneities are of concern which result in occupation of a turbulent flow region behind the inhomogeneity by uniformly-distributed large or small eddies. For these cases the corresponding simplified expressions for the generated acoustic power are obtained, and their estimates are carried out for the characteristic scales in the turbulent flow region.

Keywords: noise, turbulence, channel, quadrupoles.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Lees R. S. Phonoangiography: a new noninvasive diagnostic method for studying arterial disease / R. S. Lees, C. F. Dewey // Proc. Nat. Acad. Sci. – 1970. – 67. – P. 935-942.
2. Young D. F. Fluid mechanics of arterial stenosis / D. F. Young // J. Biomech. Eng. – 1979. – 101. – P. 157-175.
3. Миролюбов С. Г. Гидродинамика стеноза / С. Г. Миролюбов // Современ. пробл. биомех. – 1983. – №. 1. – С. 73-136.
4. Berger S. A. Flows in stenotic vessels / S. A. Berger, L.-D. Jou // Ann. Rev. Fluid Mech. – 2000. – 32. – P. 347-382.
5. Borisyuk A. O. Noise field in the human chest due to turbulent flow in a larger blood vessel / A. O. Borisyuk // Flow, Turbulence and Combustion. – 1999. – Vol. 61. – P. 269-284.
6. Borisyuk A.O. Experimental study of noise produced by steady flow through a simulated vascular stenosis / A. O. Borisyuk // J. Sound Vibr. – 2002. – Vol. 256. – P. 475-498.
7. Борисюк А. О. Генерація шуму обмеженою областю турбулентної течії в жорсткостінному каналі кругового поперечного перерізу / А. О. Борисюк // Вісн. Донецьк. нац. ун-ту. Сер. А. Природничі науки. – 2010. – № 1. – С. 35-41.
8. Blake W. K. Mechanics of Flow-Induced Sound and Vibration / W. K. Blake. – New York: Acad. Press Inc., 1986. – Vol. 1,2. – 974 p.
9. Голдстейн М. Е. Аэроакустика / М. Е. Голдстейн. – М.: Машиностроение, 1981. – 294 с.
10. Morse P. M. Methods of Theoretical Physics / P. M. Morse, H. Feshbach. – New York: McGraw-Hill, 1953. – Vol. 1. – 997 p.
11. Lighthill M. J. On sound generated aerodynamically. 1.General theory / M. J. Lighthill // Proc. Roy. Soc. London. – 1952. – A211. – P. 564-587.
12. Фіхтенгольц Г. М. Курс дифференциального и интегрального исчисления / Г. М. Фіхтенгольц. – М.:Физматгиз, 1962. – Т. 2. – 807 с.
13. Ямке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции / Е. Ямке, Ф. Эмде, Ф. Леш. – М.: Наука, 1968. – 344 с.

Надійшла до редакції 27.05.2010 р.

УДК 539.3

ПОЗДОВЖНИЙ ЗСУВ БЕЗМЕЖНОГО ТІЛА З ТОНКИМ ДВОЛАНКОВИМ ПРУЖНИМ ВКЛЮЧЕННЯМ

К. В. Васільєв, Я. М. Пастернак, Г. Т. Сулим

Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, м. Львів

Розроблена аналітико-чисельна, а також чисельна методика (на основі методу граничних елементів) розв'язування задач поздовжнього зсуву нескінченного ізотропного тіла з тонкими пружними включеннями за наявності кутових точок. Результати обчислень узагальнених коефіцієнтів інтенсивності напружень для дволанкового пружного включення за навантаження на нескінченності, що обчислені за допомогою двох методів, відрізняються незначно, що підтверджує вірогідність отриманих результатів.

Ключові слова: дволанкове пружне включення, ламана тріщина, МГЕ, ССІР, УКІН, метод зосереджених чинників.

Вступ. Задачі лінійної теорії пружності тіл із тонкими неоднорідностями типу тріщин, пружних, чи абсолютно жорстких включень (АЖВ) при наявності зламів є набагато складнішими за випадок гладких неоднорідностей, зважаючи на потребу врахування некоренових особливостей у кутових точках. Основною проблемою таких задач є потреба розв'язування результуючих систем сингулярних інтегральних рівнянь (ССІР) з урахуванням особливості степеневого типу у точках зламу. На розв'язування таких задач спрямовані, зокрема, роботи [1-4].

Істотного спрощення під час дослідження задач для неоднорідностей з точками зламу найчастіше досягають завдяки припущенню, що коефіцієнти інтенсивності напружень ланок неоднорідності у точці зламу дорівнюють нулю, не враховуючи тим часом особливості у кутовій точці (див. напр. [5]).

На відміну від задач для тріщин [1-3] і АЖВ [5] з точками зламу, аналогічні задачі для тонких пружних неоднорідностей ще не вивчалися.

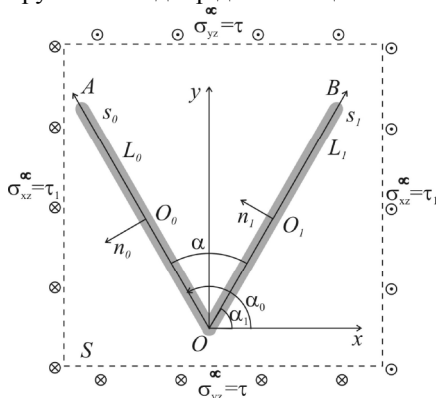


Рис. 1 Дволанкове включення у нескінченному просторі

Це дослідження стосується розробки та розвитку підходів до розв'язування задач поздовжнього зсуву тіл із тонкими пружними стрічковими неоднорідностями з точками зламу. Запропоновано два підходи розв'язування задачі про визначення напруженого стану безмежного ізотропного тіла із дволанковою тонкою пружною неоднорідністю за поздовжнього зсуву на нескінченності, а саме: 1) аналітично-числовий метод; 2) прямий числовий спосіб за схемою методу граничних елементів.

Формулювання задачі. У безмежному ізотропному тілі S , що перебуває в умовах поздовжнього зсуву під дією рівномірного поля напружень τ , τ_1 на нескінченності (рис. 1), розташоване тонке пружне включення L . Його ланки з осями L_0 , L_1 є тонкими стрічковими неоднорідностями з однаковими модулями зсуву G_B (можуть бути і різні) завдовжки $2a_0$, $2a_1$,

що нахилені під кутами α_0 , α_1 відповідно до осі абсцис. Їхня товщина однакова і дорівнює $2h$. Відповідно до методу функцій стрибка [5] за принципом спряження континуумів різної вимірності включення як геометричний об'єкт вилучається із розгляду, а контактні напруження та переміщення переносяться на його серединну поверхню. Тобто вплив включення моделюється функціями стрибків векторів напружень і похідних переміщень на серединній поверхні неоднорідності.

Розв'язування задачі методом додаткових зосереджених чинників. Розглянемо пружне включення з кутовою точкою як сукупність двох ніби відокремлених стрічкових неоднорідностей, кожна з яких моделюється своїми функціями стрибків [5, 6] напружень f_{50} , f_{51} і похідних від переміщень f_{60} , f_{61} . Врахуємо, що за своєю фізичною суттю метод функцій стрибків у випадку антиплоскої деформації є моделюванням тонких неоднорідностей за допомогою розподілених уздовж осевих ліній включень зосереджених сил (стрибок вектора напружень) і гвинтових дислокацій (стрибок переміщень) наперед невідомої густини [6].

У точці O дотику включень функції стрибків для ланок L_0 та L_1 , очевидно, пов'язані між собою. Оскільки цей зв'язок заздалегідь невідомий, то спочатку для визначеності накладемо додаткові умови рівності нулю функцій стрибків у цій точці:

$$f_{50}(O) = f_{60}(O) = 0, \quad f_{51}(O) = f_{61}(O) = 0. \quad (1)$$

Через те, що у точці O первісної задачі існує певний, швидше всього ненульовий, стрибок напружень і похідних від переміщень, то для того, щоб підправити накладене формулою (1) обмеження, додатково розмістимо у цій точці невідомі за величиною зосереджену силу Q і гвинтову дислокацію b , які мають забезпечити згаданий стрибок. Таким чином, напружений стан модельованої задачі шукатимемо у вигляді суперпозиції розв'язків для двох включень та невідомих зосередженої сили і дислокації, що діють у точці O контакту неоднорідностей:

$$\sigma_{yz} + i\sigma_{xz} = \sigma_{yz}^0 + i\sigma_{xz}^0 + \frac{i}{2\pi} \sum_{p=0}^1 \int_{L'_p} \frac{f_{5p}(t) + iGf_{6p}(t)}{te^{i\alpha_p} - (z - z_{0p})} dt + (\sigma_{yz}^* + i\sigma_{xz}^*) \quad (2)$$

$$\sigma_{yz}^* + i\sigma_{xz}^* = -\frac{i}{2\pi} \frac{Q + iGb}{z - z^*}, \quad z_{0p} = x_{0p} + iy_{0p}, \quad z^* = x^* + iy^*.$$

Тут $\sigma_{yz}^0, \sigma_{xz}^0$ – однорідний розв'язок задачі (тіла без включення із тим же заданим зовнішнім навантаженням); $\sigma_{yz}^*, \sigma_{xz}^*$ – напруження від дії сили Q і дислокації b в точці O із координатами $z^* = 0$ контакту неоднорідностей; z_{0p} – координати центру p -го включення; α_p – кут його орієнтації (рис. 1).

Для визначення невідомих f_{5j}, f_{6j} ($j=0,1$) за методом функцій стрибка необхідно скористатися умовами взаємодії матриці з включеннями. Для пружної тонкої плівки завдовжки $2a_p$, завтовшки $2h$ з довільним сталим модулем зсуву G_B умови взаємодії можна подати у вигляді [5, 7]

$$\sigma_{sz}^{p+} + \sigma_{sz}^{p-} + \frac{G}{G_B h} \int_{-a_p}^{s_p} (\sigma_{nz}^{p+} - \sigma_{nz}^{p-}) dt = 2 \frac{G\sigma_{sz}^{pc}(-a_p)}{G_B}; \quad (3)$$

$$\sigma_{nz}^{p+} + \sigma_{nz}^{p-} - \frac{G_B}{hG} \int_{-a_p}^{s_p} (\sigma_{sz}^{p+} - \sigma_{sz}^{p-}) dt = \frac{w_p^*}{h}.$$

Тут $\sigma_{sz}^{cp}(-a_p), w_p^*$ – певні торцеві сталі у лівій вершині неоднорідності, для визначення яких використовують апріорні залежності [5, 7]

$$\sigma_{sz}^{cp}(-a_p) = \sigma_{sz}^0(-a_p) \frac{G_B}{\max(G_B, G)}, \quad w_p^* = 2h(a_p)\sigma_{nz}^0(-a_p) \frac{\min(G_B, G)}{G}. \quad (4)$$

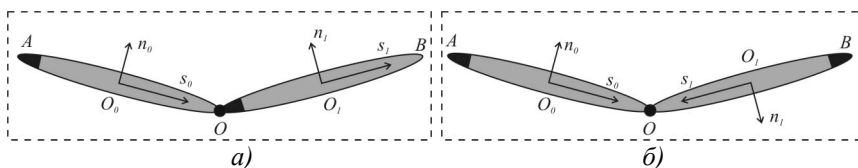


Рис. 2 Варіанти розташування включень

Оскільки суцільне включення розглядається як поєднання двох стрічкових, то для зображеного на рис. 2, а випадку (послідовне поєднання ланок), торцеві сталі для включення L_0 запишуться у вигляді (4), а для включення L_1 залежатимуть від функцій стрибків включення L_0 , зосередженої сили Q і дислокації b . Проте для випадку дволанкового включення можна спростити побудову рівнянь, вибравши протилежну орієнтацію включення L_1 (рис. 2, б), за якої формули (4) будуть слухними для обох неоднорідностей. Надалі розглядатимемо лише цей простіший випадок, зображений на рис. 2, б.

Перейдемо у (2) до локальної для p -го включення ($p=0,1$) системи координат $s_p O_p n_p$:

$$\sigma_{nz}^p + i\sigma_{sz}^p = [\sigma_{yz} + i\sigma_{xz}] \exp(i\alpha_p), \quad z = x + iy = \tilde{z}_p \exp(i\alpha_p) + z_{0p} = (s_p + in_p) \exp(i\alpha_p) + z_{0p}.$$

Застосувавши до результату такого перетворення формулу Сохоцького – Племелі [8], отримаємо вирази для залежності напружень і переміщень на верхньому і нижньому берегах стрічкових неоднорідностей від невідомих функцій стрибків f_{5j}, f_{6j} ($j = 0,1$):

$$\begin{aligned} \sigma_{nz}^{p\pm}(s_p) + i\sigma_{sz}^{p\pm}(s_p) &= \sigma_{nz}^{0p} + i\sigma_{sz}^{0p} \mp \frac{1}{2} \left[f_{5p}(s_p) + iGf_{6p}(s_p) \right] + \\ &+ \frac{i}{2\pi} \int_{L'_p} \frac{f_{5p}(t) + iGf_{6p}(t)}{t - s_p} dt + \left(\hat{\sigma}_{nz}^p + i\hat{\sigma}_{sz}^p \right) + \left(\sigma_{yz}^{p*} + i\sigma_{xz}^{p*} \right) \quad (p=0,1), \\ \hat{\sigma}_{nz}^p + i\hat{\sigma}_{sz}^p &= \frac{i}{2\pi} \sum_{k=0, k \neq p}^1 \int_{L'_k} \frac{[f_{5k}(t) + iGf_{6k}(t)] \exp(i\alpha_p)}{t \exp(i\alpha_k) - (s_p \exp(i\alpha_p) + z_{0p} - z_{0k})} dt, \\ \sigma_{nz}^{0p} + i\sigma_{sz}^{0p} &= \left[\sigma_{yz}^0 + i\sigma_{xz}^0 \right] \exp(i\alpha_p), \quad \sigma_{nz}^{p*} + i\sigma_{sz}^{p*} = \left[\sigma_{yz}^* + i\sigma_{xz}^* \right] \exp(i\alpha_p). \end{aligned} \quad (5)$$

Підставляючи (5) в умови взаємодії матриці з включенням (3), отримаємо чотири сингулярні інтегральні рівняння стосовно чотирьох невідомих функцій стрибків f_{5p}, f_{6p} ($p=0,1$) та двох невідомих сталих Q і b :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_{L'_p} \frac{f_{5p}(t)}{t - s_p} dt - \frac{G}{G_B h} \int_{-a_p}^{s_p} f_{5p} dt + 2\hat{\sigma}_{sz}^p + 2\sigma_{sz}^{p*} &= 2 \frac{G\sigma_{sz}^{cp}(-a)}{G_B} - 2\sigma_{sz}^{0p}, \\ \frac{1}{\pi} \int_{L'_p} \frac{f_{6p}(t)}{t - s_p} dt - \frac{G_B}{G h} \int_{-a_p}^{s_p} f_{6p} dt - \frac{2}{G} \hat{\sigma}_{nz}^p - \frac{2}{G} \sigma_{nz}^{p*} &= -\frac{w_p^*}{G h} + \frac{2}{G} \sigma_{nz}^{0p} \quad (p=0,1). \end{aligned} \quad (6)$$

Дві додаткові рівності задані умовами глобальної рівноваги дволанкового включення

$$\int_{-a_0}^{a_0} f_{50}(t) dt + \int_{-a_1}^{a_1} f_{51}(t) dt + Q = 0 \quad (7)$$

і умовами однозначності переміщень при обході навколо нього

$$\int_{-a_0}^{a_0} f_{60}(t) dt + \int_{-a_1}^{a_1} f_{61}(t) dt + b = 0. \quad (8)$$

Таким чином, отримано чотири сингулярні інтегральні рівняння (6) стосовно чотирьох невідомих функцій стрибків та двох невідомих сталих. Чотири умови (1) і дві умови (7), (8) дають можливість розв'язати отриману систему сингулярних інтегральних рівнянь. Розв'язок (1), (6)-(8) шукатимемо на основі методу колокацій [5], вважаючи, як і у загальній схемі відокремлених включень, що функції стрибків мають кореневі особливості на кінцях L_0 та L_1 .

Основними характеристиками поля напружень біля вістря тонких неоднорідностей відповідно до [5] є узагальнені коефіцієнти інтенсивності напружень (УКІН). Для дволанкового включення з урахуванням додатного напрямку руху по L_1 (рис. 2б) формули обчислення УКІН [6] набувають вигляду

$$\begin{aligned} K_{32}^A - iK_{31}^A &= \left(p_5^A + iGp_6^A \right) \sqrt{\pi/2}, \quad p_j^A = \lim_{t \rightarrow -a_0} \left[\sqrt{a_0 + t} f_{j0}(-a_0) \right], \\ K_{32}^B - iK_{31}^B &= -\left(p_5^B + iGp_6^B \right) \sqrt{\pi/2}, \quad p_j^B = \lim_{t \rightarrow -a_1} \left[\sqrt{a_1 + t} f_{j1}(-a_1) \right] \quad (j=5,6). \end{aligned} \quad (9)$$

Моделювання антиплоскої деформації тіл із тонкими стрічковими включеннями з точками зламу за схемою методу граничних елементів. Розробимо числову процедуру розв'язування сформульованої задачі за схемою методу граничних елементів. Для цього розглянемо тонке стрічкове включення, що складається з двох ланок з осями L_0 та L_1 (рис. 1). За принципом спряження моделюватимемо його стрибками переміщень та напружень уздовж його серединної лінії (поверхні)

$\Gamma_C = L_0 \cup L_1$ (відповідно береги Γ_C^+ та Γ_C^-). Виходячи з тотожності Сомільяни [8] побудуємо таку систему дуальних інтегральних рівнянь задачі для безмежного тіла з тонким стрічковим включенням:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} F^w(\Sigma t, \Delta w, \mathbf{y}) &= w^{\text{hom}}(\mathbf{y}) + \text{RPV} \int_{\Gamma_C^+} W(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \Sigma t(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x}) - \text{CPV} \int_{\Gamma_C^+} T(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \Delta w(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x}), \\ \frac{1}{2} F^t(\Sigma t, \Delta w, \mathbf{y}) &= n_j^+(\mathbf{y}) \left[\sigma_{3j}^{\text{hom}}(\mathbf{y}) + \text{CPV} \int_{\Gamma_C^+} D_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \Sigma t(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x}) - \right. \\ &\quad \left. - \text{HPV} \int_{\Gamma_C^+} S_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \Delta w(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x}) \right], \end{aligned} \quad (10)$$

де w, t – ненульові компоненти векторів переміщень $(0, 0, w)$ та напружень $(0, 0, t)$; $\Delta w = w^+ - w^-$, $\Delta t = t^+ - t^-$, $\Sigma w = w^+ + w^-$, $\Sigma t = t^+ + t^-$; знаками «+» та «-» позначено величини, що стосуються поверхонь Γ_C^+ та Γ_C^- , утворених розрізом Γ_C ; n_j^+ – компоненти вектора нормалі до поверхні Γ_C^+ ; позначення RPV означає величину невластивого інтеграла (Riemann principal value); CPV – головне значення інтеграла (Cauchy principal value); HPV – скінченна частина гіперсингулярного інтеграла (Hadamard principal value); $w^{\text{hom}}(\mathbf{y})$, $\sigma_{3j}^{\text{hom}}(\mathbf{y})$ – переміщення та напруження в однорідному тілі без включення; $\Sigma w(\mathbf{y}) = F^w(\Sigma t, \Delta w, \mathbf{y})$, $\Delta t(\mathbf{y}) = F^t(\Sigma t, \Delta w, \mathbf{y})$ – рівняння математичної моделі тонкого включення. Точка колокації \mathbf{y} лежить на гладкій ділянці розрізу Γ_C . Ядра інтегральних рівнянь для антиплоскої задачі теорії пружності ізотропних тіл мають вигляд

$$W(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = -\frac{\ln r}{2\pi G}, \quad T(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = -\frac{1}{2\pi r^2} r_k n_k, \quad D_j = r_j / (2\pi r^2), \quad S_j = \mu [n_j r^2 - 2r_j (n_k r_k)] / (2\pi r^4). \quad (11)$$

Використавши підхід [9] та розглядаючи зсув тонкого включення у площині, дотичній до його серединної поверхні за моделлю пружної основи Вінклера, легко отримати друге рівняння моделі тонкого включення:

$$\Delta t(\mathbf{y}) = F^t(\Sigma t, \Delta w, \mathbf{y}) = -\Delta w(\mathbf{y}) G_B / h(\mathbf{y}), \quad (12)$$

де $h(\mathbf{y})$ – півтовщина включення в точці \mathbf{y} .

Розглядаючи рівновагу деякої частини включення між точками \mathbf{y}_0 та \mathbf{y} , отримаємо середнє значення напружень у деякому його перерізі \mathbf{y} :

$$\sigma_{\tau 3}(\mathbf{y}) = \frac{1}{2h(\mathbf{y})} \left[2h(\mathbf{y}_0) \sigma_{\tau 3}(\mathbf{y}_0) + \int_{\mathbf{y}_0}^{\mathbf{y}} \Sigma t(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x}) \right], \quad (13)$$

де \mathbf{y}_0 – радіус-вектор лівого торця включення; $\sigma_{\tau 3}(\mathbf{y}_0)$ – напруження на лівому торці включення. Пов'язавши середні значення деформацій із середніми значеннями напружень за допомогою закону Гука, отримаємо для перших таких вираз:

$$\varepsilon_{\tau 3}(\mathbf{y}) = \frac{1}{2h(\mathbf{y}) G_B} \left[2h(\mathbf{y}_0) \sigma_{\tau 3}(\mathbf{y}_0) + \int_{\mathbf{y}_0}^{\mathbf{y}} \Sigma t(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x}) \right], \quad \varepsilon_{\tau 3} = \frac{\partial w}{\partial x_\tau}. \quad (14)$$

У формулах (13) та (14) індекс « τ » вказує на напрям, дотичний до серединної поверхні стрічкового включення.

Інтегруючи (14) та враховуючи, що для тонкого включення величину $\frac{1}{2} \Sigma w$ можна вважати середнім по товщині значенням його переміщень, отримаємо

$$\frac{1}{2} F^t(\Sigma t, \Delta w, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \Sigma w(\mathbf{y}) = w^0 + \int_{\mathbf{y}_0}^{\mathbf{y}} \frac{1}{2h(\mathbf{y}) G_B} \left[2h(\mathbf{y}_0) \sigma_{\tau 3}(\mathbf{y}_0) + \int_{\mathbf{y}_0}^{\mathbf{y}} \Sigma t(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x}) \right] d\Gamma(\mathbf{y}), \quad (15)$$

де w^0 – переміщення лівого торця включення, що визначаються із рівняння глобальної рівноваги останнього:

$$2h(\mathbf{y}_n)\sigma_{\tau 3}(\mathbf{y}_n) - 2h(\mathbf{y}_0)\sigma_{\tau 3}(\mathbf{y}_0) - \int_{\Gamma_C} \Sigma t(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x}) = 0. \quad (16)$$

Рівняння (10), (12), (15) та (16) є моделлю антиплоскої деформації безмежного пружного ізотропного середовища з тонким стрічковим включенням. Розв'язуватимемо їх за схемою методу граничних елементів [10]. Для цього криву Γ_C апроксимуємо за допомогою n прямолінійних відрізків – граничних елементів Γ_q . На кожному елементі виберемо по 3 вузлові точки: одну в центрі, а дві інші – на відстані $1/3$ довжини елемента по обидва боки від центральної (розривний граничний елемент). Тоді всі точки колокації утвореного внаслідок апроксимації контуру завжди відповідатимуть точкам на гладкій ділянці апроксимованого контуру. Крайові функції напружень Σt та переміщень Δw на елементі апроксимуємо за їхніми вузловими значеннями:

$$[\Sigma t, \Delta w](\xi) \approx \sum_{p=1}^3 [\Sigma t^{q,p}, \Delta w^{q,p}] \phi^p(\xi), \quad (17)$$

де ξ – параметр розташування точки на елементі, означений на проміжку $-1 \leq \xi \leq 1$ так: $d\Gamma_q = \frac{L_q}{2} d\xi = J_q d\xi$, J_q – модуль якобіана заміни змінних на елементі Γ_q . Для прямолінійного розривного квадратичного елемента його вузлам $\mathbf{x}^{q,p}$ ($p=1, \dots, 3$) відповідають значення параметра $\xi = \{-2/3; 0; 2/3\}$. Тому інтерполяційні поліноми Лагранжа $\phi^p(\xi)$ означені виразами

$$\phi^1 = \xi \left(\frac{9}{8} \xi - \frac{3}{4} \right), \quad \phi^2 = \left(1 - \frac{3}{2} \xi \right) \left(1 + \frac{3}{2} \xi \right), \quad \phi^3 = \xi \left(\frac{9}{8} \xi + \frac{3}{4} \right). \quad (18)$$

Таким чином система гіперсингулярних інтегральних рівнянь (10) зводиться до системи лінійних алгебричних рівнянь стосовно шуканих вузлових значень $\Sigma t^{q,p}$, $\Delta w^{q,p}$ крайових функцій Σt та Δw :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} F^w(\mathbf{x}^{s,r}) &= w^{\text{hom}}(\mathbf{x}^{s,r}) + \sum_{q=1}^n \sum_{p=1}^3 [\Sigma t^{q,p} \int_{-1}^1 W(\xi, \mathbf{x}^{s,r}) \phi^p(\xi) J_q d\xi - \\ &\quad - \Delta w^{q,p} \int_{-1}^1 T(\xi, \mathbf{x}^{s,r}) \phi^p(\xi) J_q d\xi], \\ \frac{1}{2} F^t(\mathbf{x}^{s,r}) &= \sum_{j=1}^2 n_j^+(\mathbf{x}^{s,r}) \sigma_{3j}^{\text{hom}}(\mathbf{x}^{s,r}) + \sum_{q=1}^n \sum_{p=1}^3 \sum_{j=1}^2 n_j^+(\mathbf{x}^{s,r}) \times \\ &\quad \times \left[\Sigma t_k^{q,p} \int_{-1}^1 D_j(\xi, \mathbf{x}^{s,r}) \phi^p(\xi) J_q d\xi - \Delta w^{q,p} \int_{-1}^1 S_j(\xi, \mathbf{x}^{s,r}) \phi^p(\xi) J_q d\xi \right] \end{aligned} \quad (19)$$

для $3n$ точок колокації $\mathbf{x}^{s,r}$ ($s=1, \dots, n; r=1, 2, 3$). Граничноелементне подання моделі (12) та (15) тонкого включення сталі товщини $2h$ має вигляд

$$\begin{aligned} F^t(\mathbf{x}^{k,r}) &= -\Delta w^{k,r} G_B / h; \\ \frac{1}{2} F^w(\mathbf{x}^{k,r}) &= w^0 + \frac{1}{2hG_B} \left[\sum_{s=1}^{k-1} J_s^2 \int_{-1}^1 \int_{-1}^{\eta} \Sigma t^s(\zeta) d\zeta d\eta + \right. \\ &\quad \left. + J_k^2 \int_{-1}^{\xi_r} \int_{-1}^{\eta} \Sigma t_j^k(\zeta) d\zeta d\eta + 2 \sum_{m=1}^{k-1} J_m \left(2h\sigma_{\tau 3}^0 + \sum_{s=1}^{m-1} J_s \int_{-1}^1 \Sigma t^s(\xi) d\xi \right) + \right. \\ &\quad \left. + (\xi_r + 1) J_k \left(2h\sigma_{\tau 3}^0 + \sum_{s=1}^{k-1} J_s \int_{-1}^1 \Sigma t^s(\xi) d\xi \right) \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Відповідно до [5] крайові функції біля вершини дефекту можна подати у вигляді

$$\Delta w = K_{31} \sqrt{8r} / (\sqrt{\pi} G), \quad \Sigma t = -K_{32} \sqrt{2/(\pi r)}. \quad (21)$$

де r – відстань до вершини; K_{3i} – УКІН (K_{31} відповідає КІН K_3 теорії тріщин). Для визначення УКІН використаємо значення функцій Δw та Σt у вузлах 3-3' та 2-2' граничного елемента на кінці включення (рис. 3). Апроксимуючи функціями (21) вузлові значення розривів переміщень Δw та напружень Σt , обчислені на основі розв'язку системи рівнянь (19) задачі, за допомогою методу найменших квадратів отримаємо прості розрахункові формули

$$K_{31} = \frac{\sqrt{\pi}G(3\Delta w^{2-2'} + \sqrt{15}\Delta w^{3-3'})}{16\sqrt{2J}}, \quad K_{32} = -\frac{\sqrt{2\pi}J(5\Sigma t^{2-2'} + \sqrt{15}\Sigma t^{3-3'})}{16}. \quad (22)$$

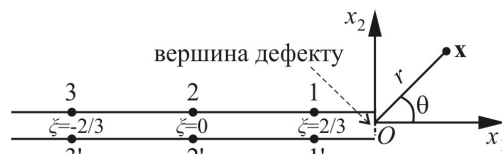


Рис. 3. Система вузлів на кінцевому граничному елементі

За розробленою схемою методу граничних елементів тонке дволанкове включення моделювалося рівномірно розподіленими уздовж ланок L_0 та L_1 граничними елементами. У числовій схемі методу особливість у точці зламу, як і на кінцях розрізу, окремо не виділялася. Узагальнені КІН обчислювалися за апроксимаційними формулами (22).

Аналіз результатів. Вивчимо двома розглянутими вище методами вплив геометричних та механічних параметрів неоднорідності на УКІН дволанкового включення за двох способів дії однорідного поля напружень на нескінченності.

Приклад 1. Розглянемо симетричну щодо осі y дволанкову неоднорідність півтовщини $h = 0,01a$ з відносним модулем пружності $k = G_B/G$, кутом α розхилу однакових за величиною $a_0 = a_1 = a$ ланок за дії навантаження на нескінченності $\sigma_{yz}^\infty = \tau$, $\sigma_{xz}^\infty = 0$ (див. рис. 1). Під час розв'язування ССР (6) з додатковими умовами (1), (7), (8) методом колокацій [5] бралось $N = 40$ членів розвинення в ряд функцій стрибків, що забезпечило похибку обчислень УКІН у 0,1%.

Загальна кількість граничних елементів, використаних для моделювання задачі у методі за схемою граничних елементів, дорівнює 82 (по 41 елементу на кожен ланку).

У табл. 1 подано результати обчислення нормованих УКІН $K_{31}^{0\tau} = K_{31}/(\tau\sqrt{\pi a})$ для лівої (A) вершини податнішого за матрицю дволанкового включення (для жорсткіших цей УКІН близький до нуля), отримані методом впровадження додаткових зосереджених чинників і за схемою (19) методу граничних елементів.

Таблиця 1

Нормовані УКІН $K_{31}^{0\tau}$ лівої (A) вершини податнішого за матрицю дволанкового включення у нескінченному просторі

	Метод додаткових зосереджених чинників						Метод граничних елементів					
	30	60	90	120	150	180	30	60	90	120	150	180
0	0	0	0	0	0	0	0,009	0,017	0,025	0,030	0,034	0,035
-0,5	0,025	0,047	0,067	0,082	0,092	0,095	0,024	0,046	0,065	0,079	0,088	0,091
-1	0,058	0,112	0,158	0,194	0,216	0,224	0,053	0,103	0,146	0,178	0,199	0,206
-2	0,191	0,363	0,509	0,619	0,688	0,712	0,192	0,363	0,508	0,619	0,688	0,711
-3	0,414	0,705	0,939	1,113	1,222	1,258	0,426	0,722	0,960	1,137	1,247	1,284
-4	0,507	0,812	1,059	1,243	1,357	1,396	0,523	0,834	1,085	1,273	1,390	1,429
-7	0,521	0,827	1,075	1,260	1,375	1,414	0,538	0,850	1,102	1,291	1,408	1,448
Ф. (23)	0,521	0,827	1,075	1,260	1,375	1,414	0,521	0,827	1,075	1,260	1,375	1,414

У останньому рядку табл. 1 подано результати для дволанкової тріщини, обчислені за формулою (23).

У табл. 2 подано результати обчислення нормованих УКІН $K_{32}^{0\tau} = K_{32}/(\tau\sqrt{\pi a})$ для лівої (A) вершини жорсткішого за матрицю дволанкового включення. УКІН для лівої і правої вершин включення для податнішої за матрицю неоднорідності виявилися того ж, а для жорсткішої – протилежного знаку.

Спостерігаємо, що результати обчислення УКІН, отримані за допомогою методу додаткових зосереджених чинників, різняться не більше, як на 1–3 % від результатів, отриманих за схемою методу граничних елементів (див. табл. 1, 2). Розбіжність результатів пояснюється перш за все нехтуванням у

схемі (19) кореневою особливістю стрибків напружень на кінцях неоднорідності, обчисленням УКІН за апроксимаційними формулами (22), відмінністю моделей тонкого включення.

Таблиця 2

Нормовані УКІН $K_{32}^{0\tau}$ лівої (A) вершини жорсткішого за матрицю дволанкового включення у нескінченному просторі

	Метод додаткових зосереджених чинників						Метод граничних елементів					
	30	60	90	120	150	180	30	60	90	120	150	180
7	0,785	0,740	0,621	0,446	0,233	0	0,771	0,732	0,615	0,442	0,231	0
4	0,782	0,737	0,618	0,443	0,231	0	0,767	0,728	0,612	0,439	0,229	0
3	0,753	0,707	0,591	0,424	0,221	0	0,735	0,694	0,582	0,418	0,218	0
2	0,564	0,517	0,427	0,304	0,158	0	0,524	0,483	0,399	0,284	0,148	0
1	0,212	0,190	0,155	0,110	0,057	0	0,146	0,131	0,107	0,076	0,039	0
0,5	0,091	0,082	0,067	0,047	0,024	0	0,046	0,041	0,033	0,024	0,012	0
0	0	0	0	0	0	0	0,008	0,007	0,006	0,004	0,002	0

Достовірність отриманих результатів забезпечується також порівнянням УКІН для дуже податного включення ($k = 10^{-7}$) з отриманими на основі формул [11] КІН K_3 для дволанкової тріщини у просторі, зокрема: для навантаження $\sigma_{yz}^\infty = \tau$, $\sigma_{xz}^\infty = 0$ –

$$K_{31}^{0\tau} \sim K_3 = \sqrt{2} [m/(1-m)]^{1/2-m}; \quad (23)$$

для навантаження $\sigma_{yz}^\infty = 0$, $\sigma_{xz}^\infty = \tau_1$ –

$$K_{31}^{0\tau_1} \sim K_3 = 1/\sqrt{2} (1-2m)m^{-m} (1-m)^{m-1}, \quad m = \alpha/(2\pi). \quad (24)$$

Результати обчислення УКІН за допомогою методу додаткових зосереджених чинників з похибкою менше 0,1% збігаються з отриманими на основі формул (23), (24). У випадку розв'язку за схемою методу граничних елементів похибка склала близько 2% через неврахування особливості.

Зазначимо також, що для навантаження у площині, перпендикулярній до площини навантаження попередньо розглянутого випадку, тобто $\sigma_{yz}^\infty = 0$, $\sigma_{xz}^\infty = \tau_1$, і так само розташованого включення з відносним модулем пружності \tilde{k} , таким, що $\lg \tilde{k} = -\lg k$, УКІН $K_{32}^{0\tau_1} = K_{32} / (\tau_1 \sqrt{\pi a})$ і $K_{31}^{0\tau_1} = K_{31} / (\tau_1 \sqrt{\pi a})$ відрізнялися не більше, як на 0,1% від УКІН $K_{31}^{0\tau}$ та $K_{32}^{0\tau}$ відповідно, отриманих за навантаження $\sigma_{yz}^\infty = \tau$, $\sigma_{xz}^\infty = 0$ ($K_{32}^{0\tau_1} \approx K_{31}^{0\tau}$, $K_{31}^{0\tau_1} \approx K_{32}^{0\tau}$) при обчисленні методом додаткових зосереджених чинників і не більше 3% при обчисленні за схемою методу граничних елементів. Це впливає, зокрема, і з відповідності ССІР (6) двох задач.

Приклад 2. Розглянемо дволанкове включення відносної товщини $h/a_0 = 0,01$ з ланками різної довжини за дії навантаження $\sigma_{yz}^\infty = \tau$, $\sigma_{xz}^\infty = 0$ (див. візку рис. 4). Проаналізуємо вплив відносної довжини $c = a_1/a_0$ неоднорідностей, а також їхнього кута розхилу α на нормовані УКІН $K_{3i}^{0A,B} = K_{3i}^{A,B} / (\tau \sqrt{\pi a_0})$ ($i=1,2$) лівої (A) і правої (B) вершини неоднорідності (рис. 4). Дослідимо випадки гострого $\alpha = \pi/6$ (на рис. 4 – суцільна лінія), прямого $\alpha = \pi/2$ (штрихова лінія) та тупого $\alpha = 5\pi/6$ (пунктирна лінія) кутів розхилу $\alpha = \alpha_0 - \alpha_1$. Обчислення здійснені для $c = 1; 0,8; 0,5; 0,3; 0,1$.

Спостерігаємо, що зі зменшенням довжини ланки L_1 , абсолютна величина нормованих УКІН для вершини A ланки L_0 зменшується для податнішого за матрицю включення і зростає для жорсткішого. Екстремальні значення нормованих УКІН K_{3i}^{0A} ($i=1,2$) отримуються для граничних випадків пружних властивостей включення – тріщини і АЖВ.

Зростання кута розхилу α від нуля до π податнішої за матрицю неоднорідності спричиняє зростання нормованого УКІН лівої (A) вершини, який за такого навантаження досягає свого максимуму

у разі плоскої стрічкової тріщини ($\alpha = \pi$). У випадку жорсткішої за матрицю неоднорідності спостерігаємо протилежну ситуацію. Результати дослідження впливу малих кутів між ланками з огляду на обмежений обсяг публікації тут не подано. Це питання вимагає окремого докладного вивчення.

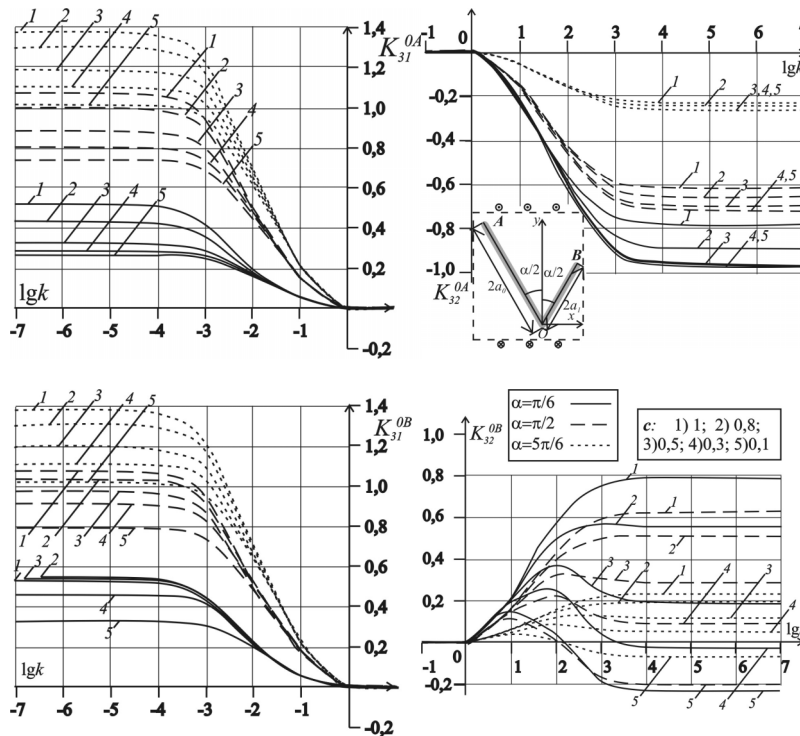


Рис. 4. Нормовані УКІН для несиметричного дволанкового включення

Для вершини B ланки L_1 спостерігаємо дещо іншу ситуацію. Зокрема для гострого кута добре видно, що графіки залежностей УКІН K_{32}^{0B} від відносного модуля зсуву не є монотонними: зі зростанням k спочатку спостерігаємо зростання K_{32}^{0B} , досягнення ним певного максимального значення і подальше спадання, навіть, для малих значень c , з можливою для достатньо коротких і великих кутів зламу включення зміною знаку УКІН на протилежний. Пояснити ці неочевидні результати можна перш за все взаємодією вершини B неоднорідності з ланкою L_0 включення L , яка посилюється зі зменшенням довжини ланки L_1 . Близькість результатів, отриманих двома методами, дає підстави стверджувати їхню правильність.

Висновки. У роботі на основі методу функцій стрибків запропоновано прості способи достатньо точного визначення напружено-деформованого стану безмежного ізотропного середовища з дволанковою пружною тонкою неоднорідністю. Задача зводиться до визначення напружено-деформованого стану для двох пружних неоднорідностей за дії додаткової невідомої зосередженої сили і дислокації у точці поєднання між собою окремих фрагментів, та використанні певних додаткових умов. Також розроблено числовий підхід розв'язування задач антиплоскої деформації тіл із тонкими стрічковими включеннями довільної гладкої чи ламаної конфігурації за схемою методу граничних елементів. Обчислені для прикладів узагальнені коефіцієнти інтенсивності напружень збіглися з відомими розв'язками КІН для дволанкової тріщини. Взаємна верифікація результатів, отриманих двома розробленими методами, виявляє хорошу узгодженість, що свідчить про достовірність отриманих даних і у випадку дволанкового пружного включення.

РЕЗЮМЕ

Разработана аналитико-численная, а также численная методика (на основе метода граничных элементов) решения задач продольного сдвига бесконечного изотропного тела с тонкими упругими включениями при наличии угловых точек. Результаты вычислений обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений для двухзвенного упругого включения при нагрузке на бесконечности, вычисленные с помощью двух методов, отличаются незначительно, что подтверждает правильность полученных результатов.

Ключевые слова: двухзвенное упругое включение, ломаная трещина, МГЭ, ССИУ, УКІН, метод сосредоточенных факторов.

SUMMARY

This paper develops analytic-numeric and numeric (basing on the boundary element method) approaches for study of out-of-plane shear of infinite solid containing thin elastic kinked inclusion. The values of generalized stress intensity factors obtained by both developed approaches for two-link elastic kinked inclusion are in a good agreement that verifies the correctness of the received results and also proves the efficiency of proposed techniques.

Keywords: two-link elastic inclusion, kinked crack, BEM, SSIE, SIF, method of concentrated factors

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Саврук М. П. Численный анализ в плоских задачах теории трещин / Саврук М. П., Осив П. Н., Прокопчук И. В. – К.: Наук. думка, 1989. – 248 с.
2. Саврук М. П. Визначення напруженого стану нескінченного тіла з ламаними тріщинами / Саврук М. П., Осечко А. М. // *Машинознавство*. – 2002. – № 9. – С. 21 – 25.
3. Саврук М. П. Поздовжній зсув безмежного тіла із системою ламаних тріщин / Саврук М. П., Осечко А. М. // *ФХММ*. – 2003. – Т. 39, № 5. – С. 49 – 58.
4. Chen YZ. Complex potentials and integral equations for curved crack and curved rigid line problems in plane elasticity / Chen YZ, Lin XY. // *Acta Mechanica*. – 2006. – P. 182:211–230.
5. Сулим Г. Т. Основи математичної теорії термопружної рівноваги деформівних твердих тіл з тонкими включеннями / Сулим Г. Т. – Монографія. – Львів: дослідно-видавничий центр НТШ, 2007. – 716 с.
6. Божидарник В. В. Елементи теорії пружності / Божидарник В. В. Сулим Г. Т. – Львів: Світ, 1994. – 560 с.
7. Сулим Г. Т. Антиплоская задача для системы линейных включений в изотропной среде / Сулим Г. Т. // *Прикл. матем. и механика*. – 1981. – Т. 45, № 2. – С. 308 – 318.
8. Божидарник В. В. Елементи теорії пластичності та міцності / Божидарник В. В. Сулим Г. Т. – Львів: Світ, 1994. – 948 с.
9. Панасюк В. В. Концентрация напряжений в трехмерных телах с тонкими включениями / Панасюк В. В., Стадник М. М., Силованюк В. П. – К.: Наук. думка, 1986. – 216 с.
10. Portela A. The dual boundary element method: Effective implementation for crack problems / Portela A., Aliabadi M. H., Rooke D. P. // *Int. J. Numer. Meth. Engng.* – 1992. – Vol. 33. – P. 1269–1287.
11. Саврук М. П. Коэффициенты интенсивности напряжений в телах с трещинами. / Саврук М. П. – К.: Наук. думка, 1988. – 618 с.

Надійшла до редакції 01.03.2010 р.

ВЗАЄМНІ СТАТИСТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПУЛЬСАЦІЙ ШВИДКОСТІ
ТА ТИСКУ В НАПІВСФЕРИЧНОМУ ЗАГЛИБЛЕННІ

В. А. Воскобійник, А. В. Воскобійник
Інститут гідромеханіки НАН України, м. Київ

Представлені результати експериментальних досліджень формування та еволюції вихрової течії в напівсферичній лунці, розташованій на гладкій пластині. Поміряні взаємні кореляції і спектри поля пульсацій швидкості над обтічною поверхнею лунки та пластини і поля пристінного тиску на обтічній поверхні. Вказані характерні особливості зміни взаємних характеристик, отримані швидкості переносу джерел пульсацій швидкості та тиску. Для різних пар датчиків показаний ступінь корелюваності пульсацій швидкості та тиску і визначені напрями переносу корельованих сигналів.

Ключові слова: напівсферична лунка, вихрові структури, кореляція, спектр

Вступ. Обтічні поверхні багатьох конструкцій мають заглиблення різноманітної конфігурації та форми. Серед них можна виділити гідротехнічні споруди з технологічними нішами на які діє хвиловий рух у відкритому морі та поблизу берегів, заглиблення конструктивного або випадкового характеру, розташовані на корпусах підводних та надводних човнів, колодязі шасі та вантажні люки на літаках, корпуси пристроїв корегування траєкторії руху на космічних апаратах та в інших технічних конструкціях [1]. Залежно від режимів обтікання та геометричних параметрів таких неоднорідностей, усередині них формуються складні вихрові течії, які можуть призвести до збільшення опору тіл, шуму та вібрацій [2, 3]. Підвищений інтерес до використання, наприклад, сферичних заглиблень невеликої глибини пов'язаний також з тим, що спортивні снаряди, котрі мають на своїй поверхні елементи шорсткості у вигляді заглиблень різної форми мають можливість пролітати більшу відстань. В першу чергу це стосується м'ячів для гольфу, футболу, волейболу. Вирішенням проблеми зменшення опору кулі у польоті стало нанесення сферичних заглиблень на поверхню кулі. В цьому випадку рух повітря в примезовому шарі турбулізується, відривна зона зменшується, а відрив потоку затягується у кормову частину обтічної поверхні кулі. Довший рух потоку навколо кулі перед відривом створює набагато менший слід і значно зменшує опір, в першу чергу через зменшення опору форми. Коли у польоті м'яч з заглибленнями рухається з обертанням, то при цьому збільшується його підймальна сила [4]. На добре обтічних поверхнях в енергозберігаючих технологіях використовуються системи заглиблень з метою генерації вихрових структур, що суттєво збільшує тепло та масопереніс і процеси змішування, а також зменшує низькочастотний гідродинамічний шум та вібрації. Так, наприклад, досліді показали, що нанесення заглиблень на поверхню моделі швидкісного залізничного експресу зменшує опір на 15% [5]. Використання рядів сферичних заглиблень на найбільшому стовщенні аеродинамічних профілів, крил та пропелерів покращило аеродинамічні властивості крила та збільшило швидкість польоту майже на 10%. В автомобілебудуванні заглиблення розташовані на днищі автомобілів Lexus, Audi та Volkswagen використано для зменшення аеродинамічного опору, шуму у салоні та забруднення днища [4, 5]. У теплоенергетиці широко використовуються системи заглиблень на кожухах теплообмінних апаратів, на поверхні лопатей газових турбін та трубних теплообмінниках, що на практиці дозволило покращити їх теплогідрравлічну ефективність [4, 6, 7].

Вихровий рух у локальному заглибленні, розташованому на обтічній поверхні, як показують результати чисельних та експериментальних досліджень, є украй складним по своїй структурі, неоднорідним у просторі та нестационарним у часі [1, 4-7]. Залежно від геометричних параметрів та режимів обтікання усередині отвору заглиблення формується циркуляційна течія, генеруються великомасштабні когерентні вихрові структури і дрібномасштабні вихори, які взаємодіють як один з одним, так і з обтічною поверхнею. Результати робіт [8, 9] показали, що при збільшенні швидкості обтікання кількість дрібномасштабних вихрових структур зростає. При достатньо високих швидкостях потоку з передньої кромки заглиблення відривається примезовий шар, утворюючи зсувний шар, частина якого у результаті дії сил в'язкості та інерції згортається у вихрові структури та, взаємодіючи з внутрішнім вихровим рухом заглиблення, інтенсифікує турбулентність основного потоку. Ударна взаємодія вихрових структур зсувного шару з кормовою стінкою заглиблення породжує потужні пульсації швидкості та тиску, ініціює осциляції потоку, як усередині лунки, так і в її околі, генерує резонансні коливання усередині отвору заглиблення. Викид вихрових систем назовні з заглиблення, яке обтікається потоком, та їх взаємодія з останнім утворює інтенсивні поля пульсацій векторних і скалярних складових течії, що передаються у оточуюче середовище у тому числі і на обтічну поверхню.

Вихрові системи, які формуються у результаті взаємодії течії з локальною неоднорідністю обтічної поверхні, у вигляді одиночного заглиблення або ансамблю лунок можуть призвести до збільшення опору поверхні, її гідродинамічного шуму та вібрацій. Інтенсивність пульсацій, які генеруються усере-

дині і поблизу обтічного заглиблення, залежить від динамічних та кінематичних параметрів потоку і від форми та розміру самого заглиблення. Пульсації швидкості та тиску, обумовлені перенесенням джерел пульсацій у просторі і у часі, корелюють між собою і ступінь їх кореляції значною мірою залежить від віддалення від джерел пульсацій (вихрових структур) і їх інтенсивності. Одним з методів вивчення структури вихрового потоку і його особливостей є статистичний взаємний кореляційний і спектральний аналіз, який застосовується для полів випадкових змінних у вигляді пульсацій швидкості та тиску, виміряних відповідними датчиками, які мають необхідну просторову та часову роздільну здатність [10, 11].

Метою представлених експериментальних досліджень є вивчення просторово-часових характеристик вихрових структур, а також знаходження характерних частот коливального процесу, що формуються усередині напівсферичного заглиблення і в його околі. Для цього використовуються статистичні методи, зокрема взаємні кореляційні і спектральні характеристики поля пульсацій швидкості та пульсацій тиску над обтічною поверхнею та на ній.

Експериментальна установка та методика вимірювань. Експериментальні дослідження проводилися в гідродинамічному лотку завдовжки 16 м, шириною 1 м та глибиною 0,8 м. Глибина потоку води була близько 0,4 м, а його швидкість змінювалася від 0,03 м/с до 0,4 м/с. Досліджувана пластина з напівсферичним заглибленням встановлювалася на дно вимірювальної ділянки гідродинамічного лотку і розташовувалася на відстані 0,1 м від дна лотка паралельно його поверхні [12]. Гідравлічно гладка пластина, виготовлена з полірованого органічного скла завтовшки 0,01 м, шириною 0,5 м і завдовжки 2 м, була загострена з одного (фронтального) та з іншого (кормового) боку для забезпечення безвідривної її обтікання (рис. 1). На відстані 1 м від носка пластини було зроблено одиночний отвір напівсферичної

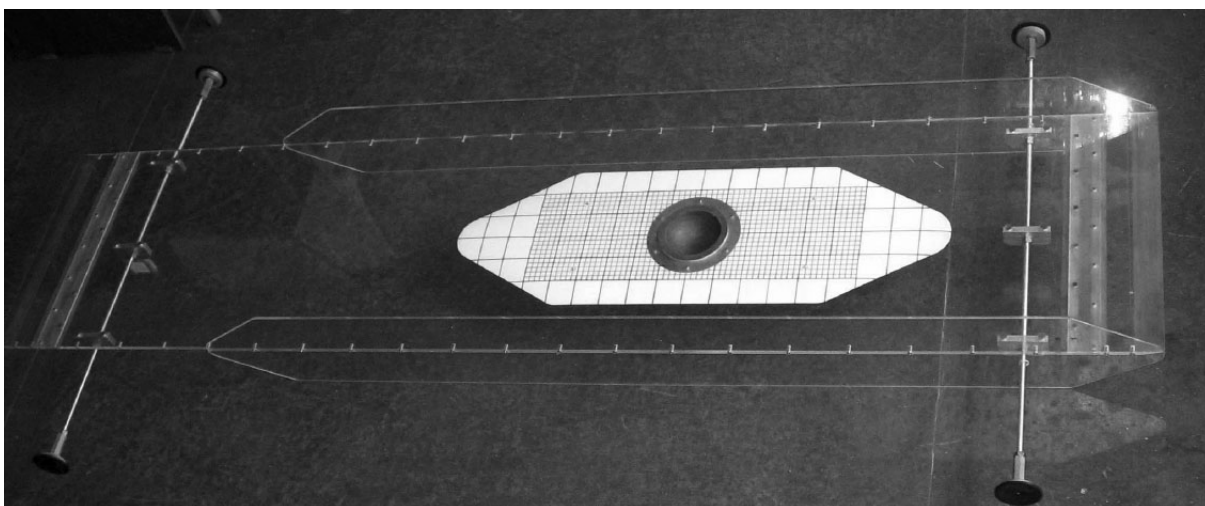


Рис. 1. Вимірювальна пластина з напівсферичним заглибленням та координатною сіткою, нанесеною на обтічній поверхні

форми діаметром 0,1 м. Урівень з обтічною поверхнею півсферичної лунки і на пластині поблизу заглиблення встановлювалися 8 мініатюрних датчиків пульсацій пристінного тиску (рис. 2, а). Ці

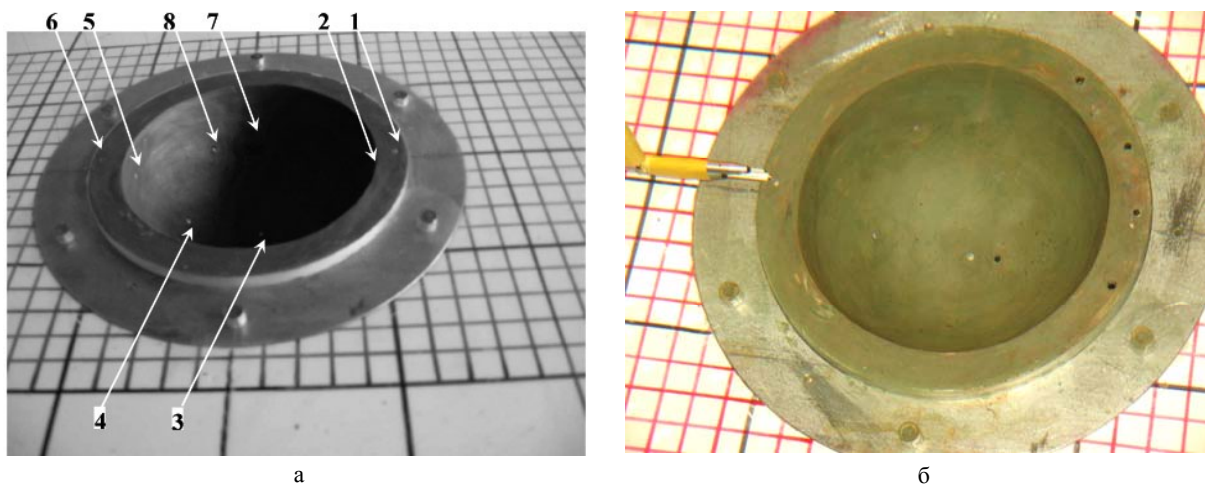


Рис. 2. Розташування датчиків у напівсферичному заглибленні та поблизу нього: а) – п'єзокерамічні датчики пульсацій пристінного тиску; б) – кореляційний блок плівкових термоанемометрів

п'єзокерамічні датчики мембранного типу мали діаметр чутливої поверхні $1,6 \cdot 10^{-3}$ м. Разом з датчиками пульсацій пристінного тиску в експериментальних дослідженнях використовувались плівкові термоане-

мометри фірми Діза. На рис. 2, б показано розташування одно та двокомпонентних плівкових термоанемометрів над пластиною позаду півсферичного заглиблення і датчиків пульсацій тиску, вмонтованих урівень з обтічною поверхнею пластини та заглиблення. Термоанемометри за допомогою відповідних державок і координатних пристроїв вводились усередину примежового шару та у вихровий потік заглиблення для вимірювання поля швидкості.

Електричні сигнали датчиків пульсацій пристінного тиску та плівкових термоанемометрів підсилювались, фільтрувались, вимірювались і реєструвались відповідною апаратурою. Виміряні аналогові сигнали подавались на багатоканальні аналогово-цифрові перетворювачі, вбудовані в персональний комп'ютер, де реєструвались, а потім оброблялись по стандартних та спеціально розроблених програмах і методиках з використанням алгоритму швидкого перетворення Фур'є у часовому та частотному представленнях експериментальних даних.

Усі датчики, незалежно від призначення і конструкції калібрувались та тестувались абсолютними і відносними методами. У ході експериментальних досліджень датчики тиску повірялися за допомогою генерації імпульсу надмірного тиску або його гармонійної форми в гідродинамічному лотку, що служило методом поточного контролю стану датчиків та їх чутливості. Разом з цим, перевірка датчиків проводилася як перед початком проведення досліджень, так і після їх закінчення. Калібрувальні та тестові криві і залежності використовувалися для визначення чутливості датчиків та коефіцієнтів перетворення фізичних величин в електричні сигнали вимірювальними трактами.

Похибка вимірювань осереднених та інтегральних характеристик поля пульсацій швидкості та тиску не перевищувала 8 % при надійності 0,95 або 2σ . Похибка вимірювань спектральних та кореляційних залежностей полів пульсацій швидкості і тиску складала не більше 2 дБ в діапазоні частот від 0 Гц до 12,5 кГц при тій же надійності вимірюваних результатів.

Результати вимірювань. Загальними закономірностями інтегральних результатів, отриманих для обтікання півсферичної лунки, є: по-перше, наявність областей збільшення та зменшення середніх значень поздовжньої швидкості, що чергуються, над лункою, обумовлене впливом лунки на примежовий шар; по-друге, наростання середньої та пульсаційної швидкості при наближенні шару змішування до кормової стінки лунки; по-третє, існування в придонній області лунки зворотньої течії, яка зароджується у зоні ударної взаємодії вихрових структур шару змішування та кормової стінки лунки.

Спектральні густини потужності пульсацій поздовжньої швидкості, пульсацій пристінного тиску та хвильовий спектр у примежовому шарі на пластині перед заглибленням якісно мають вигляд подібний до загальноприйнятих спектральних представлень поля швидкості та тиску над плоскою поверхнею [11] у вигляді монотонно змінних спектрів у частотному та хвильовому діапазонах. Але в області низьких частот частотний спектр пульсацій швидкості та тиску над пластиною в безпосередній близькості до заглиблення має декілька вищих рівнів, вказуючи на те, що поблизу заглиблення примежовий шар більшою мірою насичується великомасштабними низькочастотними вихровими системами [7]. З віддаленням углиб лунки уздовж її передньої стінки відбувається перерозподіл енергії спектральних складових пульсацій поздовжньої швидкості та тиску з високочастотної області в низькочастотну область. У спектрах з'являються яскраво виражені екстремуми спектральних рівнів для кривих, які отримано там де розташовуються квазістійкі великомасштабні когерентні вихрові системи у заглибленні. У центральній частині заглиблення спостерігається більш високочастотне наповнення спектрів з виразним проявом пульсаційної енергії вихрових систем в інерційній області частот, де спектри змінюються обернено пропорційно частоті.

Датчики пульсацій пристінного тиску, встановлені в області ударної взаємодії вихрових структур зсувного шару з кормовою стінкою заглиблення, виразно реєструють резонансні пульсації тиску (дискретні підвищення у спектральних залежностях), які відповідають першій та другій модам автоколивань вихрових структур зсувного шару. Окрім цього, поле пульсацій пристінного тиску в області кормової стінки насичено періодичними коливаннями, які відповідають низькочастотній слідовій моді осциляцій вихрової течії, що властиво внутрішній структурі потоку в заглибленні. При збільшенні швидкості обтікання плоскої поверхні з локальною неоднорідністю спектральні рівні резонансних коливань, що відповідають слідовим і зсувним модам осциляцій зменшуються. Разом з цим в спектральних залежностях пульсацій пристінного тиску, особливо у придонній області півсферичного заглиблення, все більш виразно проявляється тривимірна модулююча мода осциляцій, якій властиво значення числа Струхала ($St=fd/U_\infty$) порядку 0,025, що узгоджується з результатами робіт [3, 7, 8].

На рис. 3 наведені спектральні залежності, які отримані при обтіканні пластини з локальним заглибленням потоком зі швидкістю 0,1 м/с. Крива 1 відповідає результатам вимірювань за допомогою датчика пульсацій пристінного тиску 3, встановленого у центрі дна заглиблення (див. рис. 2, а). Крива 2 відповідає вимірюванням на кормовій стінці лунки (датчик 4). Для цього режиму обтікання числа Рейнольдсу, обраховані по швидкості потоку та відстані від носка пластини до розташування лунки і по діаметру лунки складають $Re_x=8 \cdot 10^4$ і $Re_d=1 \cdot 10^4$ відповідно. Результати досліджень показують, що на дні заглиблення максимум спектральних рівнів пульсацій пристінного тиску спостерігається на частоті порядку 0,05 Гц ($St \approx 0,05$) та її вищих гармоніках. На кормовій стінці заглиблення, з якою взаємодіють вихори

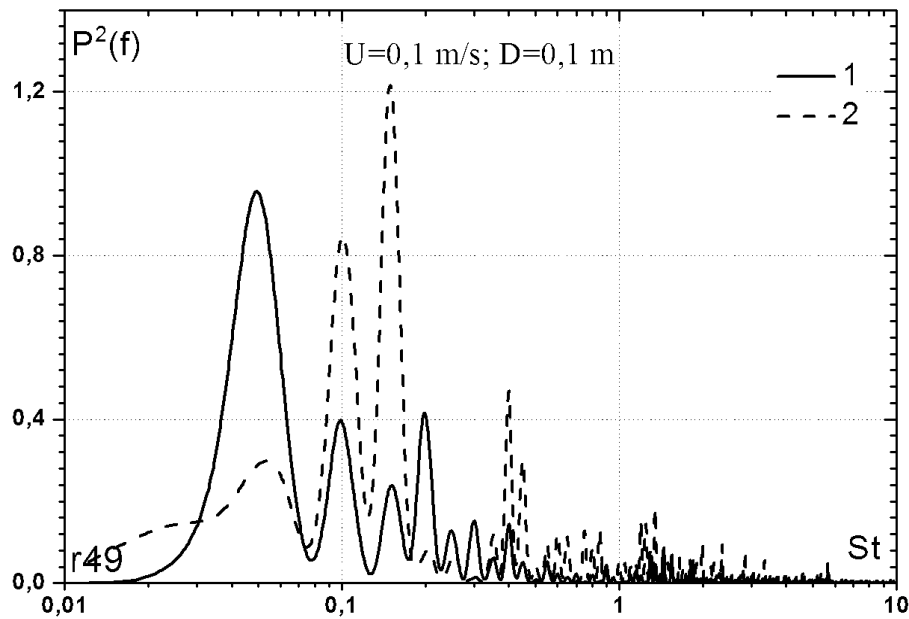


Рис.3. Спектральні густини потужності пульсацій пристінного тиску на обтічній поверхні напівсферичної лунки для швидкості потоку 0,1 м/с

зсувного шару, найбільші пульсації пристінного тиску зареєстровано на частотах близько 0,16 Гц та 0,4 Гц ($St=0,16$ та $0,4$).

Просторово-часові або взаємні кореляційні характеристики полів пульсацій тиску та швидкості експериментально досліджувались з використанням групи датчиків, які утворювали кореляційні блоки та розташовувались як усередині заглиблення, так і у рівень з обтічною поверхнею пластини та півсферичної лунки. У ході експериментальних досліджень вимірювалися автокореляційні функції пульсацій швидкості та тиску, що дозволило визначити розвиток у часі кореляційного сигналу, який сприймався датчиками. Взаємна кореляція між парами однойменних та відмінних один від одного за конструкцією та вимірюваним параметром датчиків дозволила отримати характерні особливості просторово-часового розвитку вихрового руху усередині заглиблення та поблизу нього. Проходження вихрових структур повз вимірювальні датчики дозволило оцінити їх ступінь кореляції, напрям переміщення, швидкість перенесення та час існування. Окрім цього, проведення кореляційного та спектрального аналізів дало можливість оцінити масштаби когерентних вихрових структур, напрям і частоту їх обертання.

На рис. 4 наведено залежності взаємних кореляцій між парами датчиків пульсацій пристінного тиску для різних швидкостей обтікання пластини з напівсферичним заглибленням. Крива 1 отримана для

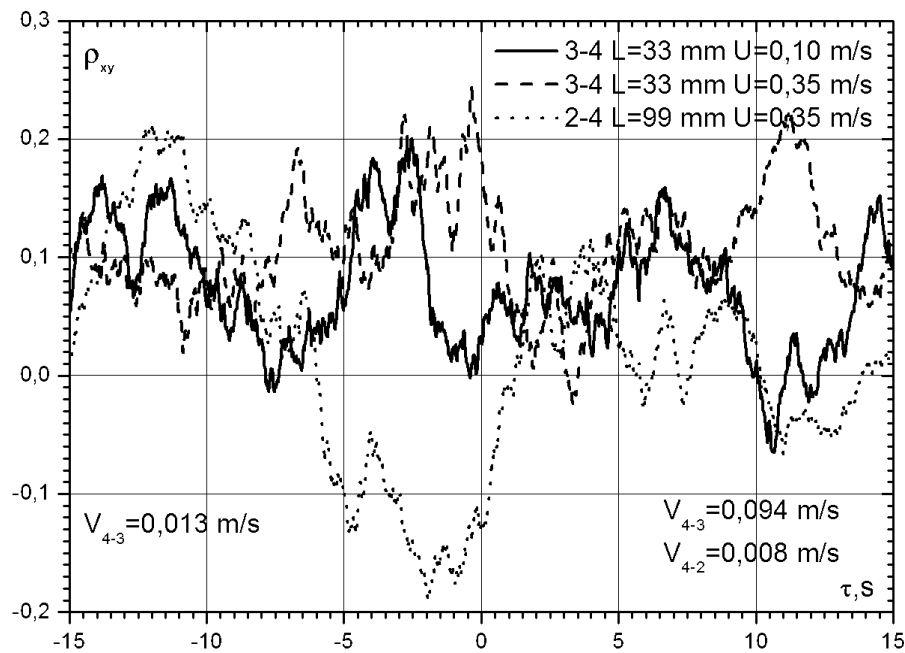


Рис.4. Взаємні кореляції між парами датчиків пульсацій пристінного тиску для різних швидкостей обтікання пластини з напівсферичним заглибленням

пари датчиків № 3 та № 4 (див. рис. 2, а) і режиму обтікання $U_\infty=0,1$ м/с, $Re_x=8 \cdot 10^4$ та $Re_d=1 \cdot 10^4$; крива 2 отримана для тієї ж пари датчиків, але для режиму обтікання $U_\infty=0,35$ м/с, $Re_x=2,8 \cdot 10^5$ та $Re_d=3,5 \cdot 10^4$, а крива 3 – для пари датчиків № 2 та № 4 і останнього режиму обтікання пластини з напівсферичним заглибленням. Відстань між датчиками пульсацій пристінного тиску уздовж поверхні заглиблення складала: $L_{3-4}=33$ мм або $L_{3-4}/d=0,33$ для датчиків № 3 та № 4 і $L_{2-4}=99$ мм ($L_{2-4}/d=0,99$) для датчиків № 2 та № 4. Збільшення швидкості обтікання пластини з локальним заглибленням призводить до зростання корелюваності пульсацій пристінного тиску, зареєстрованих на дні заглиблення і його кормовій стінці. При цьому максимум взаємної кореляції зміщується в область малих часових інтервалів, що вказує на вищу швидкість перенесення корелюваних сигналів, джерелами яких є вихрові структури. Окрім цього, максимумами взаємної кореляції між цією парою датчиків пристінного тиску спостерігаються для від'ємного часу затримки. Отже, найбільш корелюваний сигнал поступав від датчика № 4 до датчика № 3. Знаючи відстань між парою датчиків та час затримки, коли реєструється максимум взаємної кореляції, а також напрям розповсюдження цього корелюваного сигналу визначається групова швидкість перенесення вихрових систем, які генерують пульсації тиску, відповідно до рекомендацій [10, 12]. У приведених результатах експериментальних досліджень групова швидкість перенесення джерел пульсацій пристінного тиску на поверхні півсферичної лунки дорівнює $V_{cg4-3} \approx 0,13U_\infty$ для швидкості обтікання 0,1 м/с і $V_{cg4-3} \approx 0,27U_\infty$ для швидкості обтікання 0,35 м/с.

Коефіцієнт взаємної кореляції між датчиком пульсацій тиску, що знаходиться під зоною відриву примежового шару, та датчиком, розташованим на кормовій стінці заглиблення має як позитивне, так і негативне значення. При цьому значення коефіцієнтів кореляції і антикореляції (негативне значення коефіцієнта взаємної кореляції) приблизно однакові і їх максимуми розташовуються в області негативних часів затримки (крива 3 на рис. 4). Групова швидкість переносу синфазного корелюваного сигналу між датчиками № 4 і № 2 дуже мала і складає всього $0,02U_\infty$, а групова конвективна швидкість корелюваного протифазного сигналу дорівнює $0,14U_\infty$. Слід нагадати, що розрахунок вище приведених групових конвективних швидкостей проводився по відстані між парами датчиків пульсацій пристінного тиску уздовж кола напівсферичного заглиблення, а не по найкоротшій відстані між ними, оскільки допускається, що вихори у пристінній області заглиблення переміщуються паралельно обтічній поверхні.

Про ступінь корелюваності полів пульсацій пристінного тиску та швидкості над обтічною поверхнею лунки можна судити за допомогою даних наведених на рис. 5 для коефіцієнта взаємної кореляції пульсацій швидкості та пристінного тиску. Слід зазначити, що на цьому графіку разом з взаємною кореляцією

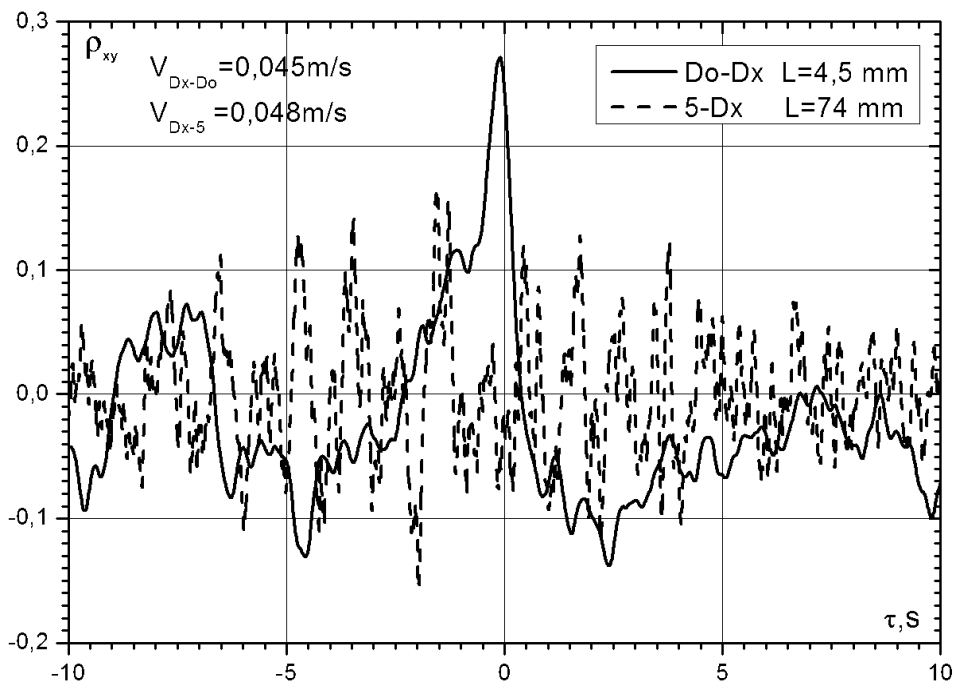


Рис.5. Взаємні кореляції між пульсаціями швидкості та пристінного тиску

ляцією між датчиками пульсацій швидкості приведені криві коефіцієнта взаємної кореляції між парами датчиків пульсацій швидкості та пульсацій пристінного тиску. Просторово-часові кореляції пульсацій швидкості і тиску отримані для швидкості обтікання пластини з локальним заглибленням $U_\infty=0,1$ м/с і чисел Рейнольдса $Re_x=8 \cdot 10^4$ та $Re_d=1 \cdot 10^4$. Пара плівкових термоанемометрів в цих вимірюваннях знаходилася над отвором заглиблення у верхній частині зсувного шару і ближче до передньої стінки лунки. Двокомпонентний датчик розміщувався ближче до площини обтічної пластини, а однокомпонентний датчик (вимірює поздовжню координату швидкості) знаходився над першим. Координатами розташу-

вання термоанемометрів відповідно до рис. 2, б були $l_{XDx}=-22$ мм або $-0,22d$; $l_{YDx}=5$ мм ($0,05d$) та $l_{ZDx}=0$ (двокомпонентний датчик) і $l_{XD0}=-22$ мм ($-0,22d$); $l_{YD0}=9,5$ мм ($0,095d$) та $l_{ZD0}=0$ (однокомпонентний датчик). Взаємна кореляція між поздовжніми компонентами пульсацій швидкості представлена кривою 1. Крива 2 відображає залежність коефіцієнта взаємної кореляції між пульсаціями пристінного тиску, які реєструвалися датчиком пульсацій тиску № 5, та пульсаціями поздовжньої швидкості, які вимірювалися двокомпонентним датчиком D_x . Як показують результати досліджень, кореляція між поздовжніми компонентами швидкості вища, ніж між пульсаціями тиску і швидкості. Швидкість перенесення корелюваного сигналу між двома датчиками швидкості трохи нижча, ніж між датчиком пульсацій швидкості та датчиком пульсацій пристінного тиску. Напрямок руху корелюваних сигналів наступний: від нижнього датчика швидкості до верхнього та від датчика швидкості до датчика пульсацій тиску, що знаходиться у верхній частині кормової стінки напівсферичної лунки.

Ступінь корелюваності пульсацій швидкості над обтічною поверхнею заглиблення та пульсацій пристінного тиску на його поверхні та напрямок переносу корелюваного сигналу дає можливість оцінити взаємозв'язок між полями швидкості та тиску в досліджуваному вихровому русі. Розташування датчиків пульсацій швидкості усередині зсувного шару, що формується при обтіканні напівсферичного заглиблення, і датчиків пульсацій пристінного тиску на кормовій стінці заглиблення показує, що вихрові структури зсувного шару переносяться із швидкістю порядку $0,48$ швидкості потоку. Це значення конвективної швидкості непогано узгоджується із загальноприйнятими значеннями швидкості перенесення вихрових структур у зсувному шарі над отвором заглиблення [1, 4, 10]. Як показують результати досліджень та підтверджують опубліковані дані теоретичних і експериментальних робіт вихрова течія усередині заглиблень незалежно від їх форми та розмірів і поблизу них є у великій мірі нестійкими процесами. Ця нестійкість виявляється в нестационарності фізичних явищ, що відбуваються у таких течіях, а також неоднорідності їх в просторі, що значно ускладнює їх реєстрацію в експериментальних дослідженнях і при чисельному моделюванні кінематики та динаміки вихрового руху.

Висновки. Результати експериментальних досліджень взаємних спектральних та кореляційних характеристик поля пульсацій швидкості та тиску усередині та поблизу напівсферичного заглиблення, розташованого на пласкій поверхні, яка обтікається потоком, дозволяють зробити наступні висновки:

1. Встановлено, що поблизу заглиблення примезовий шар більшою мірою насичується великомаштабними низькочастотними вихровими системами. З віддаленням углиб лунки уздовж її передньої стінки відбувається перерозподіл енергії спектральних пульсацій поздовжньої швидкості і тиску з високочастотної області в низькочастотну область. У спектрах з'являються яскраво виражені екстремуми спектральних рівнів, які відповідають першій та другій зсувним модам, слідовій моді та низькочастотній тривимірній моді осциляцій, яка модулює коливальний процес. У центральній частині заглиблення спостерігається більш високочастотне наповнення спектрів з розширенням інерційної області частот в енергії вихрових систем.

2. Виявлено, що кореляція між поздовжніми компонентами швидкості вища, ніж між пульсаціями тиску та швидкості. Збільшення швидкості обтікання пластини з локальним заглибленням призводить до зростання корелюваності пульсацій пристінного тиску, зареєстрованих на дні заглиблення та його кормовій стінці. Максимум взаємної кореляції зміщується в область малих часових інтервалів, що вказує на вищу швидкість переносу корелюваних сигналів, джерелами яких є когерентні вихрові системи. Групова швидкість переносу джерел пульсацій пристінного тиску на поверхні напівсферичної лунки дорівнює $V_{cg4-3} \approx 0,13U_\infty$ для швидкості обтікання $0,1$ м/с та $V_{cg4-3} \approx 0,27U_\infty$ для швидкості обтікання $0,35$ м/с, яка направлена від кормової частини лунки до її дна.

Робота виконана при фінансовій підтримці за грантом НАН України – 2009-2010 рр. (договори № 5-2009; № 4-2010, Держ. реєстр. № 0109U007050; № 0110U004182).

РЕЗЮМЕ

Представлены результаты экспериментальных исследований формирования и эволюции вихревого течения в полусферической лунке, расположенной на гладкой пластине. Измерены взаимные корреляции и спектры поля пульсаций скорости над обтекаемой поверхностью лунки и пластины и поля пристеночных давлений на обтекаемой поверхности. Указаны характерные особенности изменения взаимных характеристик, получены скорости переноса источников пульсаций скорости и давления. Для различных пар датчиков показана степень коррелированности пульсаций скорости и давления и определены направления переноса коррелированных сигналов.

Ключевые слова: полусферическая лунка, вихревые структуры, корреляция, спектр.

SUMMARY

The results of experimental researches of forming and evolution of vortical flow are presented into a hemispherical dimple, located on a flat surface. It is measured cross correlations and spectra of velocity fluctuation field over streamlined surface of the dimple and the plate and wall-pressure fluctuation field on streamlined surface. Typical changes of cross characteristics are shown and convective velocities of sources of velocity and pressure fluctuations are defined. It is shown correlation extent of velocity and pressure fluctuations for different pairs of sensors and direction of correlation signals are found.

Keywords: semispherical cavity, vortical structures, correlation, spectrum.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Управление обтеканием тел с вихревыми ячейками в приложении к летательным аппаратам интегральной компоновки // Под ред. А. В. Ермишина, С. А. Исаева. – М.: СПб., 2001. – 360 с.
2. Смольяков А. В. Шум турбулентных потоков / А. В. Смольяков. – С.-Пб.: ЦНИИ им. акад. А.И. Крылова, 2005. – 312 с.
3. Blake W. K. Mechanics of flow-induced sound and vibration: in 2 vols / W. K. Blake . – New York: Academic Press, 1986. – 974 p.
4. Теплогидравлическая эффективность перспективных способов интенсификации теплоотдачи в каналах теплообменного оборудования / Ю. Ф. Гортышов, И. А. Попов, В. В. Олимпиев и др. – Казань: Центр инновационных технологий, 2009. – 531 с.
5. Кикнадзе Г.И. Явление самоорганизации смерчеобразных струй в потоках сплошной среды и технологий на его основе / Г. И. Кикнадзе // Труды XVI Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А. И. Леонтьева. Санкт-Петербург. В 2 т. – Т. 2. – М.: Изд-ский дом МЭИ, 2007. – С. 341–345.
6. Исаев С. А. Численное моделирование смерчевого теплообмена при обтекании поверхностей с лунками (состояние и перспективы) / С. А. Исаев , А. И. Леонтьев , Н. В. Корнев // VI Минский Межд. Форум по Теплообмену, ММФ 2008. – Минск, Беларусь, 2008. – С. 1–9.
7. Халатов А.А. Теплообмен и гидродинамика около поверхностных углублений (лунки) / А. А. Халатов. – К.: ИТТФ НАН Украины, 2005. – 76 с.
8. Воскобойник В.А. Статистичні характеристики вихрових систем у напівциліндричному заглибленні на обтічній поверхні / В. А. Воскобойник, А. В. Воскобойник // Гідроакустичний журнал. – 2006. – № 3. – С. 57-65.
9. Халатов А.А. Режимы течения в единичном углублении, имеющем форму сферического сегмента) / А. А. Халатов , Г. В. Коваленко , В. И. Терехов // VI Минский Межд. Форум по Теплообмену, ММФ 2008. – Минск, Беларусь, 2008. – С. 10-19.
10. Источники псевдозвуковых пульсаций давления при обтекании сферической лунки / Г. А. Воропаев, А. В. Воскобойник, В. А. Воскобойник // Акустичний вісник.– 2008.– Т. 11, № 3.– С. 27–49.
11. Metzger M. M. A comparative study of near-wall turbulence in high and low Reynolds number boundary layers / M. M. Metzger, J. C. Klewicki // Phys. Fluids. – 2001. – V. 13, No 3. – P. 692-701.
12. Воскобойник А. В. Поле пульсаций пристеночного давления внутри и вблизи овальной лунки при малой скорости обтекания / А. В. Воскобойник // Вісн. Донецьк. нац. ун-ту. Сер. А: Природничі науки. – 2010. – №. 1. – С. 42-51.

Надійшла до редакції 27.05.2010 р.

УДК 539.3

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОУПРУГИХ УСИЛИЙ И МОМЕНТОВ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ТЕПЛОМ НАГРЕВЕ ОРТОТРОПНОЙ ОБОЛОЧКИ

Н. В. Дергачева

Получены решения задачи о локальном тепловом нагреве ортотропной оболочки для усилий и моментов. Выполнены исследования зависимостей усилий и моментов от термомеханических и геометрических параметров ортотропных оболочек. Рассмотрен случай оболочек отрицательной кривизны. Для определения локального термоупругого состояния использовалось фундаментальное решение уравнения термоупругого равновесия пластин и оболочек и формула свертки. Численное интегрирование полученных аналитических решений проводилось методом Файлона.

Ключевые слова: ортотропная оболочка, термоупругое состояние, локальный нагрев, фундаментальные решения.

Введение. Большое количество элементов современных конструкций и инженерных сооружений работают в условиях неравномерного, в том числе локального нагрева. Исследование термоупругих параметров оболочки при локальных нагревах в зависимости от моделей ортотропного материала, кривизны является актуальной задачей для повышения эффективности разрабатываемых сооружений, а также реализации новых конструкторских решений и технологических процессов.

На сегодняшний день существуют разные модели локальных и сосредоточенных температурных влияний на тонкостенные элементы конструкций. Для сосредоточенных температурных воздействий это – сосредоточенный нагрев и сосредоточенный источник тепла. Модель с сосредоточенным источником тепла учитывает условия теплообмена с окружающей средой и характер распределения температуры по тонкостенному элементу. Модель с сосредоточенным нагревом не учитывает условие теплообмена с окружающей средой и использует для исследования термоупругого состояния оболочки лишь уравнения термоупругого равновесия. В данной работе рассматривается задача в рамках второй модели. Понятие так называемого "сосредоточенного нагрева" используется для построения частного решения ключевых уравнений термоупругости, т.е фундаментального решения, посредством которого путем интегрирования записывается решение задач термоупругости при заданном в некоторой области распределении температуры. Впервые постановка задачи о сосредоточенных температурных воздействиях на оболочки рассмотрена в монографии [1] и в статье [2]. В статьях [3, 4, 5] построены фундаментальные решения задачи теплопроводности для пластин и пологих оболочек.

В данной работе исследуется решение для усилий и моментов задачи о локальном тепловом нагреве ортотропной оболочки произвольной гауссовой кривизны [6, 7]. Ранее исследования проводились для усилий T_{12} и моментов M_{12} , но только для одного ортотропного материала, не представлены ранее исследования для усилия при "изгибном" тепловом нагреве и для моментов при "плоском" тепловом нагреве. В работе исследованы зависимости усилий и моментов от термомеханических и геометрических параметров ортотропных оболочек при локальном нагреве. Рассмотрен случай оболочек отрицательной кривизны.

Постановка и решение задачи. Проведем исследование поведения усилий при "плоском" и "изгибном" локальном нагреве.

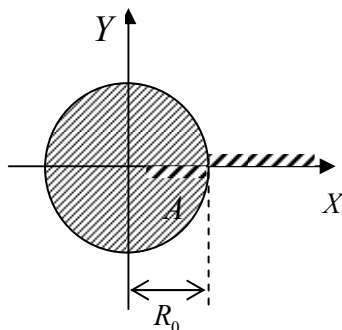


Рис. 1

Рассмотрим тонкую пологую оболочку толщиной $2h$ произвольной гауссовой кривизны, площадка S которой нагревается заданной распределенной температурой (рис. 1). Определение термоупругого состояния заданной оболочки сводится к решению системы уравнений [6]:

$$\sum_{j=1}^3 L_{ij} u_j = -X_i \quad (i = \overline{1,3}), \tag{1}$$

в которой $u_1 = u$, $u_2 = v$, $u_3 = w$ – компоненты вектора перемещений; L_{ij} – известные дифференциальные операторы. X_i – функции которые определяют нагрев оболочки.

Закон распределения интегральных характеристик температуры возьмем в соответствии с законом распределения в сварочной дуге или пламени, близкой к закону нормального распределения Гаусса [6]:

$$t_{1,2}(r) = \begin{cases} \mu_{0,1} e^{-k_0 r^2}, & |r| \leq R_0, \\ 0, & |r| > R_0, \end{cases} \tag{2}$$

где μ_0, μ_1 – значение интегральных характеристик температуры t_1, t_2 в центре пятна нагрева; r_0 – радиус пятна нагрева; k_0 – коэффициент, характеризующий форму кривой нормального распределения температуры.

Решение рассмотренной задачи о распределенном нагреве оболочки по области $S \in S^\infty$ получим, используя формулу сверток для соответствующего фундаментального решения [9] с функцией, которая описывает локальное распределение температуры (2). Формула сверток имеет вид [8]:

$$F(x, y) = \iint_S E(x-x_0, y-y_0) t_{1,2}(x_0, y_0) dx_0 dy_0,$$

где F – компоненты термоупругого состояния, E – компоненты фундаментального решения, которые отвечают элементам фундаментальных матриц усилий и моментов, $t_{1,2}$ – закон распределения интегральных характеристик температуры по области S ; $x, y \in S^\infty, x_0, y_0 \in S$.

В задаче было рассмотрено две области: область вне пятна нагрева и сама область нагрева (рис.1). В работе [6] получены решения для каждой из них. Для случая области вне пятна нагрева, но в непосредственной близости к нему выражение для усилий при «изгибном» локальном нагреве ($\mu_0 = 0$):

$$T_{1,2}^{(1)}(r, \varphi) = -\frac{Eh^2 \Delta_\alpha^+ \mu_1}{\pi^2 \left(\frac{\kappa}{\kappa^3}\right) R_2} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} e_n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t'_{mn}(\lambda)}{m!} \int_0^{2\pi} \int_0^{R_0} G_{n,n+m}(k\rho\sqrt{i}) \cos(2n\varphi_1) e^{-k_0 r_0^2} dr_0 d\varphi_0, \quad (3)$$

где

$$\rho^2 = r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos(\varphi - \varphi_0), \quad k^4 = 12(1-\nu^2)/(R_2^2 h^2), \quad \Delta_\alpha^+ = \alpha_t^{(2)} + \alpha_t^{(1)} \kappa^2, \\ \varphi_1 = \operatorname{arctg} \frac{r_0 \sin \varphi_0 + r \sin \varphi}{r_0 \cos \varphi_0 + r \cos \varphi};$$

r, φ – полярные координаты; (r_0, φ_0) – координаты точки приложения сосредоточенного теплового нагрева, $\alpha_t^{(1)}, \alpha_t^{(2)}$ – температурные коэффициенты линейного расширения.

$$t'_{mn}(\lambda) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sum_{l=0}^m (-1)^l \binom{m}{l} \left(\frac{1 + \lambda \kappa^2 (1 + 2\gamma \cos 2\theta)}{2 \sqrt{\Delta_8}} \right)^{l+n+2} \times \\ \times \left(\sqrt{\frac{1-\mu}{a^2}} \right)^{l+n+2} \cos(2n\theta) \frac{[(1+\nu) + (1-\nu)\gamma_1 \cos 2\theta]}{t^2(\theta)} \left(\frac{\sin^2 \theta}{\cos^2 \theta} \right) d\theta,$$

где $\Delta_8 = \left[1 + 4\tilde{\mu}(1-\nu) \cos^2 2\theta \right] \left[1 - 4\tilde{\mu}(1+\nu) \cos^2 2\theta \right]$ $\nu = \sqrt{\nu_1 \nu_2}$, ν_1, ν_2 – коэффициенты Пуассона вдоль главных осей ортотропии; $\lambda = R_2 / R_1$, R_1, R_2 – кривизна и радиусы кривизны оболочки вдоль главных осей ортотропии, $\mu = (E - 2G_{12}(1+\nu))/E$, $\gamma_1 = (\alpha_t^{(1)} \kappa^2 - \alpha_t^{(2)}) / \Delta_\alpha^+$.

Аналогичным образом были найдены моменты. Для случая "плоского" локального нагрева моменты будут иметь вид:

$$M_{1,2}^{(0)}(r, \varphi) = -\frac{Eh^3 \Delta_\alpha^+ \mu_0}{2\pi^2 R_2 \left(\frac{\kappa}{\kappa^2}\right)} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} e_n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m_{mn}}{m!} \int_0^{2\pi} \int_0^{R_0} G_{n,m+n}(k\rho\sqrt{i}) e^{-k_0 r_0^2} \cos(2n\varphi_1) dr_0 d\varphi_0 \quad (4)$$

Внутри нагреваемой области оболочки рассматривается зависимость функций усилий от радиуса пятна нагрева α , который принимает значения в промежутке $(0, R_0)$. Усилие при «плоском» локальном нагреве ($\mu_1 = 0$):

$$T_{1,2}^{(0)}(\alpha) = -\frac{Eh^3 k \Delta_\alpha^+ \mu_0 (1-\mu)}{2\pi^2 \left(\frac{\kappa}{\kappa^3}\right) a} \operatorname{Im} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t_{m0}}{m!} \int_0^\alpha G_{0,m}(\zeta_0 \sqrt{i}) e^{-\frac{k_0}{k^2} \zeta_0^2} d\zeta_0. \quad (5)$$

Здесь

$$t_{mn}(\lambda) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sum_{l=0}^m (-1)^l \binom{m}{l} \left(\frac{1 + \lambda x^2}{2} \frac{(1 + 2\gamma \cos 2\theta)}{\sqrt{\Delta_1 \Delta_2}} \right)^{l+n+1} \left(\sqrt{\frac{1-\mu}{a^2}} \right)^{l+n+1} (1 - \cos 2\theta) \times \\ \times \cos(2n\theta) (1 + \gamma_1 \cos 2\theta) \Delta_2^{-1} d\theta, \quad \Delta_2 = \left[1 - 4\tilde{\mu}(1 + \nu) \cos^2 2\theta \right]. \quad (6)$$

При «изгибном» локальном нагреве ($\mu_0 = 0$):

$$T_{1,2}^{(1)}(\alpha) = -\frac{Eh^2 \Delta_\alpha^+ \mu_1}{\pi^2 R_2 k \left(\frac{\kappa}{\kappa^3} \right)} \operatorname{Re} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t'_{m0}(\lambda)}{m!} \int_0^\alpha G_{0,m}(\zeta_0 \sqrt{i}) e^{-\frac{k_0}{k^2} \zeta_0^2} d\zeta_0 \quad (7)$$

Аналогичным образом были получены моменты. Для случая «плоского» локального нагрева ($\mu_1 = 0$):

$$M_{1,2}^{(0)}(\alpha) = -\frac{Eh^3 \Delta_\alpha^+ \mu_0}{2\pi^2 R_2 k \left(\frac{\kappa}{\kappa^2} \right)} \operatorname{Re} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m_{m0}}{m!} \int_0^\alpha G_{0,m}(\zeta_0 \sqrt{i}) e^{-\frac{k_0}{k^2} \zeta_0^2} d\zeta_0 \quad (8)$$

Для случая «изгибного» локального нагрева ($\mu_0 = 0$):

$$M_{1,2}^{(1)}(\alpha) = -\frac{Eh^4 \mu_1 k \Delta_\alpha^+}{24(1-\nu)\pi^2 a \left(\frac{\kappa}{\kappa^3} \right)} \operatorname{Im} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m'_{m0}(\lambda)}{m!} \int_0^\alpha G_{0,m}(\zeta_0 \sqrt{i}) e^{-\frac{k_0}{k^2} \zeta_0^2} d\zeta_0 \quad (9)$$

Результаты численных исследований. Все численные исследования были проведены для следующих материалов: 1) изотропный стеклопластик (материал М1); 2) стеклопластик косоугольной намотки (М2) [10]; 3) стеклопластик косоугольной намотки, который обладает сильной анизотропией (М3) [6]; 4) композит КАСТ-В (М4) [11]. Значения термомеханических параметров приведены в таблице.

Таблица

Параметр	Материалы			
	М1	М2	М3	М4
E_1 / e_0	10,000	10,000	36,730	1,390
E_2 / e_0	10,000	35,710	9,810	2,000
G_{12} / e_0	2,820	3,700	3,920	0,720
ν_1	0,077	0,275	0,280	0,174
α_1 / α_0	0,800	3,900	0,700	4,000
α_2 / α_0	0,800	0,800	3,800	3,000
μ	0	0,404	0,520	-0,042

где $e_0 = 10^2$ МПа, $\alpha_0 = 10^{-5}$ К⁻¹.

Графики приведены для обезразмеренных функций усилий и моментов

$$F^0(\lambda, \nu, E, G_{12}) = k_F^0 \cdot F^{(0)}(\lambda, \nu, E, G_{12}), \quad \text{где } k_m^0 = \frac{\pi^2 R_2}{\sqrt{3} a_0 h^2 \mu_0}, \quad k_M^0 = \frac{\pi^2 R_2}{a_0 h^3 \mu_0}, \quad (10)$$

$a_0 = 10^2$ МПа/1^o К, $F^{(0)}$ – функция усилия, или момента, k_T^0 , k_M^0 – коэффициенты при усилиях и моментах.

На рис. 2-5 для внутренней области А приведены значения усилий и моментов при нагреве, когда ($\mu_0 = 1^o$ К, $\mu_1 = 0$) и при нагреве, когда ($\mu_0 = 0$, $\mu_1 = 1^o$ К).

Цифрой 1 обозначены кривые для изотропного материала, цифрой 2 – для модели материала с «приведенной» ортотропией ($\mu = 0$, $E_1 \neq E_2$, $G_{12} = \sqrt{E_1 E_2} / (2(1 + \sqrt{\nu_1 \nu_2}))$), цифрой 3 – для ортотропного материала М2, цифрой 4 – для ортотропного материала М3, цифрой 5 – для ортотропного материала

М4, кривизна $\lambda = 0,5$, радиус области нагрева $r_0 = 10h$.

В случае «плоского» локального нагрева ($\mu_1 = 0$) имеем

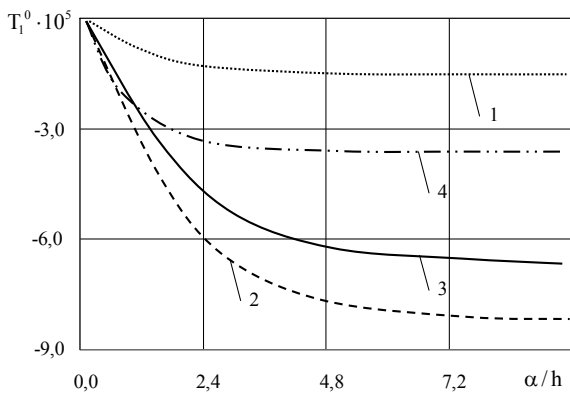


Рис. 2

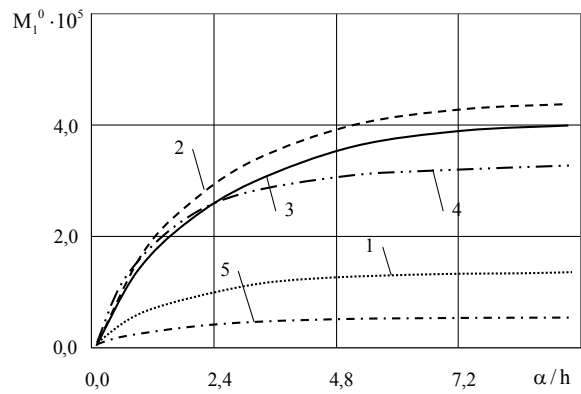


Рис. 3

Как видно из графиков, ортотропия материала существенным образом влияет на значение термоупругих усилий в области нагрева. Для усилия расхождение для кривых с пометкой 2 – "приведенная" ортотропия и 3 – ортотропия достигает 23%. Для моментов такое расхождение составляет около 10%.

При «изгибном» локальном нагреве (при $\mu_0 = 0$):

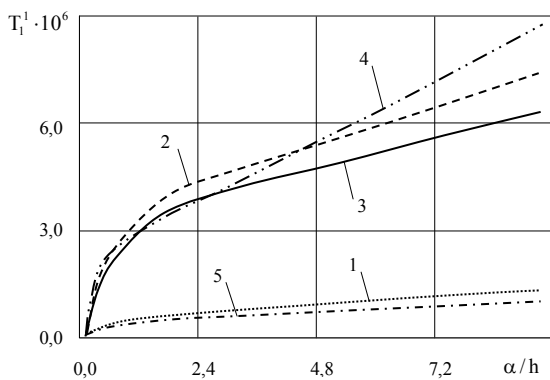


Рис. 4

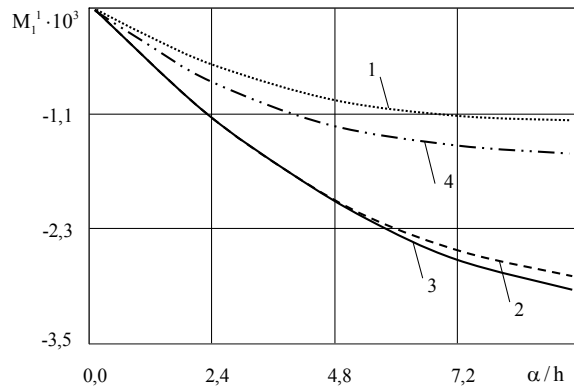


Рис. 5

Как видно из графиков (рис. 4) для усилий уже на расстоянии от $\alpha/h = 0,7$ нельзя пользоваться моделью "приведенной" ортотропии, так как кривая с пометкой 2 – "приведенная" ортотропия и кривая с пометкой 3 – ортотропный материал, расположенные на значительном расстоянии друг от друга, расхождение между значениями усилия достигает от 5% до 14%. Для моментов (Рис.5) можно значительно упрощать расчеты, принимая коэффициент ортотропии равным нулю. Так как кривые в случае "приведенной" ортотропии и ортотропии очень близко расположены. Максимальное отклонение значений моментов составляет около 4%.

На следующих рисунках приведены числовые исследования поведения усилий в зависимости от кривизны оболочки из ортотропного материала (М3). Построенные зависимости усилия от кривизны оболочки λ для точек максимального и минимального воздействия кривизны на усилие. Здесь $r = \alpha$.

При локальном нагреве в случае $\mu_1 = 0$ (рис.6) и при $\mu_0 = 0$ (рис.7):

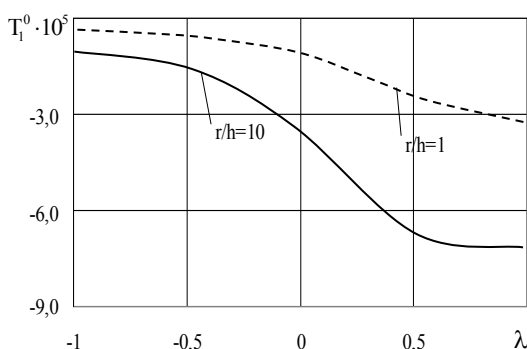


Рис. 6

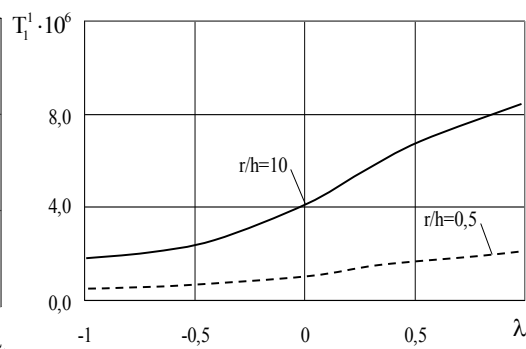


Рис. 7

Обобщая результаты, которые приведены на (рис. 6, 7) можно сделать вывод о том, что влияние геометрии оболочки на усилие значительно и расхождение в значениях при изменении коэффициента кривизны оболочки с шагом 0,5 составляет от 10 до 40%.

Для области вне зоны нагрева было проведено численное исследование для разных ортотропных материалов в зависимости от координаты $r^* = r - R_0$ полярной системы координат с началом на расстоянии R_0 от центра, то есть вдоль оси Ox ($\varphi=0$) (рис. 8, 9).

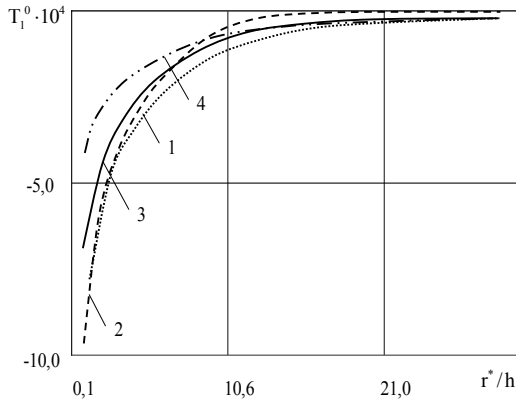


Рис. 8

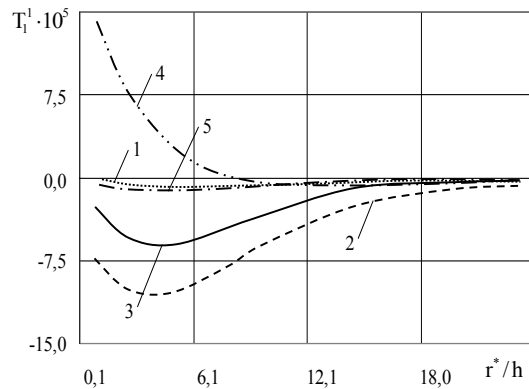


Рис. 9

На рис. 8 видим, что вне зоны нагрева, как и в случае зоны нагрева (рис. 2), ортотропия материала оболочки существенным образом влияет на значение усилий в случае "плоского" локального нагрева. Отклонения кривых в области до $7h$ не превышает 5%. Применения модели "приведенной" ортотропии для расчетов усилий вне области нагрева возможно лишь на расстоянии до $7h$ от зоны локального нагрева.

В случае "изгибного" нагрева (рис. 9), влияние ортотропии на усилие существенно. Максимальное отклонение кривых усилий составляет около 45% вблизи области нагрева. Применения модели "приведенной" ортотропии для расчета усилий вне области нагрева может привести к ошибочным результатам. На графике прослеживается интересный эффект для кривой 4. Если сравнить термомеханические параметры МЗ с остальными, можно увидеть, что в отличие от остальных материалов у материала МЗ значения коэффициентов линейного расширения вдоль оси Ox (вдоль исследуемой оси) является малой по сравнению с остальными материалами и меньше значения вдоль оси Oy . Если проанализировать аналитические формулы полученных решений (1), можно увидеть входящую в качестве множителя разность $(\alpha_t^{(1)} \kappa^2 - \alpha_t^{(2)})$, а также комбинации этой разности с упругими параметрами, именно она дает подобный качественный эффект, поскольку меняет знак в зависимости от значений коэффициентов линейного расширения. Для материала с отрицательным коэффициентом μ (М4) из графика видно, что кривая расположена близко к изотропной кривой.

Выводы. В работе получено решение для усилий и моментов задачи о локальном нагреве ортотропной оболочки. Решение для усилий и моментов получено посредством использования формулы свертки для соответствующего фундаментального решения с функцией, которая описывает локальное распределение температуры [6,7]. Численно исследованы зависимости полученных решений от термомеханических и геометрических параметров ортотропных оболочек при локальном нагреве. В частности сделан вывод о том, что использование "приведенного" модуля сдвига возможно: в зоне нагрева – для момента в случае "изгибного" нагрева, в зоне около области нагрева - для усилия при "плоском" нагреве на расстоянии до $7h$ от области нагрева. Также в работе проанализирован процент отклонения кривых в случае расчета усилий и моментов по формуле, учитывающей все термомеханические параметры и по упрощенной формуле. Рассмотрен случай оболочек отрицательной кривизны.

РЕЗЮМЕ

Отримано розв'язок задачі про локальний тепловий нагрів ортотропної оболонки для зусиль і моментів. Виконано дослідження залежностей зусиль і моментів від термомеханічних і геометричних параметрів ортотропних оболонок. Розглянуто випадок оболонок негативної кривини. Для визначення локального термопружного стану використовувалася фундаментальний розв'язок рівняння термопружної рівноваги пластин і оболонок і формула згортки. Чисельне інтегрування отриманих аналітичних розв'язків проводилося методом Файлона.

Ключові слова: ортотропна оболонка, термопружний стан, локальний нагрів, фундаментальний розв'язок.

SUMMARY

Decisions of a problem on local thermal heating orthotropic shells for forces and the moments are received. Researches of dependences of forces and the moments from thermomechanical and geometrical parameters orthotropic shells are executed. The case of shells of negative curvature is considered. For definition local thermoelastic conditions the fundamental decision of the equation thermoelastic balance of plates and environments and the formula of convolution was used. Numerical integration of the received analytical decisions was carried out by method Filon's.

Keywords: orthotropic shell, thermoelastic conditions, the local heating, fundamental decisions.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Подстригач Я. С. Температурні напруження в оболонках / Я. С. Подстригач, С. Я. Ярема – К.: Изд-во АН УРСР, 1961. – 212 с.
2. Ярема С. Я. Фундаментальное решение температурной задачи для цилиндрической оболочки/ С. Я. Ярема // Тепловые напряжения в элементах турбомашин. –1961. – Вып.1. – С. 70-76.
3. Ярема С. Я. Фундаментальний розв'язок рівнянь теплопровідності для пластин і пологих оболонок з внутрішніми джерелами тепла/ С. Я. Ярема // Доп. АН УРСР, Сер. А. – 1967. – № 3. – С. 245-249.
4. Ярема С. Я. Фундаментальное решение приближённых уравнений стационарной задачи теплопроводности пологих оболочек / С. Я. Ярема // Вопр. механики реальн. твёрдого тела. – К.: Наук. думка, 1964. – Вып.3. – С. 88-94.
5. Ярема С. Я. Решение температурной задачи для пологой сферической оболочки в случае сосредоточенного нагрева/ С. Я. Ярема // Научн. зап. Ин.-та машиновед. и автом. Сер. машиновед. – 1964. – Вып.9. – С. 80-89.
6. Дергачева Н. В. Исследование термоупругого состояния ортотропных оболочек при локальном тепловом нагреве / Н. В. Дергачева // Теоретическая и прикладная механика. – 2008. – Вып. 44. – С. 180-186.
7. Шевченко В. П. Влияние геометрических параметров ортотропной оболочки на термоупругое состояние при локальном тепловом нагреве / В. П. Шевченко, Н. В. Дергачева // Пробл. обчислюв. механіки і міцності конструкцій. – 2009. – Вып.13. – С. 271-279.
8. Шевченко В. П. Методы фундаментальных решений в теории ортотропных оболочек/ В. П. Шевченко // Концентрация напряжений. – К.: А.С.К., 1998. – С. 159–196. – (Механика композитов: В 12 т. Т. 7).
9. Шевченко В. П. Фундаментальные решения уравнений термоупругого равновесия пологих ортотропных оболочек / В. П. Шевченко, Н. В. Дергачева // Механика твердого тела. – 2005. – Вып. 35. – С. 160–166.
10. Справочник по композиционным материалам: В 2 кн. Кн. 1 / Под ред. Дж. Любина. – М.: Машиностроение, 1988. – 448 с.
11. Амбарцумян С. А. Некоторые нестационарные температурные задачи для ортотропной пластинки / С. А. Амбарцумян, С. М. Дургарьян// Изв. АН СССР. Механика и машиностроение.– 1962. – № 3. – С. 120–127.

Поступила в редакцію 06.04.2010 г.

УДК 539.3

**НЕЛИНЕЙНЫЕ АНГАРМОНИЧЕСКИЕ ВОЗМУЩЕНИЯ ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ
ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ПРОДОЛЬНО-СДВИГОВЫХ НОРМАЛЬНЫХ ВОЛН
В УПРУГОМ ЦИЛИНДРЕ**

А. В. Елагин, В. И. Сторожев

В статье представлены вторые гармоники осесимметричных нормальных волн продольно-сдвигового типа, распространяющиеся вдоль осевого направления в изотропном цилиндре кругового сечения с закрепленной боковой поверхностью. С использованием аналитических представлений нелинейных вторых гармоник проанализированы амплитудно-частотные зависимости для нелинейных ангармонических возмущений волн в волноводе из дюралюминия. Представлены результаты анализа форм волновых движений во вторых гармониках с изменяемой относительной длиной.

Ключевые слова: цилиндрический волновод, физическая и геометрическая нелинейность, продольно-сдвиговые волны, нелинейные вторые гармоники, амплитудно-частотные эффекты.

Введение. Исследование нелинейных эффектов при распространении нормальных упругих волн в деформируемых волноводах различной геометрической формы является одной из важных современных задач механики деформируемого твердого тела.

Самый малоизученный класс задач о нелинейных ангармонических эффектах при распространении упругих волн составляют задачи о нелинейных свойствах нормальных волн в пространственных упругих волноводах различного геометрического строения. Прогресс в исследованиях по этому направлению связан с появившимися возможностями использования средств компьютерной алгебры для проведения громоздких аналитических преобразований в процессе построения численно-аналитических решений соответствующих граничных задач. Для упругих анизотропных волноводов в виде монокристаллического слоя кубической системы анализ различных задач описания нелинейных вторых гармоник упругих волн проведен в работах [1-8].

В весьма ограниченном числе работ в различных вариантах анализировалась проблема распространения нелинейных упругих волн в волноводах цилиндрической формы. К этим работам можно отнести публикацию [9], в которой анализ данной проблемы проводится в стержневом приближении - на основе математической модели нелинейного динамического деформирования стержня. В пространственной постановке отдельные вопросы о нелинейных эффектах при распространении волн вдоль изотропно упругого цилиндра рассматривались в работах [10, 11]. Анализ в этих работах подвергался вопрос о нелинейном взаимодействии мод крутильных и продольно-сдвиговых осесимметричных нормальных волн при совпадении их фазовых скоростей (т.е. в точке пересечения характеризующих моды этих волн дисперсионных кривых). Выражений для функций напряженности вторых гармоник нормальных крутильных и продольно-сдвиговых волн, позволяющих исследовать амплитудно-частотные и амплитудно-фазовые характеристики нелинейных эффектов, кинематические и энергетические свойства вторых гармоник нормальных волн, в указанных выше работах получено не было.

Таким образом, несмотря на имеющие достаточно большую историю весьма широкие теоретические исследования по проблемам нелинейных упругих волн, многие задачи этого типа остаются практически неисследованными ввиду крайней сложности построения соответствующих теоретических решений. Именно к этой группе и относятся актуальные задачи о нелинейных ангармонических эффектах при распространении нормальных упругих волн в цилиндрических волноводах трехмерной геометрии.

Постановка и концепция анализа рассматриваемой задачи. Рассматривается задача исследования нелинейных вторых гармоник монохроматических нормальных волн, распространяющихся вдоль осевого направления в изотропном цилиндре кругового сечения с радиусом R , который в нормированных цилиндрических координатах $Or\theta z$ и прямоугольных декартовых координатах $Ox_1x_2x_3$ занимает область

$$V = \{0 \leq r \leq R, 0 \leq \theta \leq 2\pi, -\infty < z < \infty\} = \{(x_1^2 + x_2^2)^{1/2} \leq R, -\infty < x_3 < \infty\} \quad (1)$$

Используемая в работе модель нелинейного динамического деформирования изотропных упругих сред с учетом эффектов геометрической и физической нелинейности основывается на тензорном представлении функции упругого потенциала U с квадратичными и кубическими членами по деформациям ε_{ij} , а коэффициенты этого представления выражаются через компоненты тензоров упругих постоянных второго и третьего порядка.

В качестве U используется упругий потенциал Мурнагана [12] в форме

$$U = \frac{\lambda + 2\mu}{2} E_1^2 - 2\mu E_2 + \frac{l + 2m}{3} E_1^3 - 2m E_1 E_2 + n E_3. \quad (2)$$

Здесь λ, μ – параметры Ламе линейной модели деформирования материала цилиндра; l, m, n – упругие постоянные третьего порядка соответствующей модели нелинейного деформирования; E_i ($i = 1, 2, 3$) – главные инварианты тензора деформаций Грина, которые связаны формулами

$$E_1 = I_1, \quad E_2 = \frac{1}{2}(I_1^2 - I_2), \quad E_3 = \frac{1}{6}(I_1^3 - 3I_1 I_2 + 2I_3) \quad (3)$$

с алгебраическими инвариантами

$$I_1 = E_{rr} + E_{\theta\theta} + E_{zz}, \quad I_2 = E_{\theta\theta} E_{zz} - E_{\theta z} E_{z\theta} + E_{zz} E_{rr} - E_{rz} E_{zr} + E_{rr} E_{\theta\theta} - E_{r\theta} E_{\theta r}, \\ I_3 = E_{rr} E_{\theta\theta} E_{zz} - E_{rz} E_{\theta\theta} E_{zr}. \quad (4)$$

Нелинейные представления компонент тензора упругих деформаций в соотношениях (2) – (4) задаются в форме

$$\varepsilon_{rk} = \frac{1}{2} (u_{r,k} + u_{k,r} + u_{l,r} u_{l,k}) \quad (5)$$

где $u_{r,k} = \partial u_r / \partial x_k$, u_r – компоненты вектора волновых упругих перемещений.

Для изотропного материала рассматриваемого цилиндрического волновода представления нормированных отнесенных к μ компонент второго тензора напряжений Пиола-Кирхгофа на основных площадках цилиндрической системы координат имеют вид

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(l)} + \sigma_{ij}^{(n)}, \\ \sigma_{ij}^{(l)} = \frac{2\sigma}{1 - 2\sigma} I \delta_{ij} + 2\varepsilon_{ij}, \\ \sigma_{ij}^{(n)} = \left[\frac{l}{\mu} I_1^2 - \left(2\frac{m}{\mu} - \frac{n}{\mu} \right) I_2 \right] \delta_{ij} + \left(2\frac{m}{\mu} - \frac{n}{\mu} \right) I_1 \varepsilon_{ij} + \frac{n}{\mu} \varepsilon_{ik} \varepsilon_{kj}, \\ (i, j = r, \theta, z). \quad (6)$$

Представления для компонент тензора напряжений Лагранжа (первого тензора напряжений Пиола-Кирхгофа) на основных площадках цилиндрической системы координат следуют из соотношения

$$\begin{bmatrix} S_{rr} & S_{r\theta} & S_{rz} \\ S_{\theta r} & S_{\theta\theta} & S_{\theta z} \\ S_{zr} & S_{z\theta} & S_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} & \frac{\partial u_r}{\partial z} \\ \frac{\partial u_\theta}{\partial r} & 1 + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} & \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} & 1 + \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{rr} & \sigma_{r\theta} & \sigma_{rz} \\ \sigma_{\theta r} & \sigma_{\theta\theta} & \sigma_{\theta z} \\ \sigma_{zr} & \sigma_{z\theta} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (7)$$

и, соответственно, могут быть представлены в форме

$$S_{\alpha\beta} = S_{\alpha\beta}^{(l)} + S_{\alpha\beta}^{(n)} \quad (\alpha, \beta = r, \theta, z). \quad (8)$$

Рассматривается случай жесткого закрепления боковой поверхности волновода, описываемый краевыми условиями

$$(u_r)_{r=R} = (u_\theta)_{r=R} = (u_z)_{r=R} = 0. \quad (9)$$

Методика численно-аналитического решения. Используемой в работе методикой определения нелинейных эффектов в упругих волнах малой интенсивности является методика определения малых нелинейных “добавок” (ангармонических возмущений, вторых гармоник) в представлениях функций волновых упругих перемещений. Указанные добавки пропорциональны малому параметру δ в виде акустического числа Маха (отношения амплитуды рассматриваемой упругой волны к ее длине). В этом случае компоненты вектора упругих волновых перемещений u_j представляются в виде суммы линейных составляющих $u_j^{(l)}$ и нелинейных ангармонических возмущений $u_j^{(n)}$:

$$u_j = u_j^{(l)} + u_j^{(n)}, \quad |u_j^{(n)}| \sim \delta |u_j^{(l)}|. \quad (10)$$

В задаче о вторых гармониках осесимметричных волн продольно-сдвигового типа в рассматриваемом цилиндре, искомое поле волновых перемещений в линейной волне имеет структуру

$u_r^{(l)} = u_r^{(0,l)}(r)e^{-i(\omega t - kz)}$, $u_z^{(l)} = u_z^{(0,l)}(r)e^{-i(\omega t - kz)}$, $u_\theta^{(l)}(r, z, t) \equiv 0$. Соответственно, в первом приближении задача сводится к однородной спектральной задаче относительно функций волновых упругих перемещений $u_r^{(l)}, u_z^{(l)}$, имеющей вид

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_r^{(l)}}{\partial t^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_{rr}^{(l)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})) + \frac{\partial S_{rz}^{(l)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})}{\partial z} - \frac{S_{\theta\theta}^{(l)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})}{r} &= 0, \\ \rho \frac{\partial^2 u_z^{(l)}}{\partial t^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_{zr}^{(l)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})) + \frac{\partial S_{zz}^{(l)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})}{\partial z} &= 0, \\ (u_r^{(l)})_{r=R} &= 0, (u_z^{(l)})_{r=R} = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Неоднородная граничная задача для определения комплексных функций волновых упругих перемещений $u_r^{(n)}, u_z^{(n)}$ в нелинейных вторых включает неоднородную систему дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_r^{(n)}}{\partial t^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_{rr}^{(l)}(u_r^{(n)}, u_z^{(n)})) + \frac{\partial S_{rz}^{(l)}(u_r^{(n)}, u_z^{(n)})}{\partial z} - \frac{S_{\theta\theta}^{(l)}(u_r^{(n)}, u_z^{(n)})}{r} &= \\ = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_{rr}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})) - \frac{\partial S_{rz}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})}{\partial z} + \frac{S_{\theta\theta}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})}{r}, & (12) \\ \rho \frac{\partial^2 u_z^{(n)}}{\partial t^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_{zr}^{(l)}(u_r^{(n)}, u_z^{(n)})) + \frac{\partial S_{zz}^{(l)}(u_r^{(n)}, u_z^{(n)})}{\partial z} &= \\ = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_{zr}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})) - \frac{\partial S_{zz}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)})}{\partial z}, \end{aligned}$$

с граничными условиями

$$(u_r^{(n)})_{r=R} = 0, (u_z^{(n)})_{r=R} = 0. \quad (13)$$

Решение волновых уравнений линейной задачи относительно амплитудных функций $u_r^{(0,l)}, u_z^{(0,l)}$, которое описывает первые гармоники нормальных осесимметричных продольно – сдвиговых волн в цилиндре, может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} u_r^{(0,l)} &= A(-\tilde{\alpha} J_1(\tilde{\alpha} r) + \frac{\tilde{\alpha} J_1(\tilde{\alpha} R)}{ik J_1(\tilde{\beta} R)} ik J_1(\tilde{\beta} r)), \\ u_z^{(0,l)} &= A(ik J_0(\tilde{\alpha} r) - \frac{\tilde{\alpha} J_1(\tilde{\alpha} R)}{ik J_1(\tilde{\beta} R)} \tilde{\beta} J_0(\tilde{\beta} r)). \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь A – произвольный амплитудный множитель; $J_n(\alpha r)$ – цилиндрическая функция Бесселя индекса n . Дисперсионное уравнение для волн этого типа, которое определяет полный спектр линейных осесимметричных нормальных продольно-сдвиговых волн в цилиндре имеет вид

$$\begin{aligned} k^2 J_0\left(\sqrt{-k^2 + \frac{\Omega^2}{\zeta}} r\right) J_1\left(\sqrt{-k^2 + \Omega^2} r\right) + \\ + \sqrt{-k^2 + \Omega^2} \sqrt{-k^2 + \frac{\Omega^2}{\zeta}} J_0\left(\sqrt{-k^2 + \Omega^2} r\right) J_1\left(\sqrt{-k^2 + \frac{\Omega^2}{\zeta}} r\right) = 0, \end{aligned}$$

где $\Omega = \omega R / v_s$ – безразмерный нормированный частотный параметр, $\tilde{k} = kR$ – безразмерное нормированное волновое число.

Решение неоднородной граничной задачи (12), (13) на основе разработанного алгоритма аналитических преобразований в среде специализированного пакета Mathematica 6.0 получено в виде:

$$\begin{aligned} u_r^{(n)} &= -2B_1 \tilde{\alpha} J_1(2\tilde{\alpha} r) + B_2 ik J_1(2\tilde{\beta} r) + F_1(r), \\ u_z^{(n)} &= B_1 ik J_0(2\tilde{\alpha} r) - 2B_2 \tilde{\beta} J_0(2\tilde{\beta} r) + F_2(r), \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$F_1(r) = \sum_{p=1}^{\infty} a_p r^p, \quad F_2(r) = \sum_{p=1}^{\infty} b_p r^p, \quad B_1 = (\chi_{12} F_2(R) - \chi_{22} F_1(R)) / (\chi_{11} \chi_{22} - \chi_{21} \chi_{12}),$$

$$B_2 = (\chi_{11} F_2(R) - \chi_{21} F_1(R)) / (\chi_{12} \chi_{21} - \chi_{11} \chi_{22}), \quad \chi_{11} = -2\tilde{\alpha} J_1(2\tilde{\alpha} r), \quad \chi_{12} = ik J_1(2\tilde{\beta} r),$$

$$\chi_{21} = ik J_0(2\tilde{\alpha} r), \quad \chi_{22} = -2\tilde{\beta} J_0(2\tilde{\beta} r).$$

Здесь a_p, b_p – коэффициенты степенных рядов, в форме которых получено частное решение системы неоднородных уравнений (12). Данные коэффициенты рассчитываются на основе рекуррентных соотношений:

$$a_1 = \alpha_1 / \Delta_{13}^{(n)}, \quad b_1 = \beta_1 / \Delta_{23}^{(n)};$$

$$a_2 = \frac{\alpha_2 - b_1 \Delta_{14}^{(n)}}{\Delta_{12}^{(n)} + 2\Delta_{13}^{(n)} + 2\Delta_{15}^{(n)}}, \quad b_2 = \frac{\beta_2 - a_1 (\Delta_{22}^{(n)} - \Delta_{24}^{(n)})}{2\Delta_{23}^{(n)} + 2\Delta_{25}^{(n)}};$$

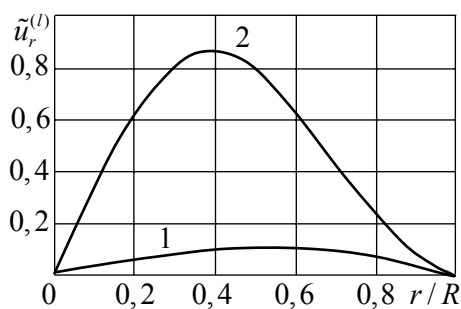
$$a_{p+2} = \frac{\alpha_{p+2} - \Delta_{11}^{(n)} a_p - \Delta_{14}^{(n)} (p+1) b_{p+1}}{\Delta_{12}^{(n)} + \Delta_{13}^{(n)} (p+2) + \Delta_{15}^{(n)} (p+2)(p+1)},$$

$$b_{p+2} = \frac{\beta_{p+2} - \Delta_{21}^{(n)} b_p - \Delta_{22}^{(n)} a_{p+1} - \Delta_{24}^{(n)} (p+1) a_{p+1}}{\Delta_{23}^{(n)} (p+2) + \Delta_{25}^{(n)} (p+2)(p+1)} \quad (p = \overline{1, \infty}).$$

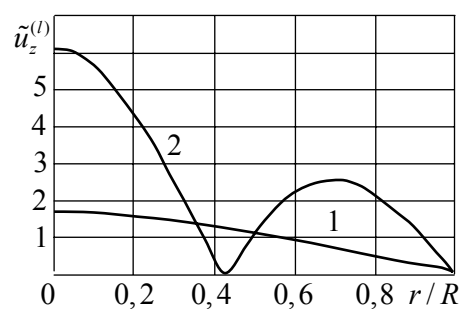
Результаты численных исследований. При численных исследованиях был проведен анализ радиальных распределений для безразмерных нормированных амплитуд волновых смещений в линейных бегущих нормальных волнах продольно-сдвигового типа, принадлежащих первой и второй моде дисперсионного спектра с относительными длинами $\lambda = 8R, \lambda = 10R, \lambda = 12R, \lambda = 14R$, а также в их нелинейных вторых гармониках. Расчеты ангармонических эффектов были проведены для волновода из дюралюминия со следующими физико-механическими параметрами: $\rho = 2.79 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$; $\sigma = 0.31$; $\mu = 2.6 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$; $\lambda = 2\sigma\mu / (1 - 2\sigma) = 4.2 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$; $l = -26.46 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$; $m = 38.22 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$; $n = 36.26 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$.

Для контроля достоверности разработанного алгоритма вычислений результаты, касающиеся свойств первых линейных гармоник сопоставлялись с данными, приведенными в работе [13]. Достоверность полученных представлений нелинейных вторых гармоник контролировалось на основе анализа степени выполнения дифференциальных уравнения и краевых условий задачи. Для получения устойчивых результатов расчетов, точность которых зависит от количества слагаемых, удерживаемых в представлениях частных решений $F_1(r), F_2(r)$ с коэффициентами a_p, b_p , порядок суммирования должен был не превышать 160. Это позволяло получать представления вторых гармоник, в которых дальнейшее увеличение числа удерживаемых слагаемых приводило к относительным изменениям анализируемых характеристик, не превышающим 1%.

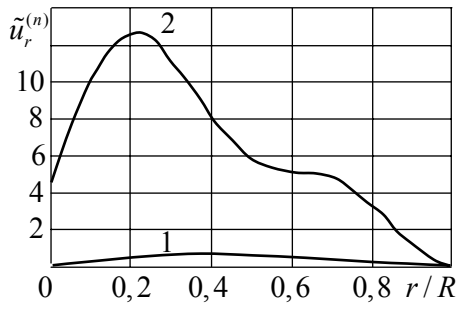
На основе расчетов получен ряд сопоставительных выводов о характере зависимостей от параметра относительной длины λ/R для форм и относительных амплитудных уровней нелинейных вторых гармоник волн из двух низших мод соответствующих дисперсионных спектров (рис. 1-4).



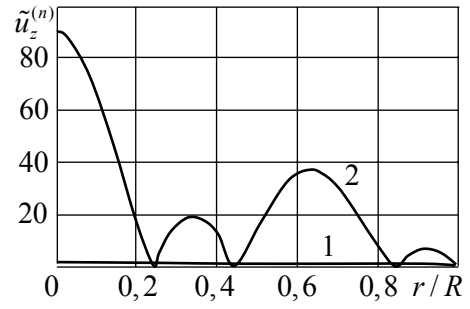
а) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(l)} = |u_r^{(l)}| / u^{(0)}$



б) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(l)} = |u_z^{(l)}| / u^{(0)}$

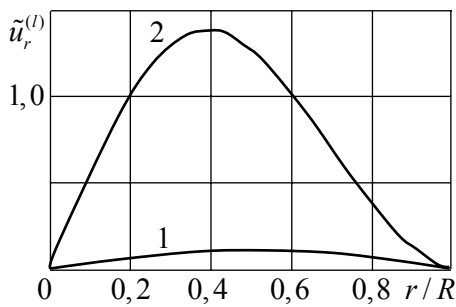


в) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(n)} = |u_r^{(n)}| / (u^{(0)})^2$

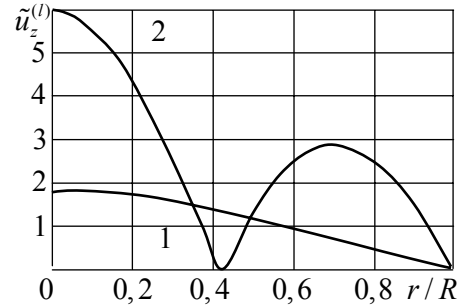


г) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(n)} = |u_z^{(n)}| / (u^{(0)})^2$

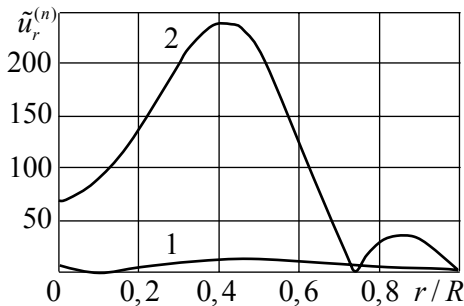
Рис. 1. Амплитудные формы волновых смещений в первых линейных и вторых нелинейных гармониках P-SV волн с относительной длиной $\lambda = 8R$ (1 – первая мода, 2 – вторая мода).



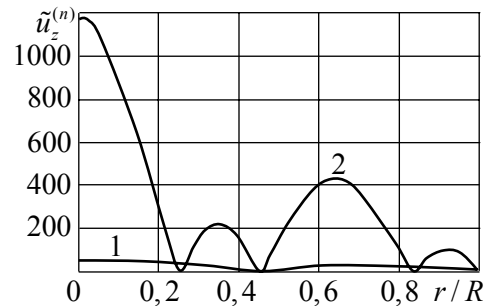
а) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(l)} = |u_r^{(l)}| / u^{(0)}$



б) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(l)} = |u_z^{(l)}| / u^{(0)}$

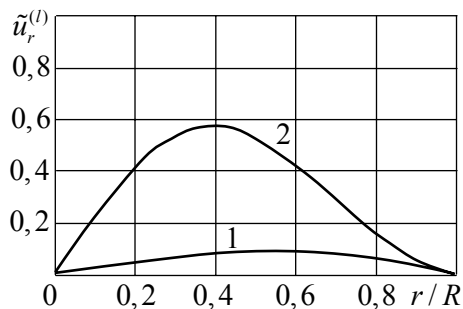


в) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(n)} = |u_r^{(n)}| / (u^{(0)})^2$

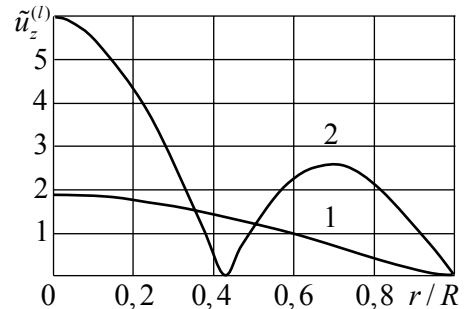


г) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(n)} = |u_z^{(n)}| / (u^{(0)})^2$

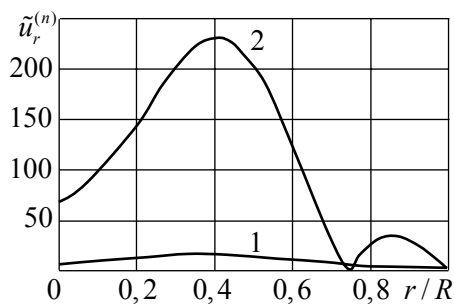
Рис. 2. Амплитудные формы волновых смещений в первых линейных и вторых нелинейных гармониках P-SV волн с относительной длиной $\lambda = 10R$ (1 – первая мода, 2 – вторая мода).



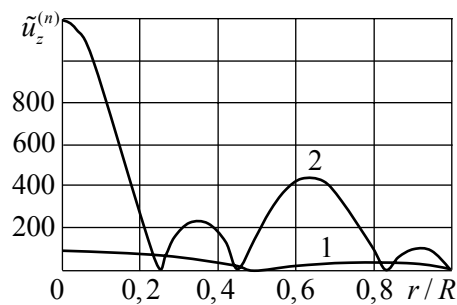
а) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(l)} = |u_r^{(l)}| / u^{(0)}$



б) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(l)} = |u_z^{(l)}| / u^{(0)}$

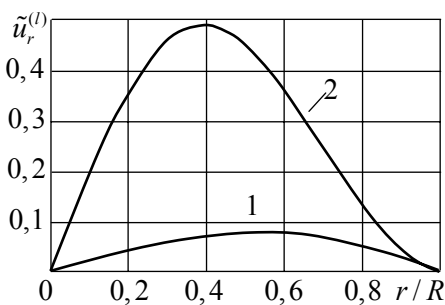


в) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(n)} = |u_r^{(n)}| / (u^{(0)})^2$

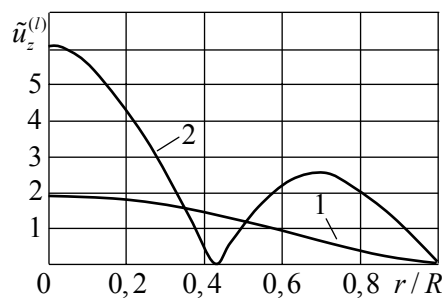


г) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(n)} = |u_z^{(n)}| / (u^{(0)})^2$

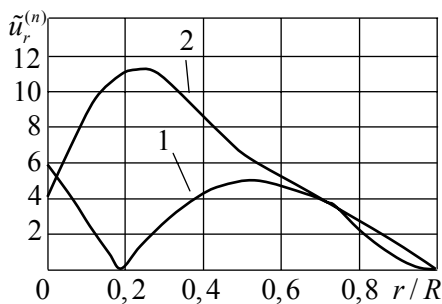
Рис. 3. Амплитудные формы волновых смещений в первых линейных и вторых нелинейных гармониках P-SV волн с относительной длиной $\lambda = 12R$ (1 – первая мода, 2 – вторая мода).



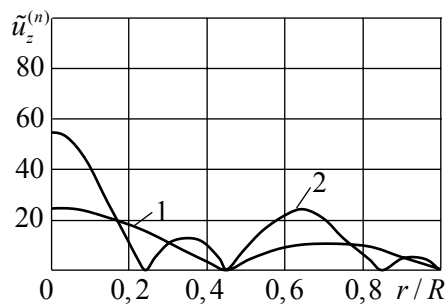
а) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(l)} = |u_r^{(l)}| / u^{(0)}$



б) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(l)} = |u_z^{(l)}| / u^{(0)}$



в) Форма смещений $\tilde{u}_r^{(n)} = |u_r^{(n)}| / (u^{(0)})^2$



г) Форма смещений $\tilde{u}_z^{(n)} = |u_z^{(n)}| / (u^{(0)})^2$

Рис. 4. Амплитудные формы волновых смещений в первых линейных и вторых нелинейных гармониках P-SV волн с относительной длиной $\lambda = 14R$ (1 – первая мода, 2 – вторая мода).

Анализ свойств амплитудных форм волновых перемещений позволяет сделать следующие заключения. При высокой степени стабильности анализируемых форм для первых линейных гармоник рассматриваемых волн в исследуемом диапазоне их относительных длин, формы волновых перемещений во вторых гармониках имеют гораздо более высокую степень изменчивости. Так, амплитудные формы перемещений $|u_r^{(n)}|$ во вторых гармониках волн первой моды стабильны в диапазоне от $8R \leq \lambda \leq 12R$, а при $\lambda = 14R$ резко трансформируется с появлением окружной узловой линии. Формы вторых гармоник волн моды 2 существенно трансформируются в интервалах $8R \leq \lambda \leq 10R$ и $12R \leq \lambda \leq 14R$. При этом амплитудные уровни нормированных напряженностей для этой компоненты ангармонических возмущений интенсивно изменяются. В рассмотренном диапазоне относительных длин они являются максимальным при $\lambda = 10R$. Амплитудные формы нормированных волновых перемещений $|u_z^{(n)}|$ для волн второй и первой моды в рассматриваемом диапазоне варьирования λ наиболее стабильны и эти перемещения имеют большую интенсивность, чем нормированные перемещения $|u_r^{(n)}|$, в связи с чем вторые гармоники волн обоих рассматриваемых мод могут быть отнесены к преимущественно продольным.

Формы $|u_z^{(n)}|$ для вторых гармоник моды 1 также достаточно стабильны, но их интенсивность при всех рассматриваемых λ существенно меньше интенсивности вторых гармоник волн моды 2.

Выводы. С использованием алгоритма для построения аналитического решения рассматриваемой задачи и его численного исследования проведен анализ некоторых свойств нелинейных монохроматических осесимметричных нормальных волн продольно-сдвигового типа, принадлежащих двум низшим модам дисперсионного спектра для цилиндра с закрепленной боковой цилиндрической поверхностью. Проанализированы амплитудно-частотные характеристики ангармонических возмущений и формы распределений амплитуд волновых смещений во вторых гармониках по радиальной координате.

РЕЗЮМЕ

У статті представлені другі гармоніки осесиметричних нормальних хвиль поздовжньо-зсувного типу, що розповсюджуються уздовж осевого напрямку в ізотропному циліндрі кругового перерізу із закріпленою бічною поверхнею. З використанням аналітичних представлень нелінійних других гармонік проаналізовано амплітудно-частотні залежності для нелінійних ангармонічних збурень хвиль в хвилеводі з дюралюмінію. Представлені результати аналізу форм хвильових рухів у других гармоніках із змінною відносною довжиною.

Ключові слова: циліндричний хвилевід, фізична і геометрична нелінійність, поздовжньо-зсувні хвилі, нелінійні друга гармоніки, амплітудно-частотні ефекти.

SUMMARY

In the article the second harmonics of axisymmetric normal longitudinal-shear waves propagating along the axial direction in an isotropic cylinder of circular section with a clamped lateral surface are presented. Using of analytical representations of non-linear second harmonics, the amplitude-frequency dependence for the non-linear anharmonic perturbations of waves in duralumin waveguide are analyzed. The results of the analysis of the forms of wave motion in the second harmonics with changed relative length are presented.

Keywords: cylindrical waveguide, the physical and geometric nonlinearity, longitudinal-shear waves, the nonlinear second harmonics, amplitude-frequency effects.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Куренная К. И. Вторые гармоники нелинейных нормальных SH-волн в пластине из монокристалла германия / К. И. Куренная, В. И. Сторожев // Теорет. и прикладная механика. – 2002. – Вып. 35. – С. 131-138.
2. Куренная К. И. Ангармонические эффекты при распространении нелинейных нормальных P-SV волн в анизотропном упругом слое / К. И. Куренная, В. И. Сторожев // Теорет. и прикладная механика. – 2002. – Вып. 36. С. 116-124.
3. Куренная К. И. Частотные зависимости нелинейных эффектов при распространении нормальных SH-волн в слое из монокристалла германия / К. И. Куренная, В. И. Сторожев // Труды III Всероссийской конференции по теории по теории упругости с международным участием (г. Ростов-на-Дону – Азов, 13-16 октября 2003 г.). – Ростов-н/Д: “Новая книга”, 2004. – С. 248-250.
4. Курінна К. І. Розповсюдження нелінійних ультраакустичних хвиль в кристалічних пластинчатих хвилеводах / К. І. Курінна, В. І. Сторожев // Машинознавство. – 2003. – № 9. – С. 27-31.
5. Kurennaia K. I., Analyses of nonlinear ultraacoustic wave properties in germanium monocrystal layer / K. I. Kurennaia, V. I. Storozhev // Journal of Computational and Applied Mechanics. – 2005. – Vol. 6, No 1. – P. 67-82.
6. Kurennaia K. I. Nonlinear acoustic effects while spreading of the normal waves in anisotropic elastic layer / K. I. Kurennaia, V. I. Storozhev // Proceedings of the Tenth International Congress on Sound and Vibration (Stockholm, Sweden, 7-10 July 2003). – Stockholm, IIAV, 2003. – P. 3605-3612.
7. Kurennaia K.I. Nonlinear effects while interacting SH waves in cubical system lamina spreading / K. I. Kurennaia, V. I. Storozhev // 4th ICCSM. Proceedings (offprints) of the 4th International Congress of Croatian Society of Mechanics (Bizovac, Croatia, September 18-20, 2003). – Zagreb, Croatian Society of Mechanics, 2003. – 658 p. – P. 299 -305.
8. Kurennaia K. I. Propagation of nonlinear ultraacoustic waves in lamina of cubical system / K. I. Kurennaia, V. I. Storozhev // Acta Acoustica United with Acoustica. Euronoise 2003. 5th European Conference on Noise Control. AIA 2003. XXX Congress of the Acoustical Society of Italy (Naples, Italy, 19-21 May 2003) – 2003. – Vol. 89, Suppl. 1. – P. 123-124.
9. Островский Л. А. Нелинейные упругие волны в стержнях / Л. А. Островский, А. М. Сутин // ПММ. – 1977. – Т. 41, № 3. – С. 531-537.
10. Sugimoto N. Numerical investigation of nonlinear mode coupling of elastic waves / N. Sugimoto // J. Acoust. Sos. Am. – 1978. – Vol. 64, No 4. – P. 1190-1195.
11. Sugimoto N. Nonlinear mode coupling of elastic waves / N. Sugimoto, M. Hirao // J. Acoust. Sos. Am. – 1977. – Vol. 62, No 1. – P. 23-32.
12. Гузь А. Н. Устойчивость упругих тел при конечных деформациях/ А. Н. Гузь. – К.: Наук. думка, 1973. – 271 с.
13. Гринченко В. Т. Гармонические колебания и волны в упругих телах. / В. Т. Гринченко, В. В. Мелешко – К.: Наук. думка, 1981. – 284 с.

Поступила в редакцию 26.05.2010 г.

УДК 539.3

АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ ОБЛАСТЕЙ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ И ЕГО ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ПЛОСКОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ

Р. Н. Нескородев

В работе предложен алгоритм построения контуров сложной конфигурации, основанный на пересечении или объединении выпуклых областей, составленных из кусков эллиптических или круговых дуг. В качестве примера предложенная методика использована для исследования напряженного состояния горных пород с протяженными горизонтальными выработками сложного сечения под действием сил собственного веса.

Ключевые слова: характеристическая функция области, R-функции, предикатное уравнение, массив горных пород, напряженное состояние, горизонтальная выработка сложного сечения

Введение. Одним из классических методов изучения напряженного состояния плоских задач теории упругости с криволинейными отверстиями или полостями является использование конформных отображений внешности единичного круга на исследуемую область [1]. Как известно, точное решение для двумерных задач с отверстием получено только для кругового и эллиптического контуров [2]. При помощи приближенного метода, основанного на построении отображающих функций внешности единичного круга на внешность криволинейных контуров решен ряд задач для многосвязных анизотропных областей с криволинейными границами [3, 4]. В статье [5] предложен приближенный метод решения задач для пластины с отверстиями произвольной формы, основанный на аппроксимации границы области эллиптическими контурами. С использованием методики, изложенной в работе [6], получены результаты, описывающие напряженное состояние вблизи выработки сводчатого сечения с разгрузочными трещинами, находящейся на большой глубине под действием собственного веса [7]. Однако, недостатком методик, предложенных в работах [5, 6] является невозможность определения компонент напряженного состояния вблизи мест стыкования контуров.

В работе [8] предложен метод построения гладкого выпуклого контура произвольной конфигурации с заданной кривизной в любой точке. Метод основан на аппроксимации граничного контура криволинейными элементами, в качестве которых выбираются части контуров окружностей с гладким соединением. Подбором параметров круга можно аппроксимировать любую часть граничного контура. Далее построенный таким образом контур будем называть макроконтуром.

В данной работе предложен алгоритм, позволяющий строить области сложной конфигурации на основе двух базовых контуров: макроконтура и эллиптического контура. Путем пересечения нескольких макроконтуров, а также необходимого количества эллиптических, используя характеристические уравнения, можно получить область любой заданной конфигурации, в том числе с невыпуклым контуром.

Характеристические функции областей. Для автоматического формирования контуров отверстий сложной формы по заданной входной информации, возникает задача определения принадлежности произвольно взятой точки M с координатами (x_{10}, x_{20}) рассматриваемой области. Подобная ситуация возникает также при исследовании напряженного состояния плоской среды с отверстиями. Эта задача приводится к построению характеристической функции заданной области. Под характеристической функцией области будем понимать функцию $\omega(x_1, x_2)$, которая принимает положительные значения в области Ω , нулевые на границе $\partial\Omega$ и отрицательные в области $\bar{\Omega}$, являющейся дополнением области Ω до всего пространства. Опишем алгоритм построения характеристической функции для бесконечной плоской области, ослабленной вырезами с заданными макро и эллиптическими контурами. Рассматриваемая область обозначена через Ω . Функции, которые принимают значение равное 1 в рассматриваемой области и значение равное 0 вне ее, называют двузначными предикатами или характеристическими функциями областей [9]. Так как значение предикатов есть либо 0, либо 1, то их можно подставлять на место аргументов булевых функций. Используя методы алгебры логики, можно построить предикат практически для всякого геометрического объекта, составленного из кусков известных линий. Переход от предикатного описания геометрических объектов к построению их уравнений осуществляется путем использования R-функций [9]. Построение предикатного уравнения, определяющего заданный объект, связано с анализом формирования этого объекта из других, более простых (опорных) элементов. В качестве опорных элементов, из которых формируется область Ω , выбираются полуплоскости, внешности эллиптических контуров, а также полуплоскости с вырезами в виде полуэллипсов. Как частный случай вместо эллиптических могут использоваться круговые контуры.

Нетрудно убедиться в том, что

$$\omega_r^1(x_1, x_2) = (x_{2,r+1} - x_{2r})x_1 + (x_{1r} - x_{1,r+1})x_2 + x_{1,r+1}x_{2r} - x_{1r}x_{2,r+1} = 0 \quad (1)$$

есть уравнение прямой, проходящей через точки $t_r = x_{1r} + ix_{2r}$ и $t_{r+1} = x_{1,r+1} + ix_{2,r+1}$ (рис. 1, а).

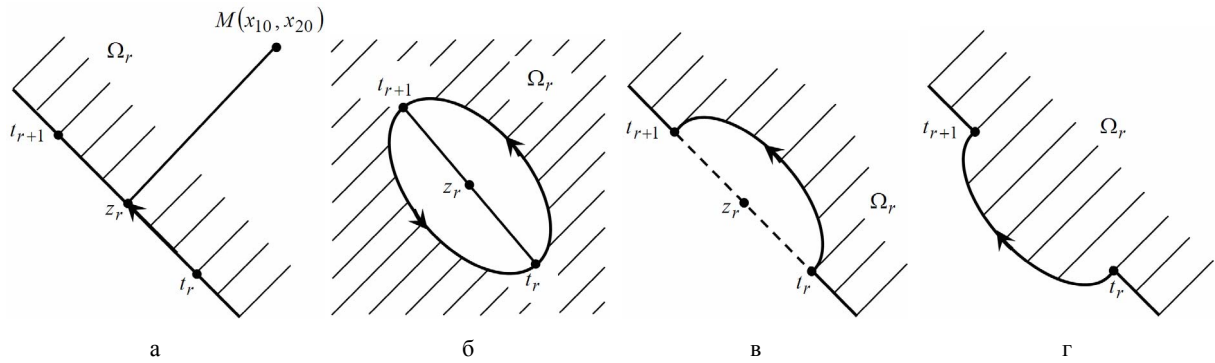


Рис. 1

Действительно, пусть точка M с координатами (x_{10}, x_{20}) лежит на нормали к прямой $t_r t_{r+1}$ на расстоянии $\alpha|t_{r+1} - t_r|/2$ ($\alpha > 0$ – произвольный вещественный параметр) от середины отрезка $z_r = (t_r + t_{r+1})/2$. Считаем, что обход контура осуществляется в направлении от точки t_r к точке t_{r+1} так, что область Ω_r остается справа. Тогда координаты (x_{10}, x_{20}) точки M находятся по формулам:

$$\begin{aligned} x_{10} &= [x_{1r} + x_{1,r+1} + \alpha(x_{2,r+1} - x_{2r})]/2, \\ x_{20} &= [x_{2r} + x_{2,r+1} - \alpha(x_{1,r+1} - x_{1r})]/2. \end{aligned} \quad (2)$$

Подставляя представления (2) в уравнение (1), получим значение функции ω_r^1 в точке M :

$$\omega_r^1(x_{10}, x_{20}) = \frac{\alpha}{2} \left[(x_{2,r+1} - x_{2r})^2 + (x_{1,r+1} - x_{1r})^2 \right] > 0. \quad (3)$$

Из соотношения (3) следует, что функция $\omega_r^1(x_1, x_2) > 0$ в области справа от прямой $t_r t_{r+1}$ и $\omega_r^1(x_1, x_2) < 0$ слева от нее. Это дает основание назвать функцию $\omega_r^1(x_1, x_2)$ характеристической для области, изображенной на рис. 1 а).

Уравнение эллиптического контура образующего вырез на рис.1 б имеет вид

$$t = z_r + R_r \sigma + m_r / \sigma, \quad (4)$$

где $\sigma = \exp(i\theta)$; $R_r = (t_r - t_{r+1})(1 + \beta_r)/4$; $m_r = (t_r - t_{r+1})(1 - \beta_r)/4$;

$\beta_r = b_r / a_r$ – безразмерная величина; $a_r = |t_r - t_{r+1}|/2$ и b_r – полуоси эллипса.

На основании уравнения (4) определяется функция, отображающая внешность единичного круга на внешность эллипса:

$$z = z_r + R_r \zeta + m_r / \zeta \quad (|\zeta| \geq 1). \quad (5)$$

Разрешая уравнение (5) относительно переменной ζ , найдем

$$\zeta_{1,2} = \left(z - z_r \pm \sqrt{(z - z_r)^2 - 4R_r m_r} \right) / (2R_r). \quad (6)$$

Из соотношений (6) следует, что для произвольной точки $z_0 = x_{10} + ix_{20}$ значение одной из величин $|\zeta_1(z_0)|$ или $|\zeta_2(z_0)|$ будет больше единицы, если она лежит вне эллипса и равно единице, если она лежит на контуре эллипса. Если точка z_0 лежит внутри эллиптического контура, то обе величины $|\zeta_1(z_0)|$ и $|\zeta_2(z_0)|$ будут меньше единицы. На основании вышесказанного, можно сделать заключение, что функция

$$\omega_r^2(x_1, x_2) = [|\zeta_1| + |\zeta_2| + ||\zeta_1| - |\zeta_2||] / 2 - 1 = \max\{|\zeta_1|, |\zeta_2|\} - 1 \quad (7)$$

является характеристической для области, изображенной на рис. 1 б).

Легко убедиться в том, что функция

$$\omega_r^3 = [\omega_r^1 + \omega_r^2 - |\omega_r^1 - \omega_r^2|] / 2 = \min\{\omega_r^1, \omega_r^2\} \quad (8)$$

является характеристической для области, изображенной на рис.1 в), а функция

$$\omega_r^4 = [\omega_r^1 - \omega_r^2 + |\omega_r^1 + \omega_r^2|] / 2 = \max\{\omega_r^1, -\omega_r^2\} \quad (9)$$

будет характеристической для области, изображенной на рис. 1 з).

Характеристические функции (3) и (7) – (9) будут использованы как опорные при построении характеристических функций областей сложной формы.

Будем обозначать заштрихованные области, изображенные на рис.1, через Ω_r . Введем двузначный предикат $S_2(\omega_r^k)$, который определим следующим образом [10]:

$$S_2(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 1, & x \geq 0. \end{cases}$$

Тогда области Ω_r определяются уравнениями $S_2(\omega_r^k)$ ($k = \overline{1,4}$).

Для построения характеристической функции области сложной формы предлагается метод, основанный на использовании R-функций. Конечную замкнутую область D_k на рис. 2, а можно построить как пересечение (конъюнкцию) опорных областей Ω_r ($r = \overline{1, n}$), изображенных на рис. 1, и задать логической формулой

$$D_k = \Omega_1 \cap \Omega_2 \cap \dots \cap \Omega_n. \quad (10)$$

Замкнутую область T_p вне отверстия на рис.2, б можно сформировать объединением опорных областей Ω_r ($r = \overline{1, m}$), изображенных на рис. 1. Соответствующая формула имеет вид

$$T_p = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \dots \cup \Omega_m. \quad (11)$$

Предикатные уравнения приведенных областей D_k и T_p получим, производя формальную замену символов конъюнкции в (10) и дизъюнкции в (11) символами соответствующих элементарных R-функций, а символов ω_r – двузначными предикатами $S_2(\omega_r)$ [9]:

$$D_k = S_2(\phi_k^1) = S_2(\omega_1) \wedge_1 S_2(\omega_2) \wedge_1 \dots \wedge_1 S_2(\omega_n), \quad (12)$$

$$T_p = S_2(\phi_k^2) = S_2(\omega_1) \vee_1 S_2(\omega_2) \vee_1 \dots \vee_1 S_2(\omega_m) \quad (13)$$

Для этих предикатных уравнений булевы функции (10) и (11) являются сопровождающими. Уравнения (12) и (13) дают возможность представить области D_k и T_p в виде неравенств [9, 10]

$$\phi_k^1 = \omega_1 \wedge_1 \omega_2 \wedge_1 \dots \wedge_1 \omega_n \geq 0,$$

$$\phi_k^2 = \omega_1 \vee_1 \omega_2 \vee_1 \dots \vee_1 \omega_m \geq 0.$$

Равенство нулю достигается лишь на границе области, поэтому уравнения

$$\phi_k^1 = \omega_1 \wedge_1 \omega_2 \wedge_1 \dots \wedge_1 \omega_n = 0, \quad \phi_k^2 = \omega_1 \vee_1 \omega_2 \vee_1 \dots \vee_1 \omega_m = 0$$

будут уравнениями границ областей D_k и T_p соответственно.

Отметим, что в качестве элементарных R-функций здесь использованы функции [9]:

$$Y_1 \equiv x_1 \wedge_1 x_2 \equiv \frac{1}{2}(x_1 + x_2 - |x_1 - x_2|) \equiv \min\{x_1, x_2\},$$

$$Y_2 \equiv x_1 \vee_1 x_2 \equiv \frac{1}{2}(x_1 + x_2 + |x_1 - x_2|) \equiv \max\{x_1, x_2\}.$$

Построение предикатных уравнений для областей более сложного вида, чем области D_k и T_p , сводится к объединению (дизъюнкции) областей вида D_k , и к пересечению (конъюнкции) областей вида T_p . Если внешняя область Ω формируется из областей вида T_p ($p = \overline{1, k}$), то окончательное уравнение этой области запишется в форме

$$\omega = \phi_1^2 \wedge_1 \phi_2^2 \wedge_1 \dots \wedge_1 \phi_k^2 \geq 0,$$

где φ_p^2 – предикатные уравнения областей T_p ($p = \overline{1, k}$), построенные выше.

Приведенный алгоритм построения характеристических уравнений позволяет автоматизировать построение контуров областей сложной формы с помощью компьютера. На основе приведенной теории была разработана программа на алгоритмическом языке, позволяющая строить области сложной конфигурации на основе двух базовых контуров: макроконтура и эллиптического контура.

Путем пересечения нескольких макроконтуров, а также необходимого количества эллипсов, используя характеристические уравнения, можно получить область любой заданной конфигурации, в том числе с невыпуклым контуром.

Постановка и решение упругой задачи. Используем предложенную методику для решения задач механики горных пород и исследуем напряженное состояние вблизи горизонтальных протяженных выработок, имеющих сложную форму поперечного сечения.

Будем представлять массив в виде тяжелого полупространства, отнесенного к прямоугольной системе координат $Ox_1x_2x_3$. Начало системы находится на глубине H , ось Ox_2 направлена вертикально вверх, а плоскость Ox_1x_3 параллельна плоскости дневной поверхности.

Считаем, что свойства материала, из которого состоят породы, различны в разных направлениях и для описания их используем модель упругого анизотропного тела. Предполагаем линейную связь между напряжениями и деформациями, выраженную обобщенным законом Гука.

Протяженные в направлении оси Ox_3 горизонтальные выработки на некотором расстоянии от краев находятся в одинаковых условиях. В случае общей анизотропии - это условия обобщенной плоской деформации. Компоненты перемещений и напряжений не меняются вдоль оси Ox_3 и зависят только от координат x_1 и x_2 .

Начальное напряженное состояние нетронутого массива находится по формулам [11]

$$\sigma_k^0 = \tau_k \gamma (x_2 - H) \quad (k = \overline{1, 6}),$$

где величины τ_k зависят от упругих постоянных материала; γ – вес единицы объема горного массива.

Задача об упругом равновесии такого массива приводится к определению в областях S_j функций $\Phi_j(z_j)$, удовлетворяющих граничным условиям. Для каждого элемента L_r контура границы поставим в соответствие комплексные потенциалы

$$\Phi_{jr} = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{rkj} / \zeta_{jr}^k.$$

Если контуры выработок содержит N элементов, то комплексные потенциалы $\Phi_j(z_j)$, будут представлены в виде суммы функций по всем элементам:

$$\Phi_j(z_j) = \sum_{r=1}^N \Phi_{jr} = \sum_{r=1}^N \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{rkj} / \zeta_{jr}^k. \quad (14)$$

Граничным условиям нужно удовлетворить на каждом из $r = \overline{1, N}$ элементов. Для массива с неподкрепленными выработками, эти условия на r -м элементе имеют вид [8, 11]

$$2 \operatorname{Re} \sum_{j=1}^3 a_{jr} \Phi'_j = P_{1r}, \quad 2 \operatorname{Re} \sum_{j=1}^3 b_{jr} \Phi'_j = P_{2r}, \quad 2 \operatorname{Re} \sum_{j=1}^3 c_{jr} \Phi'_j = P_{3r}. \quad (15)$$

Решение задачи о напряженно – деформированном состоянии массива горных пород с выработками свелось к определению комплексных коэффициентов $\alpha_{rkj} = \alpha_{rkj}^1 + i\alpha_{rkj}^2$ функций (14) из граничных условий (15). Сведение этой задачи к решению системы алгебраических уравнений проведено методом наименьших квадратов [8, 11]. После нахождения указанных коэффициентов становятся известными функции $\Phi_j(z_j)$. Напряжения, возникающие в массиве, определяются из соотношений [11]

$$\sigma_k = \sigma_k^0 + 2 \operatorname{Re} \sum_{j=1}^3 p_{kj} \Phi'_j(z_j) \quad (k = \overline{1, 6}).$$

Напряжения, действующие на контуре или вблизи контура выработки на площадках, касательных и нормальных к нему вычисляются по формулам, приведенным в работе [8].

Численные исследования. Приведем некоторые результаты численных исследований, проведенных для материала алевролит со следующими упругими постоянными [12]

$$E_1/E = 1.074, \quad E_2/E = 0.523, \quad G_2/E = 0.120, \quad \nu_1 = 0.413, \quad \nu_2 = 0.198,$$

$$E = 9.81 \times 10^4 \text{ МПа}; \quad \rho = 2500 \text{ кг/м}^3 \text{ – плотность породного массива.}$$

На рис. 3 представлены эпюры напряжений $|\sigma_\theta / \gamma H|$ для выработки составленной из двух одинаковых эллиптических контуров (граничные элементы 1 и 2), которые соединены между собой выработкой с прямолинейными границами (элементы 3 и 4), расстояние между которыми $h = 1 \text{ м}$. Меньшая по-

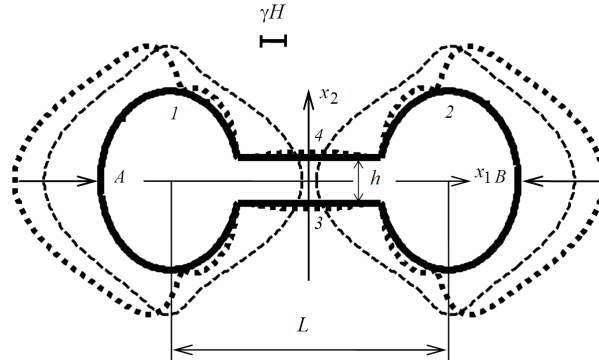


Рис. 3

луось эллипса $a = 1.5 \text{ м}$, а большая $b = 2 \text{ м}$. Расстояние между центрами эллиптических полостей $L = 6 \text{ м}$. Максимальные значения напряжений получились сжимающими (со знаком минус). Штриховой линией показаны напряжения, возникающие на контурах отдельно стоящих эллиптических выработок, а пунктирной линией – на контуре сложной выработки. В табл. 1 даны значения максимальных напряжений $\sigma_\theta / \gamma H$, возникающих в точках A и B, а также в центральных точках прямолинейных элементов 3 и 4 в зависимости от величины L.

Таблица 1

$L, \text{ м}$	6	10	30	60	150
$\sigma_\theta / \gamma H _{A,B}$	-3,7017	-4,3887	-6,8042	-9,2586	-14,1832
$\sigma_\theta / \gamma H _{3,4}$	0,2866	0,6028	0,8135	0,8508	1,0152

Как видно из таблицы, увеличение расстояния L ведет к росту значений $|\sigma_\theta / \gamma H|$. Следует отметить, что на граничных прямолинейных контурах, а также в области сопряжения выработок возникают растягивающие напряжения, которые также увеличиваются с ростом L.

На рис. 4 показано распределение напряжений $|\sigma_\theta / \gamma H|$ на контуре сложной формы, составлен-

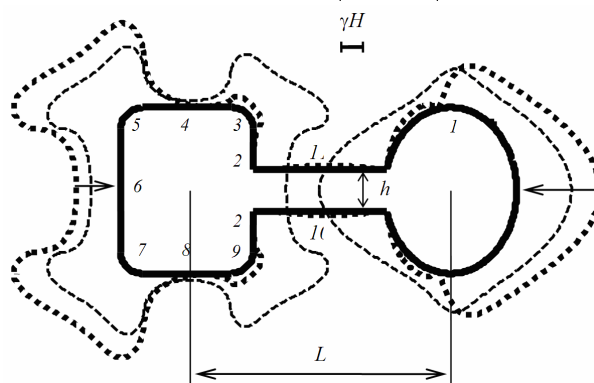


Рис. 4

ного из эллиптической (элемент 1) и прямоугольной (элементы 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9) выработок, соединенных выработкой с прямолинейными границами (элементы 10 и 11) и $h = 1 \text{ м}$. Отношение сторон прямоугольной выработки – 3/4, радиус закругления в угловых точках – 0.5 м, расстояние между центрами выработок $L = 6 \text{ м}$. Как и на предыдущем рисунке штриховая линия характеризует распределение напряжений на контурах отдельно стоящих выработок, а пунктирная на сложной выработке. Увеличение расстояния между центрами выработок приводит, как и в случае изображенном на рис. 3, к росту напря-

жений $|\sigma_{\theta} / \gamma H|$. Для представленных невыпуклых конфигураций выработок видно, что в окрестности выступающих углов напряжения равны нулю, что подтверждает теорию [13].

Выводы. При помощи методов R-функций и алгебры логики построены характеристические уравнения для областей, которые могут быть ограничены прямолинейными отрезками и частями эллиптических контуров. Алгоритм нахождения характеристических уравнений позволяет автоматизировать построение границ областей сложной формы. Предложенная методика апробирована на решении задачи механики горных пород при исследовании напряженного состояния вблизи горизонтальных протяженных выработок, имеющих сложную форму поперечного сечения. Приведен количественный и качественный анализ полученных результатов. Данная методика может быть использована для решения двумерных краевых задач математической физики.

РЕЗЮМЕ

У роботі запропоновано алгоритм побудови контурів складної конфігурації заснований на перетинанні або об'єднанні опуклих областей, складених з частин еліптичних або кругових дуг. Як приклад запропонована методика використана для дослідження напруженого стану гірничих порід з протяжними горизонтальними виробками складного перерізу під дією сил власної ваги.

Ключові слова: характеристична функція області, R-функції, предикатне рівняння, масив гірничих порід, напружений стан, горизонтальна виробка складного перерізу

SUMMARY

In work the algorithm of construction of contours a complicated configuration based on crossing or uniting of the convex areas made of pieces of elliptic or circular arcs is offered. As an example, the proposed approach is used to investigate the stress state of massif with a long horizontal holes of complicated section under action of forces of a body weight.

Keywords: characteristic function of area, R-function, the predicate equation, a massif of rocks, stress state, lateral opening of a complicated section

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Савин Г. Н. Распределение напряжений около отверстий / Г. Н. Савин. – К.: Наукова думка, 1968. – 887 с.
2. Лехницкий С. Г. Теория упругости анизотропного тела / С. Г. Лехницкий. – М.: Наука, 1977. – 415 с.
3. Космодамианский А. С. Новый приближенный метод определения напряжений в анизотропной пластике с криволинейным отверстием / А. С. Космодамианский // Некоторые задачи теории упругости о концентрации напряжений и деформации упругих тел. – 1965. – № 2. – С. 35-42.
4. Космодамианский А. С. Напряженное состояние анизотропных сред с отверстиями или полостями / А. С. Космодамианский. – К.: Вища школа, 1976. – 200 с.
5. Нескородев Н. М. Метод граничных элементов в задачах о напряженном состоянии анизотропной пластинки с отверстиями / Н. М. Нескородев // Теоретическая и прикладная механика. – 1993. – № 24. – С. 44-50.
6. Калоеров С. А. Двумерное напряженное состояние многосвязного анизотропного тела с полостями и трещинами / С. А. Калоеров, Е. С. Горянская // Теоретическая и прикладная механика. – 1995. – Вып. 25. – С. 45-56.
7. Калоеров С. А. Напряженное состояние горного массива с выработкой и разгрузочными щелями / С. А. Калоеров, Е. С. Горянская, В. А. Полухин // Теоретическая и прикладная механика. – 1996. – Вып. 26. – С. 28-35.
8. Нескородев Р. Н. Применение способа гладкой аппроксимации криволинейных отверстий в решении задач плоской теории упругости / Р. Н. Нескородев // Вісник Донецького національного університету. Сер. А: Природн. науки. – 2010. – Вип. 1. – С. 81-88.
9. Рвачев В. Л. Теория R-функций и некоторые ее приложения / В. Л. Рвачев. – К.: Наук. думка, 1982. – 552 с.
10. Рвачев В. Л. Алгебро-логические и проекционные методы в задачах теплообмена / В. Л. Рвачев, А. П. Слесаренко. – К.: Наук. думка, 1978. – 138 с.
11. Нескородев Н. М. Напряжения вокруг выработок в анизотропном горном массиве / Н. М. Нескородев, Р. Н. Нескородев. – Донецк: ДонНУ, 2003. – 148 с.
12. Ержанов Ж. С. Сейсмонапряженное состояние подземных сооружений в анизотропном слоистом массиве / Ж. С. Ержанов, Ш. М. Айтиалиев, Ж. К. Масанов. – Алма-Ата: Наука, 1980. – 212 с.
13. Нескородев Н. М. Об особенностях напряжений в окрестности угловых точек ортотропной пластинки / Н. М. Нескородев, Р. Н. Нескородев // Теоретическая и прикладная механика. – 1999. – Вып. 29. – С. 78-83.

Поступила в редакцию 23.05.2010 г.

УДК 539.3

ПЕРЕДАЧА НАГРУЗКИ СТРИНГЕРОМ ОРТОТРОПНОМУ КРУГОВОМУ СЕКТОРУ С КРИВОЛИНЕЙНОЮ АНИЗОТРОПИЄЮ

А. В. Павленко*, Т. С. Кагадій**, О. В. Белова*

*Національна металургічна академія України, г. Дніпропетровськ

**Національний горний університет, г. Дніпропетровськ

В даній роботі розглядається взаємодія стрингера з еластичною ортотропною пластинкою кінцевих розмірів з циліндричною анізотропією. Для її розв'язання використовується асимптотичний метод, який дозволяє розщепити напружено-деформоване стан пластины на дві складові, причому кожна з них знаходить-ся при послідовному розв'язанні крайових задач теорії потенціала.

Ключові слова: асимптотичний метод, анізотропний матеріал, передача навантаження.

Введення. Пошук підходів до розв'язання контактних задач для тіл з криволінійною анізотропією є актуальним на протязі тривалого часу, так як подібні задачі мають обширну область застосування. Дослідження в цьому напрямку проводяться різними методами [1-7]. При їх реалізації виникають додаткові складнощі, пов'язані з ускладненням геометрії та властивостей матеріалу. В даній роботі для розв'язання задачі про контакт еластичних тіл, одне з яких є одномерним, а друге має криволінійну анізотропію, використовується асимптотичний метод [1, 2].

Метою статті є дослідження контактної взаємодії ортотропного кругового сектора кінцевих розмірів, що має циліндричну анізотропію, з підкріплюючим його еластичним елементом.

Постановка задачі. Нехай еластична пластинка $R_0 \leq r \leq R_1, -\gamma \leq \theta \leq \gamma$ закріплена по краях $\theta = \pm \gamma$. Границі $r = R_0, r = R_1$ залишаються вільними. В середині між закріпленими краями (вдоль лінії $\theta = 0$; рис.1) пластинка зміцнена стрингером, який в граничній точці $r = R_0$ навантажено продольним зусиллям P_0 . Матеріал пластины є ортотропним, головні напрямки анізотропії збігаються з полярними координатами r, θ . Пластинка працює в умовах загального плоского напруженого стану, приймається схема контакту по лінії. Потрібно визначити закони зміни зусилля в стрингері, контактної сили взаємодії між стрингером і пластинкою, а також напружень в пластинці.

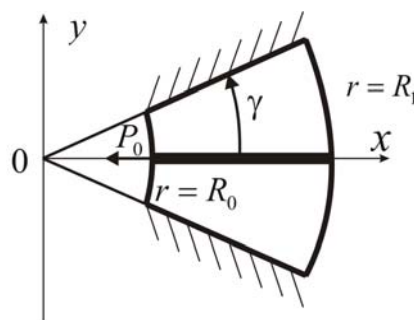


Рис.1

Метод розв'язання. Для реалізації поставленої мети використовується метод, розроблений в [1, 2], що дозволяє розщепити напружено-деформоване стан сектора на дві складові, що мають різні властивості. Крайова задача теорії еластичності зводиться до послідовного розв'язання задач теорії потенціала, і розв'язок вихідної задачі визначається як суперпозиція вказаних складових.

Якщо замість полярних координат r, θ ввести безрозмірні координати ξ, η співвідношеннями $r = R_0 e^\xi, \theta = \eta$, то поставлена задача може бути зведена до інтегрування рівнянь рівноваги пластины в переміщеннях

$$B_1 u_{\xi\xi} + G u_{\eta\eta} - B_2 (v_\eta + u) + G m v_{\xi\eta} - G v_\eta = 0;$$

$$G v_{\xi\xi} + B_2 v_{\eta\eta} + B_2 u_\eta + G m u_{\xi\eta} + G (u_\eta - v) = 0$$

при наступних граничних умовах:

$$\sigma_1 = B_1 (R_0 e^\xi)^{-1} (u_\xi + \mathcal{G}_2 (v_\eta + u)) = 0;$$

$$\tau = G (R_0 e^\xi)^{-1} (u_\eta + v_\xi - v) = 0 \quad (\xi = 0, \xi = h);$$

$$u = u_c; v = 0 \quad (\eta = 0); u = v = 0 \quad (\eta = \pm \gamma).$$

Переміщення стрингера u_c задовільняє співвідношенню

$$E F u_{c\xi\xi} = P_0 R_0 e^\xi \delta(\xi) - 2 R_0 e^\xi \tau(\xi, 0). \tag{1}$$

Здесь $u = u_r, v = u_\theta$ – компоненты вектора перемещений пластины; B_1, B_2 – жесткости пластины на растяжение-сжатие; G – жесткость на сдвиг; σ_1, τ – нормальное и касательное усилия в пластине; $m = 1 + \mathcal{G}_2 B_1 / G = 1 + \mathcal{G}_1 B_2 / G$; $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2$ – коэффициенты Пуассона материала пластины ($\mathcal{G}_1 B_2 = \mathcal{G}_2 B_1$); EF – жесткость стрингера на растяжение-сжатие; $h = \ln(R_1/R_0)$; $\delta(\xi)$ – дельта-функция Дирака; $\tau(\xi, 0) = T(\xi)$ – контактное усилие взаимодействия между стрингером и пластиной; индексы ξ, η обозначают дифференцирование по соответствующим координатам. Так как при $\eta = 0, v = 0$ ($v_\xi = 0$), то контактное усилие взаимодействия между стрингером и пластиной определяется по формуле

$$T(\xi) = \tau(\xi, 0) = G \left(R_0 e^\xi \right)^{-1} u_\eta \Big|_{\eta=0}. \quad (2)$$

В дальнейшем, из условий симметрии относительно оси Ox , рассматриваем лишь область

$$0 \leq \xi \leq h \quad (R_0 \leq r \leq R_1), \quad 0 \leq \eta \leq \gamma.$$

В соответствии с расщеплением напряженно-деформированного состояния пластины на две составляющие [1, 2] сформулированная выше краевая задача в первом приближении сводится к последовательному решению следующих двух

$$B_1 u_{\xi\xi}^{1,0} + G u_{\eta\eta}^{1,0} = 0, \quad v_\eta^{1,0} + u^{1,0} = 0; \quad (3)$$

$$u_\xi^{1,0} = 0 \quad (\xi = 0, \xi = h); \quad u^{1,0} = u_c \quad (\eta = 0), \quad u^{1,0} = 0 \quad (\eta = \gamma); \quad (4)$$

$$G v_{\xi\xi}^{2,0} + B_2 v_{\eta\eta}^{2,0} = 0; \quad u_{\xi\xi}^{2,0} = 0; \quad (5)$$

$$v_\xi^{2,0} = -u_\eta^{1,0} \quad (\xi = 0, \xi = h); \quad v^{2,0} = -v^{1,0} \quad (\eta = 0, \eta = \gamma). \quad (6)$$

Построение решения задачи. При определении напряженно-деформированного состояния первого типа [1, 2] приходится интегрировать уравнение (1) с учетом (2) и нулевыми граничными условиями, а также первое уравнение в системе (3) с граничными условиями (4). После применения косинус-преобразования Фурье с конечными пределами по координате ξ к уравнению (1) и первому уравнению в системе (3), решения полученной задачи, находим

$$u_*^{1,0}(n, \eta) = -\frac{P_0 R_0}{EF} \frac{f(n, h)}{\varphi(n)}, \quad (7)$$

где

$$u_*^{1,0}(n, \eta) = \int_0^h u^{1,0}(\xi, \eta) \cos(\alpha_n \xi) d\xi, \quad f(n, \eta) = \frac{sh[\omega \alpha_n (\gamma - \eta)]}{sh(\omega \alpha_n \gamma)}, \quad \varphi(n) = \alpha_n^2 + g \alpha_n cth(\omega \alpha_n \gamma),$$

$$\omega^2 = B_1 / G, \quad \alpha_n = n\pi / h, \quad g = 2G\omega / (EF). \quad (8)$$

Возвращаясь к оригиналу в равенстве (7), получим

$$u^{1,0}(\xi, \eta) = -\frac{P_0 R_0}{EF} \frac{\omega(\gamma - \eta)}{gh} - \frac{2P_0 R_0}{EFh} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f(n, \eta) \cos(\alpha_n \xi)}{\varphi(n)}. \quad (9)$$

Из второго уравнения системы (3) имеем

$$v^{1,0}(\xi, \eta) = -\frac{P_0 R_0}{EF} \frac{\omega}{gh} \frac{(\gamma - \eta)^2}{2} - \frac{2P_0 R_0}{\omega EFh} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f_1(n, \eta) \cos(\alpha_n \xi)}{\alpha_n \varphi(n)}, \quad (10)$$

где $f_1(n, \eta) = ch[\omega \alpha_n (\gamma - \eta)] / sh(\omega \alpha_n \gamma)$.

Полученные решения не удовлетворяют нулевым граничным условиям по касательным напряжениям τ для пластины при $\xi = 0$ и $\xi = h$, а также нулевым граничным условиям по компоненте вектора перемещений v при $\eta = 0$ и $\eta = \gamma$. Устранение соответствующих невязок обеспечивается решением краевой задачи (5), (6).

Применяя к первому уравнению (5) косинус-преобразование Фурье с конечными пределами по координате ξ , находим

$$\frac{d^2 v_*^{2,0}}{d\eta^2} - \lambda^2 a_m^2 v_*^{2,0}(m, \eta) = -\lambda^2 \psi(m, \eta), \quad (11)$$

где

$$v_{*}^{2,0}(m, \eta) = \int_0^h v^{2,0}(\xi, \eta) \cos(\alpha_m \xi) d\xi, \alpha_m = \frac{m\pi}{h},$$

$$\lambda^2 = G/B_2, \psi(m, \eta) = u^{1,0}|_{\xi=0} - u^{1,0}|_{\xi=h} \cos m\pi =$$

$$= \frac{P_0 R_0}{EF} \frac{\omega}{gh} (1 - \cos m\pi) + \frac{2P_0 R_0}{EF} \frac{\omega}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_n f_1(n, \eta) (1 - \cos n\pi \cos m\pi)}{\varphi(n)}.$$

После применения косинус-преобразования Фурье с конечными пределами по координате ξ к граничным условиям (6) при $\eta = 0, \eta = \gamma$ получим

$$v_{*}^{2,0}(m, 0) = -v_{*}^{1,0}(m, 0); v_{*}^{2,0}(m, \gamma) = -v_{*}^{1,0}(m, \gamma), \quad (12)$$

причем

$$v_{*}^{1,0}(m, \eta) = \int_0^h v^{1,0}(\xi, \eta) \cos(\alpha_m \xi) d\xi,$$

а $v^{1,0}(\xi, \eta)$ определяется по формуле (10).

Общее решение уравнения (11) может быть записано следующим образом:

$$v_{*}^{2,0}(m, \eta) = C_1 e^{-\lambda \alpha_m \eta} + C_2 e^{\lambda \alpha_m \eta} + a_m^{-2} \frac{2P_0 R_0}{EF} \frac{\omega}{gh} (1 - \cos m\pi) -$$

$$- \frac{2P_0 R_0}{EF} \frac{\omega}{h} \lambda^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_n f_1(n, \eta) (1 - \cos n\pi \cos m\pi)}{\varphi(n) (\omega^2 a_n^2 - \lambda^2 a_m^2)}, \quad (13)$$

где величины C_1 и C_2 не зависят от координаты η и находятся из граничных условий (12).

После нахождения C_1, C_2 (из-за громоздкости они здесь не приводятся) и перехода к оригиналу, получим

$$v^{2,0}(\xi, \eta) = \frac{1}{h} v_{*}^{2,0}(0, \eta) + \frac{2}{h} \sum_{m=1}^{\infty} v_{*}^{2,0}(m, \eta) \cos(\alpha_m \xi). \quad (14)$$

Отметим, что решение (13) зависит от комбинации значений m и n . В частности, при четных m и n $(1 - \cos m\pi) = 0, (1 - \cos n\pi \cos m\pi) = 0$. Если m и n нечетные, то $(1 - \cos m\pi) = 2, (1 - \cos n\pi \cos m\pi) = 0$ и в общем решении (13) сохраняется третье слагаемое. При m -четных и n -нечетных третье слагаемое в (13) отсутствует, так как $(1 - \cos m\pi) = 0, (1 - \cos n\pi \cos m\pi) = 2$, а в ряде решения (13) $n = 1, 3, \dots$. Если m -нечетные, а n -четные, то в решении (13) сохраняются все слагаемые, но в ряде n принимает значение $n = 2, 4, \dots$.

Из второго уравнения системы (5) находим, что $u^{2,0} = 0$.

На этом решение задачи в первом приближении заканчивается. Все граничные условия удовлетворяются. Так как $u^{2,0} = 0$, то невязка в граничных условиях по нормальным напряжениям σ_1 при $\xi = 0, \xi = h$ отсутствует и, следовательно, решения следующего приближения оказываются нулевыми [1]. Поэтому, если ограничиться первыми двумя приближениями, то компоненты напряженно-деформированного состояния определяются по формулам

$$u = u^{1,0}; v = v^{1,0} + v^{2,0}; \sigma_1(\xi, \eta) = B_1 (R_0 e^{\xi})^{-1} u_{\xi}^{1,0};$$

$$\sigma_2(\xi, \eta) = B_2 (R_0 e^{\xi})^{-1} v_{\eta}^{2,0},$$

$$\tau(\xi, \eta) = G (R_0 e^{\xi})^{-1} (u_{\eta}^{1,0} + v_{\xi}^{2,0}); \quad (15)$$

усилие в стрингере

$$N(\xi) = EF (R_0 e^{\xi})^{-1} u_{\xi}^{1,0} \quad (\eta = 0),$$

а контактное усилие взаимодействия между стрингером и пластиной

$$T(\xi) = G (R_0 e^{\xi})^{-1} u_{\eta}^{1,0} \quad (\eta = 0),$$

где $u^{1,0}, v^{1,0}, v^{2,0}$ задаются соотношениями (9), (10) и (14).

Рассмотрим некоторые частные случаи. Функция $u^{1,0}(\xi, \eta)$ (9) может быть записана в виде

$$u^{1,0}(\xi, \eta) = -\frac{P_0 R_0}{EF} \frac{\omega(\gamma - \eta)}{gh} - \frac{2 P_0 R_0}{\pi EF} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f(s_n, \eta) \cos(s_n \xi)}{\varphi(s_n)} \Delta s_n,$$

где $s_n = n\pi/h$, $\Delta s_n = \pi/h$, $f(s_n, \eta) = sh[\omega s_n(\gamma - \eta)] / sh(\omega s_n \gamma)$.

При $h \rightarrow \infty$ ($R_1 \rightarrow \infty$) первый член в правой части последнего равенства стремится к нулю. При любом фиксированном h второе слагаемое есть функция от s_n , принимающего значение от π/h до ∞ . Поэтому, при $h \rightarrow \infty$ получим

$$u^{1,0}(\xi, \eta) = -\frac{2 P_0 R_0}{\pi EF} \int_0^{\infty} \frac{f(\eta, s) \cos(\xi s)}{\varphi(s)} ds, \quad (16)$$

где $f(\eta, s) = sh[\omega(\gamma - \eta)s] / sh(\omega \gamma s)$, $\varphi(s) = s^2 + gs \operatorname{cth}(\omega \gamma s)$.

Выражение (16) соответствует решению задачи для полубесконечного кругового сектора.

Аналогично можно показать предельный переход для функции $v^{2,0}$ (14).

Если пластина работает только на сдвиг ($\omega \rightarrow 0$), то из равенства (9) производные $\partial u^{1,0} / \partial \xi$; $\partial u^{1,0} / \partial \eta$ могут быть записаны следующим образом:

$$\frac{\partial u^{1,0}}{\partial \xi} = \frac{P_0 R_0}{EF} \frac{\gamma - \eta}{\gamma} \frac{sh[g_*(h - \xi)]}{sh(g_* h)}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial u^{1,0}}{\partial \eta} = \frac{P_0 R_0}{EF} \frac{1}{\gamma g_*} \frac{ch[g_*(h - \xi)]}{sh(g_* h)}, \quad (18)$$

где $g_*^2 = 2G/(\gamma EF)$, причем здесь использованы формулы из [8].

Усилие в стрингере $N(\xi) = EF(R_0 e^{\xi})^{-1} u_{\xi}^{1,0} \Big|_{\eta=0}$ удовлетворяет граничным условиям при $\xi = 0$ и $\xi = h$, а контактное усилие взаимодействия между стрингером и пластиной $T(\xi) = G(R_0 e^{\xi})^{-1} u_{\eta}^{1,0} \Big|_{\eta=0}$, естественно, не имеет особенности в точке $\xi = 0$.

При $h \rightarrow \infty$ усилие в стрингере и контактное усилие взаимодействия находятся по формулам $N(\xi) = P_0 e^{-(1+g_*)\xi}$, $T(\xi) = P_0 G / (\gamma g_* EF) e^{-(1+g_*)\xi}$, которые соответствуют аналогичной задаче для полубесконечного кругового сектора.

Определение характера напряженного состояния в окрестности линии $\xi = 0$ в исходной постановке задачи сводится к анализу решения (16) при больших значениях параметра s . В этом случае

$$sh[\omega(\gamma - \eta)s] \sim e^{\omega \gamma s} e^{-\omega \eta s}, \quad sh(\omega \gamma s) \sim e^{\omega \gamma s}; \quad \operatorname{cth}(\omega \gamma s) \sim 1, \quad ch[\omega(\gamma - \eta)s] \sim e^{\omega \gamma s} e^{-\omega \eta s},$$

а производные $\partial u^{1,0} / \partial \xi$; $\partial u^{1,0} / \partial \eta$ из равенства (16) принимают вид

$$\frac{\partial u^{1,0}}{\partial \xi} = \frac{2 P_0 R_0}{\pi EF} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\omega \eta s} \sin \xi s}{s + g} ds; \quad (19)$$

$$\frac{\partial u^{1,0}}{\partial \eta} = \frac{2 P_0 R_0 \omega}{\pi EF} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\omega \eta s} \cos \xi s}{s + g} ds. \quad (20)$$

В частности, при $\eta = 0$ после вычисления интегралов в (19),(20) [8] получим

$$N(\xi) = 2P_0 (\pi e^{\xi})^{-1} [\sin(g\xi) \operatorname{ci}(g\xi) - \cos(g\xi) \operatorname{si}(g\xi)]; \quad (21)$$

$$T(\xi) = 2P_0 G \omega (\pi E F e^{\xi})^{-1} [-\sin(g\xi) \operatorname{si}(g\xi) - \cos(g\xi) \operatorname{ci}(g\xi)], \quad (22)$$

где $\operatorname{si}(x)$ и $\operatorname{ci}(x)$ – соответственно интегральные синус и косинус, причем выражение в квадратных скобках равенства (21) при $\xi = 0$ равно $\pi/2$ [8], а контактное усилие $T(\xi)$ при $\xi = 0$ имеет логарифмическую особенность, так как интегральный косинус $\operatorname{ci}(x)$ при $x=0$ имеет эту особенность [9].

Полученная в решении (22) особенность является первым членом разложения точной по параметру $\varepsilon = G/B_1$ [1, 2]. Поэтому соотношение (22) справедливо лишь вне некоторой окрестности точки $\xi = 0, \eta = 0$. Характер же точной особенности известен [4], неизвестным остается лишь коэффициент при этой особенности. Этот коэффициент может быть найден из условий «срачивания» точного особого решения с решением (22). Условия «срачивания» в простейшем случае могут быть сформулированы следующим образом: в некоторой точке области контакта должны совпадать как приближенное и особое решения, так и их производные. Эти условия дают возможность определить точку срачивания двух решений и коэффициент особого. Оказывается, что решение (22) несправедливо лишь в очень малой окрестности особой точки.

При $\eta = \gamma$ интеграл в соотношении (20) дает интегральную показательную функцию $Ei(x)$ [8], которая при $x=0$ имеет логарифмическую особенность [9]. Поэтому и при $\eta = \gamma$ касательное напряжение τ в окрестности точки $\xi = 0$ имеет логарифмическую особенность.

Выводы. С помощью асимптотического метода разложения по малому параметру получено решение поставленной контактной задачи в первых приближениях, проведен анализ полученных результатов, указаны законы распределения усилий в стрингере, контактных усилий взаимодействия между стрингером и пластиной, напряжений в пластине, а также поведения решений вблизи особых точек.

РЕЗЮМЕ

У даній роботі розглядається взаємодія стрингера з пружною ортотропною пластинною кінцевих розмірів з циліндричною анізотропією. Для розв'язання задачі використовується асимптотичний метод, який дозволяє розщепити напружено-деформівний стан пластини на дві складові, причому кожна з них знаходиться при послідовному розв'язанні крайових задач теорії потенціалу.

Ключові слова: асимптотичний метод, анізотропний матеріал, передача навантаження.

SUMMARY

In the given work interaction of a stringer with an elastic orthotropic plate of final sizes with cylindrical anisotropy is considered. For its solution the asymptotic method which allows splitting the intense-deformed condition of a plate on two components is used, and each of them is at a sequential solution of boundary value problems of a potential theory.

Keywords: asymptotic method, anisotropic material, transmission of loading.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Маневич Л. И. Асимптотические методы в теории упругости ортотропного тела / Л. И. Маневич, А. В. Павленко, С. Г. Коблик. – Киев-Донецк: Вища школа. – 1982. – 152 с.
2. Маневич Л. И. Асимптотический метод в микромеханике композиционных материалов / Л. И. Маневич, А. В. Павленко. – Киев: Вища школа. – 1991. – 131 с.
3. Гузь А. Н. Контактное взаимодействие упругих штампа и полупространства с начальными (остаточными) напряжениями / А. Н. Гузь, Т. В. Рудницкий // Прикладная механика. – 2007. – Т. 43, № 12. – С. 28-40.
4. Александров В. М. Аналитические методы в контактных задачах теории упругости / В. М. Александров, М. И. Чебаков. – М.: Физматлит. – 2004. – 132 с.
5. Контактные задачи теории упругости для неоднородных сред / С. М. Айзикович, В. М. Александров, А. В. Белоконь и др. – М.: Физматлит. – 2006. – 240 с.
6. Острик В. І. Вдавлювання пружного клиноподібного індентора в пружний півпростір / В. І. Острик, А. Ф. Улітко, І. А. Улітко // Вісн. Київського нац. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки. – 2009. – № 1. – С. 63-66
7. Ворovich И. И. Механика контактных взаимодействий / И. И. Ворovich, В. М. Александров. – М.: Физматлит. – 2001. – 152 с.
8. Градштейн И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. – М.: Наука – 1971. – 1108 с.
9. Янке Е. Специальные функции (формулы, графики, таблицы) / Е. Янке, Ф. Емде, Ф. Леш. – М.: Наука. – 1968. – 344 с.

Поступила в редакцию 28.04.2010 г.

УДК 539.374

МЕТОДИКА РАСЧЕТА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ КОРПУСА ПОРОХОВОЙ ГИДРОПУШКИ

О. А. Русанова, А. Н. Семко

Предложена методика расчета напряженно-деформированного состояния корпуса пороховой гидропушки, которая учитывает упруго-пластические деформации, динамику процесса и кавитацию жидкости. При конструировании гидропушек с заданной формой сопла на первом этапе рассчитывается давление жидкости на поверхность сопла в разные моменты времени. Из гидродинамического расчета определяется поле давления и его максимальное значение в процессе выстрела, по величине которого делается оценка внешнего радиуса корпуса гидропушки. На втором этапе в стационарной постановке по заданному давлению рассчитывается напряженно-деформируемое состояние корпуса гидропушки с помощью пакета ANSYS. На третьем этапе проводится динамический расчет напряженно-деформированного состояния корпуса гидропушки численным методом с искусственной вязкостью с учетом упруго-пластических деформаций и нестационарной кавитации. На основании этого расчета делается окончательный вывод о геометрических размерах корпуса гидропушки.

Ключевые слова: импульсные струи жидкости, гидропушка, напряженно-деформированное состояние, численные методы, метод с искусственной вязкостью.

Введение. Импульсные и пульсирующие высокоскоростных струи жидкости имеют много практических приложений и хорошие перспективы дальнейшего использования. В частности они используются для высокоскоростной резки металлов, при обработке труднообрабатываемых материалов, фрагментации, разрушении горных пород. Все перечисленное становится возможным благодаря большому кратковременному давлению импульсной струи.

Наиболее распространенной конструкцией для получения импульсных высокоскоростных струй жидкости является гидропушка. При выстреле в гидропушке создается высокое давление, которое приводит к возникновению напряжений в корпусе близких к пределу прочности [1-3]. Например, давление в корпусе гидропушки [4] составляет 1,4 ГПа, динамическое давление головы струи – 5,6 ГПа, скорость водяной струи – 3000 м/с.

Импульсные технологии не получили широкого распространения по причине низкой мобильности и надежности, что является следствием пренебрежения при расчетах импульсным характером процессов, динамикой, упруго-пластическими деформациями. В данной работе приводится методика расчета напряжений в корпусе пороховой гидропушки, которая учитывает упруго-пластические деформации, динамику процесса и кавитацию жидкости.

Математическая модель пороховой гидропушки. Характерной особенностью выстрела гидропушки традиционной конструкции с поршневым приводом является резкое уменьшение скорости истечения струи сразу же после начала истечения. В экспериментах было обнаружено, что струя пороховой гидропушки эффективно разрушает преграду и имеет большую дальность, что позволяет расширить применение пороховой гидропушки, которая является объектом исследования в настоящей работе.

Пороховая гидропушка по сравнению с пневматической обладает следующими существенными преимуществами: простота конструкции, малые габариты и масса, большая удельная мощность, обусловленная компактным источником энергии, и возможность существенного увеличения дальности. Источником энергии в пороховой гидропушке являются продукты сгорания пороха. Пороховая гидропушка (рис. 1) состоит из камеры сгорания 1, цилиндрического ствола 3, в котором между пыжами 6 находится водяной заряд 2, сужающегося сопла 4, которое заканчивается цилиндрическим коллиматором 5. Процесс в такой гидропушке начинается с момента воспламенения пороха с помощью капсюля 7. Пороховые газы приводят в движение водяной заряд и разгоняют его в стволе. При втекании в сужающееся сопло вода продолжает ускоряться, увеличивая скорость многократно, и истекает наружу с большой скоростью. Обычно сопло заканчивается коллиматором – цилиндрическим участком, который служит для стабилизации струи и выравнивания скорости по ее длине.

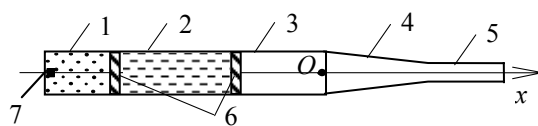


Рис. 1. Пороховая гидропушка

Математическая модель пороховой гидропушки обычно строится при следующих допущениях:

- жидкость считается идеальной и сжимаемой, вязкостью, теплопроводностью и радиальным течением пренебрегается (квазиодномерное приближение) [1, 5];
- влияние пыжей не учитывается;
- граница раздела “пороховые газы - вода” считается плоской в течение всего выстрела.

За начальный принимается момент воспламенения пороха. Начало координат расположено у входа в сопло, ось x направлена вдоль оси установки.

В принятой постановке квазиодномерное движение воды в пороховой гидропушке описывалось системой уравнений нестационарной газовой динамики [5, 6]

$$\frac{\partial \rho F}{\partial t} + \frac{\partial \rho v F}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho v F}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v^2 + p) F}{\partial x} = p \frac{dF}{dx}, \quad (1)$$

$$p = B \left[(\rho / \rho_0)^n - 1 \right]$$

с начальными и граничными условиями

$$v(0, x) = 0, \quad p(0, x) = 0, \quad \rho(0, x) = \rho_0, \quad x_{g0} \leq x \leq x_{f0}; \quad (2)$$

$$p(t, x_f) = 0, \quad p(t, x_g) = p_g, \quad v(t, x_g) = v_g, \quad (3)$$

где t – время, x – координата, v – скорость, F – площадь поперечного сечения сопла, p и ρ – давление и плотность, $B = 304,5$ МПа, $n = 7,15$, $\rho_0 = 1$ г/см³ – постоянные в уравнении состояния воды в форме Тэта, x_{g0} , x_{f0} и x_g , x_f – начальные и текущие координаты контактной и свободной поверхностей, p_g и v_g – давление и скорость пороховых газов на контактной поверхности.

Горение пороха рассматривалось в квазистационарном приближении при допущениях, характерных для задач внутренней баллистики в артиллерии [8]:

- порох воспламеняется мгновенно и горит адиабатически параллельными слоями по геометрическому закону;
- химический состав продуктов сгорания постоянный;
- параметры продуктов сгорания одинаковые по объему и связаны упрощенным уравнением Ван-дер-Ваальса, учитывающим только собственный объем молекул.

Система уравнений и начальные условия, описывающие квазистационарное горение пороха, имеют вид

$$\frac{dz}{dt} = \frac{u_1 p_g}{h_1}, \quad Q_g = m_{p0} \chi_1 \sigma(z) \frac{u_1 p_g}{h_1},$$

$$\frac{1}{k-1} \frac{d(p_g V_g)}{dt} + p_g F u_g = q Q_g, \quad (4)$$

$$\frac{dV_g}{dt} = Q_g (1/\rho_p - \alpha) + v_g F, \quad v_g = \frac{dx_g}{dt},$$

$$z = 0, \quad V_g = V_{g0}, \quad p_g = p_{g0}, \quad x_g = x_{g0}.$$

Здесь h_1 – половина толщины порохового зерна; z – толщина сгоревшего слоя, отнесенная к h_1 ; u_1 – постоянная скорости горения; p_g – давление пороховых газов; Q_g – скорость прихода пороховых газов; χ_1 и $\sigma(z)$ – коэффициент и функция, зависящие от формы порохового зерна; например, для зерна трубчатой формы $\chi_1 = 1 + h_1/c$, $\sigma(z) = 1 - 2h_1 z / (c + h_1)$; c – половина длины порохового зерна; α – коэффициент (поправка на собственный объем молекул); m_{p0} – начальная масса пороха; k – показатель адиабаты пороховых газов; q и ρ_p – удельная теплота сгорания и плотность пороха; V_g – объем пороховых газов; V_{g0} , p_{g0} – параметры газа после срабатывания воспламенителя.

Осесимметричное напряженно-деформируемое состояние корпуса гидропушки описывается следующими уравнениями в лагранжевой форме

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\sigma_{xy}}{y} = \rho \ddot{x}, \quad \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\sigma_{yy} - \sigma_{\theta\theta}}{y} = \rho \ddot{y},$$

$$\sigma_{xx} = -p + s_{xx}, \quad \sigma_{yy} = -p + s_{yy}, \quad \sigma_{\theta\theta} = -p + s_{\theta\theta},$$

$$\frac{\dot{V}}{V} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + \frac{\partial \dot{y}}{\partial y} + \frac{\dot{y}}{y}, \quad \dot{E} = -p \dot{V} + V (s_{xx} \dot{\epsilon}_{xx} + s_{yy} \dot{\epsilon}_{yy} + s_{\theta\theta} \dot{\epsilon}_{\theta\theta} + \sigma_{xy} \dot{\epsilon}_{xy}), \quad (5)$$

$$\dot{s}_{xx} = 2\mu \left(\dot{\epsilon}_{xx} - \frac{1}{3} \frac{\dot{V}}{V} \right) + \delta_{xx}, \quad \dot{s}_{yy} = 2\mu \left(\dot{\epsilon}_{yy} - \frac{1}{3} \frac{\dot{V}}{V} \right) + \delta_{yy}, \quad \dot{s}_{xy} = 2\mu \left(\dot{\epsilon}_{xy} - \frac{1}{3} \frac{\dot{V}}{V} \right),$$

$$\dot{\epsilon}_{xx} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial x}, \quad \dot{\epsilon}_{yy} = \frac{\partial \dot{y}}{\partial y}, \quad \dot{\epsilon}_{\theta\theta} = \frac{\dot{y}}{y}, \quad \dot{\epsilon}_{xy} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{y}}{\partial x},$$

где x, y – осевая и радиальная пространственные координаты, ρ – плотность, V – относительный объем, p – гидростатическое давление, E – внутренняя энергия на единицу объема, $\sigma_{ii}, s_{ii}, \varepsilon_{ii}, i = x, y, \theta$ – соответственно полные напряжения, компоненты деватора напряжений и деформации, σ_{xy} – касательное напряжение, δ – поправка на поворот ячейки разностной сетки. Точка над величинами, входящими в уравнения, означает производную по времени вдоль траектории частицы.

Данная система уравнений замыкается уравнением состояния в форме Тэта

$$p = nB(\rho/\rho_0 - 1) + e(n-1)\rho,$$

где B – постоянная Тэта, n – показатель адиабаты, ρ_0 – плотность при нормальных условиях.

Будем считать, что при выполнении неравенства Мизеса, материал переходит в пластическую стадию, а эквивалентные напряжения становятся равными пределу текучести и остаются постоянными при выполнении указанного условия

$$\sigma_{eq} = \sqrt{1/2((\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_2)^2)} \leq [\sigma], \quad (6)$$

$\sigma_i, i = 1, 2, 3$ – главные напряжения, $[\sigma] = 1520$ МПа – предел текучести.

Методика расчета параметров гидропушки. Данная методика предназначена для расчета напряженно-деформированного состояния корпуса гидропушки или других гидроимпульсных устройств при неоднородных динамических нагрузках, с заданной геометрией проточной части установки и максимальных значениях гидродинамических параметров. Методика расчета основана на математической модели, приведенной в предыдущем пункте, и учитывает упруго-пластические деформации, динамику процесса, кавитацию жидкости и справедлива в рамках нелинейной теории упругости. Данная методика позволяет получить поля всех главных и эквивалентных напряжений, интенсивность напряжений, а также распределение давления жидкости по длине установки и скорость истечения струи в любой момент времени. Результаты расчетов могут быть использованы для рационального конструирования гидроимпульсных устройств.

При конструировании гидроимпульсных устройств на первом этапе рассчитываются гидродинамические параметры и определяется давление воды на поверхность сопла и ствола установки в разные моменты времени. По этим расчетам определяется максимальное давление воды в процессе выстрела, по которому делается оценка внешнего радиуса корпуса гидропушки на основании теории сопротивления материалов для толстостенного цилиндра. Кроме того, находится распределение давления по поверхности установки на этот момент. На втором этапе в стационарной постановке рассчитывается напряженно-деформированное состояние корпуса установки при помощи пакета ANSYS по распределению давления и размерам корпуса, полученным на предыдущем этапе. Расчетные значения напряжений сравниваются с пределом текучести материала корпуса. На основании этого анализа корректируются внешние размеры корпуса конструкции, и проводится повторный расчет напряженного состояния.

На третьем этапе проводится динамический расчет напряженно-деформированного состояния корпуса установки численным методом с искусственной вязкостью с учетом упруго-пластического характера деформации и нестационарной кавитации. На основании этого расчета делается окончательное заключение о размерах устройства.

Для расчета гидродинамических параметров гидропушки нужно задать длину разгона водяного заряда, массу воды, длину водяного заряда, координаты свободной поверхности воды и границы газ-вода. Кроме того, следует задать показатель адиабаты, плотность при нормальных условиях и постоянную Тэта для воды, а также критические значения плотности и давления при которых возникает кавитация. Для построения геометрии проточной части установки необходимы значения координат узловых точек сопла, радиусы ствола и частей сопла, длина частей сопла и коллиматора.

По заданным значениям координат вычисляются объем и плотность

$$\Delta V_{i+1/2} = \frac{\Delta x_{i+1/2}}{3} (F_i + F_{i+1} + \sqrt{F_i \cdot F_{i+1}}),$$

$$\rho_i^j = \frac{(\rho \Delta V)_{i-1/2}^j + (\rho \Delta V)_{i+1/2}^j}{\Delta V_{i-1/2}^j + \Delta V_{i+1/2}^j}.$$

где F_i – площадь поперечного сечения.

Искусственная вязкость определяется по формуле

$$q_{i+1/2}^{j+1/2} = \begin{cases} \rho_{i+1/2}^{j+1/2} \left(\lambda_1 a_{i+1/2}^{j+1/2} |u_{i+1}^{j+1/2} - u_i^{j+1/2}| + \lambda_2 (u_{i+1}^{j+1/2} - u_i^{j+1/2})^2 \right), & u_{i+1}^{j+1/2} - u_i^{j+1/2} \geq 0; \\ 0, & u_{i+1}^{j+1/2} - u_i^{j+1/2} < 0; \end{cases}$$

Тогда давление и энергия определяются соответственно как

$$e_{i+1/2}^{j+1} = e_{i+1/2}^j - \Delta t^j \left(\frac{p+q}{\rho} \right)_{i+1/2}^j \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{u_{i+1} + u_i}{2\Delta x_{i+1/2}} \ln \frac{F_{i+1}}{F_i} \right)_{i+1/2}^{j+1/2},$$

$$p_{i+1/2}^{j+1} = \begin{cases} n_{жид} B_{жид} \left(\rho_{i+1/2}^{j+1} / \rho_{0жид} - 1 \right) + (n_{жид} - 1) \rho_{i+1/2}^{j+1} e_{i+1/2}^{j+1}, & \rho_{i+1/2}^{j+1} \geq \rho_{kr}; \\ p_{kr}, & \rho_{i+1/2}^{j+1} < \rho_{kr}. \end{cases}$$

Используя, полученные значения находим скорости и координаты как

$$u_i^{j+1} = u_i^j - 2\Delta t^j \frac{(p+q)_{i+1/2}^j - (p+q)_{i-1/2}^j}{(x_{i+1} - x_{i-1})\rho_i^j},$$

$$x_i^{j+1} = x_i^j + u_i^{j+1/2} \Delta t^j, \quad \rho_{i+1/2}^{j+1} = \rho_{i+1/2}^j \frac{\Delta x_{i+1/2}^j}{\Delta x_{i+1/2}^{j+1}}.$$

Здесь ρ_i^n – плотность, отнесенная к основному узлу i , которая определяется как среднее с весом; $\Delta V_{i+1/2}$ – объем ячейки в форме усеченного конуса. Оптимальные значения коэффициентов линейной и квадратичной вязкости, подобранные экспериментально для гидропушки, равны $\lambda_1 = 3$ и $\lambda_2 = 10$.

Далее необходимо провести расчет напряженно-деформированного состояния корпуса гидропушки при помощи программы ANSYS/Structural. На данном этапе производится предварительная оценка параметров конструкции гидропушки по стационарному распределению давления, полученного при гидродинамическом расчете.

Расчет гидропушки в программном комплексе ANSYS для пользователей имеющих опыт работы с этой программой не представляет особых трудностей. В виду симметрии данную задачу удобно решать в осесимметричной постановке. Заметим, что в качестве элемента рекомендуется выбрать PLANE82, который позволяет решать задачи в такой постановки, и кроме этого обладает свойствами пластичности. Кроме того, данный элемент обладает более чем одной формой, что позволяет создать преимущественно прямоугольную сетку и использовать треугольные элементы, там, где это сделать невозможно. Для того, что бы задать переменное по координате давление удобно воспользоваться функцией в виде *SET,PAR, координата, величина давления. В результате расчета можно получить поле напряжений по Мизесу (6).

Расчетные значения напряжений сравниваются с пределом текучести материала корпуса. Определяются зоны, в которых эквивалентные напряжения далеки от предела текучести, и внешние размеры корпуса в местах расположения этих зон уменьшается. Таким способом корректируются внешние размеры гидроимпульсной установки, и осуществляется оптимизация ее массогабаритных параметров. Проводится повторный расчет напряженного состояния.

Затем выполняется расчет напряженно-деформированного состояния корпуса гидропушки при помощи численного метода с искусственной вязкостью. На этом этапе проводится расчет конструкции гидропушки с размерами, определенными в предыдущем пункте, с учетом упруго-пластических деформаций, импульсного характера нагрузки и нестационарной кавитации.

Для расчета напряженно-деформированного состояния необходимо задать следующие постоянные: показатель адиабаты, плотность материала при нормальных условиях, постоянную Гэта для материала конструкции, модуль сдвига, коэффициент Пуассона, предел текучести. Аппроксимация уравнений (5) проводится так же как описано в пункте 2.1 [9].

Поля главных напряжений по Мизесу и интенсивности напряжений удобно анализировать, если результаты представлены в графическом виде. Для этого используется пакет MatLab 7. На основании данных расчета делается заключение о дальнейшей возможности изменения параметров конструкции. Для того, что бы убедиться в безопасности полученной конструкции, необходимо повторить описанную в этом пункте процедуру для измененной геометрии и после анализа полученных результатов сделать окончательный вывод о надежности конструкции.

Анализ результатов расчета. Для примера рассмотрим пороховую гидропушку, описанную в [10]. Процессы в гидропушке начинаются с момента воспламенения пороха. Пороховые газы приводят в движение водяной заряд, появляется давление в жидкости, которое вызывает напряжения в корпусе. На основании гидродинамического расчета были получены распределения давления по длине установки на различные моменты времени. Наибольшие давления возникают в моменты времени 0,7-0,75 мс, максимальное давление достигает величины порядка 1400 МПа (рис. 2).

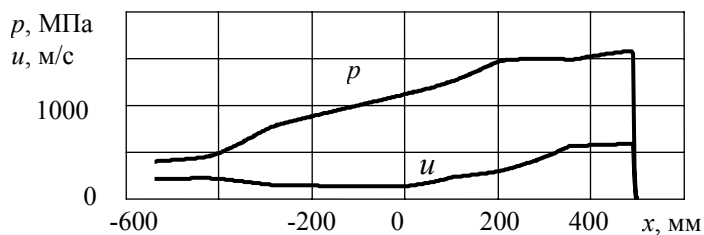


Рис. 2. Распределение давления и скорости истечения вдоль длины установки, $t = 0,75$

Далее, проведем расчет напряженно-деформированного состояния корпуса гидропушки, считая, что в любой момент времени распределение давления имеет вид, приведенный на рис. 2, т.е. по максимально-стационарному распределению давления, полученному на основании гидродинамического расчета течения внутри гидропушки. Результаты расчетов, полученные с помощью коммерческого пакета ANSYS, показывают, что максимальные напряжения, возникающие в корпусе, равны 1050 МПа. Зона с большими напряжениями незначительна, и казалось бы можно под корректировать внешние размеры. Однако, динамический расчет приведенный на рис. 3, показывает, что напряжения, полученные по статическому распределению меньше максимального значения напряжения при динамическом расчете на 30 %.

Зона с опасными напряжениями, по статическому расчету, также меньше зоны при динамическом

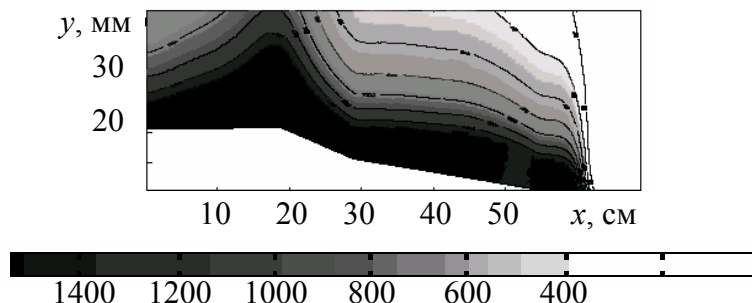


Рис. 3. Динамический расчет методом с искусственной вязкостью, $t = 0,75$ мс

расчете. На данном примере, наглядно видна необходимость учета динамики процесса.

Заключение. В данной работе приведена методика расчета напряжений корпуса пороховой гидропушки, которая учитывает упруго-пластические деформации, динамику процесса и кавитацию жидкости. На основании данной методики рассчитана пороховая гидропушка широкого спектра действия. Показана работоспособность алгоритма и обоснована необходимость учета динамики процесса.

РЕЗЮМЕ

Методика розрахунку порохової гідрогармати, яка враховує пружно-пластичні деформації, динаміку процесу та кавітацію рідини представлена у даній роботі. Для конструювання гідроімпульсних приладів з заданою формою проточної частини на першому етапі розраховується тиск води на внутрішню поверхню приладу на різні моменти часу. Визначається максимальний тиск води у процесі вистрілу, по якому робиться оцінка зовнішнього радіуса на підставі формул опору матеріалів для товстостінного циліндру. Також, знаходиться розподіл тиску на поверхню установки на цей момент часу. На другому етапі у стаціонарній постановці розраховуються напружено-деформований стан за допомогою пакету ANSYS за розподілом тиску і розмірами корпусу, які отримані на попередньому етапі. На третьому етапі проводиться динамічний розрахунок напружено-деформованого стану чисельним методом зі штучною в'язкістю з урахуванням пружно-пластичних деформацій і нестационарної кавітації. На підставі цього розрахунку робиться остаточний висновок про розміри пристрою.

Ключові слова: гідрогармата, напружено-деформований стан, методом зі штучною в'язкістю.

SUMMARY

The principles of calculation of powder hydrocannon are presented. For design of hydrocannon devices for given form of running part on the first stage the pressure of the water on inside surface of devise is calculated at different time. The maximum value of pressure during the shot is determined and the approximate value of outer radius is calculated on the basis of the strength of materials theory. On the second stage the deflected mode is defined by ANSYS according to stationary distributing of pressure and radius which obtained earlier. When the correction of the dimensions are done. And finally, the dynamic calculation of the deflected mode is realised by numerical method with artificial viscosity taking into account plasto-elastic deformation, the dynamic of the process, cavitation of the liquid. The experimental hydrocannon is elaborated.

Keywords: hydrocannon, deflected mode, method with artificial viscosity.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Атанов Г. А. Гидроимпульсные установки для разрушения горных пород / Г. А. Атанов – К.: Вища школа, 1987. – 155 с.
2. Прочностной расчет и оптимизация ствола пороховой гидропушки / Е. С. Гескин, О. П. Петренко, О. А. Русанова, А. Н. Семко // Проблемы прочности. – 2006. – № 2. – С. 137-146.
3. Семко А. Н. Расчет течения жидкости в гидропушке численным методом с искусственной вязкостью / А. Н. Семко // Прикладная гидромеханика. – 2000. – Т. 2, № 74. – С. 88-91.
4. Cooley W. C. Advances in the technology of fluid jets: past, present and targets for the 21st century / W. C. Cooley // Proc. of the 5th Pacific Rim International Conference on Water Jet Technology, WJTSJ. – Tokyo (Japan). – 1998. – P. 1-8.
5. Атанов Г. А. Внутренняя баллистика пороховой гидропушки / Г. А. Атанов, А. Н. Губский, А. Н. Семко // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. – 1997. – № 6. – С. 191-194.
6. Atanov G. A. The powder water cannon / G. A. Atanov, A. N. Semko // Proc. of the Int. Summer Science School on High-Speed Hydrodynamics (HSH 2002). – Cheboksary (Russia), Washington (USA). – 2002. – P. 419-424.
7. Glenn L. A. The mechanics of the impulsive water cannon / L. A. Glenn // Comp. Fluids. – 1975. Vol. 3. – P. 197-215.
8. Peculiarities of the powder water cannon operation / G. A. Atanov, A. N. Semko, O.P. Petrenko et al. // Proc. of the ASME Int. Mechanical Engineering Congress & Exp. – Washington (USA). – 2003. – P. 1-11.
9. Уилкинс М. Л. Расчет упруго пластических течений / М. Л. Уилкинс // Вычислительные методы в гидродинамике. – М.: Мир, 1967. – С. 212-263.
10. Пороховая гидропушка широкого спектра действия / Г. А. Атанов, Э. С. Гескин, А. Н. Ковалев, А. Н. Семко // Прикладная гидромеханика. – 2004. – Т. 6 (78), № 3. – С. 3-9.

Поступила в редакцию 14.05.2010 г.

УДК 539.3

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ КОЛЕБАНИЯ КРУГЛОГО АСИММЕТРИЧНОГО БИМОРФА ПРИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

И. В. Янчевский

Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет

Представлен численно-аналитический метод решения задачи о колебаниях тонкого биморфа (металл-пьезокерамика) при нагружении нестационарным электрическим потенциалом. Постановка задачи выполнена в рамках теории Кирхгофа. Решение построено с использованием интегрального преобразования Лапласа по времени. Рассмотрена также обратная задача по определению электрического сигнала как функции времени для обеспечения заданного движения преобразователя, при решении которой используется регуляризирующий алгоритм Тихонова. Результаты, достоверность которых оценена путем сопоставления с конечно-элементными решениями, проиллюстрированы графическим материалом.

Ключевые слова: электроупругость, асимметричный биморф, пьезоактюатор, нестационарные колебания, преобразование Лапласа.

Введение. Дисковые асимметричные биморфы, состоящие из поляризованного по толщине пьезоэлемента и жестко соединенной с ним пьезопассивной подложки, благодаря высоким эксплуатационным параметрам и низкой стоимости находят широкое применение в современной аппаратуре в качестве пьезоактюаторов [1, 2]. В частности, в технических устройствах, работающих в режиме реального времени, где механические приводы неприемлемы. Это объясняет повышенный интерес к научным исследованиям поведения биморфов, использующих обратный пьезоэлектрический эффект.

В статьях [3, 4] получены уравнения колебаний сплошных и слойно-ступенчатых дисковых биморфов, а также построены их решения в случае периодических во времени процессов. В работах [1, 2] рассмотрены задачи по формированию заданной формы биморфа, пьезоэлемент которого имеет секционированное электродное покрытие. При этом предполагается, что управление реализуется подведением к различным его секциям соответствующих электрических напряжений. Однако актуальными являются также задачи, сформулированные в нестационарной постановке, что обусловлено расширением функциональных возможностей актюаторов при их работе в переходных режимах. Для тонких преобразователей биморфной структуры типа металл-пьезокерамика при их возбуждении нестационарным электрическим сигналом известными являются задачи для полосы и балки [5–7]. В настоящей работе исследуются колебания двухслойного электроупругого диска при импульсном электрическом его нагружении.

Постановка задачи. Рассматривается биморфная пластина радиуса R , состоящая из слоя пьезокерамики толщиной h_p и жестко сцепленной с ним подложки толщиной h_m . Пьезоэлемент поляризован по толщине и имеет бесконечно тонкие сплошные электродированные покрытия. Пластина шарнирно оперта вдоль контура. Начальные условия – нулевые. Деформирование пластины происходит при подаче к электродам известной разности потенциалов $V(t)$, при этом потенциал на внутреннем электроде равен нулю.

Математическая модель. Предполагается, что рассматриваемая механическая система является тонкостенной ($h_p + h_m \ll R$) и при моделировании ее движения оправдано привлечение кинематических гипотез Кирхгофа-Лява для двухслойного пакета в целом и адекватной им гипотезы о постоянстве по толщине пьезоэлемента нормальной составляющей вектора электрической индукции [3, 4]. В результате осесимметричные колебания пластины описываются дифференциальным уравнением [1, 3]

$$\nabla^2 \nabla^2 w + \frac{\partial^2 w}{\partial \tau^2} = 0, \quad (1)$$

где w – нормальная составляющая вектора перемещений точек поверхности приведения ($z=0$); $\nabla^2 = \partial^2 / \partial \chi^2 + \chi^{-1} \partial / \partial \chi$ – оператор Лапласа; $\chi = r/R$ и $\tau = t \sqrt{D/CR^4}$ – безразмерные координата и время, $C = \rho_p h_p + \rho_m h_m$ (ρ_j – плотности материалов, образующих биморф).

Кроме однородных начальных условий, на границе пластины заданы однородные граничные условия, по форме совпадающие с граничными условиями при изгибе упругих шарнирно-опертых пластин:

$$w|_{\chi=1} = 0; \quad M|_{\chi=1} = \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \chi^2} + \nu_0 \frac{1}{\chi} \frac{\partial w}{\partial \chi} \right) \Big|_{\chi=1} + \alpha_0 V = 0, \quad (2)$$

где ν_0 и $\alpha_0 = (z_0 - h_p/2)dR^2/D$ – эффективный коэффициент Пуассона и управляющий коэффициент [1]. Отметим, что изгибающий момент в условии (2) отнесен к $-D/R^2$.

Поверхность приведения [3] выбрана на расстоянии $z_0 = \frac{B_{11}h_p^2 - A_{11}h_m^2}{2(B_{11}h_p + A_{11}h_m)}$ от границы контакта

элементов, где обозначения A_{11} и B_{11} , наряду с ν_0 , D и d , заимствованы с работы [1].

Решение задачи. Известно, что биморфные пьезопреобразователи используются преимущественно в области низкочастотных колебаний [4]. Поэтому эффективным является подход, согласно которому в искомом решении для функции w выделяется квазистатическая составляющая w_s [7, 8], удовлетворяющая однородному дифференциальному уравнению $\nabla^2 \nabla^2 w_s = 0$. Ее решение ищется в виде $w_s(\chi, \tau) = A_0(\tau) + A_1(\tau) \cdot \chi^2 + A_2(\tau) \cdot \ln(\chi) + A_3(\tau) \cdot \chi^2 \cdot \ln(\chi)$ [4], который с учетом ограниченности прогибов в центральной точке и первого граничного условия (2) преобразуется к $w_s(\chi, \tau) = A_0(\tau) \cdot (1 - \chi^2)$, где $A_0(\tau)$ – неизвестная функция времени.

Представив динамическую составляющую w рядом Фурье-Бесселя выражение для прогиба поверхности приведения примет вид

$$w(\chi, \tau) = A_0(\tau) \cdot (1 - \chi^2) + \sum_{k=1}^{\infty} A_k(\tau) J_0(\lambda_k \chi), \quad (3)$$

где J_0 – функция Бесселя; λ_k – положительные корни $J_0(z)$, расположенные в порядке возрастания.

Коэффициенты разложения A_k ($k=1, 2, \dots$) должны быть подобраны таким образом, чтобы выражение (3) удовлетворяло уравнению (1). В результате этой подстановки и применения интегрального преобразования Лапласа по времени (s – параметр преобразования) получим

$$A_0^L(s) \cdot s^2 \cdot (1 - \chi^2) + \sum_{k=1}^{\infty} A_k^L(s) (s^2 + \lambda_k^4) J_0(\lambda_k \chi) = 0.$$

Здесь и далее индексом L обозначены соответствующие трансформанты.

С использованием свойства ортогональности цилиндрических функций выражение для коэффициентов $A_k^L(s)$ получено в виде

$$A_k^L(s) = -\frac{4 J_2(\lambda_k)}{\lambda_k^2 J_1^2(\lambda_k)} A_0^L(s) \frac{s^2}{s^2 + \lambda_k^4}.$$

Следовательно, прогиб w (3) в пространстве изображений может быть выражен через коэффициент $A_0^L(s)$:

$$w^L(\chi, s) = A_0^L(s) \cdot \left[(1 - \chi^2) - \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(1)}(\chi) \frac{s^2}{s^2 + \lambda_k^4} \right]. \quad (4)$$

Здесь

$$\Psi_k^{(1)}(\chi) = \frac{4 J_2(\lambda_k) J_0(\lambda_k \chi)}{\lambda_k^2 J_1^2(\lambda_k)}.$$

Решение (4) удовлетворяет дифференциальному уравнению (1) и равенству $w|_{\chi=1} = 0$, а неизвестная трансформанта $A_0^L(s)$ вычисляется на основании второго граничного условия (2). В результате подстановки получено следующее уравнение относительно $A_0^L(s)$:

$$A_0^L(s) \cdot \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(2)} \frac{s^2}{s^2 + \lambda_k^4} \right] = \frac{\alpha_0}{2(1 + \nu_0)} V^L(s), \quad (5)$$

где $\Psi_k^{(2)} = \frac{2}{\lambda_k} \frac{1-\nu_0}{1+\nu_0} \frac{J_2(\lambda_k)}{J_1(\lambda_k)}$; $V^L(s) = L[V(\tau)]$ – изображение заданной в исходных данных разности потенциалов.

В результате инверсии (4) и (5) нормальное перемещение запишется в виде

$$w(\chi, \tau) = A_0(\tau) \cdot \left[(1-\chi^2) - \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(1)}(\chi) \right] + \int_0^{\tau} A_0(\xi) \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(1)}(\chi) \lambda_k^2 \sin(\lambda_k^2(\tau-\xi)) d\xi, \quad (6)$$

где функция $A_0(\tau)$ является решением линейного интегрального уравнения Вольтерра 2-го рода

$$A_0(\tau) \cdot \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(2)} \right] - \int_0^{\tau} A_0(\xi) \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(2)} \lambda_k^2 \sin(\lambda_k^2(\tau-\xi)) d\xi = \frac{\alpha_0}{2(1+\nu_0)} V(\tau). \quad (6'')$$

Полученные результаты позволяют рассмотреть задачу идентификации управляющего электрического сигнала как функции времени для обеспечения заданного закона движения некоторой точки актюатора. Для ее решения равенства (6) удобно представить в матричной форме

$$\begin{aligned} w_{\chi} &= M_w A_0; \\ M_V A_0 &= V, \end{aligned} \quad (7)$$

являющейся дискретным аналогом исходных выражений.

В системе (7) w_{χ} , V и A_0 – m_{\max} -мерные векторы с компонентами, аппроксимирующими соответствующие функции кусочно-постоянными аналогами на интервалах $(\tau_{m-1}; \tau_m)$, где $\tau_m = m \cdot \Delta\tau$ ($m=1 \dots m_{\max}$) – фиксированные узлы временного интервала; $\Delta\tau$ – постоянный шаг разбиения. Элементы нижних треугольных $(m_{\max} \times m_{\max})$ -матриц M_V и M_w с использованием формулы средних прямоугольников определяются согласно следующих равенств:

$$\begin{aligned} (M_w)_{m,p} &= \delta(m-p) \left[(1-\chi^2) - \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(1)}(\chi) \right] + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(1)}(\chi) \lambda_k^2 \sin\left(\lambda_k^2 \left(m-p + \frac{1}{2}\right) \Delta\tau\right) \Delta\tau, \quad (m \geq p); \\ (M_V)_{m,p} &= \frac{2(1+\nu_0)}{\alpha_0} \left[\delta(m-p) \left(1 + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(2)} \right) - \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_k^{(2)} \lambda_k^2 \sin\left(\lambda_k^2 \left(m-p + \frac{1}{2}\right) \Delta\tau\right) \Delta\tau \right], \quad (m \geq p), \end{aligned}$$

где δ – дельта-функция Дирака.

Путем исключения из системы (7) вектора A_0 с учетом коммутативности ее матриц устанавливается непосредственная связь приложенного напряжения с отклонением поверхности преобразователя:

$$M_V w_{\chi} = M_w V. \quad (8)$$

Укажем, что система алгебраических уравнений (8) применима как для решения задачи идентификации, так и для прямой задачи (когда разность потенциалов V задается). При построении устойчивого к

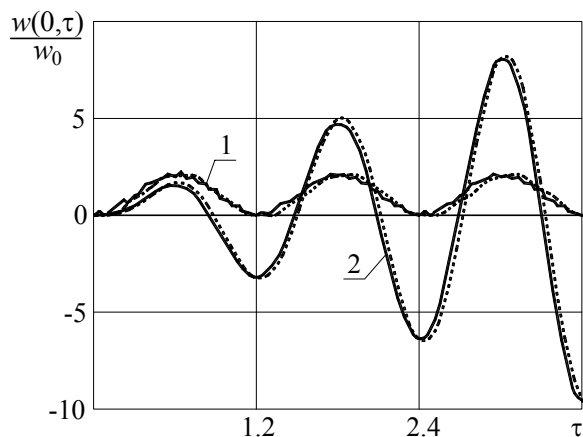


Рис. 1. Нормальные перемещения

вычислительным погрешностям решения (8) эффективным является привлечение регуляризирующего алгоритма А.Н. Тихонова [9]. Следует также отметить, что при решении интегрального уравнения (6'') можно использовать классические численные подходы в виду алгоритмической простоты их реализации. При этом роль параметра регуляризации играет шаг квадратурной формулы $\Delta\tau$ [10].

Числовые результаты. На рисунке 1 сплошная кривая 1 иллюстрирует перемещение w центральной точки биморфа ($\chi=0$) при действии электрической нагрузки ступенчатого профиля – $V(\tau) = V_0 \cdot H(\tau)$, где $H(\tau)$ – функция Хевисайда. В этом случае наблюдаются колеба-

ния относительно уровня статических перемещений $w_{st}(\chi)$, возникающего при действии нагрузки $V=V_0$. При приложении к электродированным покрытиям разности потенциалов, изменяющейся во времени по синусоидальному закону $V(\tau)=V_0 \cdot H(\tau) \cdot \sin(\omega\tau)$, где $\omega=2\pi/1,2$ – безразмерная низшая частота собственных колебаний двухслойного преобразователя, имеет место линейное нарастание амплитуд нормальных перемещений с ростом времени (рис. 1, сплошная кривая 2).

Отметим, что на этом рисунке значения $w(0,\tau)$ отнесены к $w_0=w_{st}(0)$. Расчеты проводились при следующих геометрических параметрах биморфа: $R=25$ мм, $h_p=1$ мм, $h_m=0.5$ мм. Материальные характеристики слоя из керамики PZT-5: $\rho_p=7600$ кг/м³, $s_{11}^E=15,4 \cdot 10^{-12}$ м²/Н, $s_{12}^E=-5,1 \cdot 10^{-12}$ м²/Н, $\varepsilon_{33}^T=1750 \cdot \varepsilon_0$, $\varepsilon_0=8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м, $d_{13}=-178 \cdot 10^{-12}$ Кл/Н. Упругий слой исследуемого биморфа выполнен из титанового сплава ВТ-6, для которого $\rho_m=4450$ кг/м³, $E_m=11,3 \cdot 10^{10}$ Н/м².

Точность выполненных расчетов контролировалась варьированием значений шага дискретизации $\Delta\tau$ и параметра регуляризации α , вычисляемого на основании принципа невязки [9, 10]. Достоверность результатов проверялась путем решения задач с помощью программного обеспечения, основанного на МКЭ. Полученные перемещения точки $\chi=0$, отнесенные к статическому прогибу w_0 , отображены на рисунке 1 соответствующими пунктирными линиями. Отметим, что значение w_0 , вычисленное согласно изложенной в настоящей работе методике, равно $6,965 \cdot 10^{-5}$ м при $V_0=150$ В, в то время как в программном комплексе получен результат $6,95 \cdot 10^{-5}$ м, что составляет относительную погрешность менее 1 %.

На рисунке 2 представлены результаты решения задачи идентификации управляющего электрического сигнала $V(\tau)$. При этом предполагается, что необходимо обеспечить движение центральной точки асимметричного биморфа по закону, график которого изображен непрерывной линией на рисунке 2,а. Сплошная линия на рис. 2,б иллюстрирует результат реализации метода А.Н. Тихонова для СЛАУ (8) при $\Delta\tau=0,012$ и $\alpha=10^{-6}$. Последующее моделирование в конечно-элементном комплексе нестационарных процессов в биморфе при его нагружении разностью потенциалов $V(\tau)$ согласно рис. 2,б дает прогиб, который практически не отличается от заданного (рис. 2,а, пунктирная линия). Аппроксимация $V(\tau)$ для этого частного случая кусочно-постоянной функцией (рис. 2,б, штриховая линия) также дает достаточно близкие результаты, которые в настоящей работе не приводятся.

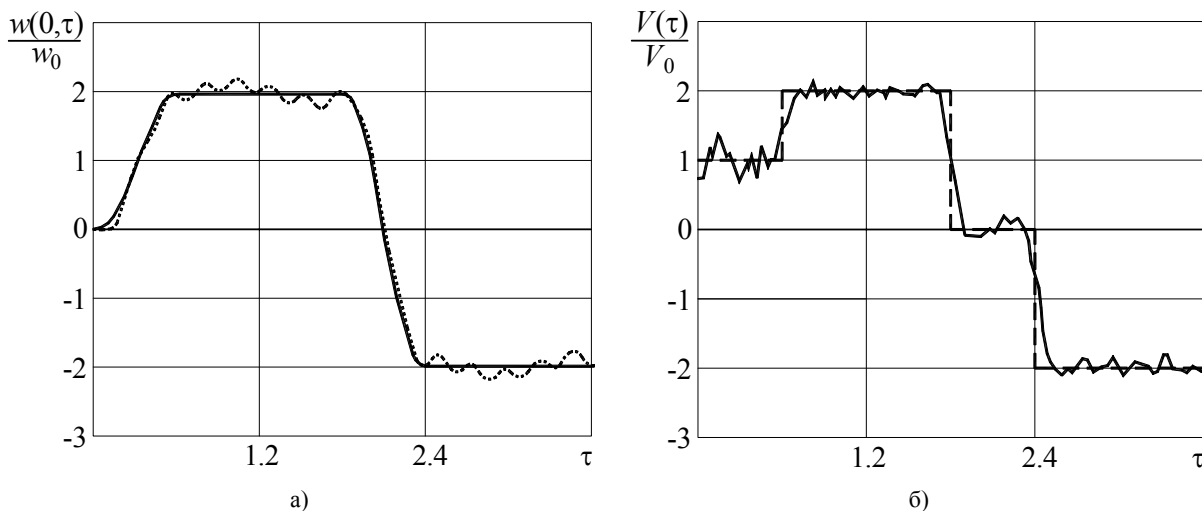


Рис. 2. Результаты решения задачи идентификации

Заключение. Выполненные расчеты свидетельствуют об эффективности разработанных методов решения прямой задачи об осесимметричных колебаниях тонкой электроупругой биморфной пластины при нагружении нестационарным электрическим потенциалом и задачи идентификации электрического сигнала для обеспечения заданного отклонения ее поверхности. Полученные результаты могут быть использованы в дальнейшем при разработке методов управления нестационарным деформированным состоянием круглого биморфа, внешнее электродное покрытие которого разделено на кольцевые секции, а управление осуществляется за счет подведения к этим секциям соответствующих электрических напряжений.

РЕЗЮМЕ

Представлен численно-аналитический метод решения задачи о колебаниях тонкого биморфа (металл-пьезокерамика) при нагружении нестационарным электрическим потенциалом. Постановка задачи выполнена в рамках теории Кирхгофа. Решение построено с использованием интегрального преобразования Лапласа по времени. Рассмотрена также обратная задача по определению электрического сигнала как функции времени для обеспечения заданного движения преобразователя, при решении которой используется регуляризирующий алгоритм Тихонова. Результаты, достоверность которых оценена путем сопоставления с конечно-элементными решениями, проиллюстрированы графическим материалом.

Ключевые слова: электроупругость, асимметричный биморф, пьезоактюатор, нестационарные колебания, преобразование Лапласа.

SUMMARY

The numerically-analytical method of solving the problem of vibration of thin bimorph (metal-piezoceramic) influenced by non-stationary electric potential is suggested. The problem statement is carried out within Kirchhoff's theory. The solution is drawn using integral Laplace transform in time. The paper also offers the problem of identification an electric signal as functions of time to support specified movement of the actuator. This inverse problem is solved with the use of Tikhonov's regularization algorithm. Results of numerical calculations are compared with finitely-element solutions to estimate their reliability and illustrated by a graphic material.

Key words: electroelasticity, asymmetric bimorph, piezoactuator, transient vibration, Laplace transform.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Управление поверхностью секционированной биморфной пластины / А. О. Ватульян, Н. Б. Лапицкая, А. В. Наседкин и др. // Прикл. механика и техническая физика. – 1995. – Т. 36, № 4. – С. 131-136.
2. Closed adaptive systems with controllable bimorph mirrors / A. G. Aleksandrov, V. E. Zavalova, A. V. Kudryashov et al. // J. Opt. Tech. – 2004. – V. 71, Iss. 11. – P. 737-741.
3. Рудницкий С. И. Колебания дискового биморфного преобразователя типа металл-пьезокерамика / С. И. Рудницкий, В. М. Шарапов, Н. А. Шульга // Прикл. механика. – 1990. – Т. 26, № 10. – С. 64-72.
4. Чувствительность биморфного преобразователя типа металл-керамика / Ю. Б. Евсейчик, С. И. Рудницкий, В. Л. Шарапов, Н. А. Шульга // Прикл. механика. – 1990. – Т. 26, № 12. – С. 67-75.
5. Бабаев А. Э. Нестационарные колебания тонкостенной электроупругой полосы / А. Э. Бабаев, Ю. Б. Мосеенков // ДАН. Серия «Математика, естествознание, технические науки». – 1994. – № 12. – С. 54-58.
6. Бабаев А. Э. Нестационарные колебания биморфной балки в режимах прямого и обратного пьезоэлектрического эффекта / А. Э. Бабаев, А. А. Бабаев, И. В. Янчевский // Актуальные проблемы физико-механических исследований. Акустика и волны. – 2007. – № 3. – С. 16-27.
7. Янчевский И. В. Управление нестационарными колебаниями слойно-ступенчатого биморфа / И. В. Янчевский // Вестник НТУ «ХПИ», вып. «Динамика и прочность машин». – 2009. – № 42. – С. 196-204.
8. Wang H. M. Dynamic solution of a multilayered orthotropic piezoelectric hollow cylinder for axisymmetric plane strain problems / H. M. Wang, H. J. Ding, Y. M. Chen // Int. J. Sol. and Struct. – 2005. – V. 42. – P. 85-102.
9. Численные методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, А. В. Гончарский, В. В. Степанов, А. Г. Ягола. – М.: Наука, 1990. – 229 с.
10. Задачи импульсного деформирования элементов конструкций / Е. Г. Янютин, И. В. Янчевский, А. В. Воропай, А. С. Шарапата. – Харьков: Изд-во ХНАДУ, 2004. – 392 с.

Поступила в редакцию 06.04.2010 г.

УДК 53.087.92:621.372.82

**ПЛАНАРНЫЕ СВЕТОВОДНЫЕ СТРУКТУРЫ В МЕТРОЛОГИЧЕСКОМ КОНТРОЛЕ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ**

Т. В. Белик, В. В. Данилов, Е. В. Деркаченко

Рассмотрены физические эффекты, на основе которых могут быть созданы планарные световодные первичные преобразователи. Предложены варианты технических решений таких преобразователей. Обоснована перспективность их применения в метрологическом контроле экспериментальной физики.

Ключевые слова: планарная световодная структура, планарный световодный первичный преобразователь, оптоэлектронный датчик.

Введение. Разработка и совершенствование методов и средств метрологического контроля (МК) является одной из важнейших проблем в технике физического эксперимента [1]. Широкие возможности для создания соответствующей аппаратуры открывают планарные световодные структуры (ПСС), в силу своих уникальных свойств. ПСС пригодны для использования в аппаратуре МК в условиях взрывоопасности, высокой радиации, сильных электромагнитных помех, высоких температур, агрессивных сред и др.

Известен ряд работ, посвященных оптоэлектронным первичным преобразователям (датчикам) внешних воздействий. При довольно широкой номенклатуре исследований по разработке и созданию волоконно-оптических первичных преобразователей (ВОПП), аналогичные данные о преобразователях на основе ПСС, так называемых планарных световодных первичных преобразователях (ПСПП) малоизвестны [2-4]. Тем не менее, можно утверждать, что в ряде случаев (исследование физико-химических процессов, происходящих на поверхности металлов, планарный характер воздействий или областей протекания изучаемого процесса и т.д.) ПСПП обладают принципиальными преимуществами. Кроме того, планарная технология позволяет создавать ПСПП с заданной конфигурацией световодов, для изготовления которых имеется более широкий класс материалов, чувствительных к внешним воздействиям.

В соответствии с классификацией по принципу действия, принятой в [5], будем различать ПСС и ПСПП на их основе, как амплитудные, фазовые и поляризационные.

Физическая модель планарной световодной структуры. Носителем информации в ПСС являются световодные моды (СМ). ПСС представляет слоистую структуру, содержащую в простейшем случае: подложку с показателем преломления n_1 , светонесущий слой с показателем преломления n_2 , толщиной d_2 и окружающую среду с показателем преломления n_3 , причем $n_2 > n_1, n_3$. Такая структура имеет определенное число волновых мод ТЕ- и ТМ-поляризаций, которые характеризуются эффективными показателями преломления - γ_m . Дисперсионное уравнение, устанавливающее связь между значениями γ_m и параметрами структуры, имеет вид [5, 8]:

$$k_0 \sqrt{n_2^2 - \gamma_m^2} d_2 = \arctg[E_{21} \sqrt{\frac{\gamma_m^2 - n_1^2}{n_2^2 - \gamma_m^2}}] + \arctg[E_{23} \sqrt{\frac{\gamma_m^2 - n_3^2}{n_2^2 - \gamma_m^2}}] + m\pi, \quad (1)$$

где

$m = 0, 1, 2, \dots$ – номер волноводной моды,

$$E = \begin{cases} 1 - \text{для } TE - \text{мод}, \\ (n_i / n_j)^2 - \text{для } TM - \text{мод}; \end{cases}$$

$k_0 = 2\pi / \lambda_0$ – волновое число для излучения, распространяющегося в вакууме,

λ_0 – длина волны излучения в вакууме.

Эффективные значения показателя преломления γ_m , определяются по величинам углов падения монохроматического излучения на элемент ввода излучения в световод, при которых возбуждаются соответствующие СМ.

Элементами ввода излучения могут быть: призма с показателем преломления $n_p > \gamma_m$, дифракционная решетка, сужающийся участок несущего слоя, диафрагма и др.

При использовании для ввода излучения призмы с углом наклона ее боковой грани к основанию β , углы падения излучения на боковую грань Θ_m связаны с соответствующими значениями γ_m следующим соотношением [5, 6]:

$$\gamma_m = n_p \sin[\beta + \arcsin(\sin \Theta_m / n_p)], \quad (2)$$

где Θ_m отсчитываются от нормали к боковой грани призмы в сторону основания. Как следует из (1), значения γ_m зависят от оптических постоянных сред ПСС и толщины светонесущего слоя. С физической точки зрения это объясняется тем, что энергия полей СМ переносится во всех средах ПСС. При внешнем воздействии на ПСС могут изменяться значения n_1 , n_2 , n_3 или d_2 . Измеряя Θ_m для нескольких ВМ и используя выражения (1,2), можно определить эти изменения, а следовательно, и величину внешнего воздействия.

Одним из методов возбуждения СМ является нарушение полного внутреннего отражения (НПВО), использующий призму с показателем преломления n_p , большим эффективного показателя преломления возбуждаемой моды γ_m . При угловом сканировании падающего на основание призмы монохроматического излучения в отраженном излучении наблюдается резонансный провал интенсивности, обусловленный возбуждением световодной моды, угловое положение минимума которой Θ_m связано с γ_m соотношением (2). Измерив значения Θ_m как минимум для двух мод, с помощью выражений (1) и (2) определяют показатель преломления n_2 и толщину d_2 несущего слоя волновода. Установлено, что при точности измерения углов возбуждения волноводных мод $5''$ точность определения n_2 не ниже 10^{-4} , а d_2 – порядка 2,0 нм. В случае одномодовых световодов для определения n_2 и d_2 можно использовать двухволновую методику, т. е. измерять Θ_{TE_0} при двух различных λ .

Определение показателя преломления и толщины тонких не поглощающих твердых и жидких пленок на основе ПСС, по-видимому, должно сопровождаться следующим:

1) для исключения влияния призмы на дисперсию СМ, что приведет к уменьшению ошибок определения n_2 и d_2 , призма должна располагаться над светонесущим слоем на расстоянии, большим $\lambda_0/2$; для сведения к минимуму ошибок измерений призму следует выбирать с минимально возможным показателем преломления (соблюдая условие $n_p > \gamma_m$);

2) ошибки определения значений n_2 и d_2 будут минимальными, если при прочих равных условиях измерять углы возбуждения основной моды ($m=0$) и наивысшей по номеру моды, существующей в данной ПСС; точность определения n_2 и d_2 будет только увеличивается, если при изменении угла падения излучения световое пятно не перемещается по основанию призмы, а излучение имеет минимально возможную угловую расходимость.

Обозначенную методику определения n_2 и d_2 можно применить и в случае, если показатель преломления светонесущего слоя меньше показателя преломления одной из граничащих с ним сред ($n_2 < n_3$ или $n_2 < n_1$), т. е. когда СМ излучаются в среду с большим показателем преломления, а также при $n_2 < n_1, n_3$ (излучение СМ в обе, ограничивающие несущий слой, среды). Для излучающего световода дисперсионное уравнение принимает вид [6]:

$$\gamma_m = n_2 - \frac{\pi^2(m+1)}{2n_2(k_0 d_{2\text{эф}})^2}, \text{ где } k_0 d_{2\text{эф}} = \begin{cases} k_0 d_2 \text{ при } n_2 < n_1, n_3, \\ k_0 d_2 + \frac{(n_1^2/n_2^2)}{\sqrt{(n_2^2 - n_1^2)}} \text{ при } n_1 < n_2 < n_3. \end{cases}$$

Роль светонесущего слоя, толщину d_2 и (или) показатель преломления n_2 которого необходимо определить, может выполнять слой жидкости или твердотельная пленка, а роль среды с показателем преломления n_3 - призма. Как и для неизлучающих световодов, измеряют углы возбуждения Θ_m и Θ_i , двух мод, например, с номерами m и i . По формуле (2) вычисляют соответствующие значения эффективных показателей преломления этих мод γ_m и γ_i , после чего определяют величины n_2 и d_2

$$n_2 = \frac{(m+1)^2 \gamma_i - (i+1)^2 \gamma_m}{(m+1)^2 - (i+1)^2}, \quad d_2 = \lambda_0(m+1) / \sqrt{2[(n_2 - \gamma_m)2n_2]}.$$

Ситуация осложняется в случае сверхтонких пленок, т.е. когда не обеспечивается световодный режим. Тем не менее, напряженность поля неизлучающих СМ на границах раздела светонесущего слоя и обрамляющих его сред отлична от нуля и экспоненциально затухает при удалении от них. Доля энергии поля СМ, переносимая в окружающей среде (в зависимости от соотношения n_1 и n_3 , номера моды и толщины несущего слоя d_2), обычно составляет единицы процентов и в пределе (при $n_1 = n_3$) может

достигать 50 %. Это и определяет высокую чувствительность поля СМ к состоянию поверхности несущего слоя и наличию на ней сверхтонких пленок, в частности адсорбированных слоев (АС).

Рассмотрим вопрос о чувствительности СМ к непоглощающим АС. Появление слоя адсорбата с оптической толщиной $n_a d_a$ на поверхности несущего слоя эквивалентно увеличению его толщины d_2 на величину $\Delta d_2 = n_a d_a / n_2$.

Для тонких слоев АС, удовлетворяющих условию $n_a d_a \ll \lambda_0$, существует связь величины приращения эффективного показателя преломления световодной моды $\Delta \gamma_m$ с параметрами световода, в виде [7,8]:

$$\Delta \gamma_m / \Delta d_2 \approx (n_2^2 - \gamma_m) / (\gamma_m d_{2\text{эф}}) \quad (3)$$

где $d_{2\text{эф}} = d_2 + 1 / (k_0 \sqrt{\gamma_m^2 - n_1^2}) + 1 / (k_0 \sqrt{\gamma_m^2 - n_3^2})$ – эффективная толщина светонесущего слоя для m -моды. Анализ выражения (3) позволяет сделать следующие выводы: $\gamma_m \rightarrow n_2$ чувствительность мала ($\Delta \gamma_m \rightarrow 0$), так как при этом толщина d_2 несущего слоя велика и доля энергии поля моды, переносимая в окружающей среде, мала; $\gamma_m \rightarrow n_1$ чувствительность также мала ($\Delta \gamma_m \rightarrow 0$), так как при этом световодный режим близок к критическому и $d_{2\text{эф}} \rightarrow \infty$ (практически вся энергия поля моды переносится в подложке).

Таким образом, для обеспечения высокой чувствительности γ_m к АС необходимо: выбирать одномодовые ПСС при максимальном отличии толщины светонесущего слоя от критической толщины для данной моды (максимальной чувствительностью обладает TE_0 -мода); изготавливать ПСС из материалов, обеспечивающих максимально возможную разность ($n_2 - n_1$), так как при этом доля энергии поля моды, переносимая в окружающей среде, возрастает.

Оценки проведенные авторами показывают, что при точности измерения угла возбуждения Θ_m волноводной моды $15''$ (соответствует $\gamma_m = 1 \cdot 10^{-4}$) для волновода с $n_1 = 1,47$, $n_2 = 1,80$ и $n_3 = 1,0$ можно зафиксировать слой АС с $n_a = 1,3 \dots 1,5$ толщиной $d_a \approx 0,1$ нм.

По-видимому, при обнаружении тонких АС перспективно использование в качестве элемента ввода излучения в светонесущий слой фазовой дифракционной решетки (ДР) с периодом Λ и амплитудой $\sigma \ll \lambda_0$, расположенной в центре отрезка канального волновода. Известно, что условие возбуждения m -й моды при падении плоской волны из воздуха на гофр решетки под углом φ_m имеет вид $\gamma_m = \sin \varphi_m + (\lambda / \Lambda) l$, где $l = 0, +1, \pm 2, \dots$ - порядок дифракции [5]. Формирование слоя АС на светонесущем слое ПСС приводит к изменению величины γ_m , при этом ввод излучения в ПСС прекращается. Тем не менее, существует возможность подобрать такие условия, при которых формирование АС на ДР приведет к изменению направления распространения введенного в ПСС излучения на обратное. Доказано [8], что минимальное изменение γ_m , необходимое для эффекта переключения, определяется выражением $(\Delta \gamma_m)_{\min} \approx \lambda / L_x$, где L_x - длина ДР. Так, например, при $\lambda = 632,8$ нм и $L_x = 10^4 \lambda$ величина $(\Delta \gamma_m)_{\min} \approx 10^{-4}$. Такая ПСС может быть использована в качестве ПСПП устройства определения точки росы и детектирования наличия в окружающей среде определенных газов.

Планарные световодные первичные преобразователи для метрологического контроля поглощающих материалов и тонких пленок. Наличие потерь в световедущей структуре (например, за счет того, что окружающая среда или АС является поглощающим) обуславливает комплексность эффективных показателей преломления СМ $\gamma_m = \gamma_m' + j\gamma_m''$, что указывает на затухание мод в направлении их распространения. В этом случае для определения показателя преломления n_a , показателя поглощения χ_a и толщины d_a исследуемого АС необходимо знать не только γ_m' (вычисляют по формуле (2) по измеренным значениям Θ_m), но и соответствующие γ_m'' . Для определения коэффициентов поглощения α_m СМ, связанных с γ_m'' и длинами их распространения L_m , с помощью соотношения [5]:

$$\alpha_m = L_m^{-1} = 2k_0 \gamma_m'' \quad (4)$$

можно использовать двухпризменную схему. В этой схеме для ввода и вывода излучения ПСПП используются две призмы, расположенные вдоль направления распространения СМ на расстоянии R друг от

друга. Интенсивность объемной волны, выходящей из второй (подвижной) призмы, определяется в виде $I = I_0 \eta e^{-2\alpha_m R}$, где η – эффективность возбуждения СМ; I_0 – интенсивность волны, падающей на первую призму. Измерив значения I_1 и I_2 при двух различных расстояниях между призмами R_1 и R_2 , вычисляют величину $\alpha_m = \ln(I_1 / I_2) / [2(R_1 - R_2)]$ и из выражения (4) определяют γ_m'' .

При погружении не поглощающей ПСС в поглощающую среду с комплексным показателем преломления $\dot{n}_3 = n_3 + j\chi_3$ с целью определения ее показателя поглощения χ_3 , величины γ_m'' связаны с χ_3 соотношением [5,6]:

$$\gamma_m'' = \frac{n_3 [\gamma_m' (\gamma_m'^2 - n_3^2)^{1/2} (n_2^2 - n_3^2)]^{-1}}{\frac{(\gamma_m'^2 - n_1^2)^{-1/2}}{(n_2^2 - n_1^2)} + \frac{(\gamma_m'^2 - n_3^2)^{-1/2}}{(n_2^2 - n_3^2)} + \frac{1}{n_2 - \gamma_m'^2} k_0 d_2 + \frac{(\gamma_m'^2 - n_3^2)^{-1/2}}{(n_2^2 - n_3^2)} + \frac{(\gamma_m'^2 - n_1^2)^{-1/2}}{(n_2^2 - n_1^2)}} \quad (5)$$

Измеряя значения Θ_m и α_m , и используя выражения (2), (4) и (5), вычисляют χ_3 . В общем случае для определения оптических постоянных n_a и χ_a адсорбционного слоя и (или) его толщины d_a при известных значениях n_1, n_2, n_3, d_2 и λ , необходимо измерить угол возбуждения Θ_m и коэффициент поглощения α_m одной или нескольких мод. Это позволяет определить комплексный показатель преломления γ_m данной моды и затем решить следующее дисперсионное уравнение для световодных мод в четырехслойной системе относительно n_a, χ_a и (или) d_a [7,8]:

$$\arctg \frac{\dot{K}_1}{j\dot{K}_2} + \arctg \left\{ \frac{\dot{K}_a}{\dot{K}_z} \operatorname{tg} \left[\frac{\dot{K}_3}{j\dot{K}_a} - \dot{u}_a d_a \right] \right\} - \dot{u}_2 d_2 = m\pi,$$

где

$$\dot{K}_i = \begin{cases} \dot{u}_i & \text{для TE-мод,} \\ \dot{u}_i / n_i^2 & \text{для TM-мод,} \end{cases}, \quad \dot{K}_a = \begin{cases} \dot{u}_a & \text{для TE-мод,} \\ \dot{u}_a / n_a^2 & \text{для TM-мод,} \end{cases},$$

$$\dot{u}_i = k_0 (n_i^2 - \gamma_m'^2)^{1/2}, \quad \dot{u}_a = k_0 (n_a^2 - \gamma_m'^2)^{1/2}.$$

Двухпризменная методика измерения поглощения СМ может найти применение в медицине для определения концентрации билирубина в крови новорожденных [2]. Преимущества ПСПП перед ВОПП в этом случае состоит в следующем: используется малый объем исследуемого материала; незначительное рассеяние излучения на красных кровяных тельцах. Последнее объясняется тем, что глубина проникновения поля СМ в исследуемую среду меньше размера красных кровяных телец и поэтому они не оказывают существенного влияния на затухание оптической волны.

Планарные световодные структуры можно использовать для определения поверхностной плотности D_s субмолекулярных поглощающих АС при известной объемной плотности молекул D данного вещества в соответствии с выражением [7, 8]:

$$D_s \approx \alpha_m^2 / \left| k_0 (\dot{n}_2^2 - \dot{\gamma}_2^2)^{1/2} \right|.$$

Планарные световодные структуры могут найти применение в спектроскопии тонких пленок на границе раздела «диэлектрик-диэлектрик», «диэлектрик-полупроводник», «диэлектрик-жидкость». В этом случае необходимо использовать монохроматор и двухпризменную методику определения коэффициентов поглощения СМ. По-видимому, недостатками метода спектроскопии являются: необходимость переустройства призм после перестройки падающего излучения по частоте; необходимость учета дисперсии показателей преломления сред световедущей структуры.

Планарные световодные структуры при выявлении химических реагентов. Применение ПСС оптического диапазона для индикации химических реагентов основано на том, что при контакте структуры с исследуемым объемом один из его слоев должен вступать в химическую реакцию с детектируемым химическим элементом. При этом изменяется показатель преломления или толщина (в случае селективной адсорбции реагента) этого слоя, что приводит к изменению величины эффективного показателя преломления рабочей СМ. Измеряемой величиной (в зависимости от реагента) может быть угол возбуждения Θ_m или (и) длина распространения L_m световодной моды.

Конструктивно такой ПСПП может быть выполнен следующим образом. На несущий слой ПСС наносится дополнительный слой из специально подобранного вещества, вступающего в химическую реакцию только с данным реагентом (слой с показателем преломления $n_a < \gamma_m$, n_2 толщиной d_a больше глубины проникновения поля рабочей СМ в материал этого слоя). В этом случае ПСПП чувствителен

только к изменению величины n_a , зависящей от концентрации реагента в окружающей среде. Для тонкого слоя возможны два варианта. В первом – d_a много меньше глубины проникновения поля СМ в материал хемочувствительного слоя, если $n_a < \gamma_m$. Во втором – d_a много меньше толщины несущего слоя, если $n_a > \gamma_m$.

В обоих случаях поле световедущей моды проникает сквозь хемочувствительный слой и взаимодействует с молекулами реагента, физико- или хемосорбированными на его поверхности.

Изготавливая хемочувствительный слой из самовосстанавливающегося материала, можно получить многоразовый волноводный химический датчик.

По-видимому, более высокой чувствительностью к внешним воздействиям (в том числе и к химическим реагентам) обладают ПСПП, в которых внешнее воздействие изменяет условия ввода излучения в ПСС. Физические основы его работы изложены в п. 1.1. Численные оценки, показывают, что при использовании $\text{SiO}_2 - \text{TiO}_2$ ($n_2=1,75$) световода на стеклянной подложке ($n_1=1,47$) с помощью дифракционной решетки для ввода излучения можно зафиксировать изменение толщины АС Δd_a протеина ($n_a=1,40$) с точностью до 0,04 нм. Измеряемое минимальное изменение поверхностного покрытия $1,5 \cdot 10^{-9}$ г/см², обнаруживаемая минимальная масса адсорбата на дифракционной решетке длиной $L_x=1,5$ мм и шириной $L_y=0,1$ мм, обеспечивающей ввод излучения в волновод, составляет $2,25 \cdot 10^{-12}$ г.

Детектирование электромагнитного излучения. ПСПП на основе интерферометра Маха-Цендера совместно с антенной может быть использован для детектирования электромагнитного излучения (ЭМИ) в радиодиапазоне (вплоть до частот $\sim 10^{12}$ Гц). Он имеет ряд преимуществ перед традиционными электронными аналогами, поскольку позволяет обойтись без усилителей и других активных компонентов на антенне. Такой ПСПП не искажает измеряемое поле и обладает примерно в 10^3 раз более высокой чувствительностью ($\sim 1,0$ мВ/м) [6, 7].

Структурная схема детектора представлена на рис. 1 [6]. Его основой является интерферометр Маха-Цендера с плечами, образованными канальными планарными световодами, различающимися по длине на величину $\Delta L = \pi(2\gamma_m k_0)^{-1}$ или кратную ей, что соответствует разности фаз на выходе интерферометра $\Phi_0 = \pi/2$. Вдоль плеч интерферометра размещают электроды, к которым подводится электрический сигнал от антенны. При использовании одномодовых световодов электроды наносятся на поверхность подложки, в случае многомодовых световодов (при необходимости модуляции полей обеих поляризаций) дополнительно формируют электроды, создающие модулирующее электрическое поле, направленное перпендикулярно поверхности подложки. Оптическое излучение от источника (внешнего или сформированного на единой со световодом подложке) поступает на вход интерферометра (левый Y-образный разветвитель), распределяется в плечи интерферометра пропорционально их ширине и суммируется на выходе интерферометра (правый Y-образный разветвитель). При одинаковой ширине плеч отношение выходной мощности $P_{\text{вых}}$ оптического излучения к входной $P_{\text{вх}}$ можно записать в виде:

$$P_{\text{вых}} / P_{\text{вх}} = 0,5(1 + \cos \Phi_i), \quad (6)$$

где Φ_i – полная разность фаз между оптическими сигналами, поступающими на выход интерферометра из его плеч. Величина Φ_i равна сумме разностей фаз, образующихся вследствие различной длины плеч Φ_0 и электрооптического воздействия $\Delta\Phi$. Размеры электродов и их расположение выбираются таким образом, чтобы величина $\Delta\Phi$ линейно зависела от величины приложенного к электродам электрического напряжения u : $\Delta\Phi = au$, где a – постоянный коэффициент. Тогда при $\Phi_0 = \pi/2$, согласно (6) имеем $P_{\text{вых}} / P_{\text{вх}} \approx 0,5(1 - au)$. Таким образом, мощность оптического сигнала на выходе модулятора-интерферометра пропорциональна величине электрического сигнала, поступающего из антенны.

На рис. 2 изображен ПСПП для детектирования оптического излучения. Устройство содержит элемент ввода 1 детектируемого излучения в планарный световод (например, дифракционную решетку или призму) и планарный фотоприемник 2, пространственно разнесенные вдоль направления распространения излучения в волно-

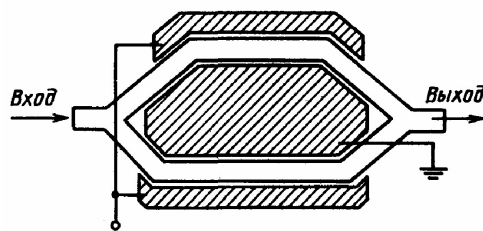


Рис. 1.

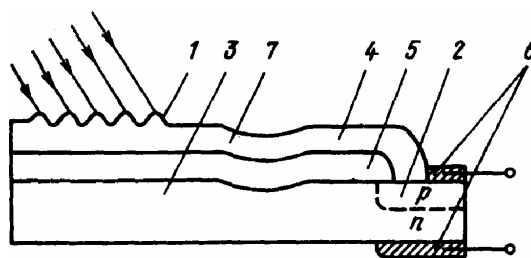


Рис. 2.

воде. Между полупроводниковой подложкой 3 и несущим слоем 4 размещен не поглощающий буферный слой 5 толщиной больше глубины проникновения поля рабочей волноводной моды в материал слоя 5; к фотоприемнику 2 подведены электроды 6, а между элементом ввода излучения 1 и фотоприемником 2 может быть расположена планарная линза 7.

Наиболее важные преимущества ПСПП перед их объемными аналогами являются:

- интегральный принцип построения, позволяющий совмещать на одной подложке оптическую и электронную части устройства (в полупроводниковой подложке 3 наряду с планарным фотоприемником 2 могут быть сформированы электронные схемы усиления и обработки электрического сигнала), что ведет к уменьшению габаритов и массы устройства, обеспечивает технологичность процесса его изготовления;
- высокая пространственная и частотная избирательность ПСПП детектирования излучения за счет резонансного характера ввода излучения в ПСС;
- снижение собственных шумов и увеличение быстродействия первичного преобразователя за счет уменьшения размеров фокусирующей планарной линзы 7;
- возможность формирования диаграммы направленности ПСПП за счет выбора параметров элемента ввода излучения (например, длины и глубины гофра дифракционной решетки) и несущего слоя 4 (его толщины, показателя преломления или профиля распределения показателя преломления вдоль нормали к подложке);
- возможность оперативного управления диаграммой направленности путем электрооптического воздействия на волноводную систему в области элемента ввода излучения.

Измерение и контроль температуры. Использование ПСС для измерения и контроля температуры (точнее, измерения и контроля ее изменения) основано на эффекте теплового расширения и тепловой зависимости показателей преломления материалов, из которых выполнена световодная структура. ПСПП температуры, в принципе, могут быть созданы на основе ПСС интерферометров типа Маха-Цендера и Майкельсона. Их основные достоинства - устойчивость к наводкам внешних электромагнитных полей и относительно высокая точность измерения изменения температуры ($\sim 10^{-3}$ град).

В отличие от ПСПП на основе интерферометра Маха-Цендера, используемого для детектирования электромагнитных полей, в планарном световодном первичном преобразователе, предназначенном для измерения температуры, разность длин плеч интерферометра ΔL должна быть значительно больше λ . Разность фаз Φ_i между волнами, поступающими из плеч интерферометра на его выход, определяется в соответствии с выражением $\Phi_i = 2\pi\gamma_m\Delta L / \lambda$. Причем, γ_m и ΔL зависят от температуры T . Поэтому в области линейной зависимости γ_m и ΔL от T имеем

$$P_{\text{вых}} / P_{\text{ex}} = 0,5[1 + q \cos(k_0 b \Delta L + \Phi_0)],$$

где q – коэффициент модуляции (для идеального устройства $q = 1$), а

$$b = d\gamma_m / dT + (\gamma_m / \Delta L)[d(\Delta L) / dt]. \quad (7)$$

Для обеспечения однозначности результатов измерений и контроля, температура должна изменяться не больше чем на величину $1/[\lambda(2b\Delta L)]$. Увеличение ΔL приводит к росту чувствительности устройства и одновременно к уменьшению диапазона изменения измеряемой температуры. Однако необходимо помнить, что единичный интерферометр имеет относительно низкую чувствительность в точках $\Phi_i = m\pi$ (где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

Сочетание высокой точности измерений и широкого диапазона изменения измеряемой температуры может быть достигнуто в планарной световодной структуре, состоящей из набора единичных интерферометров Маха-Цендера с различными разностями длин плеч, расположенных на единой подложке параллельно друг другу. На рис. 3 приведено одно из конструктивных решений ПСПП для измерения и контроля температуры, состоящего из трех интерферометров Маха-Цендера, обозначенных A, B и C , с разностями длин плеч $\Delta L_A, \Delta L_A + \gamma/(4\gamma_m)$ и $\Delta L_A/5$ соответственно. В соответствии с данными (рис. 3), можно утверждать, что высокая точность измерения в узком интервале температур обеспечивается сравнением сигналов на выходе интерферометров A и B . Этот интервал можно расширить примерно в 5 раз, измеряя одновременно и величину сигнала на выходе интерферометра C , что позволяет, например, различать температуры T_1 и T_2 . Теоретически интервал измеряемых температур можно расширить до 700°C , обеспечивая при этом точность измерений $2 \cdot 10^{-3}^\circ\text{C}$.

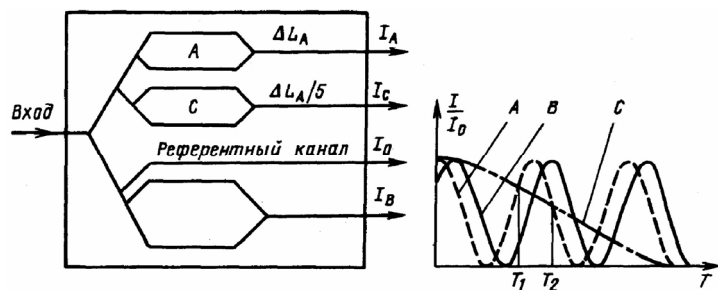


Рис. 3

ПСПП температуры, на основе ПСС интерферометра Майкельсона, обладает более высокой чувствительностью по сравнению с ПСПП на основе интерферометра Маха-Цендера. Его структура приведена на рис. 4 и представляет собой X-образное соединение планарных световодов. Левая часть соединения выполнена из различных по ширине световодов, правая часть – из планарных световодов (ПС) одинаковой ширины, но разной длины. Правые части соединения обоих ПС заканчиваются металлическими зеркалами. Роль температурно-чувствительного элемента выполняет правая часть соединения. В исходном состоянии СМ, отраженные от металлических зеркал, поступают в точку соединения ПС сдвинутыми по фазе относительно друг друга на 180° . Изменение температуры приводит к тепловому расширению (сжатию) подложки и изменению эффективных показателей преломления СМ в обоих ПС (правая часть интерферометра). Вследствие различия длин ПС соотношение фаз световых волн, поступающих из обоих световодов в точку их соединения, изменяется, что приводит к изменению интенсивности излучения на выходе интерферометра в соответствии с выражением: $P_{вых} \sim \sin^2[(\pi/2)(T/\Delta T_\pi) + \Phi_0]$, где $\Delta T_\pi = \lambda/(4b\Delta L)$ – изменение температуры, при котором сигнал на выходе интерферометра изменяет свою интенсивность от минимального до максимального значения; b – вычисляется по формуле (7); ΔL – разность длин волноводов правой части интерферометра. Таким образом, разность фаз двух отраженных от металлических зеркал световых волн является фактически мерой изменения температуры световодной системы. Причем чувствительность ПСС пропорциональна величине ΔL .

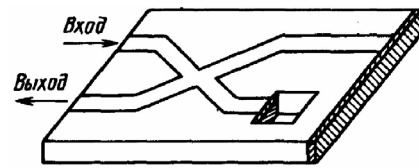


Рис. 4

Кроме рассмотренных ПСС для измерения и контроля температуры исследовались возможности применения для этой цели планарного аналога интерферометра Фабри - Перо [4,5] и элементов ввода излучения в планарный световод [4]. Чувствительность таких устройств оказалась недостаточно высокой.

Определение влажности воздуха. Возможны два типа ПСПП для определения влажности воздуха: устройства, определяющие «точку росы» с последующим расчетом по ее значению абсолютной влажности воздуха, и интерференционные устройства, в основе работы которых лежит зависимость коэффициента теплопроводности воздуха от его влажности.

В устройствах первого типа предполагается постепенное охлаждение подложки при одновременном контроле ее температуры. В «точке росы» на поверхности несущего слоя формируется слой конденсата, наличие которого фиксируется по изменению или угла возбуждения СМ, или длины распространения световодных мод. По измеренным значениям температуры выпадения росы, температуры и давления воздуха вычисляют его абсолютную влажность.

В устройствах второго типа, напротив, предполагается постепенный нагрев подложки при одновременном контроле ее температуры. На подложке размещена ПСПП на основе интерферометра Маха-Цендера, образованного двумя планарными световодами, один из которых вместе с референтным каналом покрыт термоизолирующим слоем. Второй покрыт металлическим слоем, играющим роль радиатора. Оба слоя оптически изолированы от несущих слоев буферным слоем. Вследствие интенсивного теплообмена с окружающей средой световода с металлическим радиатором, и теплоизоляции второго световода при равномерном нагреве подложки возрастает разность температур плеч интерферометра. Причем эта разность температур пропорциональна (почти в линейной зависимости) абсолютной влажности воздуха и практически не зависит от его температуры. Интенсивность оптического сигнала на выходе интерферометра, пропорциональна разности температур плеч интерферометра и, следовательно, абсолютной влажности воздуха.

Датчики механического и газового давления. Планарная световодная структура как датчик механического давления, может быть создана на основе интерферометра Майкельсона, выполненного на планарной подложке в виде X-разветвления световодов. Две «ветви» разветвления служат для ввода и вывода излучения, а «ветви», лежащие по другую сторону от точки пересечения, завершены металлическим зеркалом, размещенным на торце подложки. В исходном состоянии разность фаз между отраженными от зеркала волнами в точке пересечения волноводов равна нулю. При воздействии механического давления на некоторый участок одного из двух волноводов, расположенных между точкой пересечения и зеркалом, вследствие эффекта фотоупругости изменяется оптическая длина этого участка световода. В результате разность фаз между отраженными от зеркала волнами становится отличной от нуля, что приводит к изменению интенсивности излучения на выходе интерферометра. Для изготовленного ПСПП на основе Ti -диффузного $LiNbO_3$ световода, при $\lambda=632,8$ нм полуволновая разность фаз достигается при давлении $3 \cdot 10^4$ Н/м².

Для измерения давления разреженного газа (длина свободного пробега молекул газа превышает расстояние от первичного преобразователя до стенок сосуда, в котором находится газ) может быть предложена ПСПП на основе интерферометра Маха-Цендера, одно плечо которого покрыто термоизолирующим слоем, а второе – металлическим радиатором. Теплоперенос между металлическим радиатором и

холодильником (стенками сосуда) осуществляется молекулами газа, не сталкивающимися между собой. Поэтому температура радиатора, а значит, и покрытого им плеча интерферометра зависит от плотности молекул газа, т. е. от его давления. Для интерферометра длиной 10 мм полуволновая разность фаз при температуре газа 20 °С и давлении $P_0 = 10^{-5}$ Па достигается при изменении давления газа на $5 \cdot 10^{-10}$ Па. При относительно высоком давлении газа P_0 линейная зависимость между его изменением и величиной коэффициента теплопроводности нарушается. В этом случае ПСС можно использовать для измерения скорости потока газа, обеспечивающего конвекцию между датчиком и холодильником.

Датчики механических перемещений и вибраций. Для измерения механических перемещений могут быть использованы элементы ввода (вывода) излучения в световод, оптически связанные световоды, расположенные в одной или разных плоскостях, и планарные интерферометры. Наиболее чувствительные ПСС к механическим перемещениям можно создать, используя резкую зависимость коэффициента передачи мощности световой волны из одного световода в другой от величины зазора между ними. Однако, в таких структурах зазор между световодами на участке их оптической связи должен быть порядка λ , что осуществить, не повреждая поверхности несущего слоя, сложно. Поэтому ПСС механических перемещений на основе планарных интерферометров кажутся наиболее перспективными.

Структура ПСПП для регистрации микроперемещений, на основе интерферометра Майкельсона в виде симметричного X-разветвления планарных световодов представлена на рис. 5. Одно из правых плеч интерферометра (референтное) заканчивается зеркалом, размещенным на торце подложки, а у окончания второго правого плеча (измерительное плечо) располагается объект (к которому для увеличения коэффициента отражения может быть прикреплено зеркало). На торце подложки волноводная мода измерительного плеча преобразуется в плоскую объемную электромагнитную волну, которая, отразившись от объекта, вновь с некоторой эффективностью вводится в световод. Перемещение объекта изменяет оптический путь излучения в измерительном плече, что приводит к рассогласованию по фазе волноводных мод референтного и измерительного плеч в точке их пересечения и в результате изменяет интенсивность излучения на выходе интерферометра. ПСПП такого типа могут регистрировать микроперемещения с точностью до 10 нм.

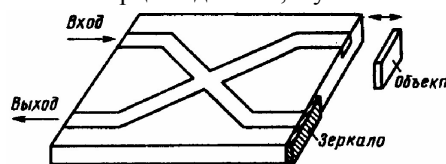


Рис. 5

По видимому, можно предложить и аналогичный по принципу действия, но без использования планарных световодов ПСПП для контроля механических колебаний объекта. Структура ПСПП ($Si/SiO_2/Si_3N_4/SiO_2$) содержит подложку с полированными торцами (рис. 6), дифракционный элемент ввода 1 излучения в световод, лучеделительный элемент 2 (полученный травлением покровного слоя SiO_2), два планарных зеркала 3 (металлизированные V-канавки). Движущийся объект 4 и фотодетектор 5 размещаются у торцов световодной структуры. Расстояние до объекта может достигать 1 см, размеры устройства 1-3 см, точность измерения расстояния до объекта не хуже $\lambda/50$.

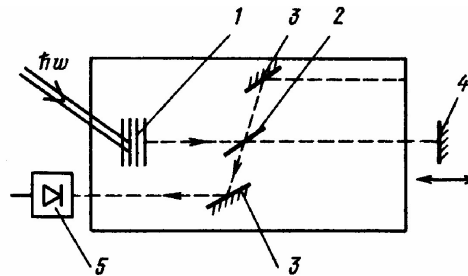


Рис. 6

Для реализации комбинированной структуры волоконно-планарного первичного преобразователя регистрации механического перемещения излучение от источника поступает в волоконный световод, у противоположного торца которого один над другим размещены два параллельных планарных световода, разделенных расстоянием в несколько микрометров. Оптические сигналы на выходе световодов регистрируются фотодетекторами. При смещении волокна в направлении, перпендикулярном к плоскости подложек световодов, изменяется отношение сигналов от фотодетекторов световодов (вычисляют отношение $(I_1 - I_2)/(I_1 + I_2)$, где I_1, I_2 – сигналы от фотодетекторов). Применение в этом устройстве двух планарных световодов, оптически связанных с волокном, и измерение отношения сигналов, поступающих из этих световодов на фотодетекторы, позволяет значительно уменьшить ошибку измерений, связанную с флуктуациями излучения и устройству быть практически не чувствительным к смещению волокна в плоскости подложек планарных световодов (это облегчает юстировку по сравнению с устройствами на оптически связанных двух волокнах или планарных световодах, расположенных торцами друг к другу).

Точность определения смещения волокна относительно планарных световодов не хуже $\lambda/10$.

Датчик волнового фронта. Основой ПСС для регистрации волнового фронта может быть линейка планарных интерферометров Маха-Цендера, сформированных из одномодовых планарных световодов на электрооптической подложке ($LiNbO_3, GaAs$). Структура может найти применение для измерения распределения фазы и амплитуды электромагнитной волны оптического диапазона вдоль его волнового фронта, что необходимо при исследовании каких-либо оптических неоднородностей, например, турбулентностей в атмосфере. Структурная схема ПСС в виде интегрально-оптического датчика приведена на рис. 7. Между интерферометрами размещены прямолинейные световоды, параметры которых идентичны

параметрам световодов, образующих интерферометры. Вдоль одного из плеч каждого интерферометра сформированы электроды, что позволяет выполнять электрооптическую подстройку интерферометров с учетом задач измерений.

Предположим, что при вводе световой волны в плечи данного интерферометра соответствующие участки ее волнового фронта имеют разность фаз Φ . Тогда интенсивность оптического сигнала на выходе интерферометра P_{Φ} связана следующим соотношением с интенсивностями оптических сигналов соседних с интерферометром прямолинейных световодов:

$$P_{\Phi} = 0,5[(P_1^{0,5} - P_2^{0,5}) + 4(P_1 P_2)^{0,5} \cos(\Phi/3)]B,$$

где B – константа, учитывающая оптические потери в волноводах. С целью уменьшения ошибок измерений, связанных с флуктуациями излучения, измеряется отношение интенсивностей светового сигнала на выходе и входе каждого интерферометра.

Перемещение ПСС в направлении, перпендикулярном к плоскости подложки, позволяет выполнять двумерный анализ волнового фронта световой волны. При этом в качестве фотоприемников могут быть использованы ПЗС-линейки. Существует следующее соотношение между среднеквадратическим отклонением величины Φ (обозначим его $\sigma(\Phi)$), мощностью излучения P , падающего на перемещающуюся апертуру, временем сканирования Δt и числом N интерферометров в линейке для данной λ : $[\sigma(\Phi)P\Delta t/N^3 = const]$. Так, например, для $\lambda=632,8$ нм при $P=10$ мВт, $\Delta t=1^{-5}$ с и $N=100$, параметр $\sigma(\Phi) < 4,5^\circ$, что соответствует ошибке определения разности оптических путей $< \lambda/80$.

Измерение угловой скорости. В основе работы оптических датчиков скорости вращения лежит эффект Саньяка, суть которого состоит в том, что оптические пути электромагнитных волн с данной λ , распространяющихся по часовой стрелке и против, во вращающемся кольцевом резонаторе, различны. Точность такого датчика пропорциональна добротности резонатора. Первые оптические датчики скорости вращения были созданы Саньяком в объемном исполнении, но из-за низкой виброустойчивости они не нашли применения в практических устройствах. С развитием лазерной техники, волоконной и планарной световодных технологий работы по созданию конкурентоспособных оптических датчиков угловой скорости получили новый импульс.

Создание промышленных волоконно-оптических первичных преобразователей угловой скорости (гироскопов) затруднено, т.к. в оптических волокнах сложно сохранять плоскость поляризации направляемого излучения. С этой точки зрения устройства на основе ПСС предпочтительны: они дешевы и технологичны в массовом производстве, хорошо сохраняют поляризацию излучения. Структура ПСПП (гироскопа) была предложена в середине 70-х годов [6-8]. Структура такого ПСПП скорости приведена на рис. 8.

На диаметрально противоположной стороне кольца излучение из резонатора частично вводится в оптически связанный с ним отрезок ПС 6, оба торца которого подключены к фотодетекторам 7. При неподвижном резонаторе из электронной схемы 2 на оба элемента 3 поступает электрический сигнал с постоянной частотой f_i , который, суммируясь с частотой излучения лазера f_0 , вводится в виде двух встречных мод с частотой $f_0 + f_i$, равной резонансной частоте неподвижного резонатора. В начале вращения резонатора вследствие эффекта Доплера и увода электромагнитной волны материалом движущегося резонатора резонансная частота для волны, движущейся против направления вращения, увеличивается, а для волны, движущейся в направлении вращения, уменьшается. Это приводит к уменьшению интенсивностей I_1 и I_2 оптических сигналов, поступающих на фотодетекторы 7. Электронная схема 2 подстраивает частоту излучения лазера f_0 по максимальному значению I_1 и вырабатывает электрический сигнал с частотой Δf , который, суммируясь с сигналом постоянной частоты f_i , поступает на элемент 3 (нижний на рис. 8). С его выхода оптический сигнал с частотой $f_0 + f_i + \Delta f$ вводится в резонатор и распространяется про-

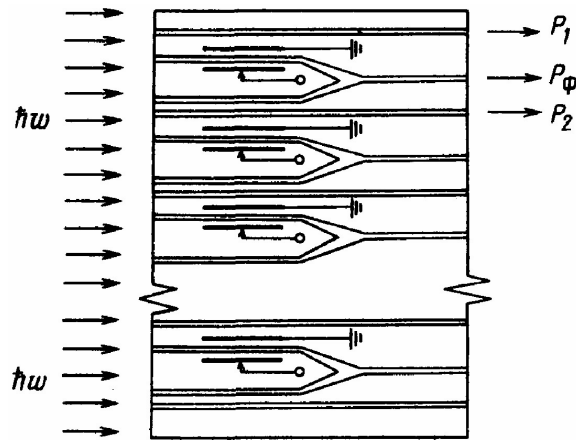


Рис. 7

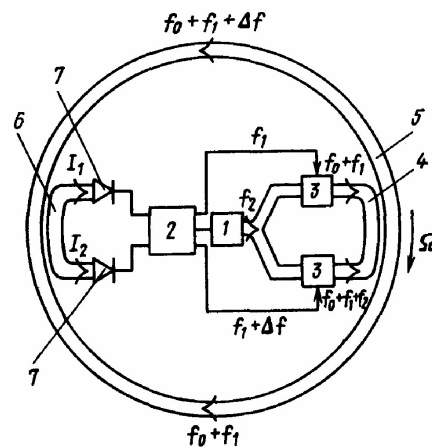


Рис. 8

тив направления вращения. Значение Δf увеличивается до тех пор, пока частота $f_0 + f_i + \Delta f$ не станет равной резонансной частоте резонатора для волны, распространяющейся против направления вращения, что фиксируется по максимальному значению I_2 . Разность Δf между резонансными частотами для волн, движущихся против и по направлению вращения, пропорциональна угловой скорости Ω : $\Delta f = 4A\Omega/(\lambda P)$, где A – площадь, ограниченная кольцом резонатора; P – периметр кольца резонатора. Точность измерения угловой скорости ПСПП определяется выражением вида:

$$\Delta\Omega = (\sqrt{2}/4A)c\lambda/[F\sqrt{QtM}],$$

где t – время измерения; c – скорость света в вакууме; Q – квантовая эффективность фотодетекторов η ; F – добротность резонатора; M – число фотонов, поступающих при резонансе в фотодетектор. Так, например, при $\lambda=632,8$ нм, $A=100$ см², $M=2\cdot 10^4$, $Q=0,5$ $t=1$ с и $F=10^9$ имеем $\Delta\Omega \approx 0,05$ град/ч.

Выводы. Предложена физическая модель планарной световодной структуры и ее математическое описание для применений ПСС в качестве первичных преобразователей (датчиков) при контроле физических параметров процессов и материалов. Показаны структуры первичных преобразователей на основе ПСС. Представлены технические характеристики преобразователей полученные экспериментально и средствами имитационного моделирования.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто фізичні ефекти, на основі яких можуть бути створені планарні світловодні первинні перетворювачі. Запропоновано варіанти технічних рішень таких перетворювачів. Обґрунтовано перспективність їхнього застосування в метрологічному контролі експериментальної фізики.

Ключові слова: планарна світловодна структура, планарний світловодний первинний перетворювач, оптоелектронний датчик.

SUMMARY

The physical effects that the base for the planar fiber sensors creation were considered. The couple of technical solutions of such the sensors were proposed. The perspective of its usage for the experimental physics control was substantiated.

Keywords: planar fiber structure, planar fiber sensor, optoelectronic sensor.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Барьяхтар В. Г. Проблемы оптимизации химико-физической (термической) обработки металлов и сплавов / В. Г. Барьяхтар, Ю. М. Буравлев, В. П. Шевченко. – Донецк.: Норд-Пресс, 2009 г. – 180 с.
2. Аш Ж. Датчики измерительных систем Кн. 1 / Ж. Аш, П. Андре, П. Дегут. – М.: Мир, 1992. – 480 с.
3. Волоконно-оптические датчики. Вводный курс для инженеров и научных работников / Под ред. Э. Удда. – М.: Техносфера, 2008. – 520 с.
4. Соколов А. Н. Волоконно-оптические датчики и системы: принципы построения, возможности и перспективы / А. Н. Соколов, В. А. Яцеев// Laitwave Russian Edition. – № 4. – 2006. – С. 44-46.
5. Хансперджер Р. Интегральная оптика: Теория и технология / Под ред. В. А. Сычугова. – М.: Мир, 1985. – 384 с.
6. Семенов А. С. Интегральная оптика для систем передачи и обработки информации / А. С. Семенов, В. Л. Смирнов, А. В. Шмалько. – М.: Радио и связь, 1990. – 197 с.
7. Маймистов А. И. Фотоника. Нелинейные оптические явления в планарных световодах / А. И. Маймистов. – М.: МИФИ, 1987. – 196 с.
8. Клэр Ж.-Ж. Введение в интегральную оптику / Ж.-Ж. Клэр. – М.: Советское радио, 1980. – 104 с.

Поступила в редакцию 20.05.2010 г.

ЭЛЕКТРОВИХРЕВЫЕ ТЕЧЕНИЯ В ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ СТАЛЕПЛАВИЛЬНЫХ ПЕЧАХ ПОСТОЯННОГО ТОКА С ПОДОВЫМ ЭЛЕКТРОДОМ*О. В. Казак, А. Н. Семко*

Работа посвящена моделированию магнитогидродинамического эффекта электровихревого движения расплава металла в ограниченных объемах на примере электрометаллургических печей постоянного тока с подовым электродом. Приводится физическая и математическая осесимметричная постановка задачи. Разработан алгоритм решения и получены результаты электромагнитных и гидродинамических полей в расплаве стали при помощи программно-вычислительных комплексов ANSYS и COMSOL.

Ключевые слова: сила Лоренца, электровихревые течения, численное моделирование.

Введение. Анализ промышленных процессов при помощи физических и математических моделей является наиболее актуальным и динамически развивающимся направлением в современных численных методах. Разработка максимально упрощенных, но в тоже время адекватно отображающих реальные процессы моделей, определение границ применения этих моделей и проверка их на адекватность наиболее сложная задача в этих методах. Упрощение моделей ведет к снижению требований к расчетной технике, программам их реализующих, а также снижает расчетное время.

Одним из таких процессов является электровихревое течения жидких проводников под действием собственного магнитного поля при пропускании через них электрического тока. Этот эффект наблюдается в целом ряде промышленных устройств: электродуговая сварка, электрометаллургический переплав (включая вакуумно-дуговые печи, электролизеры и индукционные канальные печи), выращивание кристаллов полупроводников, электрореактивные двигатели и т.д. [1]. Особое внимание при этом заслуживают электрические дуговые печи постоянного тока с подовым электродом, получившие в последнее время широкое распространение в металлургии. Эксплуатация таких печей показала, что они обладают более высоким КПД, низким процентом угара металла, меньшим износом деталей печи, и что наиболее важно, более высоким качеством приготавливаемой стали. В сравнении с дуговыми печами переменного тока, эти печи экономически выгоднее на 30 % и экологически чище на 90 % [2]. В таких печах возможно использование электрохимических реакций для очистки расплава от примесей и контроль качества стали путем корректировки состава легирующими добавками [3].

Для улучшения качества стали необходимо перемешивание расплава, которое можно производить, используя электровихревое течение. Однако у такого движения существует и негативное действие. Эксплуатация таких печей показала повышенный износ футеровки в окрестности подового электрода, причиной которого, по предварительным оценкам, является вихревое движение расплава. В среднем подовый электрод служит в 10 раз меньше чем все основные элементы печи, и выходит из строя через 300 - 400 плавов [2]. Это приводит к длительному простоям печи, дорогостоящей и технически сложной замене подины и самого подового электрода. Поэтому актуальной является задача управления электровихревыми течениями расплава.

Экспериментальные исследования электровихревых течений в сталеплавильных печах затруднены из-за высоких температур. Поэтому на практике широко проводятся эксперименты на моделях печей и сплавах, имеющих низкую температуру плавления (порядка 10 - 300 °С). Подробно такие эксперименты освещены в [4, 5]. Однако экспериментальное изучение является очень сложной и дорогостоящей задачей. Единственной альтернативой экспериментальным исследованиям является численное моделирование, которое позволяет оценить влияние разных факторов на интенсивность движения расплава металла.

В первых работах, посвященных моделированию электросталеплавильных печей постоянного тока цилиндрической формы, рассматриваются физические процессы, протекающие в расплаве в плоской или осесимметричной постановке [6-9]. В работе [8] рассматривается трехмерная модель магнитной гидродинамики для дуговой печи постоянного тока в виде сегмента сферической печи. В работах [10, 11] моделируется движение расплава под действием электрической дуги с учетом тепломассопереноса. Ряд работ посвящен не только анализу движения расплава под действием тех или иных сил, но и анализу возможности управления движением расплава. Так в работах [12, 13] предлагается управлять движением расплава за счет продувки. Однако процессы, протекающие в электросталеплавильных печах постоянного тока, являются недостаточно изученными, а модель нуждается в уточнении.

Для численного моделирования процессов в электрических печах сейчас широко используются как специализированные пакеты программ, так и пакеты мультифизики [8, 9]. Большие трудности в использовании пакетов широкого назначения возникают с выбором метода решения и соответствующих настроек, а также на этапе постановки задачи с выбором расчетной области и размерностью модели. На некоторых режимах работы процессы, протекающие в электросталеплавильной печи носят пространст-

венный характер, моделирование которого в трехмерной постановке требует значительных мощностей расчетной техники. Однако большую часть времени работы процессы в электрометаллургической печи находятся в установившемся режиме и могут быть смоделированы в осесимметричной постановке. Осесимметричная постановка задачи позволяет наиболее точно построить конечноэлементное разбиение и расположить элементы в пропорции к градиентам величин изменяющихся в рассматриваемых областях.

В настоящей работе исследуется электровихревое движение расплава в осесимметричной электрометаллургической печи постоянного тока с подовым электродом. Получено поле объемных электромагнитных сил Лоренца, ротора этих сил, а также гидродинамическая картина движения расплава под действием электромагнитных сил. Практическое применение результатов работы позволит оптимизировать работу печи и сократить расходы на выплавку металла.

Физическая и математическая постановка задачи. В работе электрической печи постоянного тока с подовым электродом можно выделить несколько основных периодов: нагрев и плавление шихты, жидкий период, во время которого приготавливается сталь, и слив жидкого металла. Время жидкого периода колеблется от 15 до 60 % от общего времени плавки в зависимости от марки приготавливаемой стали и исходного сырья [14, 15]. В жидкий период плавки металл полностью расплавлен и находится при температуре около 1550-1600 °С. Оценим процессы в промышленной осесимметричной дуговой печи в жидкий период. Тепло, производимое электрической дугой, мало и только компенсирует потери тепла через защитный слой футеровки. Относительная мощность джоулева тепла невелика и составляет около 10^{-5} по сравнению с тепловой мощностью электрической дуги. Тепловое число Пекле, характеризующее относительную роль конвективного переноса тепла в сравнении с его переносом за счет молекулярной теплопроводности $Pe = 0,055$. Число Грасгофа, характеризующее отношение архимедовой силы в неоднородном поле температур к силам вязкого трения, составляет $G_r = 0,054$. Эти оценки позволяют на данном этапе рассматривать процессы в расплаве без учета конвекции и теплопереноса.

На рис. 1 приведена упрощенная схема цилиндрической электросталеплавильной печи постоянного тока с двумя электродами. Здесь 1 – огнеупорная футеровка, 2 – жидкий металл, 3 – электроды. Будем считать, что печь имеет осесимметричную форму и круглые электроды расположены осесимметрично. Так как вся конструкция имеет осевую симметрию, то и протекающие в ней физические процессы будут обладать осевой симметрией.

Рассмотрим гидродинамические и электромагнитные процессы, протекающие в такой печи. Предположим, что металл в печи расплавлен и на электроды подано некоторое постоянное напряжение, положительное на нижний и отрицательное на верхний электрод. Под действием приложенного к электродам напряжения в жидком металле потечет ток. В силу симметрии линии плотности тока \vec{j} будут лежать в меридиональных сечениях. Из

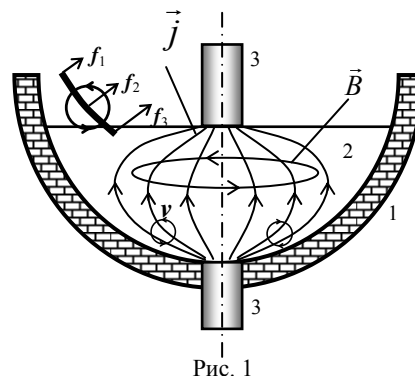


Рис. 1

закона полного тока для любого поперечного сечения печи $I = \oint_S \vec{j} d\vec{S} = const$, где S – площадь поперечного сечения печи, и хода линий тока, можно сделать вывод, что плотность тока должна убывать при удалении от оси симметрии. Этот ток создает осесимметричное магнитное поле, вектор магнитной индукции \vec{B} которого лежит в азимутальной плоскости, а линии магнитной индукции – концентрические окружности в этой плоскости.

На проводник с током в магнитном поле действует сила Ампера с объемной плотностью $\vec{f}_e = [\vec{j}, \vec{B}]$, которая перпендикулярна вектору плотности тока \vec{j} и вектору магнитной индукции \vec{B} . Для рассматриваемой схемы сила \vec{f}_e направлена к оси симметрии, лежит в меридиональной плоскости и имеет две составляющие: радиальную и осевую. Радиальная составляющая направлена к оси симметрии, а меридиональная к противоположному электроду. Радиальная составляющая силы Ампера вызывает поперечное сжатие проводника (пинч-эффект).

Выделим небольшой кусочек жидкого проводника вдоль линии тока слева от электрода (см. рис. 1). На разные части этого кусочка будет действовать разная удельная сила, уменьшающаяся при удалении от оси симметрии ($f_1 < f_2 < f_3$). Эта сила сообщает выделенному элементу поступательное и вращательное движение, так как создает вращающий момент. Под действием этой силы элемент будет перемещаться как целое к оси симметрии и поворачиваться против часовой стрелки. Но так как проводник жидкий, то в нем возникнет вихревое течение, направление которого указано на рис. 1. Необходимым условием возникновения вихревого течения ($\text{rot } \vec{v} \neq 0$) является вихревой характер электромагнитной силы \vec{f}_e ($\text{rot } \vec{f}_e \neq 0$). Такой характер течения как раз и наблюдается при пространственной неоднородности электрического тока.

В данном примере вихревое движение жидкого проводника возникает при подводе электрического тока в отсутствие внешних магнитных полей при пространственной неоднородности электрического тока. Электрический ток в жидком проводнике создает собственное магнитное поле, которое при определенных условиях вызывает вихревое движение жидкости.

Для построения физической модели процесса сделаем следующие допущения:

- 1) среда считается немагнитной ($\mu = 1$, для железа точка Кюри равна 760°C);
- 2) среда является хорошим проводником и ее диэлектрической проницаемостью можно пренебречь ($\varepsilon=1$);
- 3) конвективным током, вызванным движением среды, по сравнению с током проводимости, можно пренебречь;
- 4) физические характеристики среды предполагаются однородными и изотропными;
- 5) расплав считается несжимаемой жидкостью с одинаковой по объему температурой, тепловая конвекция не учитывается;
- 6) химические реакции не учитываются.

Протекающие в электрической печи процессы при выплавке металла нестационарные. Однако они протекают достаточно медленно и с хорошей точностью могут описываться в стационарной постановке с учетом электромагнитной силы Лоренца $\rho^{-1}[\vec{j}, \vec{B}]$. По предварительным оценкам число Рейнольдса составляет величину порядка 10^6 , что дает основания рассматривать движение расплава как турбулентное. Поэтому для замыкания уравнений движения использовалась $k-\varepsilon$ модель турбулентности. Для квазистационарных процессов система уравнений магнитной гидродинамики, описывающих турбулентное движение изотермического расплава металла в печи, имеет вид [7, 16-18]:
уравнение Навье-Стокса:

$$(\vec{v}\nabla)\vec{v} = \vec{g} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\Delta\vec{v} + \frac{1}{\rho}[\vec{j}, \vec{B}]; \quad (1)$$

уравнение неразрывности

$$\nabla\vec{v} = 0; \quad (2)$$

уравнения $k-\varepsilon$ модели турбулентности

$$\rho\vec{v}\nabla k = \nabla\left(\left(\eta + \frac{\eta_T}{\sigma_k}\right)\nabla k\right) + \eta_T P(\vec{v}) - \rho\varepsilon; \quad (3)$$

$$\rho\vec{v}\nabla\varepsilon = \nabla\left(\left(\eta + \frac{\eta_T}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla\varepsilon\right) + C_{\varepsilon 1}\varepsilon\eta_T P(\vec{v}) - \frac{C_{\varepsilon 2}\rho\varepsilon^2}{k}; \quad (4)$$

где

$$P(\vec{v}) = \frac{\nabla\vec{v}}{\nabla\vec{v} + \nabla\vec{v}^T}, \quad \eta_T = \frac{C_\mu\rho k^2}{\varepsilon}; \quad (5)$$

уравнения Максвелла

$$[\nabla, \vec{E}] = 0; \quad \nabla\vec{D} = \rho_e; \quad (7)$$

$$\nabla\vec{B} = 0; \quad [\nabla, \vec{H}] = \vec{j}; \quad (8)$$

закон Ома для движущейся среды

$$\vec{j} = \sigma(\vec{E} + [\vec{v}, \vec{B}]); \quad (9)$$

закон сохранения заряда

$$\nabla\vec{j} = 0; \quad (10)$$

где \vec{v} , ρ и p – скорость, плотность и давление жидкости; \vec{g} – ускорение свободного падения; \vec{j} – плотность тока; \vec{B} – индукция магнитного поля; ν – коэффициент кинематической вязкости среды; $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, C_μ – константы модели турбулентности; k , ε – параметры модели турбулентности; η – вязкость; η_T – турбулентная вязкость; σ – удельная проводимость среды; \vec{E} – напряженность электрического поля. В уравнении (1) учтены силы: давления $-\rho^{-1}\nabla p$, вязкого трения $\nu\Delta\vec{v}$, тяжести \vec{g} , электромагнитная сила Лоренца $\rho^{-1}[\vec{j}, \vec{B}]$.

Задача решалась при следующих граничных условиях:
условия прилипания на границе расплава

$$\vec{v} = 0. \quad (11)$$

для электрического поля

$$E_{\tau_1} = E_{\tau_2}, D_{n_1} = D_{n_2}; \quad (12)$$

для магнитного поля

$$B_{n_1} = B_{n_2}, B_{\tau_1} = B_{\tau_2}; \quad (13)$$

для плотности тока на поверхности футеровки

$$j_n = 0; \quad (14)$$

на торцах электродов

$$j_n = j_0 = I/S. \quad (15)$$

Условия прилипания использовались как в соприкосновении расплава с футеровкой, так и со шлаком на верхней поверхности расплава. Такое приближение справедливо, т.к. вязкость шлака на поверхности расплава значительно выше вязкости расплава. На границах расчетной области использовались условия магнитной и электрической изоляции (электрическое и магнитное поле не распространяется за пределы расчетной области) или неотражающие граничные условия (электрическое и магнитное поле не отражается от искусственных границ расчетной области) [19], которые были опробованы в работах [20].

Стратегия решения с использованием сопряженного анализа. Рассматриваемая задача не имеет аналитического решения и поэтому решается численно. По результатам анализа численных методов решения был выбран метод конечных элементов [21] и система ANSYS [18]. Задача относится к классу мультифизических и стратегия решения такой задачи состоит из следующих этапов: моделирование электромагнитных полей; моделирование электровихревых течений.

Такая последовательность в решении задачи обусловлена особенностями решения задач мультифизики в рамках системы ANSYS. Результатом моделирования электромагнитных полей является значения электромагнитной силы и других электромагнитных параметров, полученные для каждой узловой точки по объему расплава. Кроме того, результатом решения 1-го этапа является определение количества Джоулева тепла на единицу объема, полученное в каждой узловой точке. Задавая распределения электромагнитной силы в виде начальной нагрузки на 2-м этапе можно рассчитать скорость движения расплава, вызванное электромагнитным воздействием. Далее необходима проверка влияния движения расплава на распределение электромагнитных параметров и тепла по объему. Учитывая все эти факторы и повторяя эту последовательность до получения сходимости результатов, получаем распределение скоростей по объему расплава максимально приближенное к промышленным электросталеплавильным печам.

Моделирование электровихревых движений в осесимметричной печи. Рассмотрим электромагнитные и гидродинамические процессы в модели осесимметричной печи постоянного тока, схема и размеры расчетной области которой приведены на рис. 2.

Для моделирования за основу взяты данные, соответствующие параметрам реальной промышленной печи: сила тока $I = 80$ кА, проводимость металла $\sigma_1 = 0,9 \cdot 10^6$ (Ом·м)⁻¹, проводимость электродов $\sigma_2 = 0,2 \cdot 10^6$ (Ом·м)⁻¹, относительная магнитная проницаемость металла и окружающей среды $\mu = 1$, относительная диэлектрическая проницаемость среды $\varepsilon = 1$. Гидродинамические параметры для температуры расплава были взяты из [22], константы $k - \varepsilon$ модели турбулентности (3)-(5) из работы [9].

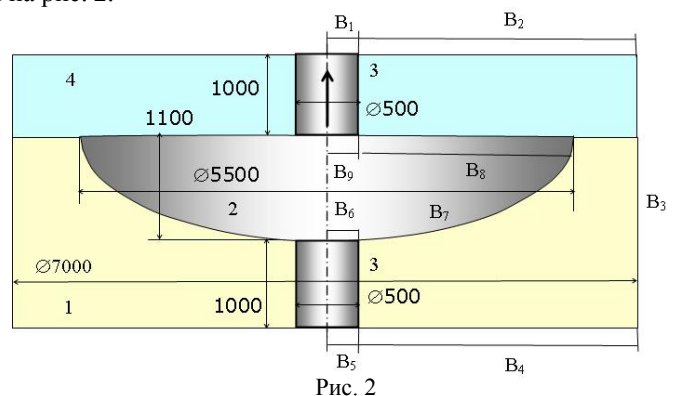


Рис. 2

В силу осевой симметрии задачи расчетная область составляла половину реальной области. Расчеты проводились с использованием различных видов анализа на различных сетках. Выяснено существенное влияние на результаты расчетов размеров расчетной сетки и формы конечных элементов. По предварительному анализу было определено оптимальное разбиение на конечные элементы и их форма. Расчетная область разбивалась на элементы неравномерно: в области подового электрода, где большие градиенты электромагнитных параметров, элементы располагались густо и имели небольшие размеры, порядка 0,01 от радиуса электрода. По мере удаления от подового электрода, в связи с уменьшением градиентов параметров, размеры элементов увеличивались пропорционально расстоянию до оси симметрии, увеличиваясь в десять раз на периферии.

Для решения задачи использовались следующие условия для границ, обозначенных на рис. 2: для границ V_1, V_5, V_6, V_9 плотность тока (15); для границ V_8, V_7 изоляция электрического тока (14); для границ V_6, V_7, V_8, V_9 условия непрерывности электрического (12) и магнитного поля (13).

Гидродинамические процессы рассматривались только для области расплавленного металла и на границах чаши печи V_6, V_7, V_8, V_9 задавалось условие прилипания (11).

Исследовано влияние граничных условий для электромагнитного поля на искусственных границах расчетной области V_2, V_3, V_4 на параметры в центральной зоне. В расчетах использовались условия магнитной изоляции, которые являются стандартными для электромагнитного анализа, и неотражающие граничные условия. Выяснено незначительное влияние разных граничных условий на параметры в центральной зоне. Результаты расчетов с условиями магнитной изоляции и неотражающими условиями различаются в пределах погрешностей расчета на 0,7%. В дальнейшем расчеты проводились с неотражающими граничными условиями и за расчетную область был выбран расплав металла, защитный слой футеровки, верхний и нижний электроды.

На рис. 3 приведено векторное и контурное поле силы Лоренца около подового электрода (анода). На рисунке обозначены: 1 – огнеупорная футеровка, 2 – жидкий металл, 3 – электроды, 4 – воздух. Значение силы Лоренца в расчетах изменялось от 0,01 Н до 39,3 кН и в среднем составило величину порядка 30% от объемной силы тяжести. Результаты расчетов подтверждают факт, что сила Лоренца в печах с подовым электродом является определяющей при возникновении электровихревого течения. На рис. 4 приведено контурное поле ротора силы Лоренца.

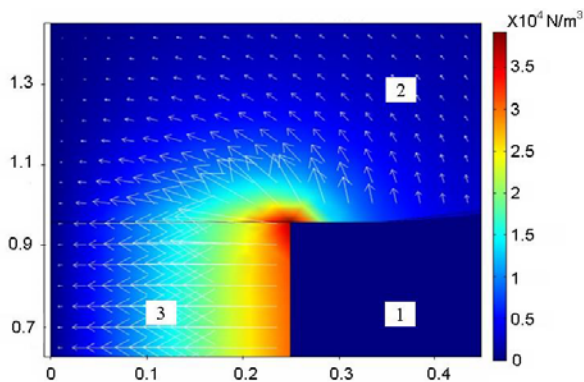


Рис. 3

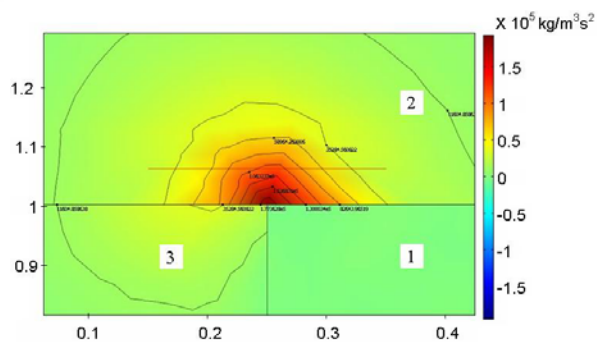


Рис. 4

Из графиков видно, что ротор силы Лоренца достигает максимальных значений в области подового электрода, что подтверждает теоретическое предположение о вихревом характере движения расплава, вызванного этой силой.

Для проверки предположения об отсутствии существенно влияния термогравитационной конвекции на общий характер движения расплава, а также для завершения первого этапа было смоделировано распределение температур по объему расплава. На рис. 5 представлены изолинии и контурный график распределения температуры по объему расплава. Как видно из графика наибольший градиент температур локализован в области электрической дуги (области верхнего электрода), а распределение температур происходит сверху вниз, что делает невозможным возникновение существенных конвективных потоков.

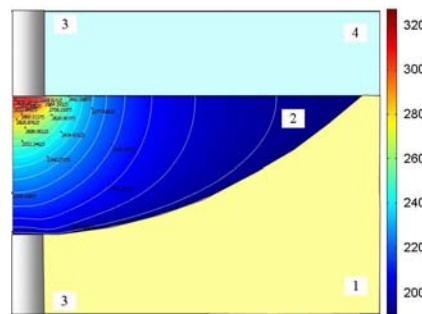


Рис. 5

На следующем этапе, согласно стратегии решения задачи, были смоделированы гидродинамические процессы в расплаве металла в осесимметричной постановке. На рис. 6 приведены гидродинамические поля модуля скорости, вектора скорости и линии тока расплава. Как видно из графиков в расплаве возникает интенсивное вихревое движение. Вихрь образуется в области подового электрода, как показано на рис. 6, и там имеет максимальную скорость. Поток расплава на оси симметрии восходящий и, достигая верхней границы объема расплава, устремляется вниз. Максимальная скорость вихревого движения наблюдается на оси электродов и достигает 0,5 м/с. Скорость расплава у торца анода возле футеровки около 0,1 м/с.

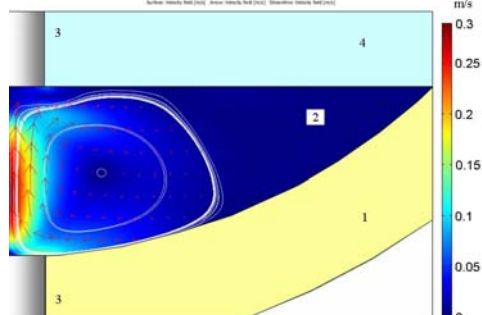


Рис. 6

Рассмотрим потери энергии за счет турбулентного характера течения. На рис. 7 представлен график турбулентной вязкости по объему расплава. Как видно из графика турбулентная вязкость достигает

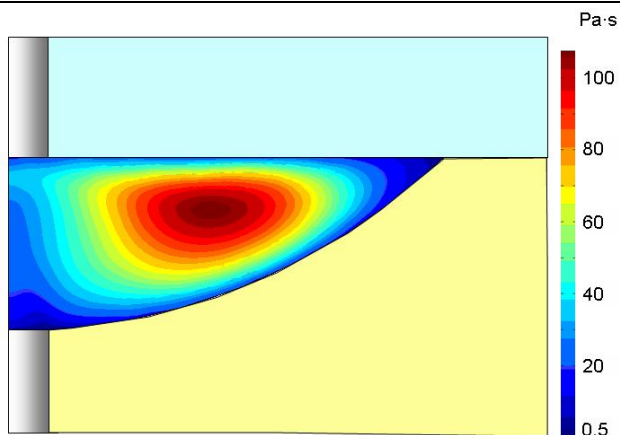


Рис. 7

100 Па·с, что превышает динамическую вязкость расплавленного металла при заданной температуре на три порядка. Однако даже столь существенное возрастание вязкости среды в целом не приводит к существенному увеличению диссипации энергии, а следственно и нагреву металла за счет вязкой диссипации энергии.

Оценивая распределение турбулентной вязкости по объему, а также график распределения скоростей не сложно заметить, что наибольшая скорость и минимальные значения турбулентной вязкости находятся в области подового электрода на расстоянии порядка радиуса электрода. Это свидетельствует о наибольшем влиянии электровихревого течения на размывание

футеровки в непосредственной близости подового электрода, что подтверждается экспериментальными данными по повышенному износу подового электрода и футеровки в его области.

Для верификации полученных результатов аналогичные расчеты были проведены в системе COMSOL. Сравнение результатов полученных в COMSOL и ANSYS показало незначительное отклонение, которое составило порядка 5%. Хорошее совпадение расчетов разными методами и пакетами говорит о надежности моделей, методов и достоверности полученных результатов.

Выводы. Для описания процессов в электрической печи использована модель магнитной гидродинамики, учитывающая пространственное распределение электрического тока, электрического и магнитного полей и силы Лоренца. Разработана стратегия решения поставленной сопряженной задачи при помощи пакета ANSYS. В осесимметричной и пространственной постановке решена задача, на которой отработаны методы расчета электромагнитных и гидродинамических полей, оценено влияние искусственных граничных условий на границах расчетной области на параметры в центральной зоне. Определен оптимальный тип конечных элементов, размеры сетки и вид анализа.

Показано, что пространственное распределение тока в расплаве металла приводит к возникновению вихревого поля силы Лоренца, которая вызывает электровихревое движение расплава. Установлено, что сила Лоренца составляет около 30 % от объемной силы тяжести и играет определяющую роль в возникновении вихревого движения расплава, максимальная скоростью которого достигает 1 м/с.

Результаты расчетов в ANSYS сравнивались с экспериментальными данными и расчетами в COMSOL. Хорошее совпадение расчетов разными методами и пакетами говорит о надежности методов и достоверности результатов.

РЕЗЮМЕ

Робота присвячена моделюванню електровихревих полів в обмежених об'ємах металу на прикладі металургійних печей. Наводиться фізична та математична вісі симетрична постановка задачі. Розроблений алгоритм розв'язання та отримані результати електромагнітних та гідродинамічних полів у розплаві сталі, за допомогою програмно-обчислювального комплексу ANSYS.

Ключові слова: сила Лоренца, електровихрові течії, чисельне моделювання.

SUMMARY

Work is devoted to modelling magneto hydrodynamic effect of electro vortex movement in finite volume of liquid metal appears in DC electro steel smelting furnace with bottom electrode. The physical and mathematical axial symmetry statements are provided. The algorithm of solution is developed. The results of electromagnetic and hydrodynamic fields in liquid steel with help of ANSYS and COMSOL software packages.

Key words: Lorenz force, electro vortex movement, numerical modelling.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Электровихревые течения / В.В. Бояревич, Я.Ж. Фрейберг, Е.И. Шилова и др. – Рига: Зинатие, 1985. – 315 с.
2. DC arc melting furnaces / S.M. Nekhamin, A.G. Lunin, M.M. Krutyanskii, A.K. Filippov // Refractories and Industrial Ceramics. – 2005, Vol. 46, No 1. – P. 37-39.
3. Губинский В. И. Металлургические печи / В. И. Губинский – Днепропетровск: НМетАУ, 2006. – 85 с.
4. Исследование тепловых и гидродинамических эффектов, сопровождающих растекание электрического тока в объеме жидкого металла / В. М. Жилин, Ю. П. Ивочкин, А.А. Оксман и др. // VI minsk international heat and mass transfer for UM MIF 2008, (Minsk, May 19-23, 2008). – Minsk, 2008. – P. 9-16.
5. Ячиков И. М. Моделирование электровихревых течений в ванне дуговой печи постоянного тока / И. М. Ячиков, О. И. Карандаева, Т. П. Ларина. – Магнитогорск, ГОУ ВПО «МГТУ», 2008. – 234 с.
6. Ushio M. Mathematical modelling of flow field and heat transfer in high-current arc discharge / M. Ushio, J. Szekely, C. W. Chang // Ironmaking and Steelmaking. – 1981, No 6. – P. 279-286.

7. Szekely J. Heat-transfer fluid flow and bath circulation in electric arc furnaces and dc plasma furnaces / J. Szekely, J. McKelliget, M. Choudhary // Ironmaking and Steelmaking. – 1983, Vol. 10, No 4. – P. 169-179.
8. Henning B. DC furnace containment vessel design using computational fluid dynamics / B. Henning, M. Shapiro, L.A. le Grange // Proceedings: Tenth International Ferroalloys Congress; INFACON X: «Transformation through Technology» – (Cape Town, South Africa, 1-4 February 2004). – 2004. – P. 565-574
9. Wang F. Numerical study of dc arc plasma and molten bath in dc electric arc furnace / F. Wang, Z. Jin, Z. Zhu // Ironmaking and Steelmaking. – 2006, Vol 33, No 1. – P. 39-44
10. Modeling of heat transfer from an electric arc – a simulation of heating – Part I / J. Alexis, M. Ramirez, G. Trapaga, P. Jonsson // Electric Furnace Conference Proceedings. –1999. – P. 279-287.
11. Modeling of a DC Electric Arc Furnace – Heat Transfer from the Arc / J. Alexis, M. Ramirez, G. Trapaga, P. Jonsson // ISIJ International. – 2000, Vol. 40, No 11. – P. 1089-1097.
12. Effects of the Arc, Slag and Bottom bubbling of argon on the fluid flow and heat transfer of a DC EAF Bath – Part II / M. Ramirez, G. Trapaga, J. Alexis, P. Jonsson // Electric Furnace Conference Proceedings. – 1999. – P. 751-761.
13. Ramirez M. J. Fluid flow and heat transfer in steel or steel/slag baths of a DC electric arc furnace under the influence of the arc and gas injection / M. Ramirez, G. Trapaga, and McKelliget // Paper presented at the Brimacombe Memorial Symposium (Vancouver, British Columbia, Canada, 4 October 2000). – 2000. – P. 14-18
14. Малиновский В. С. Техничко-экономические результаты промышленного освоения дуговых печей постоянного тока нового поколения / В. С. Малиновский, И. Б. Власова, В. Д. Малиновский // Черная металлургия: Бюл. НТИ. – 2010, № 2. – С. 26-40.
15. Малиновский В. С. Дуговые печи постоянного тока нового поколения (ДППТНП) в сталеплавильном производстве./ В.С. Малиновский // Труды 6-го конгресса сталеплавильщиков. – 2001. – С. 213-220.
16. Ландау Л. Д. Теоретическая физика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц – М.: Физматлит, 2001. – Т. VIII: Электродинамика сплошных сред. – 656 с.
17. Повх И. Л. Магнитная гидродинамика в металлургии / И. Л. Повх, А. Б. Капуста, Б. В. Чекин. – М.: Металлургия, 1974. – 240 с.
18. ANSYS Advanced analysis techniques guide ANSYS Release 10.0. – U.S.A. Canonsburg, august 2005. – 340 p.
19. Ryaben'kii V. S. Global discrete artificial boundary conditions for time-dependent wave propagation / V. S. Ryaben'kii, S. V. Tsynkov, V. I. Turchaninov // Journal of Computational Physics. – 2002, No 174 – P. 712-758
20. Казак О. В. Вихревое движение расплава в сталеплавильных печах / О. В. Казак, А. Н. Семко // Международная научная конференция «Физика конденсированного состояния» (ФКС-XVII) (Гродно, Беларусь, 21-23 апр. 2010). – 2010. – С. 39 – 42.
21. Trif D. Basics of fluid mechanics and introduction to computational fluid dynamics / D. Trif, T. Petrila. – Boston: Springer Science Business Media Inc, 2005. – 438 p.
22. Таблицы физических величин. Справочник. // Под ред. И. К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.

Надійшла до редакції 20.04.2010 р.

УДК 621.391.822

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО ШУМА ВЧ АВТОГЕНЕРАТОРА КЛАССА Е

В. В. Крыжановский*, Д. В. Чернов

*Silicon Works Co., Ltd, Дейджон, Республика Корея

Для решения задачи изучения фазового шума в автогенераторах класса Е, которые характеризуются высоким КПД и сильно нелинейным режимом, был рассчитан и изготовлен генератор на частоту 5 МГц на МОП ПТ IRF510. Были измерены его частотные характеристики – зависимости частоты генерации от напряжения питания, спектр гармоник в выходном сигнале и проведено измерение спектра фазового шума в широком диапазоне напряжения питания. Впервые полученные данные о изменении шума при изменении напряжения позволяют сделать вывод о существенном влиянии условий переключения транзистора на уровень фазового шума автогенераторов класса Е.

Ключевые слова: фазовый шум, автогенератор класса Е, экспериментальное исследование шумов автогенератора, МОП ПТ.

Введение. Для современных систем связи одной из важнейших характеристик усилительных и генерирующих устройств является фазовый шум, который ограничивает скорость передачи данных [1]. Вследствие наличия механизмов ограничения амплитуды сигнала в активных устройствах, к которым относятся отрицательная обратная связь и явления насыщения, амплитудный шум имеет существенно меньшее значение и доминирующим является фазовый шум [2]. Этот шум имеет разнообразную природу, и одним из его компонентов является шум $1/f$ или фликкер-шум [2, 3]. В связи с широким использованием усилителей и автогенераторов класса Е, (в основном в энергетических применениях, но в последнее время их продвигают и в область телекоммуникаций [4, 6]), становится актуальной задача определения шумовых колебаний, генерируемых устройствами, работающими в классе Е. В данной работе экспериментально измерен фазовый шум высокочастотного автогенератора класса Е на частоту 5 МГц, построенного по известной схеме [6-8]. Выбор такого объекта исследования определяется изученностью его энергетических характеристик, наличием методики расчета и возможностью учета влияния различных факторов на выходные характеристики автогенератора. В отличие от СВЧ автогенератора [9], в высокочастотном автогенераторе легче провести анализ причин, создающих определенный уровень фазового шума. Накопление данных по характеристикам ВЧ усилителей и автогенераторов класса Е позволяет затем применить полученный опыт для совершенствования устройств микроволнового диапазона [7].

Цель работы – экспериментальное исследование фазовых шумов и спектра выходного сигнала ВЧ автогенератора класса Е при изменении его режима работы.

Автогенератор класса Е. На основе работы [6] был рассчитан генератор на МОП транзисторе IRF510 на частоту 5 МГц и выходную мощность 400 мВт. Параметры устройства представляют собой такое сочетание свойств активного прибора и частоты, которые соответствуют гораздо более высокочастотным автогенераторам. Максимальная частота, на которой транзистор IRF510 может работать со 100% КПД при учете только его выходной емкости (около 95 пФ), в приближении идеального ключа составляет 25 МГц, при расчете по формулам работы [10]. С учетом того, что суммарная длительность нарастания и спада переходной характеристики транзистора для работы в ключевом режиме класса Е может быть до 30 % периода усиливаемой (генерируемой) частоты [7], получим для данного транзистора частоту около 7 МГц. Выбранная частота генерации устройства составляет около 1/3 максимальной частоты, такие соотношения обычно выполняются в СВЧ диапазоне при использовании арсенид галлиевых полевых транзисторов с барьером Шоттки. Таким образом, исследуемый автогенератор может дать указания на свойства СВЧ устройств, в которых транзисторы используются на одной трети граничной частоты [7]. На рис. 1 показана схема автогенератора. Параметры элементов приведены в табл. 1.

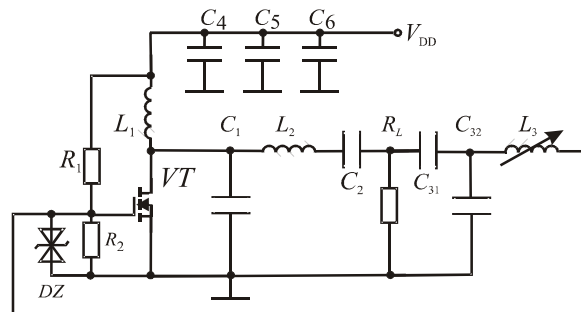


Рис. 1. Схема автогенератора с фильтром помех в цепи питания

Таблиця 1
Значення елементів схеми автогенератора класу Е на частоту 5 МГц

Елемент	Номинал	Елемент	Номинал
R_1	100 кОм	C_4	10 пФ
R_2	200 кОм	C_5	1 нФ
R_L	51 Ом	C_6	100 мкФ
C_1	133 пФ	L_1	Дроссель 10 мГн
C_2	161 пФ	L_2	7,73 мкГн
C_{31}	827 пФ	L_3	7,86 мкГн
C_{32}	28,05 нФ	VT	IRF 510

Експериментальне дослідження автогенератора. Експериментальне дослідження автогенератора класу Е проводилося з використанням аналізатора спектра Agilent E4440A, на якому була встановлена опція «226 – Вимірювання фазового шуму». Схема вимірювань показана на рис. 2, де БП – регульований блок живлення з вбудованим вимірювачем постійного напруги та споживаного струму.

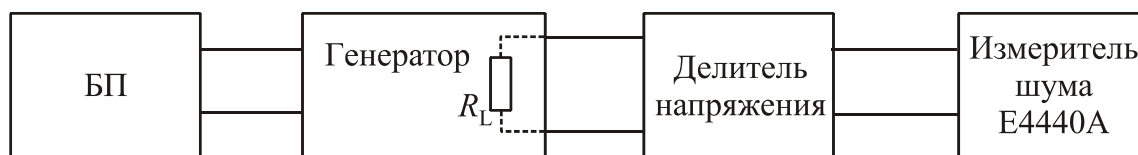


Рис. 2. Блок-схема вимірної установки

Делитель напруги використовувався у вигляді з'єднаних зовнішніх резисторів, його амплітудно-частотна характеристика з урахуванням вхідної ємності приладу була виміряна за допомогою використовуваного спектроаналізатора E4440A з застосуванням каліброваного генератора з опорним рівнем 10 дБм на частотах перших п'яти гармонік вихідного сигналу.

На рис. 3, а показана залежність частоти генерації від напруги живлення. Відносне змінення частоти генератора становить 1,3 % при зміні напруги живлення від 2,8 до 6,2 В. Ця характеристика збігається з параметрами автогенератора на транзисторі IRF530 [6] і відрізняється монотонною залежністю від автогенератора класу Е на транзисторі МТР3055Е [9], обидва генератори генерували частоту 0,8 МГц.

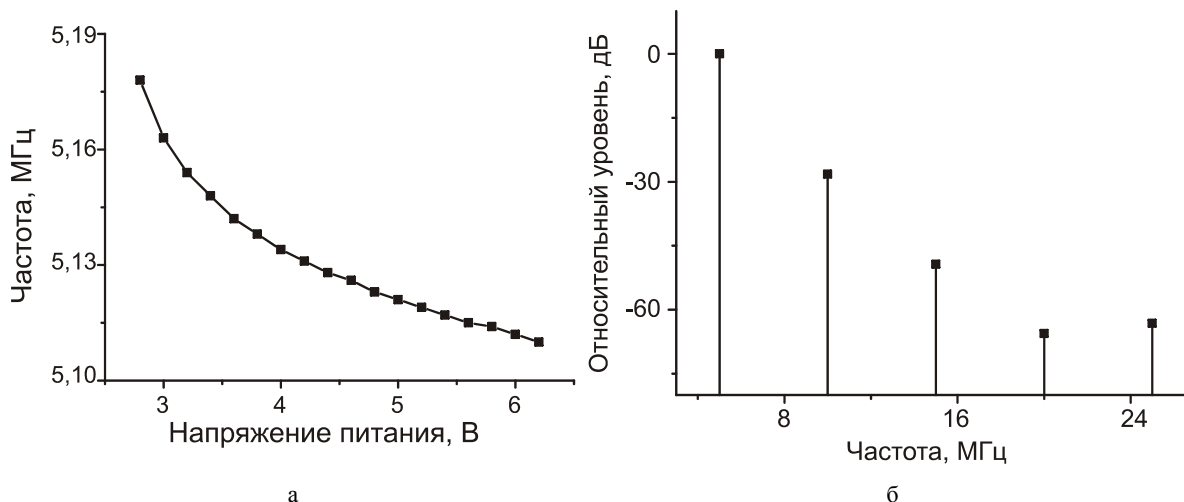


Рис. 3. Характеристики вихідного сигналу автогенератора: а) залежність частоти генерації від напруги живлення; б) потужність вищих гармонік відносно основної при напругу живлення 5 В

На рис. 3, б показаний відносний рівень гармонік вихідного сигналу генератора при напругу живлення 5 В. Відносний рівень другої гармоніки на 7 дБ, а третью на 3,5 дБ вище, ніж у роботі [6], що пов'язано з меншою навантаженою добротністю контура L_2C_2 . Разом з тим спектральні характеристики досліджуваного автогенератора близькі до раніше опублікованим, тому цей автогенератор може служити базою для порівняння шумових характеристик ВЧ і СВЧ автогенераторів класу Е.

Рис. 4 показує характерний ход частотної залежності спектра фазового шуму автогенератора класу Е при різних напругах живлення. Показана спектральна щільність фазового шуму відносно рівня несущої – потужність шуму в полосі 1 Гц, поділена на потужність першої гармоніки напруги генератора на вході спектроаналізатора. Шум при расстройках від несущої більше ніж 20 кГц, практично не залежить від напруги живлення.

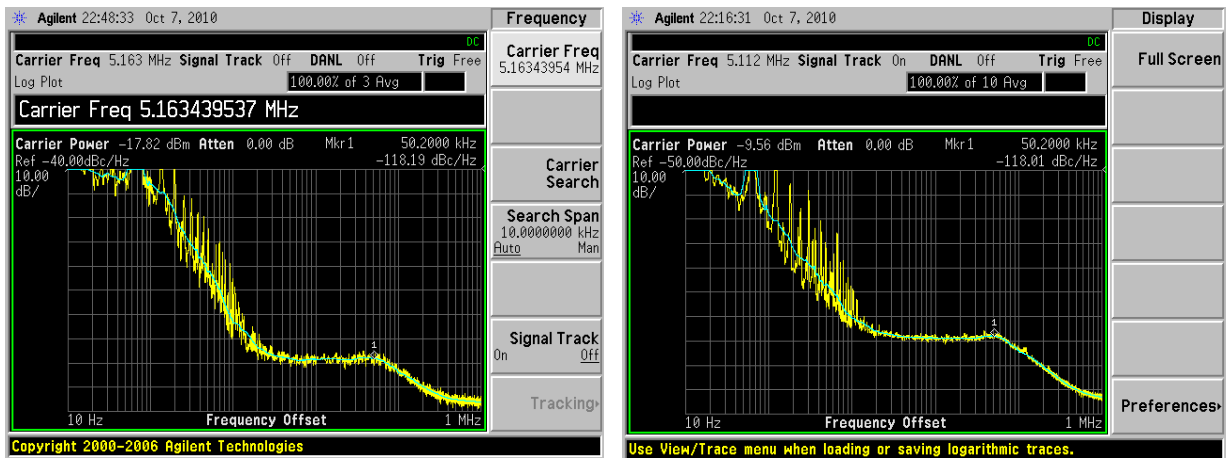


Рис. 4. Спектральна залежність фазового шуму при напругах 3 В (а) і 6В (б)

Однак при менших відстанях від несущої залежність від напруги виражена сильно (рис. 5). При напругі 3 В, коли вихідна напруга автогенератора, яка лінійно залежить від напруги живлення [7], стає малою, шум поблизу несущої різко зростає і досягає значень – 45 дБн/Гц при відстані від несущої 1 кГц. В той же час при напругі живлення 6 В і такій же расстройке шум зменшується до – 70 дБн/Гц.

Ця залежність пов'язана з ключовим режимом роботи автогенератора класу Е. Тільки при наявності достаточного рівня сигналу на затворі транзистора відбувається його чітке переключення, що сприяє збереженню стабільної частоти. Таким чином, для автогенератора класу Е основним механізмом зростання фазового шуму є збільшення часу переключення активного елемента (транзистора), що призводить до підвищення чутливості фази коливань до шумів, що діють на вході транзистора. Ці залежності необхідно врахувати при розробці теорії фазового шуму в автогенераторах класу Е.

Висновки. Розраховано і виготовлено автогенератор класу Е на частоту 5 МГц з використанням польового МОП транзистора IRF510. Експериментально виміряно залежності частоти генерації від напруги живлення. Отримані значення фазового шуму в номінальному режимі роботи автогенератора. Вперше отримані дані про зміну шуму при зміні напруги живлення дозволяють зробити висновок про суттєвий вплив умов переключення транзистора на рівень фазового шуму автогенераторів класу Е.

РЕЗЮМЕ

Для рішення задачі вивчення фазового шуму у автогенераторах класу Е, які характеризуються високим ККД а також суттєво нелінійним режимом, було розроблено та виготовлено генератор на частоту 5 МГц на МОН ПТ IRF510. Було виміряно його частотні характеристики – залежність частоти генерації від напруги живлення, спектр гармонік у вихідному сигналі та проведено вимірювання спектру фазового шуму в широкому діапазоні напруги живлення. Вперше отримані дані про рівень шуму при зміні напруги живлення дозволяють зробити висновок про суттєвий вплив умов переключення транзистора на рівень фазового шуму автогенератора класу Е.

Ключові слова: фазовий шум, автогенератор класу Е, експериментальні дослідження шуму автогенератора, МОН ПТ.

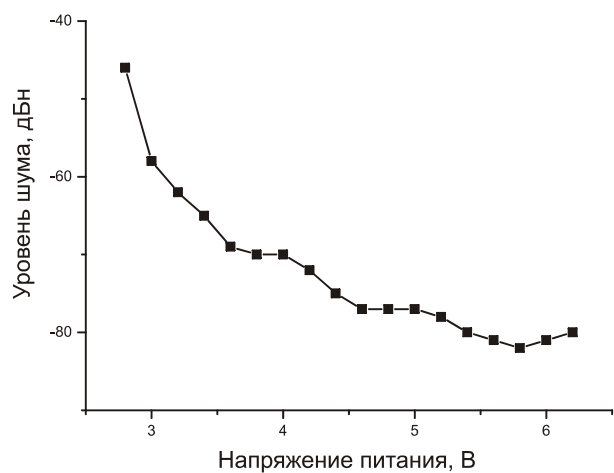


Рис. 5. Залежність відносного рівня фазового шуму автогенератора при расстройке 2 кГц від несущої

SUMMARY

The supply voltage dependency of the phase noise spectrum of class-E oscillator with 5 MHz frequency built on IRF510 field transistor was measured. The spectrum of the output signal harmonics as well as supply voltage dependency of the oscillation frequency were measured. Make conclusion about substantial influence of transistor switching terms on the level of class E oscillator phase noise.

Keywords: phase noise, class E oscillator, experimental investigation oscillator noise, MOSFET.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Галкин В. А. Цифровая мобильная радиосвязь / В. А. Галкин. – М.: Горячая линия - Телеком, 2007. – 432 с.
2. Lee T. H. Oscillator Phase Noise: A Tutorial / T. H. Lee, A. Hajimiri // IEEE J. Of Solid-State Circuits. – 2000. – Vol. 35, No. 3. – P. 326-336.
3. Моделирование фликкер-шума в схеме смесителя на MOSFET / В.В. Крыжановский, Ю. В. Рассохина, В. Г. Крыжановский, Б. В. Бондарев // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: материалы 18-й международной Крымской конференции (г. Севастополь, 8-12 сентября 2008 г.) – Севастополь, 2008. – С. 137-138.
4. Cantu H. I. Inverse Class E amplifier and oscillator phase noise characteristics / H. I. Cantu, T. Mury, V. F. Fusco / European Microwave Conf. (2007. 9-12 Oct.). – 2007. – P. 740-742
5. Additive Phase Noise in Linear and High-Efficiency X-Band Power Amplifiers / J. Breitbarth, S. Pajic, N. Wang, Z. Popovic / 2006 IEEE MTT-S Int. Microwave Symp. Dig, San Francisco, CA (Jul. 2006). – 2006. – P. 1871-1874.
6. Class-E MOSFET Tuned Power Oscillator Design Procedure / M. K. Kazimierczuk, V. G. Krizhanovski, Ju. V. Rassokhina, D. V. Chernov // IEEE Trans. On Circuits and Systems I. Regular Papers. – 2005. – Vol. 52, No 6. – P. 1138-1147.
7. Крыжановский В. Г. Транзисторные усилители с высоким КПД / В. Г. Крыжановский – Донецк: Апекс, 2004. – 448 с.
8. Крыжановский В. Г. Методика разработки и характеристики автогенератора класса Е / В. Г. Крыжановский, А. Н. Рудякова, Д. В. Чернов // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2002. – № 2. – С. 9-12.
9. Принцовский В. А. Фазовые шумы автогенератора СВЧ класса Е / В. А. Принцовский, В. В. Крыжановский / Современные проблемы радиотехники и телекоммуникаций "РТ-2008": Материалы 4-ой междуна. молодежной научн.-техн. конф. (г. Севастополь, 21-25 апреля 2008 г.). – Севастополь: СевНТУ, 2008. – С. 161.
10. Mediano A. Frequency Limitation of High-Efficiency Class E tuned RF Power amplifier Due to a Shunt Capacitance / A. Mediano, P. Molina / IEEE MTT-S Int. Microwave Symp. Dig. – 1999. – MO4C-4.

Поступала в редакцію 28.04.2010 г.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРЕМЫ ЭВАЛЬДА-ОЗЕЕНА К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ НА ОТРАЖЕНИЕ И ПРЕЛОМЛЕНИЕ ВОЛН НА СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

С. Н. Латынин

Донецкий национальный университет экономики и торговли имени М. Туган-Барановского

В методе действующего поля, обобщенного на двумерно-периодические структуры, решена задача отражения и преломления волн на слоистых кристаллах. В теории Эйри получены коэффициенты отражения и пропускания волн при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена, без использования волновых уравнений и граничных условий.

Ключевые слова: дипольный момент, теорема погашения, слоистый кристалл, отражение и преломление волн.

Введение. Вопрос о распространении электромагнитных волн в слоях и слоистых кристаллах широко обсуждается в научной литературе [1-3]. Было предложено много схем для расчета отражения и преломления волн на различных многослойных системах. В общей теории для кристаллов из макроскопических слоев электромагнитные волны в каждом слое описываются уравнениями Максвелла, а на границах сшиваются граничными условиями [1, 2]. Внутри переходных слоев кристаллов (порядка нескольких постоянных решетки a), где имеют место эффекты релаксации и реконструкции поверхности [4], а также в фотонных [5] или в других слоистых кристаллах [3], где слоями являются моноатомные плоскости (или тонкие слои $\sim a$), для описания электромагнитных волн некорректно применять макротерию. В [3] распространение волн в таких кристаллах описано в рамках расширенного феноменологического подхода при помощи модернизированных граничных условий. В отличие от модернизированных макротеорий в молекулярной теории [6-8] процесс распространения волн можно описать более непосредственным способом, не прибегая к уравнениям Максвелла и граничным условиям, а лишь при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена. Теорема Эвальда-Озеена была доказана для двумерно-периодических кристаллов, для оптически активных и анизотропных сред, она также применима к волнам в широком диапазоне частот [9, 10]. Особенно актуален такой подход при рассмотрении мономолекулярных плоскостей и тонких слоистых кристаллов [7], когда в качестве структурной единицы кристалла необходимо выбирать атом (или другую хорошо локализованную структурную группу – молекулу, ион, ковалентную связь, моноатомный плоскопараллельный слой или любое другое квазидвумерное образование).

В настоящей работе решается задача отражения и пропускания (преломления) волн на многослойных кристаллах произвольных размеров в рамках метода действующего поля, обобщенного на двумерно-периодические кристаллические структуры [6-8], при помощи теории Эйри [1], основанной на многократных отражениях волн внутри слоев и между слоями.

Применение теории Эйри в методе действующего поля. Любой слоистый кристалл можно представить как суперпозицию n плоскопараллельных слоев. Предполагаем, что в i -ом слое атомы одного сорта, а слой состоит из $N_3^{(i)}$ атомных плоскостей перпендикулярных направлению оси z декартовой системы координат ($i = 1, \dots, n$).

Рассмотрим падение на слоистый кристалл плоской монохроматической волны $\mathbf{E}^{(e)} = \mathbf{E}_0^{(e)} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r} - i\omega t)$, с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k}_0 = (\mathbf{k}_\perp, k_{03})$ (где $k_0 = \omega a/c$, « \perp » обозначает проекцию вектора на поверхность, плоскость xy). Эта волна самосогласованным образом поляризует атомы первого слоя [6,7], так что дипольный момент атома в l -ом узле имеет вид:

$$\mathbf{P}^l(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}'(\mathbf{k}^{(1)}) \exp\left(\left(i\mathbf{k}_\perp \mathbf{L}_\perp + ik_3 d_3^{(i)}(l_3 - 1)\right) - i\omega t\right) + \bar{\mathbf{P}}'(\tilde{\mathbf{k}}^{(1)}) \exp\left(\left(i\mathbf{k}_\perp \mathbf{L}_\perp - ik_3 d_3^{(1)}(l_3 - 1)\right) - i\omega t\right), \quad (1)$$

где $\mathbf{L} = (\mathbf{L}_\perp, L_3) = (\mathbf{L}_\perp, d_3^{(1)}(l_3 - 1))$ – радиус-вектор l -го узла, $0 < l_3 \leq N_3^{(1)}$, $d_3^{(1)}$ – межплоскостное расстояние (в направлении оси z); $\mathbf{k}^{(1)} = (\mathbf{k}_\perp, k_3^{(1)})$ – волновой вектор преломленной волны в слое (в единицах a); $\tilde{\mathbf{k}}^{(1)} = (\mathbf{k}_\perp, -k_3^{(1)})$.

Дипольный момент (1) определяется из самосогласованной системы уравнений:

$$\mathbf{P}^{l} = \alpha(\omega) \left\{ \mathbf{E}^{(*)l} + \mathbf{E}^{(e)} \right\} \quad (2)$$

$$\mathbf{E}^{l(*)} = \frac{1}{a^3} \left[\nabla \nabla - \frac{a^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \mathbf{\Pi}^{l3}(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

при $\mathbf{r} = \mathbf{L}$, где вектор Герца $\mathbf{\Pi}^{l3}(\mathbf{r}, t)$ рассчитывается по методу Эвальда, обобщенному на двумерно-периодические структуры [7]. В случае $\bar{q}_{\perp} = 0$ он имеет вид

$$\mathbf{\Pi}^{l3}(\mathbf{r}, t) = \frac{2\pi\delta^{(1)}}{-ik_{03}} \sum_{l_3} \left\{ \mathbf{P}(\mathbf{k}^{(1)}) \exp\left(ik_3^{(1)}L_3'\right) + \mathbf{P}(\tilde{\mathbf{k}}^{(1)}) \exp\left(-ik_3^{(1)}L_3'\right) \right\} \exp\left(ik_{03}|r_3 - L_3'| + i\mathbf{k}_{\perp}\mathbf{r}_{\perp} - i\omega t\right), \quad (4)$$

где $\delta^{(i)} = \theta a^{-3} \Omega_{\perp}^{-1}$ – параметры, которые определяются для каждого слоя ($i = 1, \dots, n$), a – постоянная решетки рассматриваемого слоя; $\theta = 1$ или 2 [7]; Ω_{\perp} – площадь элементарной ячейки на поверхности слоя.

Поле (3) внутри и вне кристаллического слоя можно представить как суперпозицию волн, создаваемых дипольными моментами отдельных атомных плоскостей с различными l_3 : $0 < l_3 \leq N_3^{(1)}$. При $r_3 < r_3^{(1)}$ имеем отраженную от слоя волну $\mathbf{E}^{(r)} = \mathbf{E}^{(*)l}$, а при $r_3 > r_3^{(1)} + d_3^{(1)}(N_3^{(1)} - 1)$ имеем прошедшую сквозь слой волну $\mathbf{E}^{(d)} = \mathbf{E}^{(*)l} + \mathbf{E}^{(e)}$.

Для обеих волн в (3)-(4) сумма $\sum_{l_3} = \sum_{l_3=1}^{N_3^{(1)}}$.

Если в (2)-(3) $0 < l_3 \leq N_3^{(1)}$, то в (3)-(4) сумма $\sum_{l_3} = \sum_{l_3=1}^{l_3-1} + \sum_{l_3=l_3-1}^{N_3^{(1)}}$ и решая самосогласованную систему уравнений (2)-(3) для дипольных моментов (1) найдем

– теорему погашения Эвальда-Озеена с учетом многократных отражений волн внутри слоя

$$E_0^{(e)} = \frac{2\pi\delta^{(1)}k_0^2 \cos(\varphi - \psi^{(1)}) \exp\left(\left(ik_3^{(1)} - ik_{03}\right)r_3^{(1)}\right)}{ik_{03} \left(1 - \exp\left(\left(ik_3^{(1)} - ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)\right)} P'(\mathbf{k}^{(1)}), \quad (5)$$

из которой можно определить $P'(\mathbf{k}^{(1)})$, если известна амплитуда $E_0^{(e)}$, падающей на поверхность кристалла волны и

– законы отражения волн на нижней и верхней грани внутри слоя:

$$P(\tilde{\mathbf{k}}^{(1)}) = -R^{(1)} \exp\left(2ik_3^{(1)}\left(r_3^{(1)} + d_3^{(1)}N_3^{(1)}\right)\right) P(\mathbf{k}^{(1)}); \quad (6)$$

$$P(\mathbf{k}^{(1)}) = -R^{(1)} \exp\left(-2ik_3^{(1)}\left(r_3^{(1)} - d_3^{(1)}\right)\right) P(\tilde{\mathbf{k}}^{(1)}), \quad (7)$$

где $R^{(1)} = \frac{\cos(\varphi + \psi^{(1)}) \left(1 - \exp\left(\left(ik_{03} - ik_3^{(1)}\right)d_3^{(1)}\right)\right)}{\cos(\varphi - \psi^{(1)}) \left(1 - \exp\left(\left(ik_{03} + ik_3^{(1)}\right)d_3^{(1)}\right)\right)}$; $r_3^{(1)}$ определяет положение первого слоя; $\psi^{(1)}$ –

угол преломления волны в слое; φ – угол падения волны на поверхность кристалла. Для каждого слоя определяются свои параметры: $R^{(i)}$, $r_3^{(i)}$, $d_3^{(i)}$, $\delta^{(i)}$, $\psi^{(i)}$, $\mathbf{k}^{(i)}$ и $\tilde{\mathbf{k}}^{(i)}$, где $i = 1, \dots, n$. В этой работе рассматриваются составляющие волн, лежащие в плоскости падения.

Решим самосогласованную задачу (2) для дипольных моментов атомов произвольного i -го слоя и выведем для него теорему погашения Эвальда-Озеена на верхней и нижней грани, с учетом многократных отражений волн внутри слоя. Из нее получим амплитуды волн $E_0^{(e)i}$ и $\tilde{E}_0^{(e)i}$, соответственно падающих на верхнюю, нижнюю поверхность слоя и лежащих в плоскости падения. Амплитуды волн отраженных на и прошедших сквозь i -й кристаллический слой соответственно при падении волны сверху на слой $E_0^{(r)i}$, $E_0^{(d)i}$ и снизу $\tilde{E}_0^{(r)i}$ и $\tilde{E}_0^{(d)i}$ получим применив для (3) обобщение метода Эвальда на двумерно-периодические структуры [6, 7].

Так как, по теории Эйри на каждый слой (кроме последнего) в многослойной структуре, с обеих сторон падают волны, отраженные или преломленные на соседних слоях, то они поляризуют атомы этого

слоя, которые в свою очередь формируют волны, поляризующие атомы соседних слоев. Эта самосогла-сованная задача многократного отражения и преломления волн на слоистом кристалле может быть решена без граничных условий и волновых уравнений, а лишь при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена.

Так как по теореме погашения Эвальда-Озеена для соседних слоев имеют место соотношения $E_0^{(d)i} = E_0^{(e)i+1}$, $E_0^{(r)i+1} = \tilde{E}_0^{(e)i}$, $\tilde{E}_0^{(d)i+1} = \tilde{E}_0^{(e)i}$ и $\tilde{E}_0^{(r)i} = E_0^{(e)i+1}$, то получим формулы для связи амплитуд дипольных моментов атомов этих слоев ($i = 1, \dots, n$):

$$P(\mathbf{k}^{(i+1)}) = W_{i0} P(\mathbf{k}^{(i)}); \quad P(\mathbf{k}^{(i)}) = V_{i0} P(\mathbf{k}^{(i+1)}); \quad (8)$$

$$P(\bar{\mathbf{k}}^{(i)}) = \tilde{W}_{i0} P(\bar{\mathbf{k}}^{(i+1)}); \quad P(\bar{\mathbf{k}}^{(i+1)}) = \tilde{V}_{i0} P(\bar{\mathbf{k}}^{(i)}). \quad (9)$$

Здесь

$$W_{i0} = \frac{\delta^{(i)}}{\delta^{(i+1)}} \frac{\cos(\varphi - \psi^{(i)})}{\cos(\varphi - \psi^{(i+1)})} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right)d_3^{(i+1)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right)d_3^{(i)}\right)} \frac{\exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right)d_3^{(i)}\right)}{\exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right)d_3^{(i+1)}\right)} \times$$

$$\times \frac{1 - (R^{(i)})^2 \exp\left(2ik_3^{(i)}d_3^{(i)}\right)}{1 - (R^{(i)})^2 \exp\left(2ik_3^{(i)}d_3^{(i)}\left(N_3^{(i)} + 1\right)\right)} \exp\left\{i\left(k_3^{(i)} - k_3^{(i+1)}\right) \sum_{j=1}^i \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right\}; \quad (10)$$

$$V_{i0} = \frac{\delta^{(i+1)}}{\delta^{(i)}} \frac{\cos(\varphi + \psi^{(i+1)})}{\cos(\varphi - \psi^{(i)})} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right)d_3^{(i)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} + ik_{03}\right)d_3^{(i+1)}\right)} \frac{\exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} + ik_{03}\right)d_3^{(i+1)}\right)}{\exp\left\{-2ik_3^{(i)}d_3^{(i)}N_3^{(i)}\right\}} \times$$

$$\times \frac{R^{(i)}\left(1 - \exp\left(2ik_3^{(i+1)}d_3^{(i+1)}N_3^{(i+1)}\right)\right)}{1 - (R^{(i+1)})^2 \exp\left(2ik_3^{(i+1)}d_3^{(i+1)}\left(N_3^{(i+1)} + 1\right)\right)} \exp\left\{i\left(k_3^{(i+1)} - k_3^{(i)}\right) \sum_{j=1}^i \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right\}. \quad (11)$$

$$\tilde{W}_{i0} = \frac{\delta^{(i+1)}}{\delta^{(i)}} \frac{\cos(\varphi - \psi^{(i+1)})}{\cos(\varphi - \psi^{(i)})} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} - ik_{03}\right)d_3^{(i)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right)d_3^{(i+1)}\right)} \frac{R^{(i)}}{R^{(i+1)}} \exp\left(2ik_3^{(i)}d_3^{(i)}N_3^{(i)}\right) \times$$

$$\frac{\exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_3^{(i)}\right) \sum_{j=1}^i \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right)}{\exp\left(-\left(ik_3^{(i+1)} + ik_{03}\right)\left(\Delta^{(i+1)} - d_3^{(i+1)}\right)\right)} \frac{1 - (R^{(i+1)})^2 \exp\left(2ik_3^{(i+1)}d_3^{(i+1)}\right)}{1 - (R^{(i+1)})^2 \exp\left(2ik_3^{(i+1)}d_3^{(i+1)}\left(N_3^{(i+1)} + 1\right)\right)}; \quad (12)$$

$$\tilde{V}_{i0} = \frac{\delta^{(i)}}{\delta^{(i+1)}} \frac{\cos(\varphi + \psi^{(i)})}{\cos(\varphi - \psi^{(i+1)})} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i+1)} - ik_{03}\right)d_3^{(i+1)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(i)} + ik_{03}\right)d_3^{(i)}\right)} \frac{\exp\left(\left(ik_{03} - ik_3^{(i+1)}\right)d_3^{(i+1)}\right)}{R^{(i)} \exp\left(2ik_3^{(i)}d_3^{(i)}N_3^{(i)}\right)} \times$$

$$\times \frac{1 - \exp\left(2ik_3^{(i)}d_3^{(i)}N_3^{(i)}\right)}{1 - (R^{(i)})^2 \exp\left(2ik_3^{(i)}d_3^{(i)}\left(N_3^{(i)} + 1\right)\right)} \exp\left\{i\left(k_3^{(i)} - k_3^{(i+1)}\right) \sum_{j=1}^i \left(\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)\right)\right\}; \quad (13)$$

$\Delta^{(j)}$ – расстояние между j -м и $j-1$ -м слоями; $\Delta^{(j)} + d_3^{(j)}\left(N_3^{(j)} - 1\right)$ – толщина j -го слоя.

Если исходить из того, что волна, отраженная от слоистой структуры, формируется первым слоем, а прошедшая волна формируется последним, то для вычисления коэффициентов отражения и прохождения волн – необходимо рассчитать дипольные моменты атомов этих слоев. Найдем их, применим метод действующего поля и теорию Эйри, основанную на многократных отражениях волн внутри слоев и между ними [1].

Дипольные моменты атомов первого слоя $P_n(\mathbf{k}^{(1)})$ определяются по формуле:

$$P_n(\mathbf{k}^{(1)}) = P(\mathbf{k}^{(1)}) + \sum_{i=1}^n \tilde{P}_i(\mathbf{k}^{(1)}), \quad (14)$$

где $\tilde{P}_i(\mathbf{k}^{(1)})$ – дополнительные дипольные моменты атомов первого слоя, поляризуемые волнами типа (16)-(17), создаваемые нижними слоями в результате многократных отражений и преломлений волн ме-

жду слоями и внутри их.

Получим рекуррентные формулы для (14) и дипольных моментов атомов последнего слоя $P(\mathbf{k}^{(n)})$. Рекуррентная формула – это формула приведения, которая сводит вычисление i – го члена какой-либо последовательности к вычислению $i-1$ – го члена этой последовательности. Рекуррентная формула позволяет шаг за шагом определить любой член последовательности, если известен ее первый член.

В результате громоздких вычислений методом математической индукции были получены и доказаны рекуррентные формулы для $P(\mathbf{k}^{(n)})$ и $P_n(\mathbf{k}^{(1)})$ в виде:

$$P(\mathbf{k}^{(n)}) = P(\mathbf{k}^{(n-1)})W_{n-1,0}[n-2]$$

или

$$P(\mathbf{k}^{(n)}) = P'(\mathbf{k}^{(1)}) \prod_{i=1}^{n-1} W_{i0} \prod_{l=1}^{n-2} [i]; \quad (15)$$

$$P_n(\mathbf{k}^{(1)}) = P_{n-1}(\mathbf{k}^{(1)}) + \tilde{P}_n(\mathbf{k}^{(n-1)}) = P_{n-1}(\mathbf{k}^{(1)}) + P(\mathbf{k}^{(n-1)})W_{n-1,0}V_{n-1,0}[n-2] \prod_{i=1}^{n-2} \tilde{W}_{i0} \prod_{i=1}^{n-3} [\bar{i}]$$

или

$$P_n(\mathbf{k}^{(1)}) = P'(\mathbf{k}^{(1)}) \left(1 + W_{10}V_{10}[O_1] + [O_1] \sum_{j=1}^{n-2} \left([O_j] V_{j+1,0} \prod_{i=1}^{j+1} W_{i0} \prod_{i=1}^j (\tilde{W}_{i0}[i]) \prod_{i=1}^{j-1} [\bar{i}] \right) \right), \quad (16)$$

где коэффициенты $[n-1] = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} \prod_{j=1}^p (V_{n0})^j [\tilde{V}_{n0} + \tilde{W}_{n-1,0} \tilde{V}_{n-1,0} [O_{n-1}] W_{n0} + W_{n0} [O_{n-1}] \times$
 $\times \sum_{l=1}^{n-2} (\tilde{V}_{n-1-l,0} [O_{n-l}] \prod_{i=1}^{l+1} \tilde{W}_{n-i,0} \prod_{i=1}^{l+1} ([\bar{i}] W_{n-i,0} \prod_{i=1}^{l-1} [\bar{i}]) \prod_{i=1}^{l-1} [\bar{i}]) \prod_{i=1}^{l-1} [\bar{i}]]^j$; (17)

$[O_i] = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^k (V_{i0} \tilde{V}_{i0})^j$ ($i=1, \dots, n$). Коэффициенты $[\bar{i}]$ получают из $[i]$ заменой: $W_i \leftrightarrow \tilde{W}_{n-1-i}$,

$V_i \leftrightarrow \tilde{V}_{n-1-i}$, $[O_i] \leftrightarrow [O_{n-1-i}]$; коэффициенты $[\bar{i}]$ получают из $[i]$, если сделать последовательно две группы замен: 1) $W_i \leftrightarrow \tilde{W}_{n-2-i}$, $V_i \leftrightarrow \tilde{V}_{n-2-i}$, $[O_i] \leftrightarrow [O_{n-2-i}]$ и 2) $W_i \leftrightarrow \tilde{W}_{n-1-i}$, $V_i \leftrightarrow \tilde{V}_{n-1-i}$, $[O_i] \leftrightarrow [O_{n-1-i}]$; $[\bar{0}] = 1$; $[\bar{0}] = 1$.

Дипольные моменты атомов n -го слоя $P(\mathbf{k}^{(n)})$ и первого $P_n(\mathbf{k}^{(1)})$ получены для многослойных структур со слоями произвольной конечной толщины (вплоть до моноатомной, $N_3^{(i)} \cong 1$). Формулы (15)-(17) не имеют ограничений при применении, они достаточно эффективны при моделировании и компьютерных вычислениях.

Для дипольных моментов (15)-(17) можно рассчитать амплитуды волн $E_0^{(r)}$ отраженные от многослойной кристаллической структуры по формуле

$$E_0^{(r)} = E_0^{(r)l} + \sum_{i=1}^n \tilde{E}_0^{(d)l}(i), \quad (18)$$

где $E_0^{(r)l}$ рассчитывается для дипольного момента $P'(\mathbf{k}^{(1)})$, $\tilde{E}_0^{(d)l}(i)$ – для $\tilde{P}_i(\mathbf{k}^{(1)})$, а волны прошедшие сквозь многослойную структуру $E_0^{(d)}$ рассчитываются для $P(\mathbf{k}^{(n)})$ по формулам:

$$E_0^{(r)l} = -2\pi\delta^{(1)} \frac{k_0^2}{ik_{03}} \frac{\cos(\varphi + \psi^{(1)}) P(\mathbf{k}^{(1)})}{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(1)} + ik_{03}\right) d_3^{(1)}\right)} \exp\left(\left(ik_3^{(1)} + ik_{03}\right) r_3^{(1)}\right) \times$$

$$\times \frac{1 - \exp(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}N_3^{(1)})}{1 - (R^{(1)})^2 \exp(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}(N_3^{(1)} + 1))}; \quad (19)$$

$$\tilde{E}_0^{(d)} = 2\pi\delta^{(1)} \frac{k_0^2}{ik_{03}} \frac{\cos(\varphi - \psi^{(1)})P(\tilde{\mathbf{k}}^{(1)})}{1 - \exp((ik_3^{(1)} - ik_{03})d_3^{(1)})} \exp(-(ik_3^{(1)} - ik_{03})(r_3^{(1)} - d_3^{(1)})) \times \\ \times \frac{1 - (R^{(1)})^2 \exp(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)})}{1 - (R^{(1)})^2 \exp(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}(N_3^{(1)} + 1))}; \quad (20)$$

$$E_0^{(d)} = 2\pi\delta^{(n)} \frac{k_0^2}{ik_{03}} \frac{\cos(\varphi - \psi^{(n)})P(\mathbf{k}^{(n)})}{1 - \exp((ik_3^{(n)} - ik_{03})d_3^{(n)})} \exp\left((ik_3^{(n)} - ik_{03})\left(\sum_{j=1}^n \Delta^{(j)} + \sum_{j=1}^n d_3^{(j)}(N_3^{(j)} - 1) + d_3^{(n)}\right)\right) \times \\ \times \frac{1 - (R^{(n)})^2 \exp(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)})}{1 - (R^{(n)})^2 \exp(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)}(N_3^{(n)} + 1))}. \quad (21)$$

При выводе формул (5), (19)-(21) мы опустили неоднородные компоненты поля и поправки связанные с дополнительной поверхностной поляризацией атомов, см. [7]. Из (5) и (19) следует: – теорема погашения в кристаллическом слое такая же, как и в полубесконечном кристалле [6]; – волна, падающая на поверхность кристалла, должна гаситься уже в области первой атомной плоскости первого слоя; – коэффициенты отражения и прохождения волн для сверхтонкого слоя, рассчитанные в микротeorии такие же, как в [1,2] при исследовании толстых слоев или полубесконечных кристаллов ($N_3^{(1)} \rightarrow \infty$), но при их выводе мы не использовали граничных условий.

В этом разделе показано, что теорему погашения Эвальда-Озеена можно охарактеризовать, как основную и универсальную закономерность, определяющую поведение электромагнитной волны на границе двух сред произвольного вида. На основе ее разработана процедура вычислений дипольных моментов атомов слоистых кристаллов в самосогласованной задаче поляризации атомов в поле многократно отраженных и преломленных волн внутри и между слоями. Формулы (18) и (21) позволяют рассчитать амплитуд волн $E_0^{(r)}$ и $E_0^{(d)}$ для произвольных многослойных кристаллов.

Коэффициенты отражения и пропускания волн на многослойной кристаллической структуре. После того, как при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена были рассчитаны амплитуды волн $E_0^{(e)}$, $E_0^{(r)}$ и $E_0^{(d)}$, выведем коэффициенты отражения и пропускания волн на многослойном кристалле:

$$\frac{E_0^{(r)}}{E_0^{(e)}} = \frac{\exp((ik_3^{(1)} - ik_{03})d_3^{(1)})}{1 - (R^{(1)})^2 \exp(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}(N_3^{(1)} + 1))} \left[R^{(1)}(1 - \exp(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)}N_3^{(1)})) + \right. \\ \left. + \left(1 - (R^{(1)})^2 \exp(2ik_3^{(1)}d_3^{(1)})\right) \exp(-2(ik_3^{(1)} - ik_{03})r_3^{(1)}) \frac{P_n(\mathbf{k}^{(1)}) - P'(\mathbf{k}^{(1)})}{P'(\mathbf{k}^{(1)})} \right]; \quad (22)$$

$$\frac{E_0^{(d)}}{E_0^{(e)}} = \frac{\delta^{(n)} \cos(\varphi - \psi^{(n)})}{\delta^{(1)} \cos(\varphi - \psi^{(1)})} \frac{1 - \exp((ik_3^{(1)} - ik_{03})d_3^{(1)})}{1 - \exp((ik_3^{(n)} - ik_{03})d_3^{(2)})} \times \\ \times \frac{1 - R^{(n)} \exp(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)})}{1 - (R^{(n)})^2 \exp(2ik_3^{(n)}d_3^{(n)}(N_3^{(n)} + 1))} \frac{\exp((ik_3^{(n)} - ik_{03})(r_3^{(n)} + d_3^{(n)}N_3^{(n)}))}{\exp((ik_3^{(1)} - ik_{03})r_3^{(1)})} \frac{P(\mathbf{k}^{(n)})}{P'(\mathbf{k}^{(1)})}. \quad (23)$$

Если слоистый кристалл находится на полубесконечной подложке (с заданными структурными и оптическими характеристиками ψ , d_3 , \vec{k} , δ), то преломленная волна имеет вид:

$$E_0^{(d)} = 2\pi\delta \frac{k_0^2}{ik_{03}} \frac{\cos(\varphi - \psi)}{1 - \exp((ik_3 - ik_{03})d_3)} \left[1 + R \cdot \exp(2ik_3 d_3) \right] P_0, \quad (24)$$

где $R = \frac{\cos(\varphi + \psi) 1 - \exp\left(\left(ik_{03} - ik_3\right)d_3\right)}{\cos(\varphi - \psi) 1 - \exp\left(\left(ik_{03} + ik_3\right)d_3\right)}$. Тогда формула Френеля для преломленной волны имеет вид:

$$\frac{E_0^{(d)}}{E_0^{(e)}} = \frac{\delta}{\delta^{(1)}} \frac{\cos(\varphi - \psi)}{\cos(\varphi - \psi^{(1)})} \frac{1 - \exp\left(\left(ik_3^{(1)} - ik_{03}\right)d_3^{(1)}\right)}{1 - \exp\left(\left(ik_3 - ik_{03}\right)d_3\right)} \exp\left(\left(ik_3^{(1)} - ik_{03}\right)r_3^{(1)}\right) \times \left[1 + R \cdot \exp\left(2ik_3 d_3\right)\right] \frac{P_0}{P'(\mathbf{k}^{(1)})}, \quad (25)$$

где дипольные моменты $P_n(\mathbf{k}^{(1)})$ и P_0 в (22) и (25) рассчитываются аналогично (21)-(23) по формулам:

$$P_0 = P(\mathbf{k}^{(n)})Z[n]; \quad (26)$$

$$P_n(\mathbf{k}^{(1)}) \rightarrow P_{n+1}(\mathbf{k}^{(1)}) = P_n(\mathbf{k}^{(1)}) + P(\mathbf{k}^{(n)})YZ[O_{n-1}][n-1] \prod_{l=1}^{n-1} \tilde{W}_{l1} \prod_{l=1}^{n-2} [\tilde{l}], \quad (27)$$

где $[n-1] = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} \prod_{j=1}^p (YZ)^j [1 + \tilde{W}_{n-1,0} \tilde{V}_{n-1,0} [O_{n-1}] + [O_{n-1}] \sum_{l=1}^{n-2} (\tilde{V}_{n-1-l,0} [O_{n-l}] \times \prod_{i=1}^{l+1} (W_{n-i,0} \tilde{W}_{n-i,0} [\tilde{l}]) \prod_{i=1}^{l-1} [\tilde{i}])^j]$. (28)

Коэффициенты Z и Y рассчитываются по формулам (10)-(11), если сделать замены: $R^{(i+1)} \rightarrow 0$; $\delta^{(i+1)}, k_3^{(i+1)}, d_3^{(i+1)}, \psi^{(i+1)}, \Delta^{(i+1)} \rightarrow \delta, k_3, d_3, \psi, \Delta$; $\delta^{(i)}, k_3^{(i)}, d_3^{(i)}, \psi^{(i)}, \Delta^{(i)}, R^{(i)}, N_3^{(i)} \rightarrow \delta^{(n)}$,

$$k_3^{(n)}, d_3^{(n)}, \psi^{(n)}, \Delta^{(n)}, R^{(n)}, N_3^{(n)}; \sum_{j=1}^i \rightarrow \sum_{j=1}^n; \text{ в (11) } 1 - \exp\left(2ik_3^{(i+1)}d_3^{(i+1)}N_3^{(i+1)}\right) \rightarrow -1.$$

Результаты настоящей работы свидетельствуют, что можно смоделировать любую многослойную кристаллическую среду и для нее рассчитать коэффициенты отражения и пропускания волн, связав их со структурой среды. Формулы (22), (23) и (25) применимы для слоев произвольной толщины, вплоть до атомарной, необходимо лишь учесть изменения законов дисперсии световых квантов и параметров решетки. Для сверхтонких слоев первое слагаемое квадратных скобок в (22) $\sim a/\lambda$. Поэтому, например, наличие на поверхности полубесконечной подложки монокристаллического слоя (с дипольными моментами атомов вида (26)-(28)), может приводить к небольшому усилению или ослаблению отраженной волны.

При $N_3^{(i)} \rightarrow 1$ и $r^{(i+1)} \rightarrow r^{(i)} + d_3^{(i)} + \Delta^{(i+1)}$ для всех $i = 1, \dots, n$ слоистый кристалл вырождается в систему монокристаллических плоскостей расположенных на полубесконечной подложке. В таком виде (22) и (25) можно применять, например, при исследовании релаксации и реконструкции поверхности кристалла, при изучении поверхностных состояний в фотонных кристаллах или поверхностной структуры нанорешеток и т.д., см., например, [5, 11].

Заключение. В методе действующего поля, обобщенного на двумерно-периодические структуры, была применена теория Эйри для описания распространения волн в многослойных кристаллических системах. В работе была разработана процедура расчета дипольных моментов атомов слоистых кристаллов в самосогласованной задаче поляризации атомов в поле многократно отраженных и преломленных волн внутри и между слоями при помощи теоремы погашения Эвальда-Озеена, без использования волновых уравнений и граничных условий Максвелла. Полученные в микротехнике коэффициенты отражения и пропускания волн найдут широкое применение в развитии теории слоистых сред, нанокристаллических пленок и слоистых структур с заданными свойствами.

РЕЗЮМЕ

У методі діючого поля, узагальненого на двовимірно-періодичні структури, розв'язується задача відбиття і заломлення хвиль на шаруватих кристалах. В теорії Ейрі одержані коефіцієнти відбиття і проходження хвиль за допомогою теореми погашення Евальда-Озеєна, без використання хвильових рівнянь і граничних умов.

Ключові слова: дипольний момент, теорема погашення, шаруватий кристал, відбиття і заломлення хвиль.

SUMMARY

In a method of a working field generalized on two-measure periodic structures a problem of reflection and refraction of waves on layered crystals is decided. The method Airy determines amplitudes of reflected and refracted waves. The factors of reflection and passing of waves are received through the theorem of repayment Ewald-Oseen without use of wave equations and boundary conditions.

Keywords: dipole moment, the theorem of repayment, layered crystal, reflection and refraction of waves.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Борн М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф. – М.: Наука, 1970. – 856 с.
2. Ярив А. Оптические волны в кристаллах / А. Ярив, П. Юх. – М.: Мир, 1987. – 616 с.
3. Румянцев В.В. Взаимодействие электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами / В. В. Румянцев– Донецк: Норд-Пресс, 2006. – 347 с.
4. Латышев А.В. Моноатомные ступени на поверхности кремния / А. В. Латышев, А. Л. Асеев // Успехи физических наук. – 1998 – Т. 168, № 10. – С. 1117-1127.
5. Виноградов А.П. Поверхностные состояния в фотонных кристаллах / А. П. Виноградов, А. В. Дорофеев, А. М. Мерзликин та інш. // Успехи физических наук. – 2010. – Т. 180, № 3. – С. 249-263.
6. Латинін С. М. До питання про існування рівноважних граней у кубічних кристалах / С. М. Латинін // Український фізичний журнал. – 2001. – Т. 46, № 9. – С. 932-936.
7. Латынин С. Н. Микроскопическая теория распространения света в сверхтонком кристаллическом слое / С. Н. Латынин // Вісник Донецького університета. – 2007, № 2. – С. 100-109.
8. Латинін С. М. Мікроскопічна теорія відбиття та заломлення хвиль на шаруватих кристалах / С. М. Латинін // Український фізичний журнал. – 2001. – Т. 46, № 1. – С. 88-93.
9. Litzman O. The Ewald dynamical theory of refraction and transmission of light by a dielectric slab. The extinction theorem in spatially dispersive media / O. Litzman // Optic Acta. – 1978. – V. 85, № 6. – P. 509-526.
10. Puri Ashok. Extinction theorem, boundary conditions and dispersion equations in bounded gyrotropic media / Ashok Puri, Zoseph Birman // Optics Communications. – 1981. – V. 37, № 2. – P. 81-85.
11. Андреев А.В. Численное исследование оптических коэффициентов отражения и пропускания поверхности периодической нанорешетки из металлических нанонитей / А. В. Андреев, А. А. Коновко, И. Р. Прудников // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2009. – № 11. – С. 14-23.

Поступила в редакцию 25.03.2010 г.

РАЗРАБОТКА РАЦИОНАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА И ГИДРОДИНАМИКИ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ СЛИТКОВ

В. М. Мелихов

Для получения рациональных скоростей разливки стали рассматриваются балансовые соотношения гидродинамических и теплообменных процессов. Формирование слитка рассчитывалось при помощи решения нелинейных дифференциальных уравнений теплопереноса и гидродинамики, которое реализовывалось при помощи разностных методов. Численное моделирование влияния теплопереноса и гидродинамики на процесс формирования слитка, показало: наличие шлака на зеркале металла способствует увеличению скорости разливки стали; шлаковый гарнисаж способствует уменьшению теплового потока к изложнице; увеличение перегрева приводит к уменьшению рациональной скорости разливки расплава; увеличение скорости наполнения изложницы способствует увеличению теплового потока.

Ключевые слова: теплофизические процессы, теплоперенос, гидродинамика, многослойный слиток, зазор, скорость заливки, численное моделирование, затвердевание.

Введение. Предъявляемые современной техникой требования к качеству литых изделий вызывают необходимость создания высоких технологий разливки и затвердевания сплавов. Одним из основных направлений решения поставленных задач является получение изделий, которые состоят из нескольких слоев сталей с различными теплофизическими свойствами. Разливка стали стали обычных слитков дает возможность проследить формирование при традиционном формировании слитка. Ранее проводилось математическое моделирование теплофизических и гидродинамических процессов композитных слитков без учета зазора между слитком и изложницы, т.е. при идеальном тепловом кантате [1-3]. При этом применялись численные методы, которые позволяют с достаточной точностью получить распределение скоростей в расплаве, температуру и другие параметры. При разливке и затвердевании стали происходит отвод тепла через стенки изложницы, где между слитком и изложницей может образовываться зазор вследствие усадки металла. Кроме того происходит теплообмен через покрытое шлаком зеркало металла.

Целью данной статьи является исследование процесса теплообмена металла с изложницей при наполнении и затвердевании слитка учетом зазора между слитком и изложницей и расчет рациональной скорости заливки стали. Для этого используется уравнения теплового баланса, а также дифференциальные уравнения теплопереноса и гидродинамики.

Постановка задачи и анализ результатов. При формировании многослойного слитка (МС) одними из главных определяющих параметров для получения высокого качества металла являются температура расплава и скорость его разливки в изложницу. Получение слитка состоит из нескольких этапов: 1) сифонная заливка легированной стали до прибыли; 2) затвердевания корочки легированной стали необходимой толщины; 3) заливка сверху углеродистой стали прибыльной части слитка.

Необходимо отметить, что скорость разливки стали и его температуру рекомендуется выбирать экспериментально для каждого типа слитка и разливаемой марки стали отдельно [1], но так как это связано с большими техническими и материальными затруднениями в данной статье проводится их теоретическая оценка. Параметры необходимые для большинства расчетов определялись при помощи математического моделирования с учетом результатов [2, 3].

При сифонной разливки оптимальная температура стали при входе в изложницу должна быть $T_{разл} = T_{кови} + 40^\circ$. Температура разливки стали, является одним из наиболее важных параметров, влияющих на качество слитков: развитие усадочных пустот и пористости в слитке, протекание процессов кристаллизации и сегрегации стали, выделение растворимых и нерастворимых примесей, появление трещин и заворотов на поверхности слитка [3].

Отличительной особенностью затвердевания МС состоит в том, что корочка стали затвердевающая в течение нескольких минут, является наружным слоем легированной стали. Рассмотрим процесс затвердевания пристеночного слоя жидкого металла толщиной $\delta_{жс}$ с учетом образования воздушного зазора между слитком и изложницей область исследования осесимметричная. В процессе затвердевания слой жидкого металла имеет теплосодержание $i_{жс}$, а затвердевший слоя толщиной корки металла $\delta_{тв}$ обладает теплосодержанием $i_{тв}$ [6]:

$$i_{жс} = c_{жс} \rho_{жс} \delta_{жс} T_{жс}, \quad i_{тв} = c_{тв} \rho_{тв} \delta_{тв} T_{кор} \quad (1)$$

где $T_{жс}$ – температура ядра расплава; T_L – температура ликвидус расплава; $T_{тв}$ – средняя температура слоя твердого металла толщиной $\delta_{тв}$.

При затвердванні слоя расплава $\delta_{жс}$ выделяется теплота кристаллизации, $Q_{кр}$ и величина теплового потока от расплава металла к затвердевшей корочке стали имеет вид

$$Q_{кр} = \rho_{тв} L \delta; \quad Q_{конв} = \alpha_{жс} (T_{жс} - T_{в}), \quad (2)$$

где L – удельная теплота кристаллизации стали; $T_{в}$ – температура выливаемости расплава. Область исследования теплопереноса и гидродинамики при формировании МС представлена на рис.1.

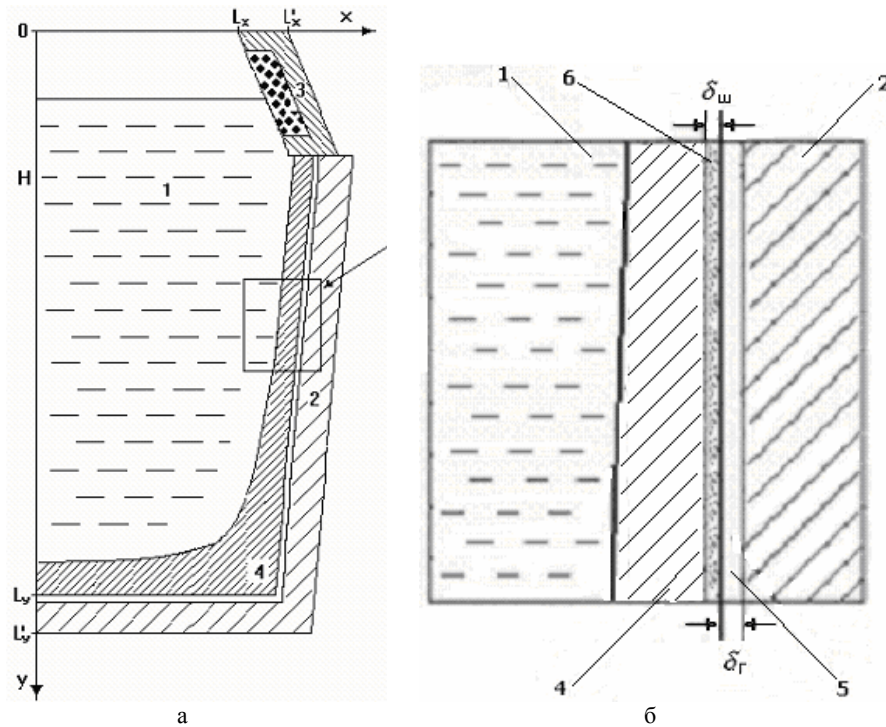


Рис 1. Схема исследуемой области: 1 – расплав стали; 2 – стенка изложницы; 3 – прибыльная надставка; 4 – затвердевший металл; 5 - газовый зазор; 6 – шлаковый гарнисаж. а) изложница; б) увеличенный фрагмент на границе слиток – изложница.

Рассмотрим теплообмен между слитком и изложницей. При этом тепловой поток $Q_{сл}$ от поверхности слитка к изложнице при идеальном контакте Q_T и при неидеальном контакте Q_R будет равен:

$$Q_T = -\lambda_{тв} \nabla T, \quad Q_R = \frac{1}{R_{\delta}} (T_{сл} - T_{изл}) \quad (3)$$

где $R_{\delta} = \delta_{заз} / \lambda_{заз} + \delta_{шл} / \lambda_{шл}$ – термическое сопротивление газового зазора и слоя шлака; $\delta_{заз}$ – газовый зазор между изложницей и слитком; $\delta_{шл}$ – слой шлака между изложницей и слитком; $\lambda_{заз}$ – теплопроводность газового зазора; $R_{\delta} = \delta_{заз} / \lambda_{заз} + \delta_{шл} / \lambda_{шл}$ – теплопроводность шлака; $T_{изл}$, $T_{сл}$ – температура изложницы и поверхности слитка. Величина газового зазора и время его образования определялись в соответствии с [7].

На основе выше приведенных соотношений уравнение теплового баланса процесса формирования корочки выразится как

$$i_{жс} - i_{тв} + Q_{кр} = Q_{сл} - Q_{конв} \quad (4)$$

Подставим в уравнение теплового баланса соотношения (1-4) и определим коэффициент теплопередачи от расплава к корочке как

$$\alpha_{жс} = [Q_{сл} + \delta / \Delta \tau (c_{тв} \rho_{тв} T_L - c_{жс} \rho_{жс} T - \rho_{тв} L)] / (T_{жс} - T_{в}) \quad (5)$$

где δ – толщина корочки; $\Delta \tau$ – время образования зазора.

При расчете по соотношению (5) будем руководствоваться результатами вычислительного эксперимента проведенного в согласно исследования [1-3].

Влияние скорости движения металла на тепловой поток от расплава к корковому слою выражается следующим соотношением [7]:

$$Nu = 0,74 \sqrt{0,53 Pe \pm 0,01 Ra}^{2/3} \quad (6)$$

где $Nu = \alpha_{жс} D_{жс} / \lambda_{жс}$; $\lambda_{жс}$ – коэффициент теплопроводности жидкой расплава; $D_{жс}$ – диаметр жидкого расплава.

Критериальное соотношение (6) учитывает зависимость теплопереноса не только от тепловой конвекции, но также от конвекции вызванной заливочной струей (число Релея). Знаки перед числом подобия Релея указывает на совпадение (плюс) или несовпадение (минус) направления потоков вынужденной и тепловой конвекции.

Из соотношения (6) определим зависимость скорости поднятия уровня металла от условий заливки. При этом скорость циркуляционных потоков у поверхности затвердевающего металла выразим в виде [7]:

$$V_u = 4,7 d_{cmp} V_{cmp} / (\sqrt{\pi} D_{ж}) \quad (7)$$

где d_{cmp} – диаметр струи при входе в изложницу; V_{cmp} – скорость струи на выходе из разливочного стакана.

Из уравнения неразрывности потока $\pi d_{cmp}^2 V_{cmp} = \pi D_{сл}^2 V_{ур}$ следует, что скорость на выходе из разливочного стакана определяется как

$$V_{cmp} = V_{ур} (D_{сл} / d_{cmp})^2 \quad (8)$$

где $V_{ур}$ – скорость поднятия уровня стали в изложнице.

Из соотношения (6) и (8) определим скорость циркуляционных потоков как

$$V_u = \frac{4,7}{\sqrt{\pi}} \frac{D_{сл}}{d_{cmp}} V_{ур} \quad (9)$$

После преобразования приведенных соотношений скорость поднятия уровня равна:

$$V_{ур} = 0,4 \sqrt{\pi} \left[\left(\frac{\alpha_{жс} X_0}{\lambda_{жс} 0,74} \right)^2 \mp 0,01 Ra^{2/3} \right] \frac{a_{жс} d_{cmp}}{D_{сл}^2} \quad (10)$$

Полученное выражение (10) позволяет определять скорость поднятия уровня стали в зависимости от скорости продвижения фронта затвердевания, на величину которого влияет теплообмен между расплавом и корочкой затвердевающей стали. Причем величина этого теплообмена зависит от скорости подачи заливаемой в изложницу стали.

Для сравнительного анализа процессов теплопереноса и гидродинамики проводилось математическое моделирование. В основу математической модели формирования многослойного слитка взяты нестационарные безразмерные уравнения переноса вихря скорости, переноса газовой фазы и теплопереноса. Также в модели учитываются тепловые процессы, связанные с образованием доли твердой фазы, которая определяет кинетику кристаллизации в приближении неравновесной двухфазной зоны.

Основываясь на полученных выше соотношениях, и используя данные вычислительного эксперимента [1, 3, 5], получили некоторые данные по рациональным режимам формирования слитка. При этом оказалось, что влияющие на скорость заливки стали (рис. 2) зависит от того, под шлаком производилась заливка или нет.

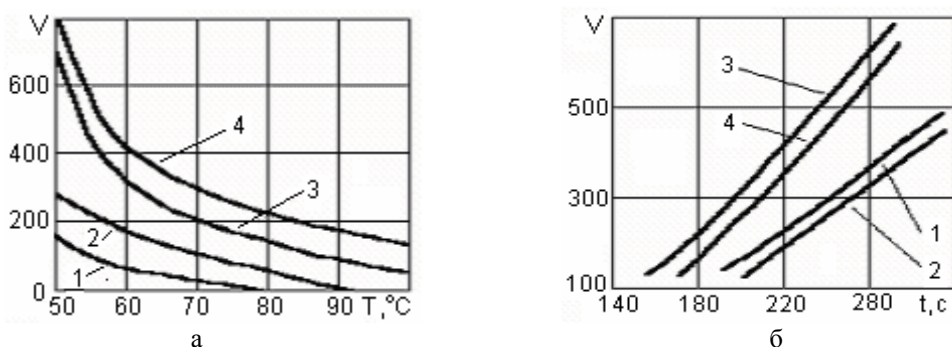


Рис. 2. Изменение скорости (V , мм/мин) поднятия уровня металла: а) от перегрева;

б) от времени отхода корочки; (1 – без шлака; 2 – со шлаком 3 – без шлака с учетом вынужденной конвекции; 4 – со шлаком с учетом вынужденной конвекции).

Причем наличие шлака на зеркале металла способствует возможности увеличения скорости заливки стали. В рассматриваемых случаях учитывалось также направление вынужденной конвекции вызванной заливочной струей (рис. 2, б). Противоположное направление тепловой и вынужденной конвекции приводит к некоторому увеличению скорости заливки стали, а однонаправленность уменьшает режим заполнения изложницы.

Изменение скорости заливки стали (рис. 3а) в зависимости от диаметра слитка показывает, что при его увеличении происходит уменьшение допустимой скорости заполнения. Увеличение диаметра зали-

ваемой струи металла дает возможность увеличить допустимую скорость заливки (рис. 3, б).

Одним из основных критериев качества металла является отсутствие дефектов трещин в слитке. Необходимо соблюдать такую допустимую скорость поднятия уровня металла, чтобы затвердевающая корочка была достаточной толщины и не разрушалась. При этом на корочку действуют напряжения: статического давления столба металла, термические напряжения и напряжения торможения усадки стали. В случае, когда корочка опирается на стенку изложницы и выполняется соотношение (11) в момент отхода корочки от стенки изложницы она не разрушается. При отливке слитка под шлаком и отсутствии дефектов на внутренней поверхности изложницы напряжения торможения усадки стали сус равно нулю [5].

Условие устойчивости корки слитка к разрушению выражается в том, что сумма напряжений возникающих в корке слитка толщиной δ не превышает предела прочности σ_{np} :

$$\sigma_{np} \geq \sigma_D + \sigma_T \quad (11)$$

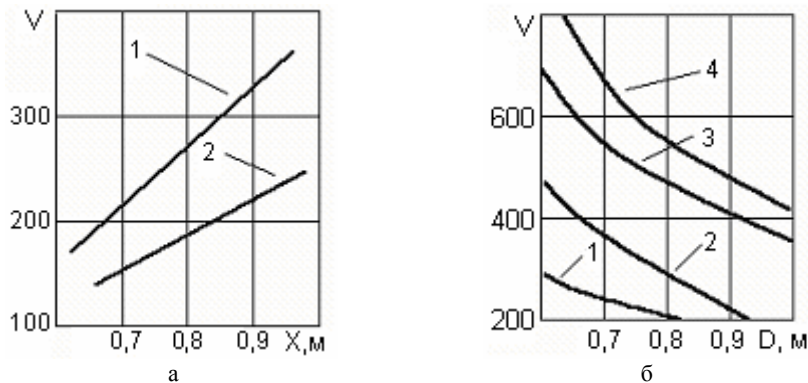


Рис. 3. Изменение скорости (V , мм/мин) поднятия уровня металла: а) от диаметра слитка; (1 – без шлака; 2 – со шлаком); б) от диаметра струи – с учетом вынужденной конвекции.

Напряжения, возникающие в корке слитка под действием статического давления столба металла

$$\sigma_D = \rho_{жс} g V_{ур} D \Delta \tau / 2 \delta \quad (12)$$

и термические напряжения σ_T в корке имеет вид [6]

$$\sigma_T = \frac{2}{3} (T_{вн} - T_n) \frac{\alpha E \mu}{(1 - \mu^2)} \quad (13)$$

где α – коэффициент линейного расширения стали; E – модуль Юнга; μ – коэффициент Пуассона; $T_{вн}$, T_n – температуры внутренней и наружной поверхности корки.

Из соотношений (13-15) получим, что скорость поднятия уровня равна

$$V_{ур} = \frac{2 \delta (\sigma_{np} - \sigma_T)}{\rho_{жс} g \Delta \tau D} \quad (14)$$

и она зависит от толщины корки стали, термических напряжений и времени отхода корки от изложницы.

В зависимости от напряжений в корочке, которые определяются разностью напряжений внутренней и наружной температурой корочки (16), определим рациональную скорость заполнения изложницы. Как можно отметить, увеличение разности температуры наружной и внутренней поверхности приводит к уменьшению рациональной скорости заливки (рис. 4, а). Характер изменения температуры показан на

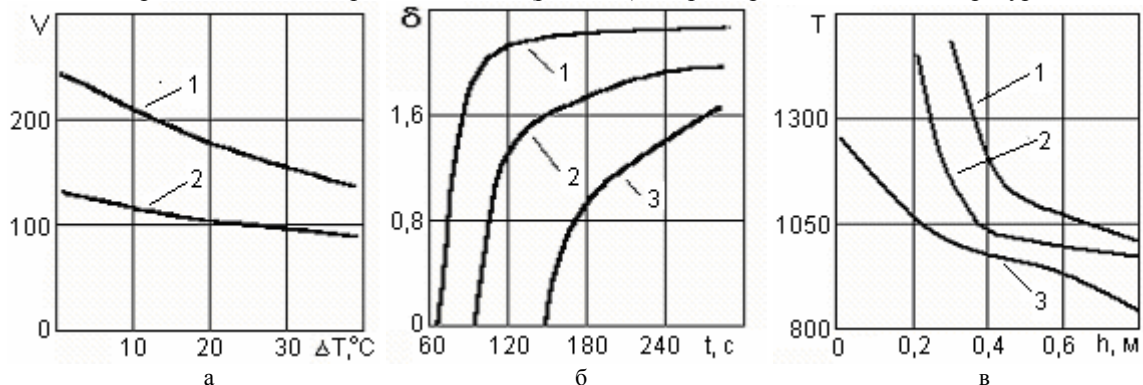


Рис. 4. Скорость V , мм/мин поднятия уровня металла (а) в зависимости от напряжений в корочке (1 – без шлака; 2 – со шлаком); влияние коэффициента теплопередачи слоя шлака на величину газового зазора (б): 1 - 1800 Вт/(м²К); 2 – 400; 3 – 200; температура стенки слитка в моменты времени заполнения изложницы в): 1 – 1 мин; 2 – 2 мин; 3 – 3 мин.

рис. 4, в. Тепловые процессы, происходящие при образовании корки, показывают, что величина газового зазора при уменьшении теплопередачи через шлаковый гарнисаж, уменьшается и происходит позже.

При известных прочностных и особенно пластических свойствах стали при высоких температурах склонность слитков к образованию трещин и заворотов зависит от того количества тепла перегрева стали, которое подводится единице площади боковой поверхности затвердевающей корочки слитка при заполнении изложницы жидкой сталью. Если этого количества тепла много, то скорость кристаллизации уменьшается, корочка получается тонкой и способной к образованию разрывов. В случае небольшого подвода тепла скорость затвердевания увеличивается, но этого тепла может не хватать на компенсацию потерь тепла на излучение с открытой поверхности металла. Поэтому наименьшее количество поверхностных дефектов получается при каких-то оптимальных температурах разлива стали [6].

Зависимость изменения теплового потока от скорости наполнения изложницы расплавом (рис. 5) показывает, что ее увеличение способствует увеличению теплового потока, что согласуется с исследованиями [2, 5].

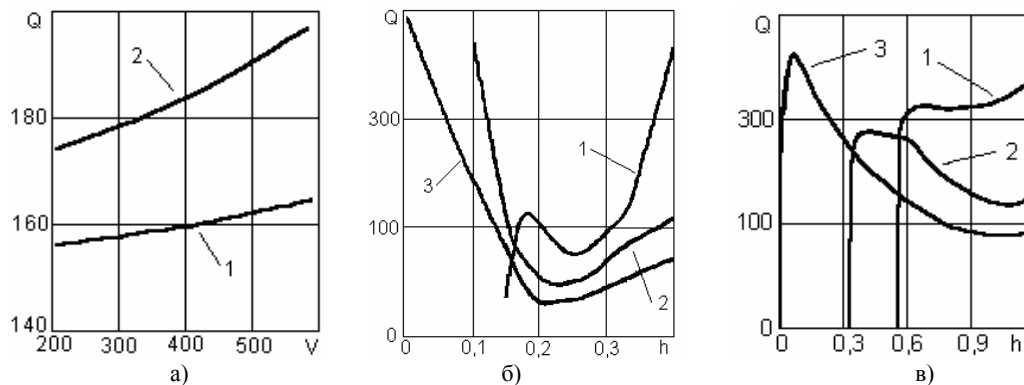


Рис. 5. Изменение потока теплоты (Q , $МДж/м^3$): а) от скорости поднятия уровня: 1 – при сифонной заливке; 2 – при заливке сверху; б) в вычислительном эксперименте вдоль боковой стенки изложницы для времени: 1 мин; 2 мин; 3 мин.

Зависимость теплового потока от скорости движения расплава у корки позволяет его изменить, регулируя скорость разлива металла. Поскольку разливка сверху избавляет от образования корочки, скорость разлива может быть значительно увеличена вследствие снижения температуры металла при выпуске из печи. Возникающие при разливке металла трещины вызываются не тепловыми, а специфическими условиями этого способа разлива – приваркой к стенкам изложницы и другими причинами, связанными с торможением усадки стали.

При разливке сверху оптимальная температура металла на выпуске из печи должна быть значительно ниже, чем при сифонном способе разлива. Причем прогрев стенок изложницы происходит более интенсивно, чем при сифонной разливке. При этом потери тепла при выпуске металла из печи и транспортировке ковша остаются без изменения, а степень перегрева, необходимого для преодоления образования корки на поверхности металла в изложнице при разливке сверху уменьшается в несколько раз. Это объясняется тем, что вновь поступающие объемы жидкого металла при разливке сверху проникают на глубину не более 0,6 - 1 м. Охлаждение этих масс металла происходит только через поверхность, определяемую высотой проникновения струи, и приводит к понижению температуры примерно в два раза меньше, чем при сифонной разливке стали [2].

На основе математического моделирования проводился вычислительный эксперимент. Необходимо отметить качественное совпадение результатов вычислительного эксперимента [2,3] с экспериментальными данными по распределению потока от расплава к корочке.

При увеличении скорости циркуляции увеличивается величина теплового потока (рис. 5), передаваемого от расплава к внутренней поверхности коркового слоя слитка [1,8]. При этом может прекратиться рост корки, образовавшейся в первый момент времени контакта жидкой стали со стенкой изложницы, а при дальнейшем увеличении теплового потока и подплавлении корки. Поэтому при отходе корки слитка от поверхности изложницы (вследствие усадки металла), толщина ее оказывается недостаточной, чтобы выдерживать давление столба жидкого металла и термические напряжения, возникающие в ней, что приводит к возникновению трещин на поверхности слитка. При малом тепловом потоке к корочке слитка скорость ее нарастания значительно выше и вероятность образования трещин мала.

При формировании МС происходит нарастание плотности тепловой энергии в несколько этапов, т.к. заливается сифоном легированная сталь и сверху углеродистая после нарастания корочки легированной стали (рис. 6, а). Как видно из рисунка при массовой скорости разлива 3 т/мин плотность тепловой энергии с перегревом 50°C и 100°C существенно отличаются. В первый период заливки при перегреве 100°C тепловая энергия принимает максимальное значение более продолжительное время чем при перегреве 50°C. Такое положение способствует большему прогреву стенки изложницы и образованию более

тонкой корочки стали. Влияние заливки сверху с различным перегревом (рис. 6, б) приводит к проплавлению корочки на различную глубину, что необходимо учитывать при образовании слоя легированной стали.

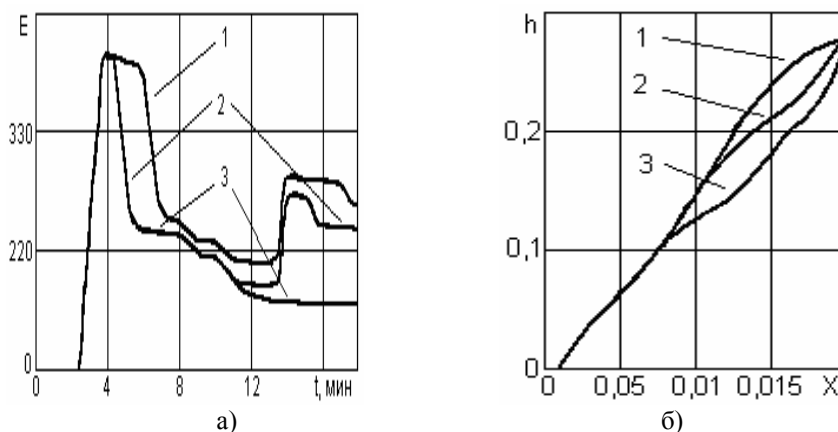


Рис. 6. Формирование многослойного слитка: а) тепловая энергия: 1- перегрев 100°C; 2 – перегрев 50°C; 3 – обычный слиток; б) корочка слитка: 1- до заливки сверху; 2- с перегревом 50°C; с перегревом 100°C.

Необходимо выбирать скорость разливки сверху и перегрев стали таким образом, чтобы формировался равномерный слой легированной стали как по толщине, так и по химическому составу на границе легированной стали и углеродистой.

Выводы. Из анализа проведенных исследований влияния теплопереноса и гидродинамики на процесс формирования слитка установлены следующие закономерности. Слой шлака на зеркале металла способствует увеличению скорости разливки стали до 30%. Шлаковый гарнисаж способствует уменьшению теплового потока на границе слиток - изложница и газовый зазор образуется позже. Увеличение перегрева приводит к уменьшению рациональной скорости разливки расплава. Увеличение скорости наполнения изложницы способствует увеличению теплового потока. Увеличение перегрева стали с 50°C до 100°C при разливке многослойного слитка приводит к увеличению проплавлению корки слитка на 30%.

РЕЗЮМЕ

Для получения рациональных скоростей разливки стали рассматриваются балансовые соотношения гидродинамических и теплообменных процессов. Формирование слитка рассчитывалось при помощи решения нелинейных дифференциальных уравнений теплопереноса и гидродинамики, которое реализовывалось при помощи разностных методов. Численное моделирование влияния теплопереноса и гидродинамики на процесс формирования слитка, показало: наличие шлака на зеркале металла способствует увеличению скорости разливки стали; шлаковый гарнисаж способствует уменьшению теплового потока к изложнице; увеличение перегрева приводит к уменьшению рациональной скорости разливки расплава; увеличение скорости наполнения изложницы способствует увеличению теплового потока.

Ключевые слова: теплофизические процессы, теплоперенос, гидродинамика, многослойный слиток, зазор, скорость заливки, численное моделирование, затвердевание.

SUMMARY

To obtain the rational speed casting of steel are considered balance relations hydrodynamic and heat processes. The formation of the ingot was calculated using the solution of nonlinear differential equations of heat transfer and fluid dynamics, which were implemented by difference methods. Numerical simulation of heat transfer and fluid dynamics on the formation of the ingot, while: the presence of slag on the metal mirror increases the casting speed steel slag skull helps to reduce heat flow to mould; increase overheating leads to a decrease in sound speed casting of the melt, increase the speed of filling the molds helps increase the heat flux.

Keywords: thermal processes, heat transfer, fluid dynamics, multi-layered ingot, gap, speed of casting, numerical simulation, solidification.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Мелихов В. М. Математическое моделирование гидродинамики и теплопереноса при формировании многослойных слитков / В. М. Мелихов // Вісник Донецького національного університету, Сер. А. Природничі науки. – 2009. – № 1. – С. 436-443.
2. Ефимов В. А. Современные технологии разливки и кристаллизации сплавов / В. А. Ефимов, А. Эльдарханов. – М.: Машиностроение, 1998. – 359 с.
3. Затвердевание металлов и металлических композиций / В. А. Лейбензон, В. Л. Пилюшенко, В. В. Кондратенко и др. – Киев: Наукова думка, 2009. – 409 с.
4. Самарский А. А. Вычислительная теплопередача / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. – М.: Едиториал, 2003. – 784 с.

5. Математическое моделирование формирования литой композиции углеродистой и хромистой сталей / В. А. Лейбензон, Ф. В. Недопекин, В. М. Мелихов и др. // Сталь. – 2004. – № 2. – С. 55-57.
6. Повышение эффективности производства стальных слитков / В. И. Баптизманский, А. М. Поживанов, Е. И. Исаев, А. П. Огурцов. – М.: Металлургия, 1992. – 222 с.
7. Скворцов А. А. Влияние внешних воздействий на процесс формирования слитков и заготовок / А. А. Скворцов, А. Д. Акименко, В. А. Ульянов. – М.: Металлургия, 1991. – 218 с.
8. Прикладные задачи металлургической теплофизики / В. И. Тимошпольский, Н. М. Беляев, А. А. Рядно и др. – Минск: Наука і тэхніка, 1991. – 319 с.

Поступила в редакцию 04.03.2010 г.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
КИНЕТИКИ ВЗРЫВНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ РАСПЛАВОВ

Ф. В. Недопёкин, А. А. Петренко

Выполненные многочисленные количественные расчёты для различных веществ показывают, что длительность единичного акта кристаллизации составляет $10^{-12} - 10^{-11}$ с, а толщина закристаллизовавшегося при этом слоя составляет $10^{-10} - 10^{-8}$ м. Расчётные теоретические значения предкристаллизационного переохлаждения $\Delta T_{кр}^-$ находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными данными для многих веществ. Так например, для железа экспериментально зарегистрированные переохлаждения составляют около 300К, расчётное – 282К, соответственно для теллура 105К и 102К, для индия 3,5К и 5,3К.

Ключевые слова: взрывная кристаллизация, расплав, физическое переохлаждение, объёмное затвердевание, монокристалл.

Введение. Проблема получения качественных монокристаллов и отливок является частью общей теории структурно-фазовых переходов, физики твёрдого тела и кинетики кристаллизации. Знание и понимание кинетики кристаллизации на микроскопическом уровне необходимо для разработки качественных монокристаллов и отливок с заданными свойствами. Известные молекулярно-кинетические теории зародышеобразования и кристаллизации, базирующиеся на термодинамических законах, рост кристалла рассматривают как равновесный диффузионный процесс, при котором отдельные атомы путем блуждания и диффузии отыскивают энергетически наиболее выгодные положения на границе раздела фаз и закрепляются на них. Считается, что термодинамическое равновесие между жидкой и твёрдой фазами возможно только при температуре плавления T_n . Скорость роста кристалла V_p пропорциональна квадрату переохлаждения на границе раздела фаз и определяется технологическими параметрами и может быть любой. Это означает, что как только температура расплава ниже T_n , так в объеме расплава возможно зародышеобразование и рост твёрдой фазы.

На практике кристаллизация в расплавах возникает только после достижения некоторого критического переохлаждения $\Delta T_{кр}$ и носит взрывной характер [1]. Максимальные скорости кристаллизации на сегодняшний день не определены, однако, экспериментально зарегистрированные составляют десятки и сотни метров в секунду [2, 3]. При высоких скоростях кристаллизации тепловыделение на фронте кристаллизации значительно превышает скорость теплоотвода, а образование твёрдой фазы возможно только путем присоединения предварительно упорядоченных целых комплексов, а не отдельных частиц, т.е. бездиффузионно. На возможность реализации именно пульсирующего механизма кристаллизации, «протекающего с ураганной скоростью путем присоединения из расплава целых слоев» впервые было указано академиком Е.С. Федоровым еще в 1915г. Позже в литературе неоднократно высказывались предложения, что «пульсирующий механизм кристаллизации является внутренним, фундаментальным свойством самого процесса фазового перехода плавление-кристаллизация» [4, 5]. Однако, для описания конкретных физических процессов эта идея теоретического развития так и не получила, т.к. не было решено уравнение теплового баланса для взрывного режима кристаллизации.

В работе [6] нами была рассмотрена теоретическая модель пульсирующей кристаллизации расплава, протекающая со скоростью распространения звука в расплаве.

В данной работе приведены формулы, полученные для расчета основных параметров кристаллизации расплавов. Проводится сравнительный анализ результатов теоретических расчетов с известными экспериментальными данными и с результатами, полученными с помощью нового метода баллистического термического анализа – БТА [6].

Постановка задачи взрывной кристаллизации расплавов. В настоящей работе теоретическая модель кристаллизации базируется на следующих основных положениях:

1. Фазовый переход плавление-кристаллизация имеет гистерезисный характер. Это означает, что плавление происходит при одной температуре – T_n , а кристаллизация при другой T_k . Величина предкристаллизационного переохлаждения $\Delta T_k^- = T_n - T_k$ определяется не техническими или технологическими параметрами, а физико-химическими характеристиками вещества и является const. В температурном интервале ΔT_k^- расплав находится не в метастабильном, а в устойчивом состоянии и спонтанная кристаллизация не возможна. В дальнейшем эту величину будем называть физическим переохлаждением.

2. Кристаллизация в расплаве возникает только при наличии технического переохлаждения ΔT_m^- , т.е. когда температура – T_0 на теплоотводящей поверхности будет ниже температуры кристаллизации

T_k , а общее переохлаждение будет больше физического: $\Delta T_m^- = \Delta T_o^- - \Delta T_k^- = T_k - T_o \geq 0$. Поскольку самая низкая температура всегда находится на внешней, теплоотводящей поверхности системы, зародышеобразование и кристаллизация в объеме расплава невозможна. В этом случае средняя скорость роста единичного кристалла, а, следовательно, и массовой кристаллизации, определяется не общим переохлаждением, а только техническим на теплоотводящей поверхности.

3. Кристаллизация расплава на микроскопическом уровне рассматривается в виде серии последовательных элементарных актов кристаллизации. Единичным или элементарным актом кристаллизации называется процесс непрерывного образования твердой фазы со скоростью распространения звука V_z в расплаве при T_n . Взрывная кристаллизация возникает только после охлаждения границы раздела фаз до T_k и продолжается до тех пор, пока температура на границе раздела фаз не повысится до T_n за счет саморазогрева ГРФ (границы раздела фаз) от выделившейся удельной теплоты кристаллизации. Следующий элементарный акт кристаллизации может возникнуть только после охлаждения ГРФ до T_k , т.е. при условии, что $\Delta T_o^- \geq \Delta T_k^-$ или при $\Delta T_m^- \geq 0$. Продолжительность единичного акта кристаллизации τ_k определяется только теплофизическими параметрами вещества, а время охлаждения τ_o закристаллизовавшегося слоя χ_k техническим переохлаждением. Чем ниже температура T_o на внешней, теплоотводящей поверхности, тем меньше время охлаждения τ_o границы раздела фаз от T_n до T_k . Период между двумя последовательными актами кристаллизации будем считать единичным циклом кристаллизации $\tau_{ц} = \tau_k + \tau_o$. Очевидно, что средняя скорость кристаллизации, или роста твердой фазы, регистрируемой экспериментально, определяются именно длительностью единичного цикла кристаллизации $\tau_{ц}$.

4. При взрывном процессе кристаллизации диффузионные процессы не работают и для образования монокристаллического зародыша или очередного монокристаллического слоя χ_k , в предкристаллизационный период расплав должен успеть приобрести структуру, эквивалентную структуре твердой фазы. Время структурирования расплава определяется скоростью диффузионных процессов в температурном интервале ΔT_k^- . Если время охлаждения τ_o от T_n до T_k меньше времени необходимого для упорядочения расплава в области, прилегающей к твердой фазе как минимум на толщину - χ_k , то расплав будет затвердевать в аморфную структуру (стеклование). На микроскопическом уровне механизм кристаллизации для металлических расплавов и для высококовязких, стеклующихся материалов должен быть одним и тем же. При высоких скоростях охлаждения любой материал можно перевести в стеклообразное состояние [7]. При достаточно медленном охлаждении теоретически любой стеклующийся материал может закристаллизоваться.

5. Параметры массовой кристаллизации и затвердевание слитка складываются из большого количества единичных актов кристаллизации, следовательно массовая кристаллизация расплава – затвердевание слитка должны подчиняться тем же законам, что и рост единичного кристалла и описываться теми же уравнениями, но усредненными на объем.

6. Взрывной дискретный механизм кристаллизации в твердом теле должен проявляться в виде полос роста различной периодичностью в выращенных монокристаллах, монокристаллических зернах и сопровождаться характеристическим оптическим и акустическим излучением, наблюдаемых экспериментально [8], параметры которых могут быть рассчитаны.

7. В данной работе при решении уравнений теплового баланса для импульсного режима кристаллизации исходные условия существенно упрощаются. Температуры плавления и кристаллизации вдоль различных кристаллографических направлений принимаются одинаковыми, хотя они всегда различны. Параметры всех остальных теплофизических коэффициентов вещества – изотропными. При рассмотрении кинетики взрывной кристаллизации возникает целый ряд взаимосвязанных физических задач, которые должны найти, как минимум, качественное объяснение, причем с единых физических позиций.

Расчет параметров кристаллизации. При взрывном режиме кристаллизации возникает ситуация, аналогичная реализуемой на практике в момент контакта расплавленного металла при заливке в холодную форму. Такая задача решена [2] и успешно используется в металлургии, в расчетах при сверхвысоких скоростях охлаждения тонких пленок и капель [9], при расчетах режимов лазерного облучения [10]. Рассматриваемая задача отличается тем, что теплоотвод от закристаллизовавшегося слоя осуществляется одновременно в твердую и жидкую фазы, находящуюся при температуре T_k . В данной работе приводятся только конечные формулы для расчета различных параметров кристаллизации. Решение уравнения теплового баланса для взрывного режима кристаллизации рассматривается в работе [1]. Время протекания единичного акта кристаллизации определяется по формуле:

$$\tau_{кр} = 1,27 \frac{\lambda}{C \rho V^2} = 1,27 \Re V^{-2}, \quad (1)$$

где

$\lambda, \mathfrak{R}, \rho$ – коефіцієнти теплопроводности, температуропроводности и плотность вещества;
 V_3 – скорость звука в расплаве при T_n .

Толщина закристаллизовавшегося слоя за единичный акт кристаллизации определяется по формуле

$$\chi_s = 1.27\mathfrak{R}V^{-1} = 1.13\sqrt{\mathfrak{R}\tau_s}. \quad (2)$$

Предположим, что мгновенно выделившаяся теплота кристаллизации полностью аккумулирована закристаллизовавшимся слоем и прилегающей средой, (жидкой и твердой фазами) при их нагревании от $T_{кр}$ до T_n в виде прямоугольного теплового пакета толщиной X_n . Зная время кристаллизации и толщину закристаллизовавшегося слоя можно определить его условную толщину:

$$X_n = \chi_s L \left(C \Delta T_{кр}^- \right)^{-1} = 1.27\mathfrak{R}L \left(V C \Delta T_{кр}^- \right)^{-1}. \quad (3)$$

Для возникновения следующего акта кристаллизации необходимо, чтобы границы раздела фаз вновь охладится до $T_{кр}$. Выделившаяся теплота кристаллизации, сосредоточенная в условном тепловом пакете, может быть отведена в окружающую среду только в том случае, если ее температура на теплоотводящей поверхности, ниже температуры кристаллизации. Очевидно, что при $\Delta T_t^- \rightarrow 0, -\tau_o \rightarrow \infty$. Для определения времени остывания теплового пакета от T_n до T_k естественно предположить, что теплоотвод осуществляется только в сторону твердой фазы. Данная задача является аналогичной рассмотренной выше [10], за исключением граничных условий. В результате проведенных расчетов получено соотношение для расчета времени охлаждения условного теплового пакета X_n :

$$\tau_o = 5,06\mathfrak{R}L^2V^{-2}C^{-2} \left(\Delta T_m^- \right)^{-2}. \quad (4)$$

Зная χ_k, τ_k и τ_o , получим формулу для вычисления средней или технической скорости роста твердой фазы за один полный цикл кристаллизации при спонтанной кристаллизации:

$$V_p = 0,25VC^2L^{-2} \left(\Delta T_m^- \right)^2. \quad (5)$$

Если в полученном соотношении постоянный множитель обозначим $K=0,25VC^2L^{-2}$, то можно записать:

$$V_p = K \left(\Delta T_m^- \right)^2. \quad (6)$$

Данное соотношение по внешнему виду фактически совпадает с хорошо известным эмпирическим соотношением для определения линейной скорости роста кристаллов [11], однако полученным совершенно из других теоретических моделей кристаллизации экспериментальных данных:

$$V_p = K_k \left(\Delta T^- \right)^2, \quad (7)$$

где K_k – некоторый кинетический коэффициент, подбираемый экспериментально.

С физической точки зрения между этими внешне похожими соотношениями имеется принципиальное отличие. Во первых, в (6) коэффициент K рассчитывается, а не подбирается экспериментально. Во-вторых, в (6) учитывается только техническое переохлаждение, а в (7) – общее. Это означает, что $V_k=0$ при $\Delta T_o^- \leq \Delta T_s^-$ и процесс кристаллизации носит гистерезисный характер. Из соотношения (7) следует, что скорость кристаллизации не равна нулю при сколь угодно малом переохлаждении. Проведенные расчеты показывают, что выражение (6) более правильно и точно описывают реальную кинетику кристаллизации.

При термодинамическом рассмотрении гомогенной кристаллизации считается, что кристаллизация возможна только при возникновении на поверхности или даже в объеме расплава критического устойчивого зародыша, минимальный радиус которого определяется из равенства свободных энергий и силы поверхностного натяжения на границе раздела фаз $\sigma_{кж}$ [10] из соотношения:

$$R = 2\sigma_{кж}T_s \left(g\Delta T^- \right)^{-1}, \quad (8)$$

где

$\sigma_{кж}$ – энергия поверхности раздела между жидкой и твердой фазами (кристалл - жидкость);
 $g = L\rho$ – удельная теплота плавления на единицу объема.

Из приведенного соотношения невозможно определить конкретное значение R , т.к. он является функцией переохлаждения и, согласно принятым представлениям, может быть любым. Это означает, что центры кристаллизации могут достигать критического радиуса при любом, сколь угодно малом переохлаждении, от которого зависит их размер, количество и скорость зародышеобразования. На практике кристаллиза-

ция любого расплава начинается только после достижения некоторого конкретного для каждого вещества значения ΔT_s^- . В рамках рассматриваемой взрывной кристаллизации расплавов для определения ΔT_s^- воспользуемся полученным соотношением (2). Предположим, что толщина закристаллизовавшегося слоя в течение единичного акта кристаллизации равна диаметру критического зародыша, т.е. $\chi_s = 2R$. В этом случае можно найти конкретное значение $\Delta T_{кр}^-$, при котором возникший зародыш твердой фазы всегда устойчив и способен к дальнейшему росту:

$$\Delta T_{кр}^- = 3,14\sigma_{кж} T_s V C L^{-1} \lambda^{-1}. \quad (9)$$

Значение $\sigma_{кж}$ определяется только расчетным путем. Для его вычисления существует много различных формул. В результате проведенных количественных расчетов установлено, что с достаточной для анализа точностью оно может найдено из соотношения, используемого в работах [11, 12].

$$\sigma_{кж} = \sigma_{жс} \left(\frac{\rho_m}{\rho_{жс}} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{L_{пл}}{L_{ис}}, \quad (10)$$

где $L_{пл}$ и $L_{ис}$ – удельные теплоты плавления и испарения вещества, $\sigma_{жс}$ – поверхностное натяжение жидкости с окружающей средой, определяемое экспериментально.

Зная τ_s и χ_s найдем поток энергии g_s выделяющейся при единичном акте кристаллизации на единицу площади границы раздела фаз из соотношения:

$$g_s = W(S\tau_s)^{-1}, \quad (11)$$

где $W = \chi_s S \rho L$ – количество энергии, выделившейся в импульсе кристаллизации. Подставляя в (11), получим:

$$g_s = \rho \chi_s L \tau_s^{-1} = V \rho L = 1,27 \rho L \sqrt{\Re \rho_s^{-1}}. \quad (12)$$

Данная формула аналогична известной в лазерной технике для определения пороговой плотности облучения поверхности твердого тела [3]

$$g_l = L \sqrt{\Re \tau_l^{-1}}, \quad (13)$$

где τ_l – длительность лазерного импульса.

Расчеты показывают, что у большинства веществ в единичном акте кристаллизации выделяемая энергия равная $g_s = 10^6 \div 10^8$ вт/см². Аналогичные плотности лазерного луча применяются для оплавления и разрушения некоторых материалов [9]. Из расчетов по формуле (12) следует, что длительность единичного акта кристаллизации составляет $10^{-10} \div 10^{-12}$ сек., а охлаждения $10^{-6} \div 10^{-8}$ сек. Толщина закристаллизовавшегося при этом слоя для различных материалов колеблется в широких пределах и составляет десятки и сотни ангстрем. Энергетические параметра и физические процессы взрывного режима кристаллизации имеют много общего с процессами, протекающими на поверхности твердого тела при импульсном облучении материалов лазерным лучом, а расчетные формулы аналогичны.

Объемное затвердевание. Если полученные формулы правильно описывают кинетику кристаллизации на микроскопическом уровне, (единичный цикл кристаллизации), то должны давать правильные количественные результаты и на макроскопическом (средняя скорость роста) уровне, т.е. должны быть применимы и для описания и расчетов объемного затвердевания отливок. Для этого в формулу (4) подставим значение V из (2), числитель и знаменатель умножим на χ^4 , произведем необходимые преобразования и получим:

$$t_s = \frac{3,14L^2}{\Re C^2 (\Delta T_m^-)^2} \left(\frac{\chi_s^3}{\chi_s^2} \right)^2 = \frac{3,14L^2}{\Re C^2 (\Delta T_m^-)^2} \left(\frac{\Theta}{S} \right)^2. \quad (14)$$

В данном выражении в числителе объем, а в знаменателе суммарная теплоотводящая поверхность слитка. На практике время затвердевания объемных отливок в значительной мере определяется конкретными конструктивными и технологическими параметрами системы, которые не входят в полученную формулу. Однако в неё входит один интегральный параметр – это техническое переохлаждение или температура на теплоотводящей поверхности отливки, которую легко контролировать и, следовательно, рассчитать время затвердевания отливки любого объёма. Отношение объема к поверхности в (14) называется приведенной толщиной слитка и считается главным параметром определяющим динамику его затвердевания [2]. Общепринятых формул для расчета времени затвердевания отливок в настоящее время нет, однако в общем случае динамика затвердевания описывается эмпирической зависимостью:

$$Z_3 = \alpha \sqrt{t_s}, \quad (15)$$

где Z – толщина затвердевшей корки или соответствующая толщина собранной вместе твердой фазы; α – некоторая const затвердевания, подбираемая экспериментально. Количественные расчеты по приведённой формуле возможны только в некоторых простейших случаях, т.к. в неё входит трудно определяемый параметр α . Из соотношения (14) легко получить формулу для расчета толщины закристаллизовавшегося слоя от времени затвердевания расплава в больших объёмах. Для этого представим $\Theta = ZS$, подставим в (14), выполнив необходимые преобразования, получим

$$Z_m = \left(0,56CL^{-1}\Delta T_m^- \sqrt{\mathfrak{R}}\right) \sqrt{t_s} . \quad (16)$$

Данное выражение, полученное на базе основных параметров взрывной кристаллизации на микроскопическом уровне, полностью совпадает с эмпирическим выражение (15), а коэффициент α приобретает четкий физический смысл, который можно рассчитать для каждого вещества. Продифференцировав полученное выражение по t_s , получим важнейшее в теории литья выражение для расчета скорости затвердевания отливки U , как комплексной количественной характеристики кристаллизующегося расплава:

$$U = \frac{C\Delta T_m^-}{2L} \sqrt{\frac{\mathfrak{R}}{3,14t_s}} = \left(0,28 \frac{C\sqrt{\mathfrak{R}}}{L\Delta T_m^-}\right) / \sqrt{t_s} . \quad (17)$$

Полученное соотношение для определения t_s , l_s , и U не содержат эмпирических коэффициентов и почти полностью совпадают с аналогичными формулами, полученными экспериментально [9].

Полосы роста. В выращенных из расплавов монокристаллах и на отдельных монокристаллических зернах при массовой кристаллизации наблюдаются различного рода полосы роста и периодические неоднородности, обусловленные кинетикой кристаллизации расплавов: субмикронные, микронные и пилообразные. Период субмикронных полос роста совпадает с расчетной толщиной закристаллизовавшегося слоя $l_l = \chi_s$ за единичный акт кристаллизации и составляет десятки и сотни ангстрем. При взрывном механизме кристаллизации неизбежно возникает ударная волна с периодом равным периоду единичного акта кристаллизации. Умножив время охлаждения τ_0 на скорость звука, получим длину акустической волны в расплаве, которая неизбежно отразится на структуре материала, т.к. расплав фактически мгновенно «замораживается» и структура расплава, существующая в предкристаллизационный период.

$$l_2 = 5\mathfrak{R}L^2C^{-2}V\left(\Delta T_t^-\right)^2 . \quad (18)$$

Расчеты показывают, что их период равен несколько микрон. Такие полосы роста хорошо наблюдаются на поверхности монокристаллов и отличаются высокой стабильностью. Предметом многочисленных исследований являются хорошо наблюдаемые на поверхности монокристаллов так называемые пилообразные полосы роста с периодом в несколько десятков микрон. Их происхождение так же объясняется в рамках взрывного пульсирующего механизма кристаллизации с учетом вклада гравитационных и термокапиллярных сил на границе раздела фаз. Получено соотношение (решение не приводится) для вычисления их периода:

$$l_3 = \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial Z} \frac{g}{\rho_l} \left(\frac{1 + \sin \alpha}{\sin \alpha}\right)^2 \left(\frac{3,14(90 + \alpha)}{360} + \frac{1}{2 \operatorname{tg} \alpha}\right)^{-1} , \quad (19)$$

где α – угол наклона расплава вблизи границы раздела фаз.

Экспериментальные и теоретические результаты. В данной работе для исследования кинетики кристаллизации расплавов использовался новый метод баллистического термического анализа – БТА [6]. Принципиальное отличие метода БТА от всех известных методов термографирования заключается в том, что образец нагревается и охлаждается многократно циклически. Максимальные и минимальные температуры в исследуемой температурной области достигаются за счет тепловой инерции печи (нагревателя), включаемой или выключаемой в определенные моменты времени. Это означает, что при экстремальных и минимальных температурах температурные градиенты в образце всегда равны нулю. Максимальные и минимальные температуры в образце могут изменяться на 0,5-1К относительно предыдущего цикла. В этом случае на термограммах экзо- и эндотермические плато не размываются и хорошо выражены. Метод БТА позволяет достаточно четко выявить постадийное плавление вещества с разницей в доли градуса, а также определить относительную долю удельной теплоёмкости плавления материала на каждом этапе плавления. Так, например, установлено, что у свинца разница между температурами плавления составляет $T_{L2}-T_{L1}=0,3\pm 0,05\text{K}$, $T_{L3}-T_{L2}=0,6\pm 0,1\text{K}$. Олово также плавится в три этапа с разницей по температуре $T_{L2}-T_{L1}=1,8\pm 0,2\text{K}$, $T_{L3}-T_{L2}=8,5\pm 0,5\text{K}$. Хлорид натрия NaCl плавится как минимум в четыре этапа при $T_s=790\pm 0,5$; $798\pm 0,5$; $801\pm 0,5$; $807\pm 0,5^\circ\text{C}$, т.е. с разницей по температуре между этапами плавления $T_{L2}-T_{L1}=8,5\pm 0,05\text{K}$, $T_{L3}-T_{L2}=2,5\pm 0,05\text{K}$ и $T_{L4}-T_{L3}=5,5\pm 0,05\text{K}$. Этим, по-видимому, объясняется большой разброс по температуре плавления для NaCl, приводимых в различных источниках. У всех исследованных веществ предкристаллизационное переохлаждение изменяется дискретно, увеличиваясь после каждого этапа плавления, достигает максимальной величины и при дальнейшем перегреве расплава не изме-

няется. Для олова $\Delta T_1^- = 1,8 \pm 0,2K$; $\Delta T_2^- = 4,8 \pm 0,2K$ $\Delta T_3^- = 8 \pm 1K$. Для свинца $\Delta T_1^- = 0,06 \pm 0,02K$; $\Delta T_2^- = 3 \pm 0,5K$ $\Delta T_3^- = 4 \pm 0,2K$.

Впервые обнаружено предкристаллизационное переохлаждение у NaCl равно $\Delta T_1^- = 0,65 \pm 0,1K$. Установлено, что независимо от величины предкристаллизационного переохлаждения температура кристаллизации всегда равна температуре плавления вещества на первом этапе. По длительности плавления определены относительные удельные теплоты плавления на каждом этапе. Для свинца $\Delta L_1 = \Delta L_2 = 0,4 \div 0,5L$ а $\Delta L_3 = 0,15L$. Для олова $\Delta L_1 \approx 0,12L$, $\Delta L_2 \approx 0,65$, $L_3 \approx 0,23L$. Для NaCl удельные теплоты плавления на каждом этапе примерно равны. Четко выражены различные температуры плавления у теллура при 450, 455 и 462,5°C. Поэтапное плавление наблюдается в PbCl₂ при 498, 503 и 522±1°C, а переохлаждение скачкообразно изменяется от 6К до 9К 24К соответственно. При плавлении InSb наблюдаются четыре эндотермических эффекта при температурах 425, 485, 515 и 525°C, а предкристаллизационные переохлаждения соответственно составляют несколько градусов - 21 и 53К. Аналогичные результаты получены для многих других веществ. Некоторые расплавы очень легко переохлаждаются на очень значительные температуры, например, у теллура $\Delta T_K^- = 120K$; у железа $\Delta T_K^- = 280 - 300K$. Расплавы других веществ значительно переохлаждать не удаётся, например, для индия, а для алюминия - $\Delta T_K^- = 1,8K$, а у других и того меньше. Максимальные переохлаждения ΔT_K^- для каждого вещества могут быть рассчитаны по формуле полученной в данной работе.

В таблице приведены результаты теоретических расчетов параметров кристаллизации некоторых веществ и экспериментальные данные. В справочниках редко приводятся характеристики веществ при температуре плавления, хотя они могут существенно отличаться от измеренных при температурах далеких от T_s. Тем не менее, полученные результаты свидетельствуют о хорошем совпадении теоретических и экспериментальных данных.

Таблица
Расчетные значения параметров кристаллизации некоторых веществ

Вещества	τ_s сек 10^{-12}	χ_s м 10^{-10}	τ_o сек 10^{-7}	X_n м 10^{-6}	$f_{гн}$ 10^6	ΔT_K^- экспер	ΔT_K^- теор.
Na	13,6	360	0,76	3,04	13	3,5	2,39
Al	4,6	212	6,84	9,42	1,5	2,8	4,7
Si	0,4	24	11,7	4,6	0,8	40	41,5
K	16,6	3117	7,89	24,2	1,3	1,8	1,77
Fe	0,4	20,6	1,1	9,52	9,2	280	287
Ni	1,1	52	1,8	2,4	5,6		
Cu	3,98	138	7,37	6,53	1,4	18	12,8
Ga	2,3	666	0,86	1,45	12	69,8	69,9
Ag	2,9	805	44,5	35,7	2,3		
Ge	1,2	41	11,2	4,45	0,9	30	27,8
In	10	232	0,94	2,53	10	5	5,3
Sn	4	100	1,9	2,43	5,3	8	6,5
Sb	4,6	86	12,5	4	0,8	39,5	39,6
Te	2,25	20,7	8,2	1,4	1,2	120	124
Hg	2,26	33	0,12	0,27	83	39,6	30,5
Pb	8,74	159	2,23	2,84	4,5	4,5	7,9
Bi	2,38	39,3	2,8	1,49	3,6	30	27,9
InSb	7,7	169	0,35	13	29	53	-
NaCl						-	0,65
PbCl ₂						24	-
Se						20,5	21,7

Выводы. В работе предполагается, что фазовый переход плавление-кристаллизация имеет гистерезисный характер. Кристаллизация расплава возникает только после достижения некоторого конкретного и постоянного для каждого вещества предкристаллизационного переохлаждения. Кристаллизация протекает со скоростью звука до тех пор, пока температура на границе раздела фаз не достигнет температуры плавления. Следующий элементарный акт кристаллизации возникает только после охлаждения расплава до прежней температуры. В результате решения уравнения теплового баланса для пульсирующего режима кристаллизации впервые получены формулы для расчёта времени протекания единичного акта кристаллизации, толщины закристаллизовавшегося при этом слоя и величины предкристаллизационного переохлаждения. В расчетные формулы входят только справочные теплофизические константы веществ.

РЕЗЮМЕ

Виконані численні кількісні розрахунки для різних речовин показують, що тривалість одиначного акту кристалізації складає $10^{-12} - 10^{-11}$ с, а товщина закристалізованого шару становить $10^{-10} - 10^{-8}$ м. Розрахункові теоретичні значення $\Delta T_{кр}^-$ перебувають у згоді з відомими експериментальними даними для багатьох речовин. Так, наприклад, для заліза експериментально зареєстровані переохолодження становлять близько 300К, розрахункове - 282К, відповідно для телура 105К і 102К, для індію 3,5 К і 5,3 К.

Ключові слова: вибухова кристалізація, розплав, фізичне переохолодження, об'ємне затвердіння, монокристал.

SUMMARY

Performed numerous quantitative calculations for different substances show that the duration of a single act of crystallization was equal to a $10^{-12} - 10^{-11}$ second, and the thickness of crystallized layer at the same time is $10^{-10} - 10^{-8}$ m. Calculated theoretical values $\Delta T_{кр}^-$ are in good agreement with available experimental data for many substances. For example, the experimentally recorded for iron re-cooling is about 300 K, estimated - 282K, respectively, for the tellurium 105K and 102K, for indium and 3.5 to 5.3 K.

Keywords: explosive crystallization, melt, physical supercooling, volume solidification, single crystal.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Затвердевание металлов и металлических композиций / Ф. В. Недопёкин, В. А. Лейбензон, В. Л. Пилюшенко и др. – К.: Наукова думка, 2009. – 412 с.
2. Салли И. В. Кристаллизация при сверхбольших скоростях охлаждения / И. В. Салли. – К.: Наукова думка, 1972. – 217 с.
3. Херлах Д. Метастабильные материалы из переохлаждённых расплавов / Д. Херлах, П. Галенко, Д. Холланд-Мориц. – М.-Ижевск: НИЦ, 2010. – 496 с.
4. Любов Б. Я. Теория кристаллизации в больших объемах / Б. Я. Любов. – М.: Наука. – 1975. – 230 с.
5. Ролов Б. Н. Физика размытых фазовых переходов / Б. Н. Ролов, В. Э. Юркевич. – Ростов н/Д.: Изд-во Ростовского университета. – 1983. – 320 с.
6. Петренко В. И. Теоретическая модель пульсирующей кристаллизации расплавов со скоростью звука / В. И. Петренко, П. В. Петренко, Ф. В. Недопекин. // Вісник Донецького університету. Сер. А. Природничі науки. – 1999. – № 1. – С. 82-89.
7. Александров В. Д. Новый метод термического анализа для исследования кинетики кристаллизации селена / В. Д. Александров, А. Ю. Кудзин, В. И. Петренко // Неорганические материалы. – 1990. – Т. 26, № 10. – С. 2091-2096.
8. Николаев И. В. Исследование переднего фронта импульса характеристического излучения при спонтанной кристаллизации расплава теллура / И. В. Николаев, А. П. Кожаро // Теплофизические процессы при кристаллизации и затвердевании. – Новосибирск: ИТФ СО АН СССР. – 1984. – С. 104-108.
9. Григорович В. К. Электронное строение и термодинамика сплавов железа / В. К. Григорович. – М.: Наука, 1970. – 288 с.
10. Ефимов В. А. Разливка и кристаллизация стали / В. А. Ефимов. – М.: Металлургия, 1976. – 552 с.
11. Баландин Г. Ф. Основы теории формирования отливки. Ч. II / Г. Ф. Баландин. – М.: Машиностроение. – 1979. – 335 с.
12. Тепломассообменные процессы финишных операций обработки стали / Ф. В. Недопёкин, А. П. Огурцов, А. В. Гресс, И. А. Павлюченков. – Днепропетровск: ДГТУ, 2007. – Кн. 1: Теоретические основы и исследования тепломассообменных процессов ковшовой металлургии и разливки стали в изложницы. – 430 с.

Поступила в редакцию 28.04.2010 г.

**ВЫХОДНАЯ ЦЕПЬ ДЛЯ УСИЛИТЕЛЯ С МАНИПУЛЯЦИЕЙ НА ГАРМОНИКАХ
НА П-ОБРАЗНЫХ ЩЕЛЕВЫХ РЕЗОНАТОРАХ**

Ю. В. Рассохина, В. Г. Крыжановский, В. А. Коваленко

В работе методом поперечного резонанса проведен анализ периодической структуры из связанных П-образных щелевых резонаторов в заземляющем слое микрополосковой линии передачи. Показано, что такая схема обеспечивает запираение основной волны микрополосковой линии одновременно на двух частотах с относительно широкими полосами пропускания. Синтезирована цепь в виде 2-звенной периодической структуры из связанных щелевых резонаторов с фильтрацией первых двух гармоник частоты 1.5 ГГц. На основе полученной матрицы рассеяния проведено моделирование высокоэффективного усилителя мощности с манипуляцией на гармониках на базе транзистора CRF24010 со стоковым КПД не менее 50% и выходной мощностью 2.7 Вт на частоте 1.5 ГГц.

Ключевые слова: микрополосковая линия передачи, щелевой резонатор, П-образный волновод, периодическая структура, метод поперечного резонанса, усилитель с манипуляцией на гармониках.

Введение. Одним из видов трехслойных планарных структур, которые активно исследуются в последнее десятилетие, являются периодические структуры из щелевых резонаторов различной формы в металлизированном слое микрополосковой линии передачи (МПЛ). К таким структурам относятся, в частности, цепи типа Electromagnetic Bandgap (EBG) или Electromagnetic bandstop (EBS) [1, 2], которые обеспечивают широкополосное запираение одной или двух гармоник основного сигнала. Простейшим вариантом такой периодической структуры является структура на полуволновых щелевых резонаторах прямоугольной формы в заземляющем слое микрополосковой линии [3], элементарная ячейка которой имеет одночастотную резонансную характеристику. Для уменьшения площади, занимаемой щелевым резонатором, часто используются емкостные нагрузки (например, форма щели в виде гантели) и изгибы щели [4]. Целью данной работы является анализ периодической структуры на связанных П-образных щелевых резонаторах в заземляющем слое микрополосковой линии передачи и ее использование в усилителях с высоким КПД.

Метод поперечного резонанса для анализа неоднородности в заземляющем слое микрополосковой линии передачи. Идея метода анализа щелевых резонансных структур сложной формы в заземляющем слое подложки описана в работе Sorrentino, Itoh [5], в которой при решении краевой задачи методом поперечного резонанса [6] поле на неоднородности в виде скачка ширины щели записывается через собственные волны волновода сложной формы поперечного сечения. В методе поперечного резонанса элементы матрицы рассеяния на неоднородности рассчитываются из решения краевых задач для виртуального резонатора с электрическими или магнитными стенками по продольной оси, который включает в себя эту неоднородность.

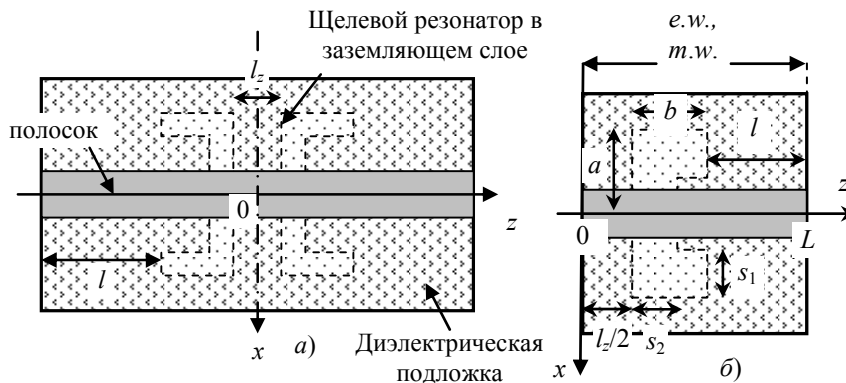


Рис. 1. а) – П-образный щелевой резонатор в заземляющем слое МПЛ, симметризованная структура, б) – топология полоскового резонатора с неоднородностью для «электрической» и «магнитной» краевых задач.

П-образный щелевой резонатор в металлизированном слое МПЛ – это несимметричная относительно плоскости $z=Const$ структура, однако ее можно симметризовать, если рассмотреть два связанных через отрезок МПЛ длиной l_z П-образных щелевых резонатора, как показано на рис. 1. Для анализа симметричной относительно плоскости $z=0$ неоднородности, показанной на рис. 1а, достаточно решить две краевые задачи для полоскового резонатора [5]: задачи с условиями электрических (*e.w.*) и магнитных (*m.w.*) стенок в плоскости симметрии $z=0$ и на границе резонатора $z=L$, рис. 1, б. Тогда элементы матрицы рассеяния основной волны МПЛ в плоскостях $z = \pm(l_z/2 + b)$

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где $S_{11} = S_{22}$, $S_{12} = S_{21}$, получаются из решений двух, «электрической» и «магнитной», краевых задач относительно длин резонатора (l_1 и l_2) по формулам:

$$S_{11} = \frac{\Gamma_2 - \Gamma_1}{2}, \quad S_{12} = \frac{\Gamma_1 + \Gamma_2}{2}. \quad (2)$$

Здесь $\Gamma_{1(2)} = \exp(2j\beta_{m,z}l_{1(2)})$, $\beta_{m,z}$ - постоянная распространения основной волны МПЛ.

Постановка и решение краевой задачи для П-образного щелевого резонатора в заземляющем слое МПЛ. Рассматривается трехслойная экранированная структура (рис. 2) – полосковый резонатор с неоднородностью в заземляющем слое МПЛ. Первый слой – это диэлектрическая подложка толщиной h и относительной диэлектрической проницаемостью ε_{r1} , второй и третий слои – с воздушным заполнением. Краевая задача для резонатора решается методом частичных областей с разбиением исходной области по вертикальной оси плоскостями $y=0$ и $y=h$ на 3 частичные. Рассмотрим решение «электрической» краевой задачи, с условиями $e.w.$ в плоскостях $z = 0, z = L$ (рис. 1, б).

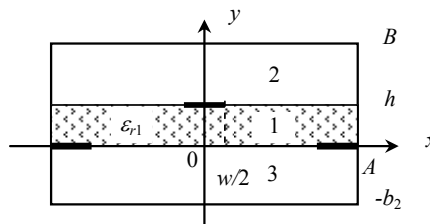


Рис. 2. Поперечное сечение полоскового резонатора плоскостью $z = l/2 + s/2$ с разбиением исходной области на три частичные подобласти.

Решается уравнение Гельмгольца для электрического (e) и магнитного (h) векторных потенциалов $A_{h(e)y} = (0, A_{h(e)y}, 0)$ в каждой из частичных областей $i=1-3$ резонатора:

$$\Delta A_{h(e)y,i} + k_0^2 \varepsilon_{ri} A_{h(e)y,i} = 0,$$

где $k_0 = \omega/c$, ε_{ri} – относительная диэлектрическая проницаемость i -го слоя. В силу симметрии структуры, решение краевой задачи ищется для четверти поперечного сечения области резонатора. Для «электрической» краевой задачи разложения электрического и магнитного векторных потенциалов в ряды Фурье имеют вид:

$$\begin{aligned} A_{ey,i} &= \sum_{m=1} \sum_{n=1} P_{mn} \cos k_{xm} x \sin k_{zn} z F_{ei,mn}(y), \\ A_{hy,i} &= \sum_{m=1} \sum_{n=0} P_{mn} \sin k_{xm} x \cos k_{zn} z F_{hi,mn}(y), \end{aligned} \quad (3)$$

где нормировочный коэффициент

$$P_{mn} = \sqrt{2/A} \sqrt{(2 - \delta_{n0})/L} \chi_{mn}^{-1}, \quad \chi_{mn}^2 = k_{xm}^2 + k_{zn}^2,$$

и $k_{xm} = \pi(2m-1)/2A$, $k_{zn} = \pi n/L$, $i=1..3$ – номер частичной области. Функции $F_{ei,mn}(y), F_{hi,mn}(y)$ имеют вид ($l = m, n$ и $y_0 = h/2$):

$$\begin{aligned} F_{e1,l}(y) &= \left[R_{e11l} \frac{\sin k_{yl}(y-y_0)}{\cos k_{yl}y_0} + R_{e12l} \frac{\cos k_{yl}(y-y_0)}{\sin k_{yl}y_0} \right] \frac{1}{k_{yl}}, \\ F_{e2,l}(y) &= R_{e2l} \frac{\cos k_{y2l}(B-y)}{\sin k_{y2l}b_1} \frac{1}{k_{y2l}}, \quad F_{e3,l}(y) = R_{e3l} \frac{\cos k_{y2l}(b_2+y)}{\sin k_{y2l}b_2} \frac{1}{k_{y2l}}, \\ F_{h1,l}(y) &= R_{h11l} \frac{\cos k_{yl}(y-y_0)}{\cos k_{yl}y_0} + R_{h12l} \frac{\sin k_{yl}(y-y_0)}{\sin k_{yl}y_0}, \\ F_{h2,l}(y) &= R_{h2l} \frac{\sin k_{y2l}(B-y)}{\sin k_{y2l}b_1}, \quad F_{h3,l}(y) = R_{h3l} \frac{\sin k_{y2l}(b_2+y)}{\sin k_{y2l}b_2}, \end{aligned}$$

где $k_{yi,mn}^2 = k_0^2 \varepsilon_{ri} - k_{xm}^2 - k_{zn}^2$, $R_{e11(2),mn}$, $R_{e2(3),mn}$, $R_{h11(2)mn}$, $R_{h2(3)mn}$ – неизвестные коэффици-

енты разложения в ряды Фурье.

Поле на П-образной щели записывается через разложения в ряды по собственным функциям $T_{h(e)y,k}$ нечетных H - и E -волн П-волновода:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{0t} &= \sum_{k=1} V_{hk} (\nabla_t T_{hy,k} \times \mathbf{e}_y) + \sum_{k=1} V_{ek} \nabla_t T_{ey,k}, \\ \mathbf{H}_{0t} &= \sum_{k=1} I_{hk} \nabla_t T_{hy,k} - \sum_{k=1} I_{ek} (\nabla_t T_{ey,k} \times \mathbf{e}_y), \end{aligned} \quad (4)$$

где $V_{h(e)k}$ – неизвестные коэффициенты разложения. Токи на полоске записываются в виде разложений в ряды по полиномам Чебышева [3,4] с неизвестными коэффициентами c_k, d_k с учетом условия магнитной стенки в плоскости симметрии $x=0$ (симметрия основной волны МПЛ):

$$\begin{aligned} J_z(x) &= \left(1 - (2x/w)^2\right)^{-1/2} \sum_{k=0} c_k T_{2k}(2x/w) = \sum_{k=0} c_k \varphi_k(2x/w), \\ J_x(x) &= \sqrt{1 - (2x/w)^2} \sum_{k=0} d_k U_{2k+1}(2x/w) = \sum_{k=0} d_k \psi_k(2x/w), \end{aligned} \quad (5)$$

а их Фурье-компоненты рассчитываются по формулам:

$$\begin{aligned} J_{zn} &= \sqrt{\frac{2}{A}} \int_0^{w/2} J_z(x) \cos(k_{xn}x) dx = \sum_{k=0} c_k \alpha_{nk}^m, \quad \alpha_{nk}^m = (-1)^k \sqrt{\frac{2}{A}} \frac{w}{2} \frac{\pi}{2} J_{2k} \left(k_{xn} \frac{w}{2} \right), \\ J_{xn} &= \sqrt{\frac{2}{A}} \int_0^{w/2} J_x(x) \sin(k_{xn}x) dx = \sum_{k=0} d_k \beta_{nk}^m, \quad \beta_{nk}^m = (-1)^k \sqrt{\frac{2}{A}} \frac{2k+2}{k_{xn}} \frac{\pi}{2} J_{2k+2} \left(k_{xn} \frac{w}{2} \right). \end{aligned}$$

Для «магнитной» краевой задачи на собственные волны полоскового резонатора (условие $m.w.$ в плоскостях $z=0$ и $z=L$) разложение поля в частных областях 1-3 имеет вид:

$$\begin{aligned} A_{ey,i} &= \sum_{m=1} \sum_{n=0} P_{mn} \cos k_{xm}x \cos k_{zn}z F_{ei,mn}(y), \\ A_{hy,i} &= \sum_{m=1} \sum_{n=1} P_{mn} \sin k_{xm}x \sin k_{zn}z F_{hi,mn}(y). \end{aligned} \quad (6)$$

«Сшивая» поля на границах частных областей $y=0$ и $y=h$ и применяя к уравнениям непрерывности процедуру Галеркина [3,4], получим однородную систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно неизвестных коэффициентов разложения c_k, d_k, V_{hk}, V_{ek} с неизвестным параметром (продольным размером резонатора L либо его собственной частотой $k_0 = \omega/c$). Приравняв определитель СЛАУ к нулю, получаем уравнение для определения этого параметра.

Решение обеих задач в некотором диапазоне частот используется затем для расчета матриц рассеяния основной волны МПЛ на двух связанных П-образных щелевых резонаторах в ее металлизированном слое по формулам (2).

Результаты расчетов. После исследования алгоритмов на сходимость в численных расчетах мы ограничились рядами по полиномам Чебышева до 4 членов ряда ($k = 0..3$), а двойные ряды Фурье – до 300 членов ряда. В рядах по собственным волнам П-волновода учли по одной волне H - и E -типа, поскольку рассчитывались только П-волноводы с узкими относительно размеров плеч волновода щелями $s_{1(2)}$. Были проведены расчеты спектра резонансных частот полоскового резонатора с неоднородностью, полученного из решения «электрической» и «магнитной» задач, а также характеристики рассеяния периодической структуры с элементарной ячейкой в виде неоднородности в заземляющем слое МПЛ (рис. 3).

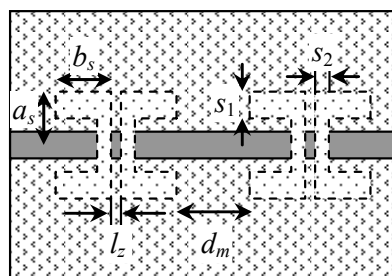


Рис. 3. Периодическая структура на связанных П-образных щелевых резонаторах в заземляющем слое МПЛ.

На рис. 4, а приведена зависимость резонансных частот полоскового резонатора с неоднородностью из двух связанных П-образных щелевых резонаторов размерами $a_s=6,0$; $b_s=5,0$; $s_1=1,0$; $s_2=0,5$ в его заземляющем слое от его длины L_1 , а на рис. 4, б – рассчитанная по этим данным характеристика коэффициента передачи 2-звенной ($n=2$, рис. 3) периодической структуры на основе этой неоднородности.

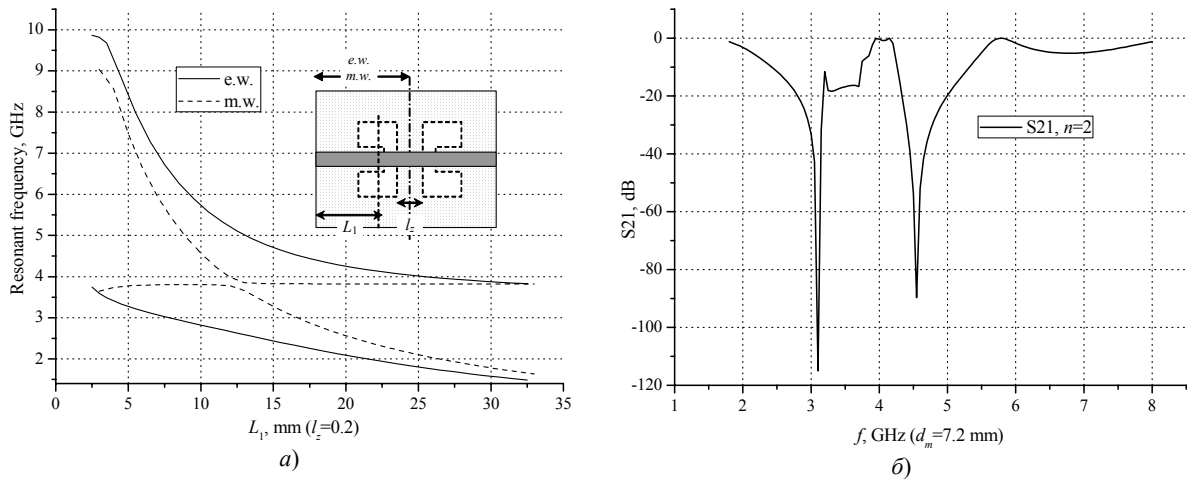


Рис. 4. (а) - спектр резонансных частот из решения «электрической» и «магнитной» краевой задачи; (б) – коэффициент передачи 2-звенной периодической структуры из двух связанных П-образных щелевых резонаторов в заземляющем слое МПЛ. Параметры структуры (в мм): подложка $h=1,0$; $\epsilon_r=9,8$; ширина полоска $w=1,0$, размеры экрана $b_1=b_2=15,0$, $A=24,0$, П-образный щелевой резонатор: $a_s=6,0$; $b_s=5,0$; $s_1=1,0$; $s_2=0,5$.

Видно, что спектр резонансных частот как «электрической», так и «магнитной» задачи – разрывный и имеет в рассматриваемом диапазоне частот 2-10 ГГц по две ветви решений. Это обусловлено тем, что щелевой резонатор имеет конечные размеры, и во взаимодействии с основной волной МПЛ участвуют обе, «электрическая» и «магнитная», стоячие волны резонатора. Характеристика коэффициента передачи основной волны МПЛ на П-образном щелевом резонаторе, рассчитанная по формуле (2), содержит два резонанса, и, следовательно, такая структура формирует характеристику в виде полосно-запирающего фильтра с двумя полосами запираения. Расстояние между ячейками $d_m=7,2$ мм соответствует четверти длины волны полосковой линии на средней для двух резонансов частоте 4 ГГц. Из рис. 4, б видно, что такая периодическая структура фильтрует вторую и третью гармоники основной частоты 1,55 ГГц.

Моделирование высокоэффективного усилителя СВЧ с манипуляцией на гармониках. По результатам расчетов матрицы рассеяния периодической структуры из связанных П-образных щелевых резонаторов в заземляющем слое МПЛ был промоделирован усилитель СВЧ на транзисторе CRF24010. Схема усилителя показана на рис. 5, где введена матрица рассеяния периодической структуры на рис. 3 в виде 4-полосника. Моделирование усилителя проведено с помощью коммерческой программы нелинейного моделирования микроволновых цепей при следующих параметрах: смещение на затворе $V_{gs} = -11,5$ В, питание на стоке $V_{ds} = 20$ В, остальные параметры схемы показаны на рисунке. Входная и выходная согласующие микрополосковые цепи также рассчитывались для подложки из поликора с приведенными выше параметрами. Для моделирования транзистора использовались нелинейная модель Матерки с параметрами для данного транзистора.

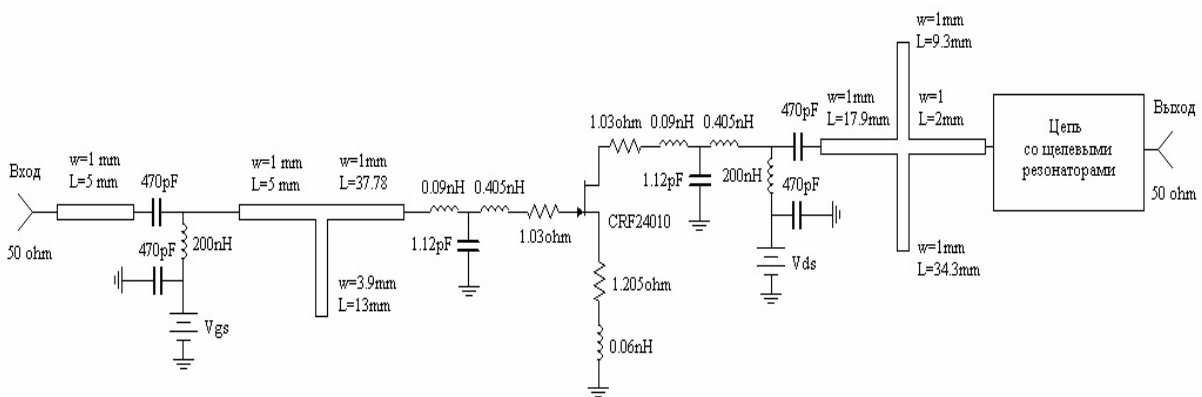


Рис. 5. Схема для моделирования усилителя с контролем уровня гармоник в выходной цепи с помощью 2-звенной периодической структуры на связанных П-образных щелевых резонаторах в заземляющем слое МПЛ.

Частотные характеристики усилителя показаны на рис. 6. Здесь максимальный стоковый КПД составил 56,8 % на частоте 1,5 ГГц при выходной мощности 2,7 Вт.

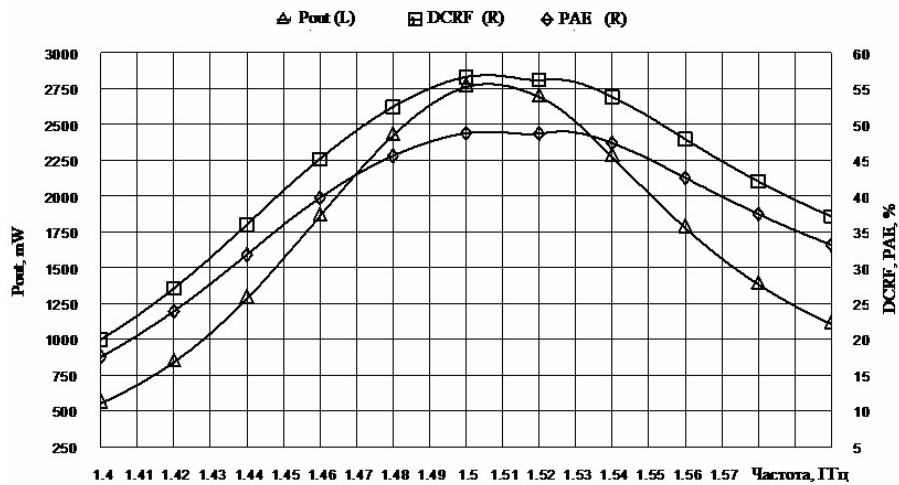


Рис. 6. Результати моделювання характеристик усилителя с манипуляцией на гармониках: P_{out} – выходная мощность, DCRF – стоковый КПД, PAE – КПД по добавленной мощности.

Заключення. Таким образом, методом поперечного резонанса рассчитаны характеристики рассеяния неоднородности в виде двух связанных П-образных щелевых резонаторов в заземляющем слое микрополосковой линии передачи. Показано, что такая схема обеспечивает загирання сигнала одночасово на двух частотах с относительно широкими полосами загирання. Синтезирована цепь в виде периодической структуры на основе П-образного щелевого резонатора в заземляющем слое МПЛ, которая фильтрует первые две гармоники частоты основной частоты 1,5 ГГц. На основе рассчитанной матрицы рассеяния 2-звенной периодической структуры из щелевых резонаторов проведено моделювання високоєфективного усилителя с манипуляцией на гармониках на базе транзистора CRF24010 со стоковым КПД не менее 56% и выходной мощностью 2,7 Вт на центральной частоте 1,5 ГГц.

РЕЗЮМЕ

В роботі методом поперечного резонансу виконано аналіз періодичної структури з пов'язаних П-подібних щілинних резонаторів у заземлюючому шарі мікросліткової лінії передачі. Показано, що така схема забезпечує замикання основної моди мікросліткової лінії одночасно на двох частотах з відносно широкими смугами придушення. Був синтезований ланцюг у вигляді 2-ланкової періодичної структури з пов'язаних щілинних резонаторів із фільтрацією перших двох гармонік частоти 1,5 ГГц. На основі отриманої матриці розсіяння проведено моделювання високоєфективного підсилювача із маніпуляцією на гармоніках на базі транзистора CRF24010 із стоковим ККД не менш 56% і вихідною потужністю 2,7 Вт на центральній частоті 1,5 ГГц.

Ключові слова: мікросліткова лінія передачі, щілинний резонатор, П-хвилевід, періодична структура, метод поперечного резонансу, матриця розсіяння, підсилювач із маніпуляцією на гармоніках.

SUMMARY

In this paper the scattering characteristics of two coupled П-shaped slot resonators in microstrip line ground plane was calculated by transverse resonance method. It is shown that such a circuit provides signal rejection at two frequencies simultaneously with relatively wide bandwidth. This circuit was synthesized as 2-cells periodic structure using coupled П-shaped slot resonators with first two harmonics filtration at operating frequency 1,5 GHz. The high-efficiency harmonic manipulation amplifier with CRF24010 transistor was modeled using the obtained scattering matrix. The modeled drain efficiency was not less than 56% with the output power 2,7 W at operating frequency 1,5 GHz.

Keywords: microstrip line, slotline resonator, П-shaped waveguide, periodic structure, transverse resonance technique, scattering matrix, harmonic manipulation amplifier.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- Harris M. Summary on preferred terminology to replace “photonic bandgap” in describing microwave and millimeter wave periodic structure / M. Harris // IEEE Microwave Mag. – 2002. – Vol. 3, N 3. – P. 74-75.
- Gao C. Study and suppression of ripples in passbands of series/parallel loaded EBG filters / C. Gao, Z. N. Chen, Yu. Y. Wang et al. // IEEE Trans. Microwave Theory Tech. – 2006. – Vol. 54, N 4. – P. 1519-1525.
- Rassokhina Yu. V. Periodic structure on the slot resonators in microstrip transmission line / Yu. V. Rassokhina, V. G. Krizhanovski // IEEE Trans. Microwave Theory Tech. – 2009. – Vol. 57, N 7. – P. 1694-1699.
- Микроэлектронные устройства СВЧ / Под ред Г. И. Веселова. – М: Высш. школа, 1988. – 280 с.
- Sorrentino R. Transverse resonance analysis of finline discontinuities / R. Sorrentino, T. Itoh // IEEE Trans. on MTT. – 1984. – V. 32, No. 12. – P. 1633-1638.
- Itoh T. Numerical techniques for microwave and millimeter-wave passive structures / T. Itoh. – New York: Wiley, 1989. – 707 p.

Поступила в редакцию 12.04.2010 г.

УДК 538.95+945

АНАЛИЗ ДВИЖЕНИЯ ВИХРЕВОЙ СИСТЕМЫ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ НАБЛЮДЕНИЙ МАГНИТНЫХ ЛАВИН

В. Ф. Русаков, В. В. Чабаненко*, С. В. Васильев*, А. Набьялек**, Е. И. Кучук

*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, г. Донецк

**Institute of Physics, PAS, Warsaw, Poland

В работе проанализирована динамика структуры индукции на поверхности ниобиевых дисков в ранее опубликованных магнитооптических исследованиях. Это позволило выделить отдельные этапы лавинного процесса и понять физические причины сложного преобразования магнитного поля на поверхности сверхпроводника. Построены простые модели, отражающие динамику преобразования профиля магнитной индукции при вхождении магнитного потока, в частности, понять причины возникновения «парамагнитных» областей. Наблюдаемые в магнитооптике особенности хорошо коррелируют с нашими исследованиями динамических лавинных явлений в жестких сверхпроводниках с помощью индуктивных методов и датчиков Холла.

Ключевые слова: жесткий сверхпроводник, критическое состояние, критический ток, смешанное состояние, лавина магнитного потока.

Введение. Движение вихревых систем в сверхпроводниках проявляет разнообразное динамическое поведение, в частности, при высоких скоростях фронта магнитного потока, которые реализуются при развитии термомагнитных неустойчивостей [1-4]. Например, в ниобиевых дисках при гелиевых температурах, была получена информация о движении фронта магнитного потока (т.е. границы между диамагнитным и смешанным состоянием) и пространственным распределением магнитного поля, индуцированного лавиной на поверхности сверхпроводника. Осцилляционный характер скорости движения фронта магнитного потока в Nb и NbZr дисках был обнаружен в нашей работе [5].

Обычно магнитодинамика жестких сверхпроводников изучается с помощью контактных, холловских, индуктивных, акустических измерений, а также магнитооптических методов [6]. Регистрируются гигантские осциллирующие импульсы магнитной индукции, затухающие осцилляции и резкие изменения в ультразвуковом поглощении. В работе [7] с помощью датчиков Холла мы наблюдали на поверхности сверхпроводника области, в которых величины индукции магнитного поля (т.е. поля в образце), превышает индукцию внешнего магнитного поля. В дальнейшем будем называть такие области «парамагнитными». Инверсию профиля магнитной индукции и парамагнитные участки поверхности сверхпроводника в результате термомагнитных лавин, мы экспериментально наблюдали в ниобий титановой пластине [7]. В этой работе был также предложен механизм возникновения таких областей, и сделан оценочный расчет. Он показал принципиальную возможность возникновения областей на поверхности сверхпроводника, в которых индукция будет превышать внешнее магнитное поле. Для более глубокого понимания электромагнитных процессов, сопровождающих лавинную динамику магнитного потока и механизмов возникновения парамагнитных областей, нами проанализированы результаты магнитооптической визуализации термомагнитных лавин.

Настоящая работа посвящена детальному анализу распределения магнитного поля на поверхности диска в процессе лавинного проникновения магнитного потока в сверхпроводящий образец. Целью работы является установление физических причин трансформации диамагнитных областей в парамагнитные.

Экспериментальный метод и образцы. В ранних работах периода 1960-70 годов была успешно использована высокоскоростная кинокамера для изучения динамики магнитного потока [3,4], связанного с термомагнитными лавинами в жестких сверхпроводниках II рода. Для съемки быстропротекающих процессов авторы [4] использовали камеру Fastax типа WF – 15 и 16 миллиметровую пленку с небольшой чувствительностью около 50ASA. Фотографии с номерами 1 – 6 процесса проникновения магнитного поля в сверхпроводящий диск на рис.1 были получены киносъемкой с частотой, примерно, 10^4 кадр/сек. Вначале диск был охлажден без магнитного поля (ZFC) до сверхпроводящего состояния. Когда камера выходила на стационарный скоростной режим, к образцу прикладывалось магнитное поле, которое возрастало от нуля со скоростью около 2 килоэрстед в секунду. Ниобиевый диск был толщиной 1,87 мм и диаметром 13 мм. Величина критического тока J_c была оценена авторами из ширины пояса a , в который проникает магнитное поле (фото 1 на рис. 1). Для критического состояния критический ток определяется соотношением: $dV/dx=J_c$. С учетом размагничивающего фактора n , эта связь будет иметь вид [4]: $J_c=H_c/4\pi(1-n)a$. Отсюда была получена оценка величины критического тока для диска $J_c=21$ кАсм⁻².

Результаты. Левая часть рис.1 показывает фотографии поверхности сверхпроводящего диска в последовательные моменты времени. На снимках видно, как последовательно зарождаются и распространяются три лавины магнитного потока. На рис. 1, b представлены распределения магнитного поля в образце в направлениях, указанных стрелками на соответствующих фотографиях левой части этого рисунка. Представляет интерес анализ величины производной индукции dV/dx на фронте лавины в динами-

ческом процессе, Эта величина характеризует критический ток, обтекающий область, занятую лавиной. Установлено, что с точностью 15% производная остается постоянной. Отсюда можно сделать вывод о постоянстве критического тока в рассматриваемом процессе. Относительно большая погрешность связана со слабой четкостью фотографий.

По яркости области, занятой лавиной, можно судить о величине индукции магнитного поля в ней. Нижний ряд рис. 1 представляет фотографию и распределение индукции после входа трех лавин. Выпуклый характер индукции каждой из трех лавин, свидетельствует о парамагнитном направлении круговых токов, ограничивающих лавины. Наличие максимумов индукции, расположенных приблизительно в центре областей, занятых вошедшим потоком, позволяет утверждать, что магнитное поле, в области занятой лавиной, самое большое на поверхности сверхпроводника, т.е. налицо парамагнитные области. Следует в тоже время заметить, что магнитооптика различает только компоненту магнитного поля в направлении перпендикулярном к поверхности диска.

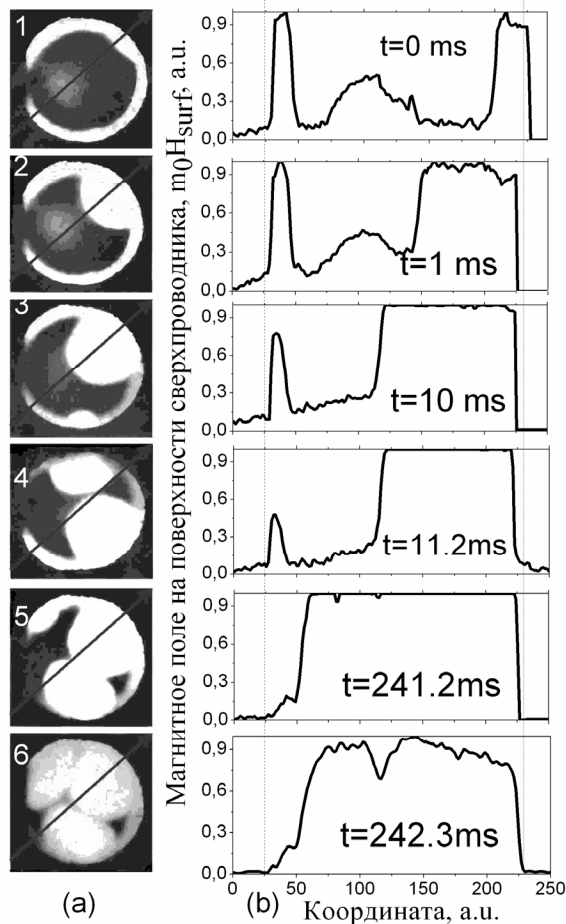


Рис. 1. а) Магнитооптические изображения распределения магнитной индукции в ниобиевом диске при температуре $T=1.86\text{K}$ взятые из работы [4], диаметр диска 13 мм, толщина 0.2 мм. Магнитное поле приложено перпендикулярно поверхности образца и возрастало от 0.08Т (первая фотография) до 0.132Т (шестая фотография). б) – профиль магнитной индукции в направлении, показанном стрелкой на левой части рисунка. t – временной интервал между снимками.

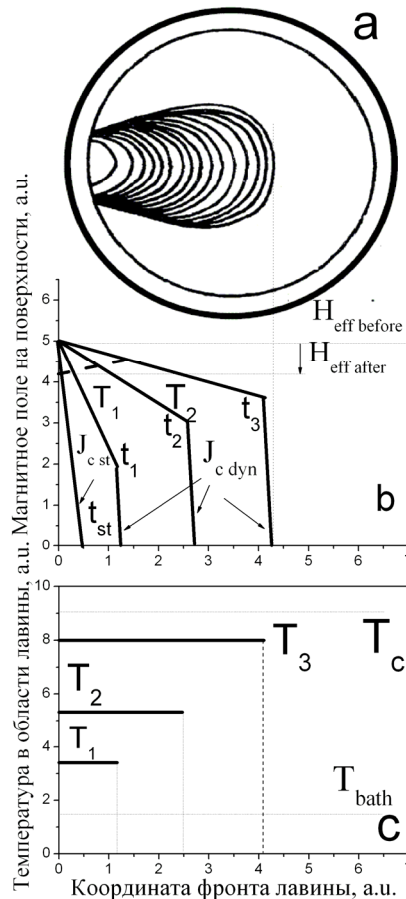


Рис. 2. а) – схема образца с лавиной потока; в) – динамика распределения магнитного поля и с) - температуры в области лавины для разных моментов времени T_1 , T_2 и T_3 ; $H_{\text{eff before}}$ – эффективное магнитное поле у поверхности сверхпроводника перед и $H_{\text{eff after}}$ – после лавины магнитного потока. T_c и T_{bath} – температуры, соответственно, критическая и окружающей среды; J_c - критический ток перед лавиной.

Рассмотрим физические причины, влияющие на формирование профиля индукции на поверхности диска и возможный механизм возникновения парамагнитных областей. Внешнее кольцо вблизи поверхности диска (рис. 2, а) представляет область неоднородного смешанного состояния, в которой перед возникновением лавины течет критический диамагнитный ток J_{cst} . Соответствующее этому току распределение индукции показано на рис. 2б. В центре диска (рис. 2, а) мы видим последовательные положения фронта потока в процессе развития термомагнитной неустойчивости. Как следует из предыдущих рассуждений, рис. 1, в процессе лавины градиент индукции на ее фронте свидетельствует о наличии кольцевого тока парамагнитного направления, ограничивающего расширяющиеся области. Возможное изменение профиля индукции в последовательные моменты времени t_1 , t_2 , t_3 представлены на рис. 2, б. Возникаю-

щій излом профиля связан с локальным увеличением температуры, приводящим к уменьшению в этой области критического тока. Это соответствует уменьшению наклона профиля индукции. Дальнейший вход потока в моменты t_2 , t_3 и соответствующий рост температуры, вследствие дальнейшего разогрева области и трансформация профиля индукции показаны на рис. 2, б и рис. 2, с

Другой механизм, влияющий на преобразование профиля магнитного поля, связан с изменением размагничивающего фактора диска. Эффективное поле на поверхности образца складывается из внешнего поля и поля размагничивания. В процессе вхождения лавины увеличивается область смешанного состояния и при этом уменьшается размагничивающий фактор. Количественную оценку изменения размагничивающего фактора провести достаточно сложно, однако можно утверждать, что уменьшение поля размагничивания приводит к уменьшению эффективного поля на поверхности образца после вхождения лавины. Таким образом, вследствие уменьшения эффективного поля вблизи поверхности, возникает излом индукции, показанный пунктиром на рис. 2, б для последней стадии лавины (момент t_3). Следует заметить, что температура разогрева образца в процессе развития неустойчивости остается ниже критической T_c и пиннинг определяет формирование части профиля помеченного пунктиром. Учитывая вышеприведенные рассуждения можно понять формирование выпуклого профиля индукции, возникающего в результате термомагнитной лавины, как показано на нижней фотографии 6, на рис. 1, а. При этом максимум индукции (парамагнитные области) будет находиться в центральной части вошедшего потока.

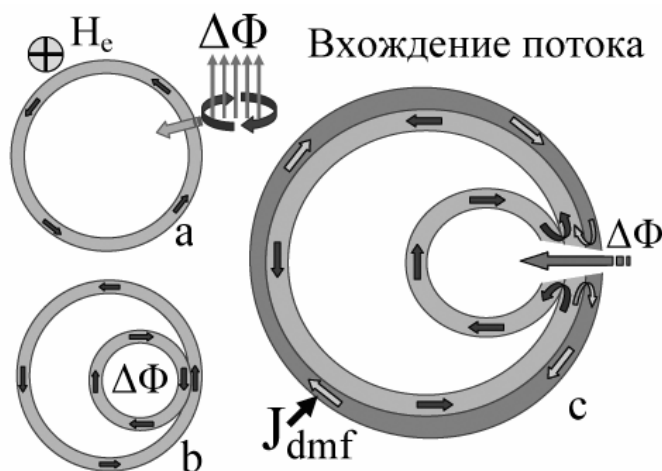


Рис.3. Схема токовых контуров в сверхпроводящем диске а) – перед и б) – после лавины магнитного потока $\Delta\Phi$; в) – результирующая картинка токов при учете уменьшения размагничивающего фактора при вхождении лавины; ΔJ_{dmf} – соответствующая изменению фактора размагничивания добавка к экранирующему току.

Схематически трансформация токов в процессе лавины потока в образце представлена на рис. 3. В исходном сверхпроводящем состоянии, рис. 3а, по периметру образца, в слое толщиной a течет экранирующий диамагнитный ток, величина которого равна критическому току. Направление внешнего магнитного поля показано на рисунке. В результате развития термомагнитной неустойчивости в образец входит магнитный поток $\Delta\Phi$, образуется смешанное состояние, по границе которого (фронт лавины магнитного потока) также течет критический ток, направление этого тока противоположно экранирующему диамагнитному току (рис. 3б). Этот ток можно назвать парамагнитным. Если принять, что в модели критического состояния его величина равна критическому току, то он может создать внутри контура магнитное поле, превышающее на 10-15% эффективное поле у поверхности сверхпроводника [7], определяя тем самым парамагнетизм этой области. На границе образца диамагнитный и парамагнитный токи компенсируются, определяя распределение индукции в этой области близкое к однородному. Выравниванию градиентов индукции способствует также и локальный разогрев, связанный с диссипативными токами, которые генерируются движущимся потоком $\Delta\Phi$. Через эту область легко проникает дополнительный магнитный поток, увеличивая часть образца, занятую смешанным состоянием. Возможные изменения направления токов в такой модели показаны на рис.3, в. На этом же рисунке в темном кольце на границе образца показана добавка к экранирующему току ΔJ_{dmf} , обусловленная уменьшением фактора размагничивания в результате вхождения лавины, что приводит к уменьшению эффективного поля на поверхности диска.

Выводы. Проанализированы динамика фронта лавины потока и наклон профиля индукции магнитного поля на фронте лавины. Показано, что угол наклона индукции магнитного поля, т.е. критический ток на фронте лавины практически не изменяется в процессе ее движения. Обнаружены генерация замкнутых токов и локальное повышение индукции магнитного поля по сравнению с внешним магнитным полем в области движения лавины. Предложен простой механизм, объясняющий возникновение таких областей.

РЕЗЮМЕ

В роботі проаналізовано динаміку структури індукції на поверхні ніобієвих дисків у раніше опублікованих магнітооптичних дослідженнях. Це дозволило виділити окремі етапи лавинного процесу й зрозуміти фізичні причини складного перетворення магнітного поля на поверхні надпровідника. Побудовано прості моделі, що відображають динаміку перетворення профілю магнітної індукції при входженні магнітного потоку, зокрема, зрозуміти причини виникнення «парамагнітних» областей. Спостережувані в магнітооптиці особливості добре корелюють із нашими дослідженнями динамічних лавинних явищ у жорстких надпровідниках виконаних за допомогою індуктивних методів і датчиків Холу.

Ключові слова: жорсткий надпровідник, критичний стан, критичний струм, змішаний стан, лавина магнітного потоку.

SUMMARY

We have analyzed the dynamics of the induction structure on the surface of Nb disks at thermomagnetic avalanches in magneto-optical investigations published earlier. We were allowed to separate the stages of avalanche process and to understand physical reasons for complex transformation of magnetic field on the surface of a superconductor. Simple models have been built that depict the dynamics of transformation of magnetic induction profile at the magnetic flux penetration. In particular, the reasons of the rise of “paramagnetic mountains” were established as well as other peculiarities of avalanche motion of magnetic flux. The observed magneto-optical features agreed with the results of our investigations of dynamic avalanche phenomena in hard superconductors by means of induction methods and Hall’s probe.

Keywords: hard superconductor, critical state, critical current, mixed state, magnetic flux avalanche.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Минц Р. Г. Неустойчивости в сверхпроводниках / Р. Г. Минц, А. Л.Рахманов. – М.: Наука, 1984. – 251 с.
2. Nucleation and growth of a flux instability in superconducting $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ films / P. Leiderer, J. Boneberg, P. Brull, et al. // Phys. Rev. Lett. – 1993. – Vol.71. – P. 2646-2649.
3. Wertheimer M. R. Flux jumps in type II superconductors / M. R. Wertheimer, J. G. Gilchrist // J. Phys. Chem. Solids. – 1967. – Vol. 28. – P. 2509-2524.
4. Goodman B. B. Un appareil pour l’étude de la cinétique des sauts de flux des supraconducteurs de la deuxième espèce / B. B. Goodman, A. Lacey, M. R. Wertheimer // C. R. Acad. Sc. Paris. – 1966. – Vol. 262. – P. 12-15.
5. Русаков В. Ф. Анализ движения вихревой системы в жестких сверхпроводниках второго рода по результатам магнітооптического изучения лавин магнітного потока / В. Ф. Русаков, В. В. Чабаненко, С. Васильев // Вісник Донецького університету. Сер. А. Природничі науки – 2007. – Вип.2. – С. 132-135.
6. Magneto-optical studies of current distributions in high- T_c superconductors / Ch. Jooss, J Albrecht, H. Kuhn et al. // Rep. Prog. Phys. – 2002. – Vol. 65. – P. 651–788.
7. The reversal of the local magnetic field profile at the surface of superconducting sample caused by the thermomagnetic avalanche / A. Nabialek, V Chabanenko, S. Vasiliev et al. // Journal of Low Temperature Physics. – 2009. – Vol. 154. – P. 55-67.

Поступила в редакцію 25.05.2010 г.

УДК: 548.4:539.261:543.427.3

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В $Mg_{0.54}Zn_{0.46}Fe_2O_4$ ФЕРРИТАХ

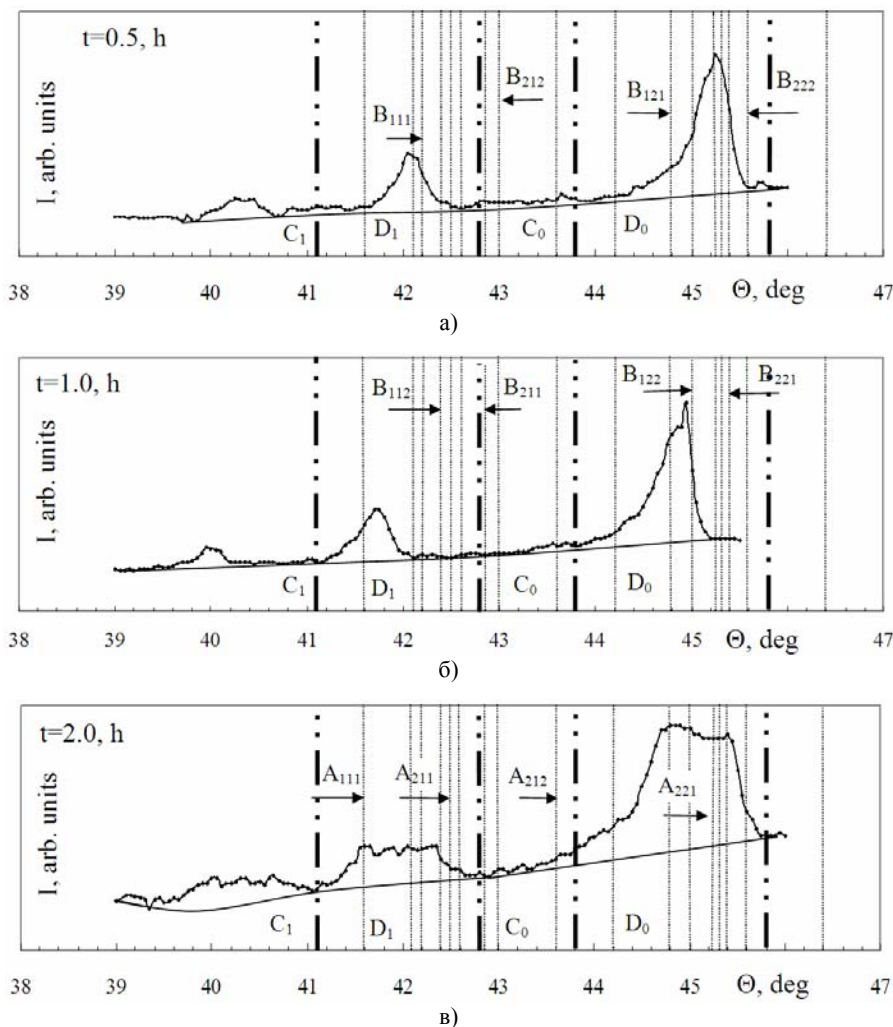
*З. А. Самойленко, В. С. Абрамов, Н. Н. Ивахненко
Донецкий физико-технический институт НАН Украины, г. Донецк*

Рентгеновскими и теоретическими методами исследован характер структурно-химических неоднородностей в ферритах $Mg_{0.54}Zn_{0.46}Fe_2O_4$. Обнаружена перестройка кристаллической структуры образцов в семействе диагональных плоскостей (333) в процессе высокотемпературного отжига (1280°C, 0,5÷8,0h). Показано, что структурная перестройка сопровождается частичным разупорядочением кристаллической структуры.

Ключевые слова: феррошпинель, диффузное рассеяние, фазовый переход, кластеры, заселенность.

Введение. Одной из актуальных проблем в настоящее время является изучение атомной структуры материалов, в частности многокомпонентных металлоксидных соединений [1-3]. Проведенные ранее исследования ферритов $Mg_{0.54}Zn_{0.46}Fe_2O_4$ и $Mn_xZn_yFe_2O_4$ [4-7] показали, что физико-химические свойства материалов, обладают большой чувствительностью к количеству и качеству дефектов разного рода, в том числе искажениям структуры и образований кластеров, когерентно связанных с основной решеткой. Это означает, что варьирование структурного порядка-беспорядка на микроскопическом и мезоскопическом уровнях приводит к значительному изменению физических свойств материалов [6, 7]. При этом структурные изменения сопровождаются разупорядочением кристаллографических областей, что является объектом исследования в данной работе.

Методика эксперимента. В работе проведено исследование дифракционных отражений в области дебаевских максимумов плоскости (333) для ферритов $Mg_{0.54}Zn_{0.46}Fe_2O_4$. Рентгеновские дифракционные картины образцов (рис. 1) получены в CrK_{α} – излучении с V – фильтром с последующим фотометрированием [8].



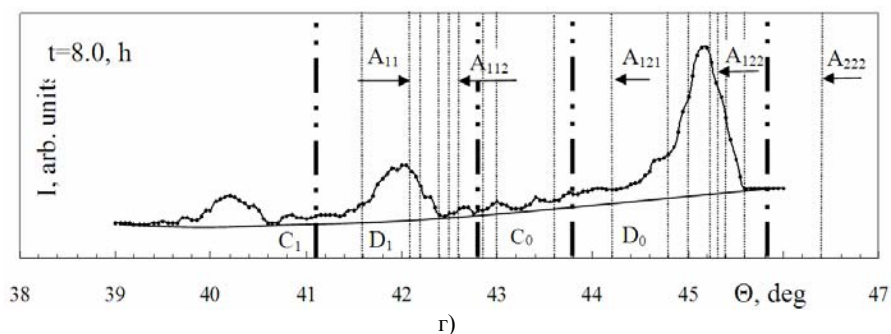


Рис. 1. Дифракційна картина розсіяння рентгеновських променів для площини (333) от времени отжига ферритов $Mg_{0.54}Zn_{0.46}Fe_2O_4$.

Угловая зависимость диффузного рассеяния полностью обусловлена особенностями корреляции атомов кристалла и их смещениями [9]. Анализ рентгеновских дифракционных спектров был проведен с помощью теоретической модели [10]. Экспериментальные дифракционные картины (рис. 1) были исследованы с учетом теоретически предсказанных положений линий, вокруг которых развивались процессы перестраивания кристаллографической структуры.

На рис. 2 показана теоретическая схема возникновения линий в зависимости от изменений кристаллографической структуры феррита.

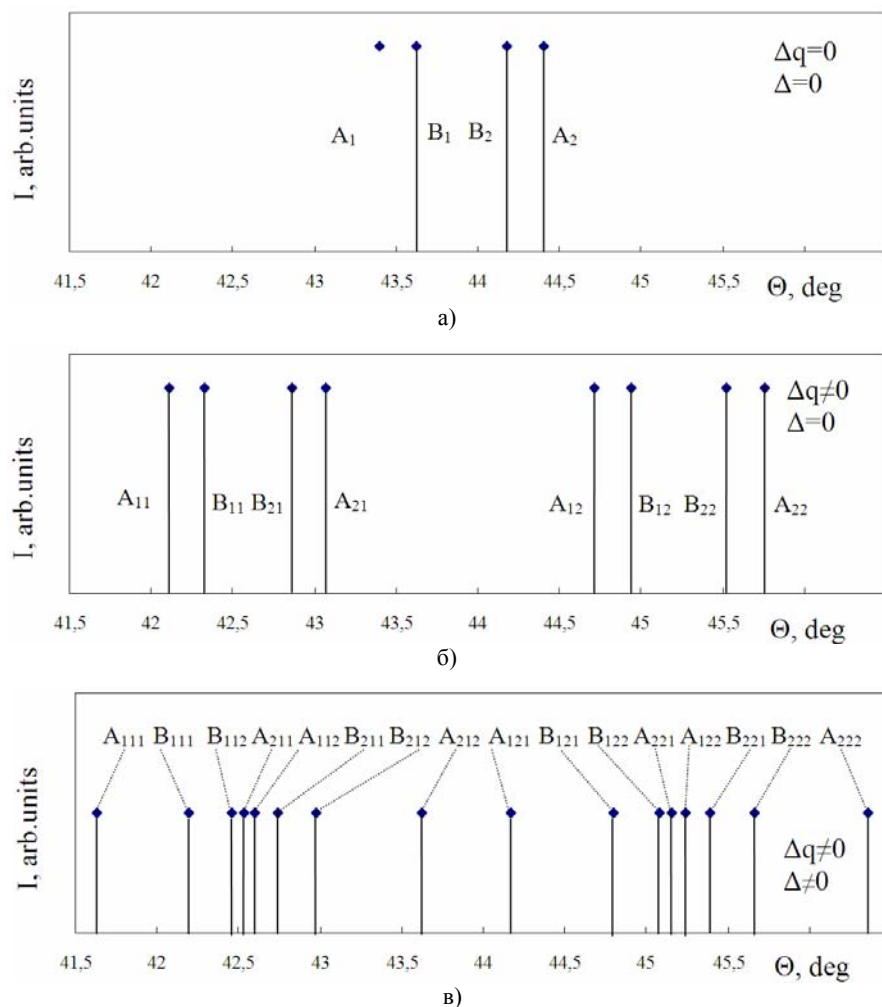


Рис. 2. Теоретическая схема положения линий в зависимости от изменений кристаллографической структуры ферритов $Mg_{0.54}Zn_{0.46}Fe_2O_4$.

Результаты проведенных исследований эволюции формы кривой диффузного рассеяния представлены спектром линий в областях D_1 ($41,1 \leq \theta \leq 42,8$) и D_0 ($43,8 \leq \theta \leq 45,8$), характеризующих области структуры, различающиеся величинами межплоскостных расстояний d согласно уравнению дифракции $2d \sin \Theta = n\lambda$ (закон Вульфа-Брэггов), от угла рассеяния при определенных временах отжига.

Теоретическая модель. Рассмотрим схему возникновения дифракционных линий в рамках теоретической модели [10]. Согласно строению шпинельных решеток, кристаллическая структура ферритов Mg-Zn в твердом растворе с дальним порядком является суперпозицией двух подрешеток, кислородной и железной, смещенных относительно друг друга на период a и расположенных слоями, параллельными диагональной плоскости типа (111) куба. При этом ионы кислорода связаны между собой в виде гофрированной плоскости, внутри которой в тетра- и окта- позициях находятся ионы железа. На дифракционной картине такая ситуация отражается в особенностях распределения интенсивности в пиках рентгеновского рассеяния от семейств диагональных плоскостей (333) и примыкающей к ним группе диффузных максимумов в интервале углов ($41^\circ < \theta < 46^\circ$) (рис. 1). Упорядочение структурных элементов описывается с помощью двух параметров порядка [10] Δq и Δ (рис. 2). Для железной подрешетки (рис. 2, а) расположение теоретически рассчитанных слоев в области основных максимумов связано с чередованием линий B_1 и B_2 , обладающих одинаковой основной модой цепочки ${}_1\text{Fe}^{3+}\text{-}{}_4\text{Fe}^{2+}\text{-}{}_1\text{Fe}^{3+}$ в состоянии $|F; \pm 1\rangle$, но с разным квантовым состоянием железа ${}_1\text{Fe}^{3+}$: в подрешетке для линии B_1 находится железо с квантовым числом $F=2$ (основное состояние), в подрешетке для линии B_2 железо с $F=3$ (возбужденное состояние). В результате расщепления ($\Delta q \neq 0$, а $\Delta = 0$) структурных состояний B_1 и B_2 , на дифракционной картине вместо линий B_1 и B_2 имеем две линии: B_{11} – аналог «tetra»- и B_{12} – аналог «окта»-позиций от линии B_1 и B_{21} – аналог «tetra»- и B_{22} – аналог «окта»-позиций от линии B_2 (рис. 2, б). Положение линий $B_1 = (B_{11} + B_{12})/2$ или ($B_2 = (B_{21} + B_{22})/2$) в спектре Mg-Zn феррита относится к положению минимума интенсивности на дифракционной картине (рис. 1), относительно которого закономерно происходят изменения в структуре слоев.

Для линий (B_{11} и B_{12} , B_{21} и B_{22}), полученных в результате расщепления основных (B_1 и B_2), характерно наличие одного параметра порядка ($\Delta q \neq 0$, рис. 2, б). За дальнейшее расщепление линий B_{11} и B_{12} при условии $\Delta q \neq 0$ отвечает второй параметр порядка $\Delta \neq 0$, связанный с мягкой модой ${}_3\text{Fe}^{4+}\text{-}{}_3\text{Fe}^{3+}(1)\text{-}{}_4\text{Fe}^{4+}$ в состоянии $|3/2; 2\rangle$, а за расщепление линий B_{21} и B_{22} ответственна мягкая мода ${}_1\text{O}^- \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}\text{-}{}_4\text{Fe}^{2+}\text{-}{}_3\text{O}^- \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}$ в состоянии $|2; \pm 1\rangle$. Результатом такого расщепления ($\Delta \neq 0$) является появление линий B_{111} , B_{112} , B_{121} , B_{122} и B_{211} , B_{212} , B_{221} , B_{222} (рис. 2, в).

Другая группа линий (рис. 2, б) соответствует основной моде цепочки из кислородосодержащих комплексов ${}_2\text{O}^{2-} \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}\text{-} {}_3\text{Fe}^{3+}(1) \text{-} [{}_1\text{O}^0 \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}]$ в состоянии $|5/2; 2\rangle$ (для линий A_2 , A_{21} , A_{22}) и в состоянии $|3/2; 2\rangle$ для линий (A_1 , A_{11} , A_{12}). Появление линий A_{21} , A_{22} , A_{11} , A_{12} обусловлено параметром порядка $\Delta q \neq 0$ основной моды вышеуказанной цепочки. Дальнейшая структурная перестройка и расщепление линий A_{21} , A_{22} определяется вторым параметром порядка $\Delta \neq 0$, связанным с мягкой модой цепочки ${}_2\text{O}^{2-} \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}\text{-} {}_2\text{Fe}^{4+}(3/2) \text{-} [{}_1\text{O}^0 \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}]$ в состоянии $|3/2; 2\rangle$, а за расщепление линий A_{11} , A_{12} ответственна мягкая мода цепочки ${}_1\text{O}^- \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}\text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}\text{-} [{}_3\text{O}^- \text{-} {}_4\text{Fe}^{2+}]$ в состоянии $|2; 2\rangle$. Результатом такой перестройки является появление линий A_{211} , A_{212} , A_{221} , A_{222} и A_{111} , A_{112} , A_{121} , A_{122} (рис. 2, в). Для удобства и сравнения с экспериментальными данными на рис.1 вертикальными линиями даны положения этих расчетных дифракционных линий.

В случае, когда основная решетка – это кислородные октаэдры с расположенными в них, плотно сидящими ионами железа, она дает дифракционные линии A_{12} , A_{22} . Эти состояния соответствуют упорядоченному положению октаэдров и характеризуют сжатые области структуры (согласно уравнению дифракции Вульфа-Брэггов). Та же группа плоскостей, но с большими межплоскостными расстояниями, представляет собой кластеры на основе железной подрешетки. На дифракционной картине такие кластеры представлены в виде диффузных линий A_{11} , A_{21} и характерны для растянутых областей структуры. Аналогичные области сжатия и растяжения присутствуют, когда включается в рассеяние рентгеновских лучей железная подрешетка (линии B_{12} , B_{22} и B_{11} , B_{21}). Наличие в образцах чередующихся областей сжатия и растяжения можно интерпретировать в терминах волны массовой плотности.

Анализ результатов. Области D_0 и D_1 представляют собой участки дифракционной картины, образованные отклоненными от положения равновесия локальными узлами матричной решетки. Такое представление эквивалентно наличию локальных статических спонтанных деформаций, поэтому можно говорить о структурных состояниях и их заселенностях для соответствующих структурных групп образцов и оценивать заселенности по интенсивности диффузных линий в этих областях. Так как интенсивности в области ($42,8 \leq \theta \leq 43,8$) близки к фоновому рассеянию, то рассмотрим атомно-структурные изменения, проявившиеся в областях D_0 и D_1 (рис. 1, 2).

В области D_1 при $t = 0,5h$ максимум диффузного рассеяния соответствует линии A_{11} (рис.1), образованной кислородными тетраэдрами. Основной вклад в ее интенсивность вносит мягкая мода в состоянии $|3/2; 2\rangle$. Смещение максимума в сторону меньших углов дифракции при $t = 1,0h$, соответствует линии A_{111} , расщепленной от A_{11} (рис.1 и 2) при упорядочении кислородной подрешетки с проме-

жучоточним іоном $4Fe^{2+}(2)$. Інтенсивність лінії визначається м'якою модою в стані $|2; 2\rangle$. При $t = 2,0h$ область D_1 характеризується розмитим максимумом, що складається з спектра ліній $(A_{111}, A_{11}, B_{111}, B_{112}, A_{112}, A_{211})$, інтенсивності яких близькі за величиною. Структурне розшарування, виражене набором дискретних ліній при $t = 2,0h$, пов'язано з розупорядоченням кислородної та залізної подрешіток, утворених кислородними та залізними тетрадрами, з проміжоточними іонами $4Fe^{2+}(2), 3Fe^{3+}(1), 4Fe^{2+}(2), 2Fe^{4+}(3/2)$. При $t = 8,0h$ структура подібна початковій при $t = 0,5h$, т.е. в процесі відпалу відбулася релаксація в структурі зразків - зняття еластичних напружень. Лінії, розташовані в області D_1 , утворені кислородними та залізними тетрадрами, що відрізняються проміжоточними іонами.

В області D_0 в початковий момент відпалу ($t = 0,5h$) дифракційний максимум характеризується лінією A_{221} , утвореною упорядоченим положенням кислородних октадрів, з розташованими в них іонами заліза $2Fe^{4+}(3/2)$ (рис. 1). Основний внесок в її інтенсивність вносить м'яка мода в стані $|3/2; 2\rangle$. При $t = 1,0h$ спостерігається зміщення положення максимуму в бік менших кутів дифракції (рис. 1), характеризується вже лінією B_{121} , утвореною упорядоченим положенням залізними октадрів. Внесок в її інтенсивність вносить м'яка мода в стані $|3/2; 2\rangle$. Отже, при переході структури з $t = 0,5h$ до $t = 1,0h$ в області D_0 , відбулося розупорядочення кислородної та упорядочення залізної подрешіток, що свідчить про перерозподіл інтенсивностей ліній ($I_{B_{121}} > I_{A_{122}}$) для $t = 1,0h$ в сімействі площин (333). При $t = 2,0h$ відбувається розщеплення максимуму дифракційної картини на спектр ліній ($B_{121}, B_{122}, A_{221}, A_{122}$ та B_{221}), утворених залізними та кислородними октадрами, інтенсивності яких близькі за величиною. З збільшенням часу відпалу спостерігається зміщення форми дифракційної кривої: від симетричної (при $t = 0,5h$) до асиметричної з витягнутим «хвостом» в області малих кутів ($t = 2,0h$). Розщеплення максимуму та зміщення форми кривої пов'язано з розупорядоченням залізної та кислородної подрешіток, що призводить до перерозподілу населеності станів, що проявляється в практичному вирівнюванні інтенсивностей серії ліній в області D_0 . При збільшенні часу відпалу до $t = 8,0h$ помітно зміщення населеності станів, подібно початковій при $t = 0,5h$, з перевагою стану A_{221} (рис. 1), що свідчить про упорядочення кислородної подрешітки з проміжоточним іоном $2Fe^{4+}(3/2)$. Лінії, розташовані в області D_0 , утворені кислородними та залізними октадрами, що відрізняються проміжоточними іонами.

Отже, відбувається розупорядочення структури при $t = 2,0h$ в областях D_0 та D_1 характеризується зменшенням інтенсивності серії ліній, що утворюють максимуми областей, порівняно з інтенсивностями піків ліній при $t = 0,5h$, $t = 1,0h$ та $t = 8,0h$ та їх практичним вирівнюванням, що характеризується розупорядоченням кислородної та залізної подрешіток.

З аналізу рис. 1, з кристаллографічної точки зору слід, що в структурі ферриту перехід з стану $A_{122}(A_{11})$ при $t = 0,5h$ до $B_{121}(A_{111})$ при $t = 1,0h$, а саме зміщення в бік менших кутів дифракції (згідно з законом Вульфа-Бреггов), відповідає ущільненню кристаллическої структури в локальному сімействі площин, а з іншої сторони - зміні внутрішніх локальних спонтанних напружень (згідно з законом Гука). При збільшенні часу відпалу $t = 2,0h$ відбувається розупорядочення структури, що свідчить про збільшення числа ліній, що характеризують максимум та практичне вирівнювання їх інтенсивностей. Таким чином, з часом відпалу відбувається чергування інтенсивностей ліній залізної та кислородної подрешіток, з виникаючим структурним розшаруванням при $t = 2,0h$. Спостережується інверсія населеності станів в областях D_1 та D_0 , що супроводжується змінами локальних деформацій основної решітки та внутрішніх напружень.

На рис. 3 представлені залежності інтенсивностей ліній, розташованих в областях D_1 та D_0 на дифракційній картині від часу відпалу (рис. 1). Всі залежності $I_{hkl}(t)$ мають екстремальний характер в інтервалі $t = [1 \div 2]h$.

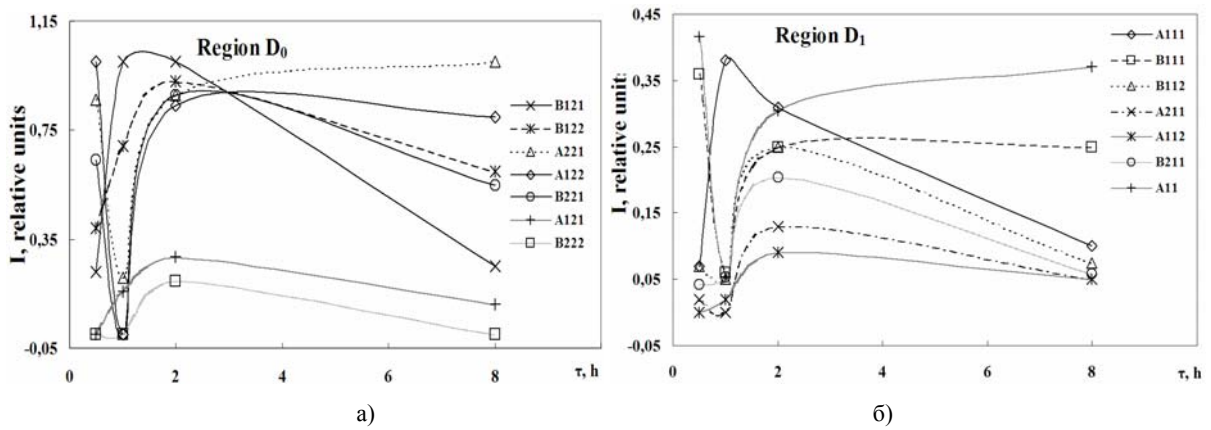


Рис. 3. Зависимости интенсивностей дифракционных линий от времени отжига.

В области D_1 в начальный момент отжига при $t = 0,5h$ наибольшую интенсивность имеют линии A_{11} и B_{111} , остальные линии кислородной и железной подрешеток минимальны (рис. 3). При увеличении времени отжига $t = 1,0h$ интенсивность линии A_{111} увеличивается, а интенсивности остальных линий уменьшаются. С увеличением времени отжига до $t = 2,0h$ интенсивности всех линий увеличиваются, максимального значения достигают линии $A_{112}, B_{211}, B_{112}, A_{211}, B_{111}$. Далее при $t = 8,0h$ интенсивности линий A_{11} и B_{111} выходят на насыщение, а интенсивности остальных линий уменьшаются.

В области D_0 при $t = 0,5h$ максимальную интенсивность имеют линии A_{221} и A_{122} , интенсивности остальных линий минимальны. С увеличением времени отжига до $t = 1,0h$ интенсивности линий $B_{121}, B_{122}, A_{121}, B_{222}$ – увеличиваются, при этом интенсивности линий B_{221}, A_{122} достигают своего минимального значения, а интенсивность линии B_{121} – максимального. При $t = 2,0h$ интенсивности линий $B_{222}, A_{121}, A_{122}, B_{221}, A_{221}, B_{122}$ – максимальны. При $t = 8,0h$ заметно уменьшение интенсивностей линий $A_{122}, B_{122}, B_{221}, B_{121}, A_{121}, B_{222}$, кроме интенсивности линии A_{221} – она увеличивается.

Учитывая, что интенсивность интерференционного максимума экспоненциально уменьшается при смещении атомов из равновесных положений: $I = I_0 e^{-kx}$ [11] результаты сравнения экстремальных зависимостей дискретных интенсивностей показывают следующие закономерности. Для области D_0 минимумы, полученные в результате преобладания кислородных подрешеток, и максимумы, полученные в результате преобладания железных подрешеток, означают, что в области основных структурных состояний в кислородной подрешетке имеет место процесс атомного разупорядочения, а в железной подрешетке, напротив, доминирует процесс атомного упорядочения. Для области D_1 максимумы, полученные в результате преобладания кислородных подрешеток, и минимумы, полученные в результате преобладания железных подрешеток, означают, что в области возбужденных структурных состояний разупорядочение доминирует уже в железной подрешетке, тогда как в кислородной подрешетке преобладают процессы упорядочения.

Таким образом, в области D_0 за разупорядочение ответственна кислородная подрешетка, а в области D_1 – железная подрешетка, именно они и характеризуются в виде смещений атомов из равновесных положений.

На рис. 4. приведены зависимости структурных параметров $Mg_{0.54}Zn_{0.46}Fe_2O_4$ от времени отжига для областей D_0 и D_1 : а) – межплоскостных расстояний (d_0, d_1); б) – коэффициента асимметрии $k = I_a/I_b$ для областей D_0 и D_1 , где I_a и I_b – площади под кривой дифракционного максимума в интервалах $(\theta_a \div \theta_f)$ и $(\theta_f \div \theta_b)$ – соответственно (вставка – пример определения параметров I_a и I_b из рентгеновского спектра для $\tau = 0.5h$ области D_0); в) – ширины $\gamma = a + b$ дифракционных линий. Возникающее изменение заселенностей структурных состояний также коррелирует с характером изменений и других структурных параметров [12]: 1 – межплоскостных расстояний d для областей D_0 и D_1 , соответствующих центрам тяжести (Θ_c) их дифракционных максимумов по закону Вульфа-Брэггов (рис. 4а); 2 – коэффициента асимметрии k для областей D_0 и D_1 (рис. 4б и вставка рис. 4с).

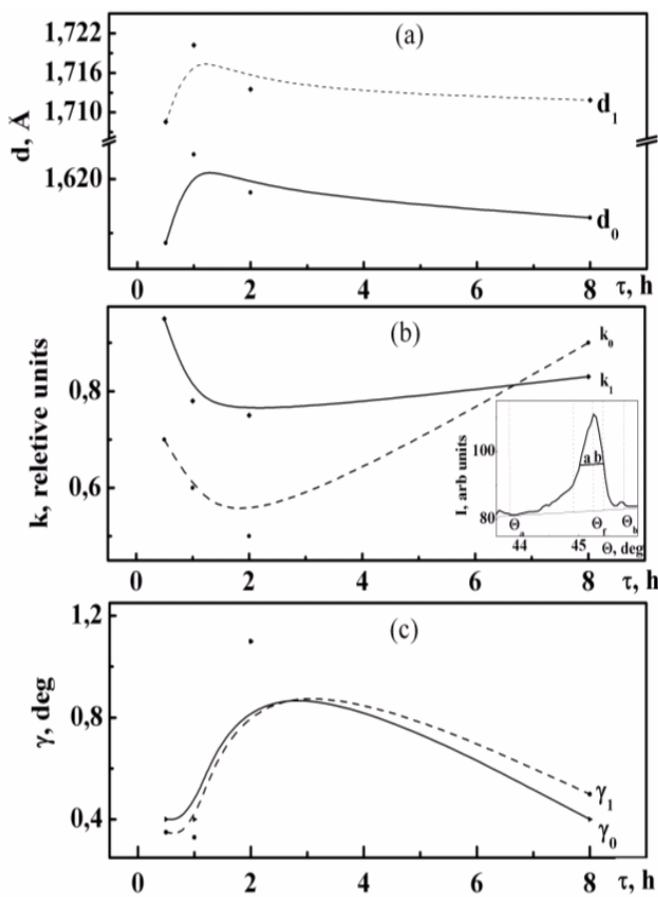


Рис. 4

Выводы. Исследована эволюция атомного порядка в кристаллической структуре $\text{Mg}_{0.54}\text{Zn}_{0.46}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ферритов под влиянием высокотемпературного отжига ($T = 1280^\circ\text{C}$, $t = 0,5 \div 8,0\text{h}$).

Показано, что атомная структура ферритов $\text{Mg}_{0.54}\text{Zn}_{0.46}\text{Fe}_2\text{O}_4$ связана с наличием в структуре дополнительных цепочек, через которые осуществляется обменное взаимодействие в диагональных железо-кислородных плоскостях.

Перераспределение интенсивности рентгеновских дифракционных спектров ферритов $\text{Mg}_{0.54}\text{Zn}_{0.46}\text{Fe}_2\text{O}_4$, доказывает метастабильность кристаллического структурного состояния в исследованной диагональной группе железо-кислородных плоскостей.

РЕЗЮМЕ

Рентгенівськими й теоретичними методами досліджено характер структурно-хімічних неоднорідностей у ферритах $\text{Mg}_{0.54}\text{Zn}_{0.46}\text{Fe}_2\text{O}_4$. Виявлено перебудову кристалічної структури зразків у процесі тривалості відпалу (1280°C , $0,5 \div 8,0\text{h}$). Показано, що структурна перебудова супроводжується частковим розупорядкуванням кристалічної структури.

Ключові слова: ферошпінель, дифузне розсіяння, фазовий перехід, кластери, заселеність.

SUMMARY

X-ray and theoretical methods are used to explore the character of structurally-chemical heterogeneities in $\text{Mg}_{0.54}\text{Zn}_{0.46}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ferrites. Reorganization of the samples' crystalline structure in the result of high-temperature annealing (1280°C , $0,5 \div 8,0\text{h}$) is determined. It is shown that structural reorganization is accompanied by partial disordering of crystalline structure.

Key words: ferrosphenel, diffuse scattering, phase transition, clusters, population.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Дефектность структуры и физико-химические свойства феррошпинелей / М. Т. Варшавский, В. П. Пашенко, А. Н. Мень и др. – М.: Наука, 1988. – 243 с.
2. Формирование кластеров $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в лазерной плазме / В. Д. Окунев, В. А. Исаев, Т. А. Дьяченко и др. // Письма в журнал технической физики. – 2008. – Т. 34, № 2. – С. 46-55.

Индексы для зависимостей, представленных на рис. 4, обозначают соответствующие области (D_0 и D_1). Как видно из рис. 4а, при увеличении времени отжига наблюдается смещение углового положения максимумов, что означает изменение соответствующих межплоскостных расстояний в исследуемой структуре. Максимумы кривых d_1 и d_0 свидетельствуют об увеличении межплоскостного расстояния, «разрыхлении» структуры» возникающем при разупорядочении кислородной и железной подрешеток.

Уменьшение величин коэффициентов асимметрии (рис. 4b) – показывает, что в семействах плоскостей, проявившихся на дифракционных картинах в диффузных максимумах в областях D_0 и D_1 происходит инверсия заселенностей кислородной и железной подрешеток с чередованием промежуточных ионов.

Действие двух предыдущих локальных процессов нарушения идеального дальнего порядка в структуре железо-кислородных плоскостей, формирующих дифракционный максимум, вызвало существенное «разрыхление» кристаллографического строения, что проявилось в уширении диффузных максимумов (рис. 4с), связанных с практическим выравниванием интенсивностей линий от кислородной и железной подрешеток.

3. Влияние Co на структурную и магнитную неоднородности, фазовые переходы и магниторезистивные свойства $La_{0,6}Sr_{0,2}Mn_{1,2-x}Co_xO_{3\pm\delta}$ / А. В. Пашенко, В. П. Пашенко, А. А. Шемяков и др. // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50, № 7. – С. 1257-1262.
4. Искажения матричной структуры и появление кластеров в монокристаллических $Mn_xZn_yFe_zO_4$ ферритах / З. А. Самойленко, В. П. Пашенко, В. С. Абрамов и др. // Физика твердого тела. – 2001. – Т. 43, № 8. – С. 1496-1502.
5. Самойленко З. А. Аномальное поведение кристаллографических и электронных состояний ферритов $Mn_xZn_yFe_zO_4$ / З. А. Самойленко, В. С. Абрамов, Н. Н. Ивахненко // Письма в журнал технической физики. – 2003. – Т. 29, № 15. – С. 80-85.
6. Самойленко З. А. Анализ фазовых переходов в разномасштабной атомной структуре магний-цинковых ферритов / З. А. Самойленко, Н. Н. Ивахненко // Журнал технической физики. – 2009. – Т. 79, № 10. – С. 151-155.
7. Эволюция ближнего, мезоскопического и дальнего порядков в структуре магний-цинковых ферритов / З. А. Самойленко, Н. Н. Ивахненко, В. П. Пашенко и др. // Журнал технической физики. – 2002. – Т. 72, № 3. – С. 83-86.
8. Кривоглаз М. А. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов на флуктуационных неоднородностях в неидеальных кристаллах / М. А. Кривоглаз. – К.: Наук. думка, 1984. – 288 с.
9. Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел / А. И. Китайгородский. – М.: Изд-во тех.-теор. лит., 1952. – 588 с.
10. Самойленко З. А. Тонкая структура и инверсная заселенность в MnK_{β_1} -спектрах $Mn_xZn_yFe_zO_4$ ферритов / З. А. Самойленко, В. С. Абрамов, Н. Н. Ивахненко // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2000. – Т. 72, № 9. – С. 679-683.
11. Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей / М. А. Блохин. – М.: Госуд. изд-во тех.-теор. лит., – 1957. – 510 с.
12. Самойленко З. А. Локальная аморфизация структуры ферритов $Mg_{0,54}Zn_{0,46}Fe_2O_4$ / З. А. Самойленко, Н. Н. Ивахненко // Письма в журнал технической физики. – 2007. – Т. 33, № 7. – С. 8-15.

Поступила в редакцию 04.03.2010 г.

УДК 538.11

**ОТРАЖЕНИЕ СПИНОВЫХ ВОЛН ОТ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО
МАГНОННОГО КРИСТАЛЛА С КОСИНУСОИДАЛЬНЫМ ПРОФИЛЕМ
МЕЖСЛОЙНОЙ ГРАНИЦЫ**

В. С. Ткаченко

В данной работе исследуется частотная зависимость коэффициентов отражения спиновых волн от магнито-го кристалла с периодически изменяющимся значением одноосной анизотропии и конечной толщиной межслойных границ. Рассматривается косинусоидальное распределение анизотропии в межслойной границе. Проанализировано влияние размера межслойной границы на значение коэффициента отражения.

Ключевые слова: магнотный кристалл, спиновые волны, периодическая структура, магнетоника.

Введение. Периодические магнитные структуры вызывают большой интерес, так как они могут стать основой нового класса магнитных устройств, в которых магнотны будут использоваться в качестве носителей информации. Эта область магнетизма получила название магнетоники [1, 2]. Магнетонные кристаллы (МК) представляют собой искусственно созданные периодические структуры, в которых распространяются возбуждения магнетонов.

Существует огромное число работ, посвященных исследованию МК с бесконечно тонкими межслойными границами [3, 4]. Однако больший интерес представляют модели, более близкие к реальным магнетикам и позволяющие учесть наличие дефектов [5], неоднородность периода [6], влияние толщины и профиля межслойной границы [7] на спектр спиновых волн (СВ).

Спектральные характеристики дают возможность сделать некоторые выводы о внутренней структуре МК, как это было показано в [8]. Для ее реализации требуется работа в нескольких направлениях. Одно из них связано с изучением спектра стоячих волн, в экспериментах с которыми исследуется закон дисперсии. В экспериментах с бегущими волнами исследуются другие параметры – коэффициенты отражения и прохождения, поэтому необходимо подробное изучение случая распространяющихся волн.

Так в работе [9] были получены результаты для МК с идеальными межслойными границами. В работе [10] была предложена модель МК с неидеальным обменным взаимодействием между слоями.

Влияние конечной толщины межслойных границ было учтено в [11], но предложенная модель не позволяла сделать вывод о влиянии профиля распределения анизотропии в межслойной границе на процесс отражения СВ. В работе [12] был проведен анализ влияния профиля межслойной границы на спектр СВ, но приведены результаты только для частот, ограниченных первой запрещенной зоной спектра.

В данной работе предложена модель с косинусоидальным профилем межслойной границы, получена частотная зависимость коэффициента отражения СВ в большем частотном диапазоне, проведено сравнение с линейным профилем.

Модель материала. Рассмотрим МК, представляющий собой цилиндр, состоящий из чередующихся однородных магнитных слоев равной толщины, характеризующихся различными величинами одноосной анизотропии в каждом слое, магнитную вязкость не учитываем. Будем предполагать, что «основные» слои разделены «переходными» слоями конечной толщины. Выберем в качестве оси z направление, перпендикулярное к плоскости слоев.

Координатная зависимость анизотропии для такого МК может быть представлена в виде соотношения

$$\beta(z) = \begin{cases} \beta_- = \langle \beta \rangle - \frac{\Delta\beta}{2} & z_0 + nL < z < (z_0 + d) + nL, \\ \langle \beta \rangle + \frac{\Delta\beta}{2} \cos \left[\frac{\pi}{\delta} (z - z_0 - d - \delta) \right] & (z_0 + d) + nL < z < (z_0 + d + \delta) + nL, \\ \beta_+ = \langle \beta \rangle + \frac{\Delta\beta}{2} & (z_0 + d + \delta) + nL < z < (z_0 + d + \delta) + nL, \\ \langle \beta \rangle - \frac{\Delta\beta}{2} \cos \left[\frac{\pi}{\delta} (z - z_0 - 2d - 2\delta) \right] & (z_0 + 2d + \delta) + nL < z < (z_0 + 2d + 2\delta) + nL, \end{cases} \quad (1)$$

где L – величина одного периода МК, $\langle \beta \rangle$ – среднее значение анизотропии, d – размер однородного слоя, δ – размер переходного слоя, n – номер периода, z_0 – координата границы раздела однородного материала и МК. Координатная зависимость анизотропии схематически изображена на рис. 1.

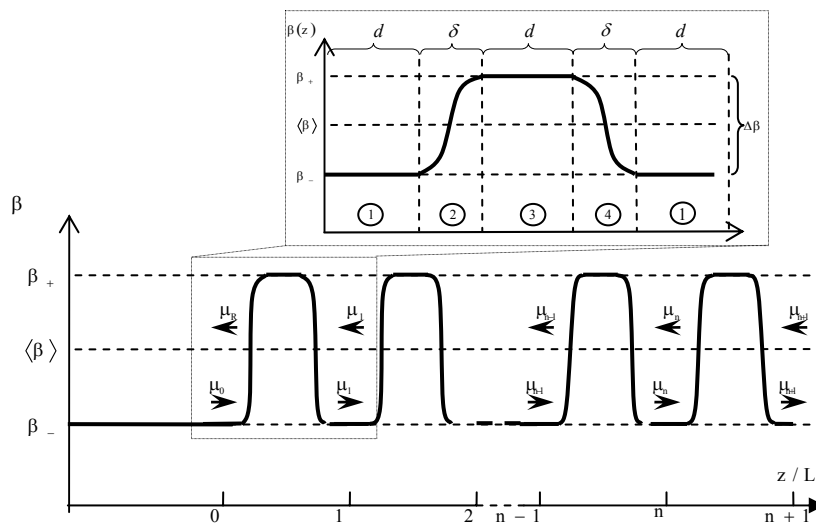


Рис. 1. Координатная зависимость распределения анизотропии

Метод решения. Предположим, что на МК перпендикулярно плоскости слоев падает спиновая волна с μ_0 . Амплитуда отраженной волны μ_r связана с ней как

$$\mu_r = R\mu_0 \tag{2}$$

где R – коэффициент отражения спиновой волны от МК.

С помощью метода, предложенного в [13] для коэффициента отражения можно получить следующее соотношение

$$R = \frac{\sqrt{(\rho+1)^2 - \tau^2} - \sqrt{(\rho-1)^2 - \tau^2}}{\sqrt{(\rho+1)^2 - \tau^2} + \sqrt{(\rho-1)^2 - \tau^2}} \tag{3}$$

Здесь введены обозначения: ρ – коэффициент отражения от одного периода МК, τ – коэффициент прохождения.

С помощью коэффициентов ρ и τ можно получить выражение для квазиволнового числа

$$\exp(iKL) = \frac{\sqrt{(\tau+1)^2 - \rho^2} - \sqrt{(\tau-1)^2 - \rho^2}}{\sqrt{(\tau+1)^2 - \rho^2} + \sqrt{(\tau-1)^2 - \rho^2}}, \tag{4}$$

где L – значение периода МК.

Для того чтобы определить значения ρ и τ , используем метод, изложенный в [12].

$$\rho = \sqrt{1 - 4\tilde{M}^2}, \quad \tau = -2\tilde{M}. \tag{5}$$

Здесь

$$\begin{aligned} \tilde{M} = & \left\{ \begin{aligned} & \left[\cos(k_1 d) P_2 + (\ell k_1)^{-1} \sin(k_1 d) P_2' \right] \cos(k_3 d) + \\ & + \left[\cos(k_1 d) Q_2 - (\ell k_1)^{-1} \sin(k_1 d) Q_2' \right] \ell k_3 \sin(k_3 d) \end{aligned} \right\} P_4 + \\ & + \left\{ \begin{aligned} & \left[\cos(k_1 d) Q_2 - (\ell k_1)^{-1} \sin(k_1 d) Q_2' \right] \cos(k_3 d) - \\ & - \left[\cos(k_1 d) P_2 + (\ell k_1)^{-1} \sin(k_1 d) P_2' \right] (\ell k_3)^{-1} \sin(k_3 d) \end{aligned} \right\} P_4' - \\ & - \left\{ \begin{aligned} & \left[\ell k_1 \sin(k_1 d) P_2 - \cos(k_1 d) P_2' \right] \cos(k_3 d) + \\ & + \left[\ell k_1 \sin(k_1 d) Q_2 + \cos(k_1 d) Q_2' \right] \ell k_3 \sin(k_3 d) \end{aligned} \right\} Q_4 + \\ & + \left\{ \begin{aligned} & \left[\ell k_1 \sin(k_1 d) Q_2 + \cos(k_1 d) Q_2' \right] \cos(k_3 d) - \\ & - \left[\ell k_1 \sin(k_1 d) P_2 - \cos(k_1 d) P_2' \right] (\ell k_3)^{-1} \sin(k_3 d) \end{aligned} \right\} Q_4' \end{aligned} \tag{6}$$

где $k_{1,3} = \sqrt{(\Omega - h - 2\pi - \beta_{\mp})/\alpha}$ – волновые числа для первого и третьего слоев МК.

Для косинусоидального профіля можна получить

$$\begin{aligned}
 P_j &= [c'(0, q_{2,4}) \cdot s(t_{2,4}, q_{2,4}) - s'(0, q_{2,4}) \cdot c(t_{2,4}, q_{2,4})], \\
 Q_j &= [c(0, q_{2,4}) \cdot s(t_{2,4}, q_{2,4}) - s(0, q_{2,4}) \cdot c(t_{2,4}, q_{2,4})], \\
 P_j' &= [c'(0, q_{2,4}) \cdot s'(t_{2,4}, q_{2,4}) - s'(0, q_{2,4}) \cdot c'(t_{2,4}, q_{2,4})], \\
 Q_j' &= [c(0, q_{2,4}) \cdot s'(t_{2,4}, q_{2,4}) - s(0, q_{2,4}) \cdot c'(t_{2,4}, q_{2,4})],
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

где $c(t_{2,4}, q_{2,4})$ и $s(t_{2,4}, q_{2,4})$ – функции Матье, $q_{2,4} = \pm \delta^2 \Delta\beta / (\alpha\pi^2)$, $t_{2,4} = \pi(z - z_{2,4}) / 2\delta$

Результаты. Характерный вид частотной зависимости квадрата коэффициента отражения СВ от полубесконечного МК с линейным и косинусоидальным (3) и линейным [12] профилями распределения анизотропии в переходных слоях представлен на рис. 2.

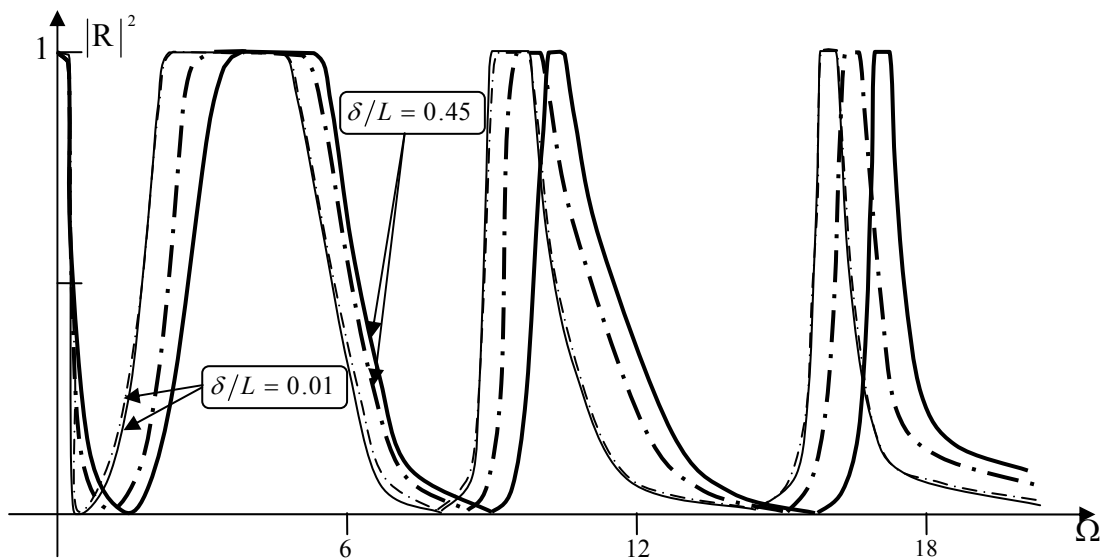


Рис. 2. Частотная зависимость квадрата коэффициента отражения для МК с линейным [12] и косинусоидальным профилем (3) межслойной границы для $\Delta\beta = 2$, $\beta_- = 3.0$, $h = 0$. Сплошные линии соответствуют линейному распределению анизотропии, штрих-пунктир – косинусоидальному.

Можно заметить, что для косинусоидального профіля так как и для лінійного [12] існують області повного відбиття від полубесконечного магнетонного кристала, що відповідають частотам, що збігаються з границями заборонених зон спектра [12]. Величина області повного відбиття зменшується з збільшенням розмитості. Існують також точки нульового відбиття, що відповідає повному проходженню спинових хвиль через МК.

Висновки. При малих значеннях відносної розмитості графіки частотної залежності квадрата коефіцієнта відбиття для лінійного і синусоїдального профілів суттєво не відрізняються на всьому досліджуваному частотному діапазоні. Структуру межшарової границі в даному випадку можна не враховувати.

Однако, при великих значеннях відносної розмитості, положення областей повного відбиття буде залежати від профілю межшарової границі. Для лінійної і косинусоїдальної модуляції області повного відбиття, які відповідають першій забороненій зоні спектра, частково збігаються, і на основі отриманих спектральних характеристик не можна зробити висновок про внутрішню структуру досліджуваного МК. Для більш високих зон для лінійної і косинусоїдальної модуляції області повного відбиття будуть відрізнятися. Це дає можливість по виміряному значенню коефіцієнта відбиття зробити висновок про внутрішню структуру МК.

РЕЗЮМЕ

В даній роботі досліджується частотна залежність коефіцієнтів відбиття спинових хвиль від магнетонного кристалу зі значенням одноосової анизотропії, що періодично змінюється, та кінцевою товщиною межшарових меж. Розглядається косинусоїдальний розподіл анизотропії в межшаровій межі. Проаналізовано вплив розміру межшарової межі на значення коефіцієнта відбиття.

Ключові слова: магнетонний кристал, спинові хвилі, періодична структура, магнетоніка.

SUMMARY

The frequency dependence of the coefficient of spin wave reflection from a semi-infinite magnonic crystal with a periodically modulated value of the uniaxial anisotropy and a finite thickness of interfaces has been investigated. A cosine-like distribution of the anisotropy value in the interfaces is considered. Influence of the interface size upon a reflection coefficient is analyzed.

Keywords: magnonic crystal, spin waves, periodic structure, magnonics.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Nikitov S. A. Spin Waves in Periodic Magnetic Structures-Magnonic Crystals / S. A. Nikitov, P. Tailhades, C. S. Tsai // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2001. – Vol. 236, No 320. – P. 687-689.
2. Гуляев Ю. В. Магнонные кристаллы – спиновые волны в периодических структурах / Ю. В. Гуляев, С. А. Никитов // Доклады РАН. – 2001. – Т. 380, № 4. – С. 469-471.
3. Stapele R. P. The spin-wave of layered magnetic thin films / R. P. Stapele, F. J. A. M. Greidanus, J. W. Smits // Journal Applied Physics. – 1985. – Vol. 57, No 4. – P. 1282-1290.
4. Кругляк В. В. Спектр спиновых волн в идеальном мультислойном магнетике при модуляции всех параметров уравнения Ландау-Лифшица / В. В. Кругляк, А. Н. Кучко, В. И. Финохин // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, № 5. – С. 842-845.
5. Кучко А. Н. Спектр спиновых волн в магнонном кристалле со структурным дефектом / А. Н. Кучко, М. Л. Соколовский, В. В. Кругляк // Физика металлов и металловедение. – 2006. – Т. 101, № 6. – С. 565-569.
6. Ignatchenko V. A. The spectrum and damping of waves partially randomized multilayers / V. A. Ignatchenko, Yu. I. Mankov, A. A. Maradudin // Journal of physics. Condensed Matter. – 1999. – Vol. 11. – P. 2773-2790.
7. Кучко А. Н. Влияние структуры межслойных границ на спектр спиновых волн в магнонном кристалле / А. Н. Кучко, В. С. Ткаченко // Металлофизика и новейшие технологии. – 2005. – Т. 27, № 9. – С. 1157-1167.
8. Ignatchenko V. A. Wave spectrum of multilayers with finite thicknesses of interfaces / V. A. Ignatchenko, Yu. I. Mankov, A. A. Maradudin // Physical review B. – 2000. – Vol. 62, No 3 – P. 2181-2184.
9. Горобец Ю. И. Отражение спиновых волн в мультислойных материалах с модулированными магнитными параметрами / Ю. И. Горобец, А. Н. Кучко, С. А. Решетняк // Физика твердого тела. – 1996. – Т. 38, № 2. – С. 575-580.
10. Решетняк С. А. Влияние обменных свойств интерфейса на отражение поверхностных спиновых волн от одноосного мультислойного ферромагнетика / С. А. Решетняк // Физика низких температур. – 2007. – Т. 33, № 1. – С. 88-92.
11. Tkachenko V. S. Spin wave reflection from semi-infinite magnonic crystals with diffuse interfaces / V. S. Tkachenko, V. V. Kruglyak, A. N. Kuchko // Metamaterials. – 2009. – Vol. 3, No 1. – P. 28-32.
12. Tkachenko V. S. Spectrum and reflection of spin waves in magnonic crystals with different interface profiles / V. S. Tkachenko, V. V. Kruglyak, A. N. Kuchko // Physical Review B. – 2010. – Vol. 81, No 2. – P. 425-433.
13. Игнатович В. К. Этюд об одномерном периодическом потенциале / В. К. Игнатович // Успехи физических наук. – 1986. – Т. 150, № 1. – С. 145-158.

Поступила в редакцию 20.05.2010 г.

KINETIC EQUATION FOR HYDROGEN INDUCED DIRECT PHASE TRANSFORMATION
IN Nd₂Fe₁₄B HARD MAGNETIC ALLOY

S. B. Rybalka

Donetsk national technical university, Donetsk

Model for evolution of the hydrogen induced direct phase transformation in Nd₂Fe₁₄B hard magnetic alloy has been proposed. On the base of Kolmogorov and Lyubov kinetic theory of the phase transformations has been obtained kinetic equation that well described the isothermal kinetic diagram for this type transformation.

Keywords: kinetics; phase transformations; hard magnetic alloys.

Introduction. As well known phase transformations studies have always been one of the main standpoint areas of solid state physics, metal science, theoretical and practical materials science [1, 2].

For instance, developed by Takeshita and Nakayama new technology well-known as HDDR-process (Hydrogenation-Decomposition-Desorption-Recombination) provides a new strategy to improve the properties of permanent magnets via hydrogen-induced phase transformations in Rare-Earth-Metal type alloys [3]. This HDDR-process allows to obtain nanocrystalline powders from Nd₂Fe₁₄B hard magnetic alloys with fine grain size ~ 0.1-0.3 μm. As result, the practical application of direct and reverse hydrogen-induced phase transformations in hard magnetic alloys of rare-earth and transition metals such as Nd₂Fe₁₄B and Sm₂Fe₁₇ allows to improve their structure and magnetic properties and also leads to miniaturization of new technical devices based on Nd₂Fe₁₄B and Sm₂Fe₁₇ permanent magnets which used in DVD-ROM, acoustic systems and others devices.

It is obvious that a clear understanding of the kinetic peculiarities of hydrogen-induced phase transformations will allow control of the microstructure and magnetic properties of these materials too.

The isothermal kinetic diagram of the hydrogen induced direct phase transformation in Nd₂Fe₁₄B alloy was obtained experimentally earlier in paper [4]. However, to the present moment some kinetic equation describing isothermal kinetic diagram above-mentioned phase transformations doesn't exist. Thus, the main goal of the present paper is to describe above mentioned isothermal kinetic diagram theoretically within the framework of classical kinetic theory of phase transformation in condensed state.

Results and discussion. At first stage, interaction of Nd₂Fe₁₄B alloy with hydrogen (at hydrogen pressure of ~0.1 MPa) at temperatures ~600-900°C leads to hydrogen induced direct phase transformation (decomposition) occurs by the following scheme [3]



At second stage, at hydrogen evacuation (in vacuum ~10⁻² Torr) from decomposed alloy occurs hydrogen induced reverse phase transformation, i.e. recombination in initial phase of Nd₂Fe₁₄B by the following scheme [3]



With direct and reverse transformation completed, the Nd₂Fe₁₄B alloy mainly consists of a fine-grained ferromagnetic phase Nd₂Fe₁₄B that allows to obtain permanent magnets with a high coercive [3,5].

For hydrogen induced direct phase transformation in Nd₂Fe₁₄B (Nd₁₅Fe₇₇B₈ at. %) alloy isothermal kinetic diagram was obtained earlier in paper [4]. This diagram is shown in fig. 1.

Earlier on a base of kinetic investigations, SEM and X-ray diffraction studies during direct phase transformation in Nd₂Fe₁₄B type alloys it was showed that transformations of this type maybe classified as diffusive phase transformation in solid state and that the direct transformation process proceeds by the nucleation and growth mechanism [5-11].

In accordance with Becker-Döering model of nucleation kinetics [12-14] if plots dependence $\ln t_\xi$ on $1/T$, where t_ξ is the time, which is needed for reaching of some degree of transformation ξ and T is the temperature, we can determine an effective energy of phase transformation process. For this goal experimental data from fig. 1 were re-plotted in co-ordinates $\ln t_\xi$ versus $1/T$ which are shown in fig. 2.

The slopes of the straight lines give us the values of the effective activation energies for hydrogen induced direct phase transformation. Obtained values of effective activation energy equal to $Q_1 = 213 \div 265$ kJ/mol in low temperature region (670-760°C) and $Q_2 = -(146 \div 214)$ kJ/mol in high temperature region (800-860°C). In our case obtained values Q_1 for low temperature region (670-760°C) transformation have good agreement with an activation energy of data for diffusion of Fe atoms in Rare-Earth metals

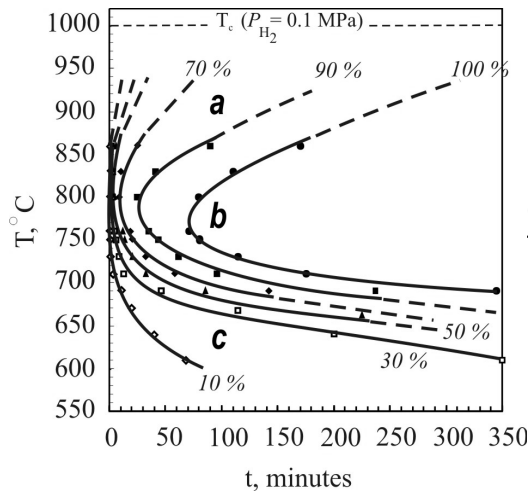


Fig. 1. The isothermal kinetic diagram for hydrogen induced direct phase transformation in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, where T is the temperature, t is the transformation time and 10, 30, 50, 70, 90 100% is the degrees of the direct transformation (from [4]).

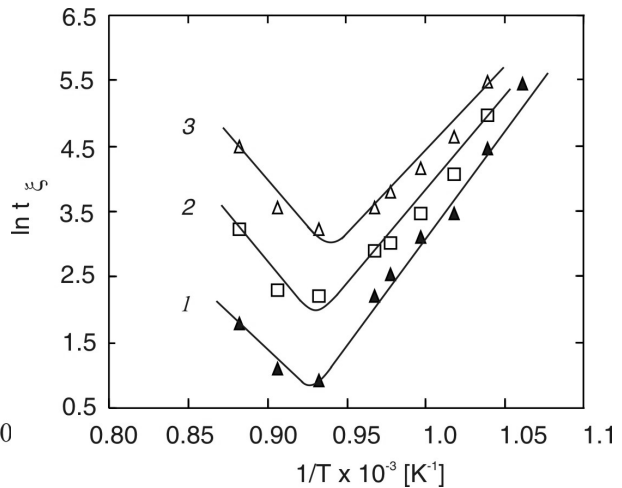


Fig. 2. Dependence $\ln t_{\xi}$ vs $1/T$ for hydrogen induced direct phase transformation in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ alloy for degrees of transformation: 1 – 0.5, 2 – 0.7, 3 – 0.9.

– $Q=250$ kJ/mol [15] and for high temperature region (800-860°C) effective energy activation Q_2 is equal to enthalpy of NdH_2 phase formation ($\Delta H_{\text{NdH}_2} = -(187.7 \pm 3.3)$ kJ/mol [16]).

Therefore, it is really possible to consider that evolution process of direct phase transformation is controlled by diffusion process of Fe atoms in temperatures interval of 670-760°C and in temperatures interval of 800-860°C phase transformation process controlled by growth kinetics of NdH_2 hydride phase. On the other hand, as can be seen from scheme (1) there is a reason to believe that diffusion of hydrogen into $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ alloy leads to nucleation and growth process of NdH_2 hydride phase and then diffusion of Fe atoms leads to formation of α -Fe phase and Fe_2B phase. Thus, in our case we can believe that evolution process of transformation is controlled by two main process, i.e. nucleation and growth process of the main phases: NdH_2 hydride phase and α -Fe phase.

In accordance with above described model let's obtain kinetic equations for direct hydrogen induced phase transformation in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ alloy. As well known from the Kolmogorov kinetic theory of phase transformation in solid state [17], the volume of the transformed area ξ in dependence on t transformation time can be written as

$$\xi(t) = \frac{V(t)}{V_o} = 1 - \exp\left[-\int_0^t I(t)\varphi(t-\tau)dt\right], \quad (3)$$

where $V(t)$ is the transformed area volume at time t , V_o is the initial volume, $I(t)$ is the nucleation rate of centres of new phases at time t , $\varphi(t)$ is the volume of this nucleation centre at time t , τ is the nucleation moment of centre of a new phase. For the isothermal conditions as in our case it is believed that $I(t) = I = \text{const}$.

In general case, according to the Lyubov kinetic theory approach [18] integral in Eq. (3) we can divide in two integrals: from 0 to τ and from τ to t , where τ is time which is necessary for growth of nucleus of new phase up to critical size. Thus, equation (3) maybe written in following form:

$$\xi(t) = 1 - \exp\left[-\left(\int_0^{\tau} I\varphi_1(t-\tau)dt + \int_{\tau}^t I\varphi_2(t-\tau)dt\right)\right], \quad (4)$$

where τ is time which is necessary for growth of nucleus of new phase up to critical size, $\varphi_1(t)$ and $\varphi_2(t)$ is the volume of new phases of NdH_2 and α -Fe nucleation centres at time moment t , correspondingly.

Further, growth of volume of a spherical centre of NdH_2 phase $\varphi_1(t)$ may be written as:

$$\varphi_1(t) = \frac{4}{3} \pi \rho_1^3(t), \quad (5)$$

where $\rho_1(t)$ is the radius of this centre at time t .

Nucleation process of NdH₂ phase we can be considered as in single-component system taking into account of high diffusive mobility of hydrogen atoms to neodymium atoms in Nd₂Fe₁₄B alloy and in this case according to theory of absolute reaction rates [19] radius $\rho_1(t)$ of NdH₂ centre at time t :

$$\rho_1(t) = \frac{\pi d^4 \Delta g}{9h} \exp\left(-\frac{U}{RT}\right)t, \quad (6)$$

where Δg is change of free energy at formation of volume unit of new phase, U is activation energy of atoms at transition through interface of phases, d is diameter of diffusing atom (hydrogen atoms in our case), h is the Planck constant, R is the gas constant, T is transformation temperature, t is some time moment.

Analogously, growth of volume of a spherical centre of α -Fe phase $\varphi_2(t)$ may be written as:

$$\varphi_2(t) = \frac{4}{3} \pi \rho_2^3(t), \quad (7)$$

where $\rho_2(t)$ is the radius of α -Fe centre at time t .

On the other hand, it's known [6-7] that at diffusive-controlled transformations boundary of new phase moves by parabolic law and $\rho_2(t)$ may be written in following form:

$$\rho_2(t) = 2\beta(\xi)\sqrt{Dt}, \quad (8)$$

where $D = D_0 e^{-\frac{Q}{RT}}$ is the diffusion coefficient of Fe atoms, Q is the activation energy of Fe atoms diffusion, R is the gas constant, $\beta(\xi)$ is kinetic parameter, T is the transformation temperature, t is some time moment.

Further, rate of nucleation I of new phase's centers in condensed systems in accordance with Turnbull-Fisher model [20] is

$$I = \gamma \frac{RT}{h} \exp\left(-\frac{W+U}{RT}\right), \quad (9)$$

where W is the energy necessary for formation of critical nucleus, U is the activation energy at transition of atoms through interface of phases, $\gamma = 10^{-4}$ mol/m³ [18], R is the gas constant.

Then, substitute equations (4)-(9) in (3) we can obtain kinetic equation for volume of the transformed area ξ in dependence on t transformation time and temperature T :

$$\xi(t) = 1 - \exp\left[-\frac{\pi^4 d^{12} \Delta g RT \gamma}{3^7 h^4} e^{-\frac{W+4U}{RT}} t^4_{cr.} - \frac{64\pi RT \gamma}{15h} \beta(\xi)^3 D_0^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{W+U+\frac{3}{2}Q}{RT}} \left(t^{5/2} - \tau^{5/2}\right) \right] \quad (10)$$

As a rule, phase transformation kinetics for practical application describes by curves showing time transformation t needs for reaching some degree of transformation ξ dependence on transformation temperature T [2]. Thus, Eq. (10) has been written in following form:

$$t(\xi, T) = \left[\frac{15h \ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right) e^{\frac{W+U+\frac{3}{2}Q}{RT}}}{64\pi RT \gamma \beta(\xi)^3 D_0^{3/2}} + \frac{5\pi^3 d^{12} \Delta g^3}{3^6 64h^3 \gamma \beta(\xi)^3 D_0^{3/2} h^3} e^{\frac{\frac{3}{2}Q-3U}{RT}} \tau^4 + \tau^{5/2} \right]^{\frac{2}{5}} \quad (11)$$

Let's consider further two main possible extreme cases, i.e. $t \geq \tau$ and $t \leq \tau$. In the case when transformation time $t \geq \tau$ we can obtain equation:

$$t(\xi, T) = \left[\frac{15h \ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right)}{64\pi RT \gamma \beta^3(\xi) D_0^{3/2}} \right]^{\frac{2}{5}} e^{\frac{\frac{2}{5}(W+U)+\frac{3}{5}Q}{RT}}. \quad (12)$$

Further, for case when transformation time $t \leq \tau$ we can obtain following equation:

$$t(\xi, T) = \frac{3h}{\pi d^2 \Delta g^{3/4}} \left[\frac{27 \ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right)}{RT\gamma} \right]^{\frac{1}{4}} e^{\frac{W+U}{4RT}} \quad (13)$$

Finally combines equation (12) and (13) it is possible to obtain kinetic equation for dependence of transformation time $t(\xi, T)$ from degree of transformation ξ and transformation temperature T :

$$t(\xi, T) = \left[\frac{15h \ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right)}{64\pi RT\gamma\beta^3(\xi)D_o^{3/2}} \right]^{\frac{2}{5}} e^{\frac{2(W+U)+\frac{3}{5}Q}{RT}} + \frac{3h}{\pi d^2 \Delta g^{3/4}} \left[\frac{27 \ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right)}{RT\gamma} \right]^{\frac{1}{4}} e^{\frac{W+U}{4RT}} \quad (14)$$

Thus, rewrite Eq. (14) in following simple form:

$$t(\xi, T) = a_1 \cdot [-\ln(1-\xi)]^{\frac{2}{5}} \left[\frac{1}{T} \right]^{\frac{2}{5}} \cdot e^{\frac{2(W+U)+\frac{3}{5}Q}{RT}} + a_2 \cdot [-\ln(1-\xi)]^{\frac{1}{4}} \left[\frac{1}{T} \right]^{\frac{1}{4}} \cdot e^{\frac{W+U}{4RT}}, \quad (15)$$

where

$$a_1 = \left(\frac{15h}{64\pi R\beta^3(\xi)D_o^{\frac{3}{2}}} \right)^{\frac{2}{5}}, \quad a_2 = \frac{3h}{\pi d^2 \Delta g^{3/4}} \left[\frac{27}{R\gamma} \right]^{\frac{1}{4}}$$

Thus, for the further analysis it is necessary to determine all unknown parameters in equation (15). In our case we can believed that above determined effective activation energies (fig. 2) Q_1 and Q_2 equal correspondently $Q_1 \cong \frac{2}{5}(W+U) + \frac{3}{5}Q$ and $Q_2 \cong \frac{W}{4} + U$, where W is the free energy of critical nucleus of α -Fe phase formation, Q is the activation energy of Fe atoms diffusion (in our case we can take on following data for diffusion of Fe atoms in Rare-Earth metals – $Q=250$ kJ/mol, $D_o=1$ mm²/s [15]). Then, using obtained earlier activation energies Q_1 and Q_2 from fig. 2 has been determined energy formation of critical nucleus of α -Fe phase W , activation energy of hydrogen atoms at transition through interface of NdH₂ phases U and others parameters in Eq. (15) which are shown in table.

Table

Values of the parameters in Eq. (15) for direct hydrogen induced phase transformation in Nd₂Fe₁₄B alloy for degrees of transformation: 0.5, 0.7 and 0.9, respectively

ξ , degree of transformation	Q_1 , kJ/mol	Q_2 , kJ/mol	U , kJ/mol	W , kJ/mol	$\beta(\xi)$	a_1	a_2
0.5	265.5	-146.55	-290.2	574.65	100.8×10^{-1}	6.0×10^{-12}	2.58×10^7
0.7	233.18	-170.71	-296.33	502.48	58.0×10^{-5}	6.36×10^{-10}	7.25×10^9
0.9	213.06	-214.65	-338.6	495.8	27.0×10^{-12}	7.42×10^{-9}	2.0×10^{12}

As follows from table values of activation energy of hydrogen atoms at transition through interface of NdH₂ phases $U = - (290 \div 340)$ kJ/mol have good agreement with enthalpy of formation of NdH₂ phase $\Delta H_{NdH_2} = -(187.7 \pm 3.3)$ kJ/mol [16]. Moreover, estimated values of energy of critical nucleus of α -Fe phase formation $W = 495 \div 575$ kJ/mol have reasonable order of magnitude for energy of critical nucleus phase formation in solid body [14]. On the base of Eq. (15) and data from Table 1 the isothermal kinetic diagram of direct hydrogen-induced phase transformation in Nd₂Fe₁₄B alloy has been plotted. This diagram is shown in fig. 3. As can be seen from this figure the calculated curves well approximate experimental data from paper [4].

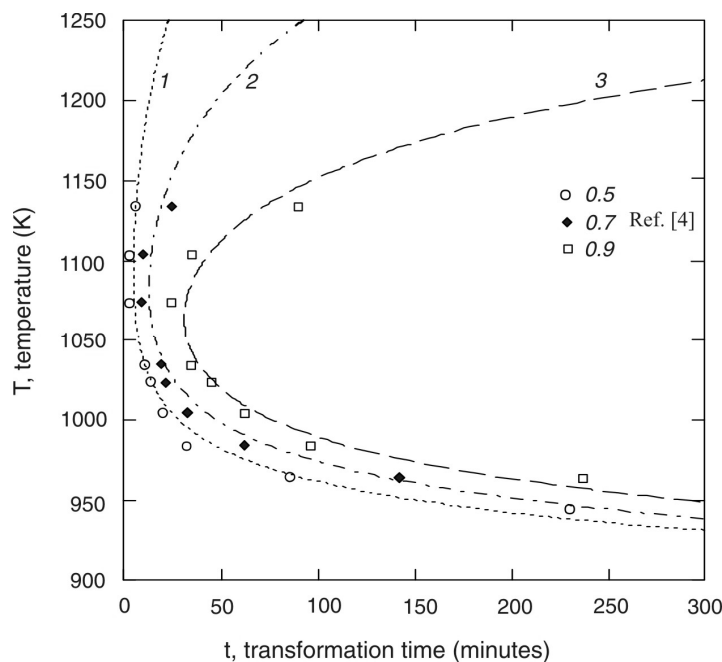


Fig. 3. The isothermal kinetic diagram of hydrogen induced direct phase transformation in $Nd_2Fe_{14}B$ alloy calculated by Eq. (15) for degrees of transformation: 1 – 0.5; 2 – 0.7; 3 – 0.9. Points are experimental data for same degrees of transformation [Ref. 4]

As seen from Fig. 3 the proposed model also describes subsequent slowing down of direct phase transformation evolution at temperatures above $\sim 1200-1300$ K (curve 3 in fig. 3) that has been determined experimentally in Nd-Fe-B type alloys [21-22].

Thus, kinetic equation of form Eq. (14) obtained on the base of Kolmogorov and Lyubov kinetic theory of the phase transformations well describes the kinetics of hydrogen induced direct phase transformations in $Nd_2Fe_{14}B$ alloy. Above-mentioned kinetic approach in future can be applied not only for $Nd_2Fe_{14}B$ type alloys but and others RE-type hard magnetic alloys for permanent magnets (Sm-Fe, Pr-Fe-B, Sm-Co, Er-Fe-B, Y-Fe etc.).

Conclusions. It is proposed model for evolution of hydrogen-induced direct phase transformation in hard magnetic $Nd_2Fe_{14}B$ alloy. On the base of Kolmogorov and Lyubov kinetic theory of the phase transformations kinetic equation for this transformation has been obtained. It is shown that the experimental isothermal kinetic diagram of hydrogen induced direct phase transformation in $Nd_2Fe_{14}B$ alloy can be well described by the equation of the following form:

$$t(\xi, T) = a_1 \cdot [-\ln(1-\xi)]^2 \left[\frac{1}{T} \right]^{\frac{2}{5}} \cdot e^{\frac{2(W+U)+\frac{3}{5}Q}{RT}} + a_2 \cdot [-\ln(1-\xi)]^4 \left[\frac{1}{T} \right]^{\frac{1}{4}} \cdot e^{\frac{W+U}{RT}}$$

where $t(\xi, T)$ is the time needs for reaching of some degree of transformation ξ at some transformation temperature T , a_1 and a_2 is the kinetic parameters, W is the energy necessary for formation of critical nucleus of α -Fe phases, U is the activation energy of hydrogen atoms at transition of atoms through interface of NdH_2 phases, Q is the activation energy of Fe atoms diffusion.

РЕЗЮМЕ

Предложена модель для развития индуцированного водородом прямого фазового превращения в магнитотвердом сплаве $Nd_2Fe_{14}B$. На основе кинетической теории фазовых превращений Колмогорова и Любова получено кинетическое уравнение, хорошо описывающее изотермическую кинетическую диаграмму для превращений такого типа.

Ключевые слова: кинетика; фазовые превращения; магнитотвердые сплавы.

РЕЗЮМЕ

Запропонована модель для розвитку ініційованого воднем прямого фазового перетворення в магнітотвердому сплаві $Nd_2Fe_{14}B$. На підставі кінетичної теорії фазових перетворень Колмогорова та Любова отримано кінетичне рівняння, що добре описує ізотермічну кінетичну діаграму для перетворень такого типу.

Ключові слова: кінетика; фазові перетворення; магнітотверді сплави.

REFERENCES

1. Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов / А. Г. Хачатурян. – М.: Наука, 1974. – 384 с.
2. Попова Л. Е. Диаграммы превращения аустенита в сталях и β -раствора в сплавах титана / Л. Е. Попова, А. А. Попов. – М.: Металлургия, 1991. – 502 с.
3. Takeshita T. Present status of the hydrogenation-decomposition-desorption-recombination process as applied to the production of magnets / T. Takeshita // J. Alloys Compounds. – 1993. – Vol. 193. – P. 231-234.
4. Fundamentals of the HDDR treatment of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ type alloys / S. B. Rybalka, V. A. Goltsov, V. A. Didus, D. Fruchart // J. Alloys Compounds. – 2003. – Vol. 356-357. – P. 390-394.
5. Dependence of anisotropy and coercivity on microstructure in HDDR Nd-Fe-B magnet / M. Liu, Y. Sun, G.B. Han et al. // J. Alloys Compounds. – 2009. – Vol. 478. – P. 303-307.
6. Kinetics and some general features of hydrogen-induced diffusive phase transformations in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ type alloys // Progress in Hydrogen Treatment of Materials / V. A. Goltsov, S. B. Rybalka, D. Fruchart, V. A. Didus. – Donetsk, 2001. – P. 367-390.
7. Didus V. A. Some kinetic and microstructural aspects during hydrogen-induced phase transformations in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ alloys / V. A. Didus, S. B. Rybalka, E.V. Dodonova // J. Alloys Compounds. – 2005. – Vol. 401-406. – P. 588-594.
8. In situ neutron diffraction study of the HDDR process of Nd-Fe-B magnets / J. L. Soubeyroux, D. Fruchart, S. Liesert et al. // Physica B. – 1997. – Vol. 241-243. – P. 341-343.
9. Detailed TEM analysis of Solid-HDDR $\text{Nd}_{16}\text{Fe}_{76}\text{B}_8$ magnetic materials / M. Matzinger, J. Fidler, O. Gutfliesch, I. R. Harris // IEEE Trans. Magn. – 1995. – Vol. 31, No 6. – P. 3635-3637.
10. The hydrogenation-disproportionation-desorption-recombination process of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ studied by in-situ neutron diffraction and thermomagnetic measurements / S. Liesert, D. Fruchart, P. de Rango, J.L. Soubeyroux // J. Alloys Compounds. – 1997. – Vol. 253-254. – P. 140-143.
11. Characterisation of solid-HDDR processed $\text{Nd}_{16}\text{Fe}_{76}\text{B}_8$ alloys by means of electron microscopy / O. Gutfliesch, M. Matzinger, J. Fidler, I. R. Harris // J. Magn. Magn. Mater. – 1995. – Vol. 147. – P. 320-330.
12. Becker R. Kinetische behandlung der keimbildung in uebersaetigen daempfen / R. Becker, W. Doering // Ann. Der Phys. – 1935. – Bd 24, No 8. – S. 712-752.
13. Becker R. Die keimbildung bei der ausscheidung in metallischen mischkristallen / R. Becker // Ann. Der Phys. – 1938. – Bd 32, N. 1. – S. 128-138.
14. Christian J. W. The Theory Transformations in Metals and Alloys / J. W. Christian – Oxford: Pergamon Press, 2002. – 1216 p.
15. Coey J. M. D. Interstitial intermetallics / J. M. D. Coey // J. Magn. Magn. Mater. – 1996. – Vol. 159. – P. 80-89.
16. Антонова М. М. Свойства гидридов металлов. Справочник / М. М. Антонова. – К: Наук. думка, 1975. – 128 с.
17. Колмогоров А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов / А. Н. Колмогоров // ДАН СССР. Сер. мат. – 1937, № 1. – С. 355-359.
18. Любов Б. Я. Кинетическая теория фазовых превращений / Б. Я. Любов. – М: Металлургия, 1969. – 263 с.
19. Gleston S. The Theory of Absolute Rate Processes / S. Gleston, K. J. Laidler, H. Eyring. – New York: McGraw-Hill, Book Comp. Inc., 1941. – P. 575-580.
20. Turnbull D. Rate of nucleation in condensed systems / D. Turnbull, J. C. Fisher // J. Chem. Phys. – 1949. – Vol. 17, No 1. – P. 71-73.
21. Nakayama R. Magnetic properties and microstructures of the Nd-Fe-B system during the hydrogenation-decomposition-desorption-recombination process / R. Nakayama, T. Takeshita // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74, No 4. – P. 2719-2724.
22. Ragg O. M. The HD and HDDR processes in the production of Nd-Fe-B permanent magnets / O. M. Ragg, G. Keegan, H. Nagel, I. R. Harris // Int. J. Hydrogen Energy. – 1997. – Vol. 22, No 2-3. – P. 333-342.

Received March 18, 2010

УДК 547.245:541.127/.128

К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ МОДИФИЦИРОВАНИЯ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

А. В. Аникеев

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАН Украины, г. Донецк

На основе формально-кинетического анализа взаимодействия бифункциональных соединений с монофункциональными модифицирующими реагентами установлен оптимальный концентрационный состав реакционных смесей, при котором выход монозамещенных продуктов достигает 62-81 %. Предложены методики получения моно-N-замещенных пиперазина на основе его реакций с алкил-, алкоксиалкилбромидами и α -окисями.

Ключевые слова: полифункциональные соединения, модификация, N-производные пиперазина.

Введение. В синтетической практике органических соединений с двумя и более идентичными функциональными группами нередко возникает задача химической модификации только одной из этих групп без затрагивания свойств остальных (см., например, [1-4]). Если реакционные центры, сосредоточенные на указанных группах, стерически разнесены, обычно предполагается, что акт взаимодействия по одному из них практически не влияет на первоначальную нуклеофильную или электрофильную способность других. Исходя из этого, на практике рассматриваемая проблема решается эмпирическим заданием избытка полифункционального компонента в расчете на чисто концентрационное подавление нежелательной модификации второго и последующих его центров. В результате, как правило, возникает задача разделения реакционной смеси, когда оказывается, что содержание целевого продукта в ней слишком мало, по сравнению с концентрацией непрореагировавшего исходного полифункционального компонента. В другом случае, если задание модифицирующего реагента было излишним, это содержание становится соизмеримым с концентрацией продуктов консекитивной модификации второго и последующих центров целевого соединения, и опять же перед исследователем возникает такая же проблема разделения.

Постановка задачи. Настоящая работа ограничена рассмотрением реакций соединений А, схема (1), содержащих только два однородных реакционных центра, с монофункциональными реагентами В, когда в результате происходит образование целевого X и побочного Y дизамещенного продукта. Целью работы является выяснение такого концентрационного состава реакционной системы (1), при котором выход продукта X мог бы быть максимальным.



При соизмеримых концентрациях реагентов А и В накопление веществ X и Y в реакционной системе описывается системой двух кинетических уравнений второго порядка (2), где x и y – концентрации продуктов X и Y в момент времени t ; $b = [B]_{t=0}$; $u = [A]_{t=0} / [B]_{t=0}$ – заданное концентрационное соотношение веществ; k_x и k_y – константы скорости образования соответствующих конечных продуктов реакции.

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k_x(ub - x - y)(b - x - 2y) - k_y x(b - x - 2y) \\ \frac{dy}{dt} = k_y x(b - x - 2y) \end{cases} \quad (2)$$

Хотя система уравнений (2) аналитически не интегрируема во времени, нетрудно показать, что в приближении $k_x \approx k_y$ взаимозависимость текущих концентраций веществ X и Y отображается трансцендентной функцией (3).

$$\ln \frac{ub - x - y}{ub} + \frac{x}{ub - x - y} = 0 \quad (3)$$

В предельном случае ($t \rightarrow \infty$), когда $b = x_\infty + 2y_\infty$ и $m = x_\infty / y_\infty$ – относительное содержание конечных продуктов по прошествии реакции, это уравнение имеет вид (4), который уже не содержит величину b .

$$\ln \frac{u(m+2) - m - 1}{u(m+2)} + \frac{m}{u(m+2) - m - 1} = 0 \quad (4)$$

Таким образом, решение поставленной в работе задачи сводится, в основном, к количественному анализу соотношения (4).

Анализ результатов. На рисунке представлена рассчитанная численным методом [5] в соответствии с уравнением (4) зависимость величин m от концентрационного соотношения реагентов u . Там же дана функция $v = m \cdot 100 / (m + 2)$, отображающая выход в % продукта X по отношению к начальной концентрации монофункционального реагента B и функция $w = m / [u(m + 2) - m - 1]$ (выражения для величин v и w вытекают из рассмотрения предельных концентраций x_∞ и y_∞), характеризующая соотношение концентраций целевого X и избыточного A продуктов в реакционной системе по прошествии процесса. Видно, что на интервале значений u [0.8, 5.0] взаимозависимость величин m и u отображается прямой линией с тангенсом угла наклона 2.03 и коэффициентом корреляции 1.

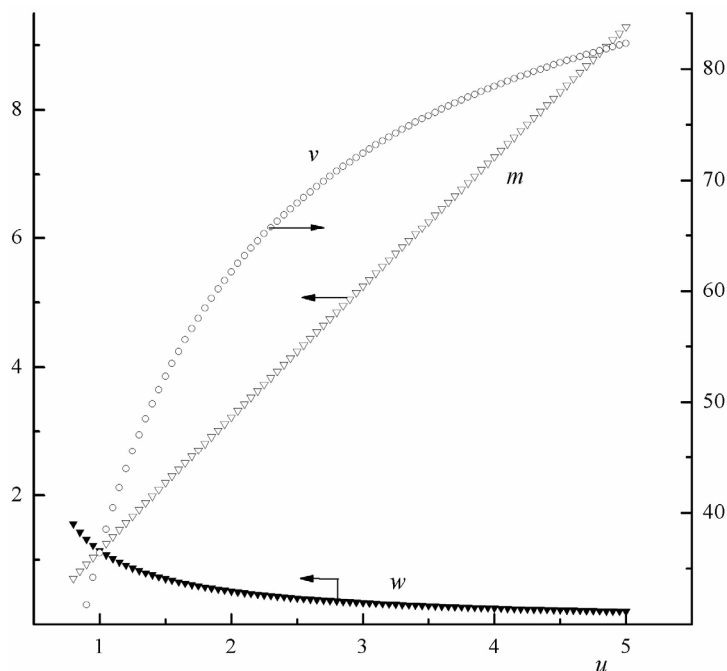


Рис. Зависимость относительного содержания m X- и Y-производного, выхода v продукта X по отношению к начальной концентрации модифицирующего реагента B и отношения концентраций w X и реагента A от состава u реакционной системы (1).


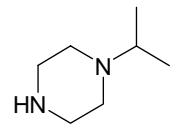
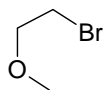
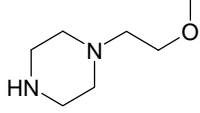
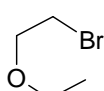
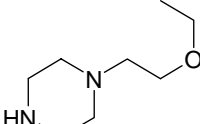
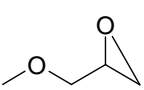
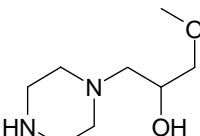
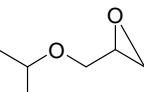
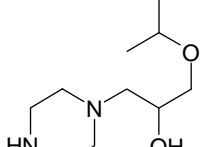
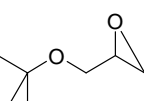
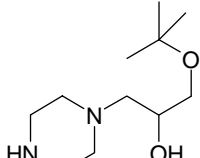
Из рассмотрения этой зависимости следует, что, наиболее оптимальная концентрационная область для решения поставленной задачи находится в промежутке значений u 2.0 – 4.5, когда мольное соотношение m целевого X и побочного Y продуктов достигает 3.2 – 8.3. Это соответствует выходу $v_{\text{выч.}}$ соединения X 62-81 %. При задании больших концентраций бифункционального реагента A, как это видно из анализа величин w (рисунок), возникает проблема его отделения от целевого продукта X.

Изложенное иллюстрируется двумя обобщенными методиками синтеза некоторых 1-R-пиперазинов, разработанных в нашей лаборатории при решении задачи модифицирования только одной из NH-функций пиперазина. Фигурирующие в методиках величины u и физико-химические параметры полученных веществ представлены в таблице.

1-R-пиперазины на основе алкил- и алкоксиалкилбромидов. В круглодонную колбу, снабженную механической мешалкой, загружают 194.2 г (1 моль) гексагидрата пиперазина и 120 мл метанола. Далее при работающей мешалке вводят $1/u$ моль (таблица) бромида B, и по прошествии 40 - 50 минут, – раствор едкого кали в метаноле из расчета 150 мл/моль (берется 5 %-ный мольный избыток КОН по отношению к реагенту B). Гомогенная реакционная смесь выдерживается при комнатной температуре 19 - 22 °C 48 часов, после чего отгоняют метанол и вводят в нее 170 мл воды. Извлечение продуктов реакции осуществляют экстракцией хлороформом. В зависимости от лиофильности алкильного радикала, количество актов элюирования дозами по 50 мл хлороформа изменялось в пп. 1-3 (таблица) от 8 до 7 и далее до 6. Полученные растворы подвергают разгонке при атмосферном давлении, отделяя водный азеотроп и хлороформ фракционированием. Вакуумную перегонку элюатов осуществляют с отбором предгона в количестве примерно 10 % от их массы, с целью отделения пиперазина и легких примесей. После замены холодильника и аллонжа получают фракцию целевого вещества X (таблица). Во всех случаях наблюдается кубовый остаток дизамещенного производного и смолистых веществ.

Таблиця

Реагенти В, використані для модифікації пиперазину при його *u*-кратному мольному избытку. Структура цільових продуктів Х, їх температури кипіння, (*T*.кип.), фізическіе густоти (d_4^{18}), показателі заломлення (n_D^{18}), реальні $V_{\text{експ.}}$ і вирахувані $V_{\text{выч.}}$ виходи в реакціях.

№ п.п.	Реагент В	Структура Х	<i>u</i>	$V_{\text{експ.}}$ %	$V_{\text{выч.}}$ %	<i>T</i> .кип., °С / мм.рт.ст.	d_4^{18} , г/см ³	n_D^{18}
1			1,86	56,2	59,5	176-179/ 746	0,9040	1,4704
2			3,44	42,8	75,4	135-138/85	0,9759	1,4737
3			4,02	68,7	78,5	120-122/42	0,9539	1,4698
4			4,72	24,0	81,3	134-138/4	1,050	1,4901
5			2,88	62,2	71,5	141-143/10	1,024	1,4795
6			4,41	73,9	80,2	142-145/8	1,020	1,4783

1-(2-гідрокси-3-алкоксипропіл)пиперазіни. В круглодонную колбу, снабженную механической мешалкой и термометром, загружают 194.2 г (1 моль) гексагидрата пиперазина и 400 мл воды. Затем при работающей мешалке в колбу вводят *1/u* моль α -окси В (таблица) и наблюдают экзотерму реакции. Ее развитие происходит на протяжении 15-20 минут и составляет 10-12 °С при комнатной температуре 18-20 °С. Далее, содержимое колбы доводят до слабого кипения и охлаждают. Извлечение целевых продуктов, также как и в предыдущем случае, производят хлороформом порциями по 50 мл. Как показали данные хроматографического анализа реакционных смесей, из-за большей гидрофильности полученных продуктов Х (таблица) понадобилось и значительно больше приемов их элюирования. Так, в п. 4 оно составило 41, в п. 5-19, а в п. 6-9. Дальнейшие экспериментальные манипуляции соответствуют предыдущей методике.

С учетом массы отобранных предгонов сравнение величин $V_{\text{експ.}}$ и $V_{\text{выч.}}$ в таблице указывает на их соответствие. Исключение составляют случаи № 2 и № 4, где гидрофильность целевых продуктов слишком велика. Можно предположить, что причиной этого является недостаточная экстрактивность этих продуктов в условиях данного опыта.

Экспериментальная часть. В работе использован коммерческий пиперазин категории «ч». 2-Бромпропан [6], 1-бром-2-метокси- и 1-бром-2-этоксиэтан [7] синтезированы известными методами. Эпоксидные реагенты получены также по известным [8] методикам.

Структура полученных соединений доказана данными элементного анализа и спектрами ПМР.

Выводы. Таким образом, результаты настоящей работы позволяют предсказать мольный состав продуктов реакции модифицирования бифункциональных молекул в зависимости от заданного концентрационного состава реакционной системы. Выбор этого состава может быть произведен по уравнению (4), рисунок, но только при учете лиофильности исходных и целевых продуктов реакции и свойств применяемого элюента, что продемонстрировано на примере синтеза ряда 1-R-пиперазинов.

РЕЗЮМЕ

На основі формально-кінетичного аналізу взаємодії біфункціональних з'єднань з монофункціональними модифікуючими реагентами встановлений оптимальний концентраційний склад реакційних сумішей, при якому вихід монозаміщених продуктів досягає 62-81 %. Запропоновано методики одержання моно-N-заміщених пиперазину на основі його реакцій з алкіл-, алкоксиалкілбромідами і α -окисами.

Ключові слова: поліфункціональні сполуки, модифікація, N-похідні пиперазину.

SUMMARY

On the formal-kinetic analysis basis of interaction bifunctional substances with monofunctional modifying reagents the optimal concentration composition of thereaction mixtures at which the yield of the monosubstituted products achieves 62-81 % have been established. Techniques of reception mono-N-substituted piperazines are offered on the basis of reactions piperazine with alkyl-, alkoxyalkylbromides and α -oxides.

Keywords: multifunctional substances, modification, N-substituted piperazines.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРЫ

1. Новые способы получения аминзамещенных 1,3,4- и 1,2,4-Тиадиазолов / Е. А. Данилова, Т. В. Меленчук, Е. Е. Мелехонова, М. К. Исляйкин // Материалы Международной конференции «Новые направления в химии гетероциклических соединений». – Кисловодск, 2009. – С. 308.
2. Рогоза Л.Н. Алкалоиды животного происхождения – производные полиметиленаминов. I. Продукты метаболизма морских организмов и микроорганизмов / Л. Н. Рогоза, Н. Ф. Салахутдинов, Г. А. Толстикова // Биоорганическая химия. - 2005. - Т. 31, № 6. - С. 563-577.
3. Тимакова Л.М. N-(2-Оксиэтил)диэтилентриамин / Тимакова Л.М., Темкина В.Я., Ярошенко Г.Ф. и др. // Методы получения химических реактивов и препаратов. – Т. 26. – М.: ИРЕА, 1974. – С.224 -225.
4. Бейшекеев Ж. Химия и применение пиперазина. / Ж. Бейшекеев. – Фрунзе: Илим, 1982. – 152 с.
5. Фаронов В.В. Программирование на персональных ЭВМ в среде Турбо-Паскаль. / В.В. Фаронов. - М.: МГТУ, 1992. – 448 с.
6. Камм О. Бромистые алкины и алкилены / О. Камм, А. Марвел // Синтезы органических препаратов. Под общ. ред. Б.А. Казанского – Т. 1. – М.: ИЛ, 1949. – С. 108-122.
7. Гаррисон Д. β -Этоксизтилбромид / Д. Гаррисон, Г. Диль // Синтезы органических препаратов. Под общ. ред. Б. А. Казанского – Т. 3. - М.: ИЛ, 1952. – С. 528 - 529.
8. Малиновский М.С. Окиси олефинов и их производные. / М.С. Малиновский – М.: ГХИ, 1961. – 557 с.

Поступила в редакцию 16.04.2010 г.

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКА НА ПРОЦЕСС ЭКСТРАКЦИИ ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ КОРНЕВИЩ ЭХИНАЦЕИ ПУРПУРНОЙ

А. В. Белый, Н. И. Белая, К. А. Литвяк*

*Национальная фармацевтическая академия, г. Харьков

Исследовано влияние условий экстракции фенольных соединений с антиоксидантными свойствами из корней и корневищ эхинацеи пурпурной с применением ультразвука (УЗ). Установлено, что более полное извлечение веществ наблюдается при экстракции 70%-ным этанолом методом холодной мацерации в УЗ поле (частота УЗ колебаний 45,3 кГц, мощность излучателя 2 Вт/см²) в течение 75 мин. с размером частиц сырья равным 1 мм. Предложенный способ получения растительных экстрактов позволяет увеличить эффективность и скорость экстракции фенольных соединений, снизить температуру и время тепловой обработки экстракта. Полученный водно-этанольный экстракт корневищ эхинацеи пурпурной позволяет более чем в 2 раза увеличить стабильность подсолнечного масла к окислению при содержании в нем экстракта до 0,1 масс.%.
Ключевые слова: природные фенольные соединения, антиоксидантная активность, ультразвук, экстракция.

Введение. Согласно литературным данным [1-3] и предыдущим исследованиям авторов [4, 5], антиоксидантные и антирадикальные свойства растительных экстрактов определяются прежде всего содержанием в них фенольных соединений (ФС) – фенолкарбоновых кислот, флавоноидов и их гликозидов, кумаринов и т.д. Получение таких экстрактов в качестве пищевых добавок, средств антиоксидантной терапии и компонентов парфюмерной продукции заставляет химиков технологов искать условия экстракции, при которых выход фенольных веществ – носителей антиоксидантной активности (АОА) был бы максимален, а их разрушение под действие температуры и растворителей минимально. В связи с этим поиск альтернативных методов извлечения антиоксидантов из растительных объектов, как, например, ультразвуковая экстракция, представляет актуальную задачу.

Поскольку ультразвук (УЗ) не является индифферентным агентом по отношению к действующим веществам: может вызывать кавитацию, ионизацию молекул, изменять свойства биологически активных веществ, понижать или усиливать их терапевтическую эффективность, применение его требует тщательного экспериментального исследования [6].

Целью настоящей работы стало изучение влияния условий ультразвуковой экстракции на количество извлеченных из растения веществ фенольной природы с антиоксидантными свойствами.

Экспериментальная часть. Выбор объекта исследования – корней и корневищ эхинацеи пурпурной обусловлен значительным содержанием в их составе ФС [7] и широким использованием экстрактов эхинацеи в фармацевтической, пищевой и парфюмерной промышленности. В качестве экстрагента использовали 70%-ный этанол, который, согласно литературным данным [6], способен ингибировать окислительно-восстановительные реакции, возникающие в ультразвуковом поле. Соотношение сырья-экстрагент составляло 1:10 [4]. Экстракцию проводили методом мацерации (одноразовой экстракции) с применением УЗ при комнатной температуре. Для проведения исследований был изготовлен ультразвуковой экстрактор, принципиальная схема которого представлена на рис. 1.

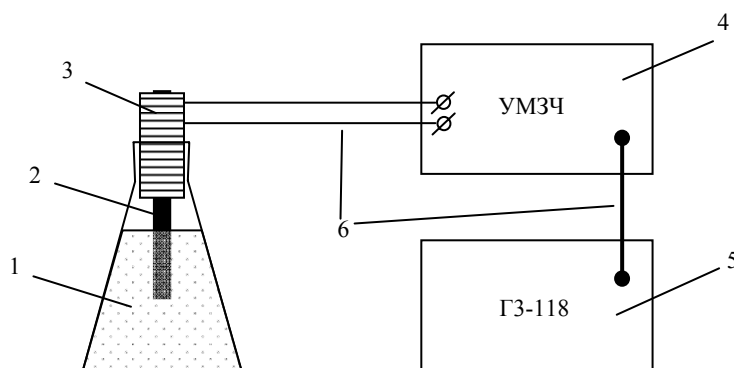


Рис. 1. Принципиальная схема ультразвукового экстрактора: 1 – исследуемый раствор; 2 – ферритовый сердечник-излучатель; 3 – индукционная катушка; 4 – усилитель мощности звуковой частоты; 5 – генератор звуковой частоты ГЗ-118; 6 – соединительные провода.

Экстракты стандартизировали по величине сухого остатка ($W_{с.о.}$, масс. %), определенного методом гравиметрии [8]. За извлечением фенолов в ходе экстракции следили путем отбора проб экстракта по ходу эксперимента и определения суммарного количества фенольных соединений (ФС., масс. %) методом перманганатометрического титрования [8]. Антиоксидантное действие полученных экстрактов изучалось в условиях высокотемпературного ($T=393\pm 2K$) автоокисления растительного масла из семян подсолнечника заводского производства. За кинетикой окисления масла наблюдали, контролируя накопление перекисного числа (ПЧ., % I_2) методом йодометрического титрования [9]. АОА полученных экстрактов характеризовали величиной τ/τ_0 , где τ – период индукции окисления масла в присутствии 0,1 масс.% экстракта, τ_0 – без экстракта.

Анализ результатов эксперимента. Среди факторов, влияющих на процесс экстрагирования веществ из растительного материала в ультразвуковом поле, изучены следующие: частота и мощность УЗ-излучателя, время экстракции и размер частиц сырья. Уровни варьирования этих факторов выбраны, исходя из анализа литературных данных [4].

С целью выбора оптимального ультразвукового режима процесс экстракции проводили с использованием четырех частот УЗ-колебаний (ν) от 27,5 до 45,3 кГц при постоянной мощности излучателя (V) равной 0,1 Вт/см². Исследуемый диапазон УЗ-характеристик не допускал возникновения кавитации, приводящей к таким нежелательным явлениям как повышение температуры и рассеивание УЗ-волн внутри системы экстрагент-сырье.

Прохождение УЗ через смесь этанол (70 об.%) – корневища эхинацеи обеспечивает эффективное экстрагирование веществ из-за возникновения УЗ-волн. В результате происходит ускорение пропитки материала и растворение содержимого клетки, увеличение скорости обтекания частиц сырья, в пограничном диффузионном слое экстрагента образуются турбулентные и вихревые потоки. Молекулярная диффузия внутри растительного материала и в диффузионном слое практически сменяется на конвективную, что приводит к интенсификации массообменных процессов. При воздействии ультразвука нарушается пограничный диффузионный слой, кроме того, вследствие изменения давления при сжатии и разрежении, может возникать эффект «губки», при котором улучшается проникновение экстрагента в материал [4].

Для оценки эффективности УЗ-экстракции природных фенолов ее результаты сравнивались с холодной и горячей ($T_{кип. р-ля.}$) мацерациями в тех же условиях без применения УЗ. Видно (табл. 1), что с ростом частоты УЗ излучателя общее количество экстрагируемых веществ ($W_{с.о.}$), суммарное количество ФС и АОА (τ/τ_0) экстрактов увеличиваются. Обращает на себя внимание тот факт, что если по сухому остатку результаты УЗ-экстракции и горячей мацерации были сравнимы, то значительно большего выхода можно было добиться с применением УЗ-колебаний для ФС. Вероятно, это связано с тем, что подавляющее большинство экстрагируемых веществ нефенольной природы имеют хорошую растворимость, поэтому действие и высоких температур, и УЗ способствует их одинаково полному извлечению из растительного материала.

Таблица 1

Зависимость выхода сухого остатка ($W_{с.о.}$), суммарного количества фенольных соединений (ФС) и антиоксидантной активности (τ/τ_0) этанольных (70 об.%) экстрактов корневищ эхинацеи пурпурной от частоты (ν) УЗ-излучателя ($V=0,1$ Вт/см², $t=90$ мин).

Частота УЗ-излучателя ν , кГц	$W_{с.о.}$ масс.%	ФС., масс.%	АОА, τ/τ_0
холодная ($T_{ком.}$) мацерация без УЗ	1,04	7,45	1,0
горячая ($T_{кип. р-ля.}$) мацерация без УЗ	1,47	9,83	1,3
27,5	1,50	10,98	1,5
32,1	1,51	11,30	1,6
38,0	1,53	11,37	1,6
45,3	1,60	11,66	1,7

В то время как фенольные соединения недостаточно хорошо растворимы, поэтому применение УЗ значительно повышает их растворимость, степень экстрагирования из сырья, и, соответственно, способствует увеличению АОА экстракта.

Если рассмотреть динамику накопления фенольных соединений во времени, то можно отметить, что в начальный период времени идет накопление ФС, достигает своего максимума и затем содержание фенолов падает, по-видимому, вследствие длительного деструктивного воздействия ультразвука. Как видно из рис. 2. максимальное содержание ФС в экстракте достигается при использовании частоты УЗ-излучателя равной 43,5 кГц.

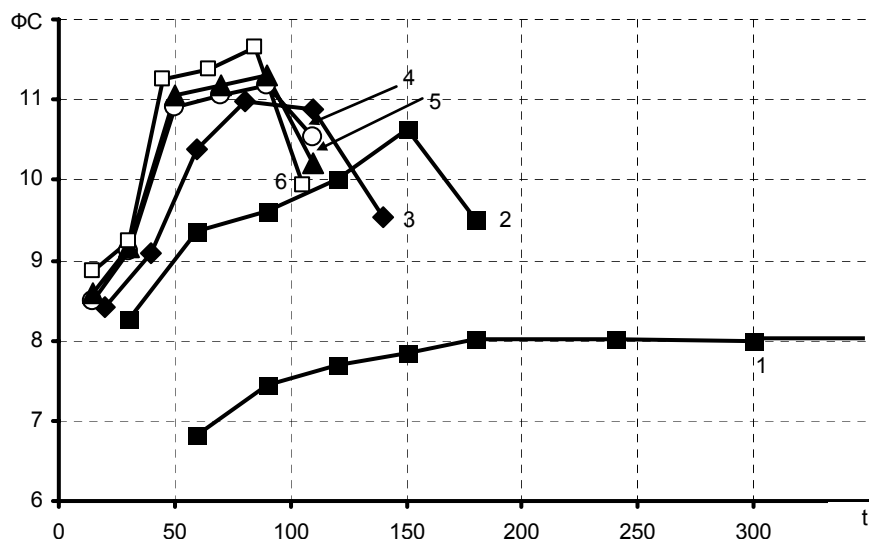


Рис. 2. Кинетика накопления суммарного количества фенольных соединений (ФС, масс.%) в процессе экстракции (холодная мацерация при $T_{ком.}$, растворитель – 70%-ный этанол) корневищ эхинацеи пурпурной в зависимости от частоты УЗ-излучателя (при $V=0,1 \text{ Вт/см}^2$): 1 – холодная мацерация без УЗ; 2 – горячая мацерация ($T_{кип. р-ля}$) без УЗ; 3 – 27,5 кГц; 4 – 32,1 кГц; 5 – 38,0 кГц; 6 – 45,3 кГц.

При исследовании мощности УЗ-генератора использовали интенсивность УЗ в пределах $0,1 - 2,0 \text{ Вт/см}^2$, что является наиболее рациональным для экстракции большинства видов растительного сырья [4] с точки зрения сохранения нативности экстрагируемых биологически активных веществ. Для достижения максимального выхода ФС из корневищ эхинацеи была выбрана частота УЗ равная 45,3 кГц время экстракции 75 мин. Анализ полученных данных (рис.3) показал, что с ростом мощности УЗ-генератора значения всех исследуемых характеристик экстракта увеличиваются. Наиболее высокий выход $W_{с.о.}$, ФС и АОА экстракта соответствуют мощности излучателя 2 Вт/см^2 .

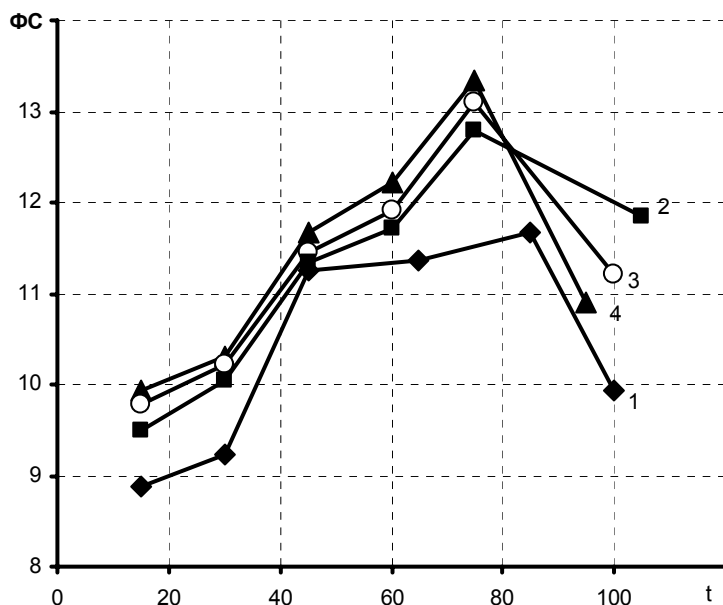


Рис. 3. Кинетика накопления суммарного количества фенольных соединений (ФС, масс.%) в процессе экстракции (холодная мацерация при $T_{ком.}$, растворитель – 70%-ный этанол) корней и корневищ эхинацеи пурпурной в зависимости от мощности УЗ-излучателя (при $\nu=45,3 \text{ кГц}$): 1 – $0,1 \text{ Вт/см}^2$; 2 – $0,8 \text{ Вт/см}^2$; 3 – $1,5 \text{ Вт/см}^2$; 4 – $2,0 \text{ Вт/см}^2$.

Эффективность экстракции в существенной степени зависит и от продолжительности экстракции. Устанавливалось влияние времени экстракции (t) на количество сухого остатка, суммарное содержание ФС и АОА экстракта. Показано (табл. 2), что с ростом продолжительности экстрагирования от 20 до 60 мин. величина сухого остатка возрастает, затем значения $W_{с.о.}$ изменяются незначительно, что связано, по-видимому, с полным истощением сырья.

Таблица 2
Зависимость выхода сухого остатка ($W_{с.о.}$), суммарного количества фенольных соединений (ФС) и антиоксидантной активности (τ/τ_0) этанольных (70 об.%) экстрактов корневищ эхинацеи пурпурной от времени экстракции (t) ($\nu=45,3$ кГц, $V=2,0$ Вт/см²).

Время УЗ-экстракции t , мин.	$W_{с.о.}$, масс.%	ФС, масс.%	АОА, τ/τ_0
20	1,22	10,09	1,5
30	1,34	10,30	1,5
45	1,50	11,71	1,6
60	1,68	12,35	1,7
75	1,73	13,43	2,4
95	1,75	10,9	1,6

Кинетика накопления фенольных соединений несколько иная – проходит через максимум и зависит от частоты колебаний и мощности УЗ-излучателя (рис.2). Чем больше частота и мощность УЗ-излучателя тем меньше времени необходимо затратить для максимального извлечения ФС. Видно (рис.3), что при частоте колебаний равной 45,3 кГц и мощности более 0,1 Вт/см² наибольшее количество ФС экстрагируется за первые 75 мин. Экстракты полученные за указанный временной интервал проявляют и наиболее высокую АОА (рис. 4). Дальнейшее увеличение продолжительности УЗ-экстракции приводит к резкому уменьшению АОА экстракта и содержанию ФС, что, по-видимому, обусловлено их окислением под действием УЗ в водно-этанольной среде [4].

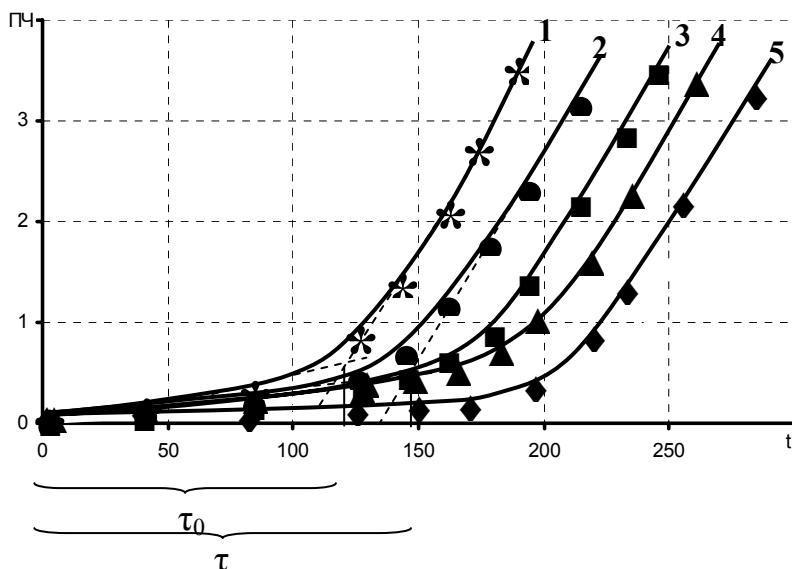


Рис. 4. Кинетика накопления пероксидных групп (ПЧ, % I₂) в процессе автоокисления подсолнечного масла (1) при температуре 393±2 К в присутствии этанольных (70 об.%) экстрактов корней и корневищ эхинацеи пурпурной (C=0,1 масс.%), полученных методом УЗ-экстракции ($\nu=45,3$ кГц, $V=0,8$ Вт/см²) через разные промежутки времени: 2 – 30 мин.; 3 – 60 мин.; 4 – 95 мин.; 5 – 75 мин.

Для оценки влияния степени измельченности на процесс УЗ-экстракции корневища эхинацеи дробили до размера частиц, проходящих сквозь сито с диаметром 1, 2 и 3 мм, а также до состояния пыли (<1 мм). Установлено (табл. 3), что с уменьшением размера частиц наблюдается увеличение выхода $W_{с.о.}$, ФС и рост величины τ/τ_0 экстракта. Наиболее рациональным для экстракции является размер частиц сырья равный 1 мм.

Таблица 3
Зависимость выхода сухого остатка ($W_{с.о.}$), суммарного количества фенольных соединений (ФС) и антиоксидантной активности (τ/τ_0) этанольных (70 об.%) экстрактов корневищ эхинацеи пурпурной от размера частиц сырья (d) ($\nu=45,3$ кГц, $V=2,0$ Вт/см², $t=75$ мин.).

Размер частиц сырья d , мм	$W_{с.о.}$, масс.%	ФС, масс.%	АОА, τ/τ_0
< 1 (состояние пыли)	1,73	13,43	2,4
1	1,73	13,43	2,4
2	1,09	10,32	1,5
3	0,9	9,1	1,2

Выводы. Отработанные условия эксперимента, а именно частота УЗ колебаний 45,3 кГц, мощность излучателя 2 Вт/см², время озвучивания 75 мин. и размер частиц 1 мм, позволяют не только значительно ускорить процесс холодной мацерации фенольных соединений из корней и корневищ эхинацеи пурпурной, но и существенно повысить их выход – за первые 75 мин. экстракции содержание ФС в экстракте достигает величины в 1,5 раза большей, чем при обычном настаивании в течение нескольких суток.

При УЗ-экстракции не нужно прибегать к нагреванию, как это необходимо при горячей мацерации для более полного извлечения ФС, что позволит предотвратить их окисление и сохранить нативные свойства.

Полученный водно-этанольный экстракт корневищ эхинацеи пурпурной позволяет более чем в 2 раза увеличить стабильность подсолнечного масла к окислению при содержании в нем экстракта до 0,1 масс. %.

РЕЗЮМЕ

Досліджено вплив умов екстракції фенольних сполук з антиоксидантними властивостями з коріння і корневищ ехінацеї пурпурової із застосуванням ультразвука (УЗ). Встановлено, що повніший вихід речовин спостерігається при екстракції 70%-ним етанолом методом холодної мацерації в УЗ полі (частота УЗ коливань 45,3 кГц, потужність випромінювача 2 Вт/см²) на протязі 75 хвилин при розмірі частинок близько 1 мм. Запропонований спосіб здобуття рослинних екстрактів дозволяє збільшити ефективність і швидкість екстракції фенольних з'єднань, понизити температуру і час теплової обробки екстракту. Отриманий водно-етанольний екстракт корневищ ехінацеї пурпурової дозволяє більш ніж в 2 рази збільшити стабільність соняшникової олії до окислення при вмісті в ній екстракту до 0,1 мас. %.

Ключові слова: природні фенольні сполуки, антиоксидантна активність, ультразвук, екстракція.

SUMMARY

The Influence of conditions of extraction of phenolic compounds with antioxidative properties from the rhizomes of *Echinacea purpurea* with using ultrasound (US) was investigated. It is established, that more full extraction of substances is observed at extraction aqueous-ethanolic solvent (70 vol.% of ethanol) with method of cold maceration in US-field (frequency - 45,3 кГц, power of radiator - 2 W/cm²) within 75 minutes with the size of particles of raw material equal 1 mm. The offered way of extraction of vegetative extracts allows to increase efficiency and speed of phenolic compounds extraction, to lower the temperature and the time of thermal processing of an extract. Received aqueous-ethanolic extract of *Echinacea Purpurea* rhizomes allows to increase stability of sunflower oil to oxidation more than 2 times at the contents in it of an extract up to 0,1 weights %.

Keywords: natural phenolic compounds, antioxidative activity, ultrasound, extraction.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Gulcin I. A comparative study on the antioxidant activity of fringe tree (*Chionanthus virginicus* L.) extracts / I. Gulcin, R. Elias, A. Gepdiremen // *African Journal of Biotechnology* – 2007. – Vol. 6, No 4. – P. 410-418.
2. Химический состав пырея ползучего и изучение его антиоксидантной активности при аллергическом контактном дерматите / А. П. Петрова, Е. А. Краснов, Э. В. Сапрыкина и др. // *Химико-фармацевтический журнал*. – 2009. – Т. 43, № 1. – С. 30-32.
3. Лубсандоржиева П. Б. Антиоксидантная активность извлечений из *Bergenia crassifolia* (L) Fritsch и *Vaccinium vitis-idaea* L. in vitro / П. Б. Лубсандоржиева // *Химия растительного сырья* – 2006. – № 4. – С. 45-48.
4. Экстрагирование антиоксидантов из листьев толокнянки (*Arctostaphylos Adans*) в электрическом поле / Н. И. Белая, Т. А. Филиппенко, А. В. Белый и др. // *Химико-фармацевтический журнал*. – 2006. – Т. 40, № 9. – С. 88 - 90.
5. Белый А. В. Определение активности природных антиоксидантов вольтамперометрическим методом / А. В. Белый, Н. И. Белая // *Вісник Донецького Національного Університету. Сер. А. Природничі науки*. – 2010. – № 1. – С. 174-179
6. Технология лекарственных форм / Т. С. Кондратьев, Л. А. Иванова, Ю. И. Зеликсон и др. – М.: Медицина, 1991. – Т. 2. – 448 с.
7. Полная энциклопедия лекарственных растений / В. К. Лавренов, Г. В. Лавренова. – СПб.: Нева, 1999. – Т. 2. – 813 с.
8. Запрометов М. Н. Основы биохимии фенольных соединений / М. Н. Запрометов. – М.: Высш. шк., 1974. – 211 с.
9. Крылова Н. Н. Физико-химические методы исследования продуктов животного происхождения / Н. Н. Крылова, Ю. Н. Ляковская. – М.: Пищепромиздат, 1961. – 230 с.

Поступила в редакцию 04.05.2010 г.

УЛУЧШЕНИЕ БИОАКТИВНЫХ СВОЙСТВ АРТЕЗИАНСКОЙ ВОДЫ

А. В. Бутюгин, М. З. Плевако, В. Л. Басенкова

В регионах с дефицитом пресной воды для сельского хозяйства необходимо привлечение источников воды с повышенной минерализацией. Изучена возможность улучшения свойств артезианской воды гуминовыми препаратами. Vegetационным методом установлено, что добавка гуминовых препаратов к артезианской воде повышает энергию прорастания и всхожесть семян зерновых культур. Показана возможность улучшения биоактивных свойств артезианской воды с помощью гуминовых препаратов для применения в сельском хозяйстве.

Ключевые слова: артезианская вода, гуминовые препараты, вегетационный метод, зерновые культуры, всхожесть семян.

Введение. Вода – самое распространенное вещество на Земле. Однако 97,5% гидросферы приходится на соленые воды и всего 2,5% (35 млн. км³) – на пресные, 67 % которых аккумулировано в ледниках и постоянном снежном покрове, а 20% представлены грунтовыми водами. В настоящее время человечество расходует ежегодно порядка 200 тыс. км³ пресной воды. Но во многих регионах наблюдается дефицит пресной воды для хозяйственной деятельности. Основными потребителями водных ресурсов являются: сельское хозяйство (70%) и промышленность (22%) [1].

Постановка задачи. Донбасс относится к регионам с нехваткой питьевой воды, хотя объемы грунтовых вод (шахтных, артезианских) достаточно велики и могли бы улучшить баланс по воде. Однако шахтные и артезианские воды отличаются повышенным содержанием солей. Очистка их до качества питьевой воды экономически не всегда выгодна. Однако эти воды вполне возможно использовать для нужд сельского и лесного хозяйства, зеленого строительства при улучшении их биоактивных свойств. Природные гуминовые вещества являются стимуляторами-адаптогенами растений, повышают их иммунитет, способствуют выживаемости растений в условиях повышенной минерализации почвенных растворов [2-5]. Поэтому применение гуминовых препаратов для улучшения биоактивных свойств таких вод вполне возможно.

Цель работы – изучение возможности улучшения биоактивных свойств артезианской воды с помощью гуминовых веществ.

Объекты и методы исследования. Объекты исследования: артезианская вода (АВ) (Волновихский район, Донецкой области), гумат аммония (ГК-А), остаточный бурый уголь (ОБУ); семена – овса сорта Скакун и озимой пшеницы сорта Алексеевка. В качестве объектов сравнения использовали дистиллированную воду (ДВ) без добавок и с добавками различных препаратов.

Лабораторные вегетационные опыты проводили в чашках Петри при 25°C в биологическом термостате. Опыты проводили в 3-х кратной повторности в период с октября по февраль месяц, чтобы оценить влияние сезонных факторов. Определяли энергию прорастания (3-и сутки) и всхожесть (7-е сутки) семян зерновых культур.

Результаты и их обсуждение. В табл. 1 приведены физико-химические характеристики артезианской воды, полученные по результатам химического анализа.

Таблица 1

Физико-химические свойства артезианской воды

Общее солесодержание, г/л	pH	Жесткость общая, мг-экв/л	Ca ²⁺ мг-экв/л	Mg ²⁺ мг-экв/л	SO ₄ ²⁻ мг/л	Cl мг/л
3,8-4,9*	6,90	26,5-29,1*	9,0-10,5*	17,5-18,6*	257,0	290,0

* пробы воды с разницей между отборами 2-3 месяца

В связи с высокой общей жесткостью артезианской воды (табл. 1), в опытах были исследованы варианты с добавками трилона Б (Тр. Б), который должен был комплексовать ионы жесткости. Однако при этом обнаружился факт сильного подкисления воды в результате ионного обмена, что отрицательно сказалось на результатах опытов.

В предварительных опытах было установлено, что гуматы аммония могут осаждать соли жесткости. Использование гуматов аммония для этих целей не рационально и экономически невыгодно. Поэтому вместо гуматов аммония было решено добавлять остаточный бурый уголь после стадии выделения гуматов аммония. Остаточный уголь, содержащий не менее 5% водорасторимых гуматов, добавляли при перемешивании в количестве 4 г на 1 л артезианской воды. Время отстаивания – 4 часа (полное осаждение). Обработанную воду осторожно сливали. Общее солесодержание уменьшалось на 0,5 г/л. Результаты опытов представлены в табл. 2-5.

Таблиця 2

Влияние гуматов аммония на энергии прорастания семян овса сорта Скакун

№	Растворы	Энергия прорастания, %						рН
		12.12.08	19.12.08	16.01.09	23.01.09	30.01.09	6.02.09	
1	Контроль - ДВ	52,6	46,0	50,0	48,0	54,6	51,4	6,26
2	ГК-А, 10 ⁻⁴ % (на ДВ)	62,6	54,0	54,7	59,4	52,0	56,6	6,60
3	ДВ + Тр. Б 9мг-экв/л	46,6	45,4	54,0	41,4	45,4	49,4	4,93
4	ДВ+ГК-А + Тр.Б	35,4	47,4	50,0	51,4	41,4	45,4	5,42
5	АВ	45,4	51,4	54,0	61,4	52,0	62,0	6,90
6	АВ + ГК-А (10 ⁻⁴ %)	66,0	62,6	63,4	72,6	57,4	60,6	7,00
7	АВ + Тр.Б	47,4	32,0	47,4	46,6	45,4	48,0	3,98
8	АВ+ Тр.Б + ГК-А(10 ⁴ %)	36,0	38,0	52,0	53,4	52,6	62,0	4,05
9	АВ обр. ОБУ	57,4	50,6	60,0	51,4	56,0	64,6	7,80

Таблиця 3

Влияние гуматов аммония на всхожесть семян овса сорта Скакун

№	Растворы	Всхожесть, %						рН
		12.12.08	19.12.08	16.01.09	23.01.09	30.01.09	6.02.09	
1	Контроль - ДВ	71,4	67,4	71,4	80,6	75,4	80,0	6,26
2	ГК-А, 10 ⁻⁴ % (на ДВ)	82,0	70,6	73,4	85,4	73,4	72,6	6,60
3	ДВ + Тр. Б 9мг-экв/л	58,6	56,6	61,4	60,6	57,4	56,0	4,93
4	ДВ+ ГК-А+ Тр.Б	50,0	54,0	53,4	52,6	62,6	54,0	5,42
5	АВ	56,0	70,6	76,7	85,4	73,4	76,0	6,90
6	АВ + ГК-А (10 ⁻⁴ %)	80,0	78,0	82,6	92,0	77,4	78,6	7,00
7	АВ + Тр.Б	53,4	42,6	65,4	68,0	52,6	70,6	3,98
8	АВ + Тр.Б + ГК-А (10 ⁴ %)	48,6	48,6	56,0	69,4	78,0	80,0	4,05
9	АВ обр. ОБУ	77,4	82,0	74,0	82,6	74,0	80,6	7,80

Из данных табл. 2 и 3 видно, что гумат аммония в дистиллированной воде и артезианской воде положительно влиял на энергию прорастания и всхожесть семян овса, относительно дистиллированной воды и артезианской воды соответственно. В опытах с добавками трилона Б результаты можно считать отрицательными, что прямо связано с рН воды (сильное подкисление жесткой воды в результате ионообмена: рН=4,93 – в дистиллированной воде и рН=3,98 в артезианской воде).

Таблиця 4

Влияние гуматов аммония на энергии прорастания семян озимой пшеницы сорта Алексеевка

№	растворы	Энергия прорастания, %						рН
		10.10.08	31.10.08	7.11.08	14.11.08	21.11.08	28.11.08	
1	Контроль - ДВ	92,0	88,0	92,0	84,0	84,6	86,0	6,26
2	ГК-А, 10 ⁻⁴ % (на ДВ)	86,7	89,3	88,7	78,7	76,6	84,0	6,60
3	ДВ + Тр. Б 9мг-экв/л	88,7	81,3	83,4	81,3	78,6	78,6	4,93
4	ДВ+ ГК-А + Тр.Б	86,7	80,0	88,0	78,7	78,6	82,0	5,42
5	АВ	86,7	85,3	82,0	77,4	82,6	80,6	6,90
6	АВ + ГК-А (10 ⁻⁴ %)	90,7	87,3	86,0	84,7	84,6	86,0	7,00
7	АВ + Тр.Б	84,0	90,7	78,0	73,4	78,0	82,6	3,98
8	АВ + Тр.Б + ГК-А (10 ⁴ %)	81,3	81,4	79,4	80,7	80,0	81,4	4,05
9	АВ обр. ОБУ	90,7	83,4	88,6	81,4	82,0	80,0	7,80

Таблиця 5

Влияние гуматов аммония на всхожесть семян озимой пшеницы сорта Алексеевка

№	Растворы	Всхожесть, %						рН
		10.10.08	31.10.08	7.11.08	14.11.08	21.11.08	28.11.08	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Контроль - ДВ	94,7	91,4	94,0	92,0	90,6	92,7	6,26
2	ГК-А, 10 ⁻⁴ % (на ДВ)	93,3	92,0	92,0	88,0	87,4	88,6	6,60
3	ДВ + Тр. Б 9мг-экв/л	88,7	82,6	83,4	84,0	85,4	82,0	4,93
4	ДВ+ГК-А + Тр.Б	87,3	80,7	90,0	84,0	81,4	83,4	5,42
5	АВ	92,0	91,4	90,7	91,4	90,6	91,4	6,90
6	АВ + ГК-А (10 ⁻⁴ %)	94,7	92,0	92,0	91,4	95,4	90,7	7,00
7	АВ + Тр.Б	86,0	91,4	82,0	79,4	80,0	85,4	3,98
8	АВ + Тр.Б + ГК-А (10 ⁴ %)	86,7	83,4	79,4	82,6	90,0	86,0	4,05
9	АВ обр. ОБУ	92,7	90,0	92,0	91,4	92,0	88,0	7,80

Результаты, полученные на семенах озимой пшеницы Алексеевка, показывают, что озимая пшеница отличается своей чувствительностью к гумату аммония от овса. При этом пшеница менее чувствительна к свойствам артезианской воды. Вместе с тем сохраняется закономерное улучшение биоактивных свойств артезианской воды при обработке гуматом аммония и остаточным бурым углем.

Выводы. Таким образом, проведенные опыты показывают потенциальную возможность повышения биоактивности артезианской воды (общее солесодержание до 5 г/л) с помощью гуминовых препаратов с целью использования ее в сельском хозяйстве. Дальнейшие исследования будут направлены на изучение возможности применения гуминовых препаратов для улучшения биоактивных свойств минерализованных шахтных вод, а также на совершенствование методов улучшения свойств артезианских и шахтных вод.

РЕЗЮМЕ

В регіонах з дефіцитом прісної води для сільського господарства необхідно притягати джерела води з підвищеною мінералізацією. Вивчена можливість поліпшення властивостей артезіанської води гуміновими препаратами. Вегетаційним методом встановлено, що добавка гумінових препаратів до артезіанської води підвищує енергію пророщування та схожість насіння зернових культур. Показана можливість поліпшення біоактивних властивостей артезіанської води за допомогою гумінових препаратів для використання в сільському господарстві.

Ключові слова: артезіанська вода, гумінові препарати, вегетаційний метод, зернові культури, схожість насіння.

SUMMARY

In regions with deficiency of fresh water for agriculture attraction of sources of water with the raised mineralization is necessary. Possibility of improvement of properties of artesian water by humic preparations is studied. By a vegetative method it is established, that the additive humic preparations to artesian water raises energy of germination and germinating seeds of grain crops. Possibility of improvement of bioactive properties of artesian water with the help humic preparations for application in agriculture is shown.

Keywords: artesian water, humic preparations, a vegetative method, grain crops, germinating seeds.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Василенко В. А. Водные ресурсы устойчивого развития / В.А. Василенко // Экология. – 2006. – № 2. – С. 128-137.
2. Горвая А. И. Гуминовые вещества: Строение, функции, механизм действия, протекторные свойства, экологическая роль / А. И. Горвая, Д. С. Орлов, О. В. Щербенко. – Киев: Наук. думка, 1995. – 304 с.
3. Бутюгин А. В. Физиологическая активность гумата аммония – экологически чистого биостимулятора-адаптогена / А. В. Бутюгин, А. Л. Антонова // Экологическая и техногенная безопасность: Сб. научн. трудов Междунар. научн. практ. конф. (Харьков, 30-31 марта 2000 г.). – Харьков: ХИСП, 2000. – С. 178-182.
4. Попов А. И. Гуминовые вещества: свойства, строение, образование / А. И. Попов. – СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2004. – 246 с.
5. Зубкова Ю. Н. Экологические аспекты использования гуматсодержащих препаратов в растениеводстве / Ю. Н. Зубкова, И. А. Рыктор, А. Л. Антонова и др. // Безпека життєдіяльності людини як умова сталого розвитку сучасного суспільства: друга Міжнародна наукова-практична конференція (м. Дніпропетровськ, 14-15 червня 2007 г.). – Дніпропетровськ: ПДАБА, 2007. – С.25-27.

Поступила в редакцію 05.05.2010 г.

**РАЗВИТИЕ НОВЫХ МЕТОДОВ ВВЕДЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП
В ПОЛИЯДЕРНЫЕ АРЕНЫ***Л. И. Величко, И. Б. Фролова, А. П. Зарайский, Н. М. Аникеева**Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАН Украины, г. Донецк*

Рассмотрены задачи межфазного катализа в области реакций электрофильных реагентов с полициклическими аренами. Показаны различные способы проведения важнейшей для органической химии реакции нитрования в условиях межфазного катализа. Исследовано влияние природы кислотной фазы в процессе нитрования окислами азота. Методы исследования – ГЖХ. Обоснована целесообразность практического применения предложенных авторами разработок. Изученные процессы могут и должны найти применение, как в практике синтетической органической химии, так и в производственной химии, включая её экологический аспект.

Ключевые слова: межфазный катализ, полициклические арены, кинетика, нитрование, окислы азота, утилизация окислов азота.

Введение. Межфазный катализ открывает возможности для мягкого проведения химических реакций, более полного использования реагентов, получения более чистых продуктов, снижения потерь.

Обзор ранних работ в области межфазного катализа при электрофильном замещении приведен в монографии [1], а также в работах [2, 3]. В последующие годы в нашей лаборатории разработаны и испытаны [4] новые условия проведения важных реакций ароматического электрофильного замещения. Был предложен отличающийся существенной новизной и эффективностью способ использования нуклеофильных межфазных катализаторов в получении некоторых высокочистых индивидуальных полициклических компонентов из фракций каменноугольной смолы коксохимических заводов.

Особое место среди исследованных процессов занимает важнейшая для органической химии реакция нитрования ароматических соединений, которая была изучена нами наиболее подробно [5-8]. Эта кислотно-катализируемая реакция может быть проведена несколькими значительно отличающимися между собой способами: (1) *нитритно-иницируемое нитрование* в системах неполярный или малополярный органический растворитель – разбавленная водная азотная кислота – нитрит натрия как инициатор в микроколичествах, запускающих реакцию; (2) *нитритное нитрование* для систем органический растворитель – водная серная кислота – нитрит натрия как реагент; (3) *процесс с использованием газообразного нитрующего реагента – окислов азота (II) и (IV)* в системах с органическим растворителем, водно-сернохлорной фазой или без таковой; (4) найденный в последнее время *вариант проведения реакции в системе, использующей в качестве полярной фазы водосодержащую фосфорную кислоту*.

Перечисленные способы межфазно-каталитического нитрования были апробированы на целом ряде полициклических аренов – бифениле, нафталине, 1- и 2-метилнафталинах, 1,3- и 2,6-диметилнафталинах, флуорене, фенантрене, флуорантене, аценафтене, пирене, антраcene. В большинстве случаев показана высокая эффективность нитрования. Идентифицированы продукты реакции. Индивидуальные нитросоединения из полициклических углеводородов коксохимического производства как уникального и незаменимого их источника представляют интерес для органического синтеза, дальнейшей переработки в фармпрепараты, красители, средства защиты растений, специфические реагенты химии и т.п.

А процесс (3), использующий окислы азота (II) и (IV) как реагент из газовой фазы (ГФ), может явиться [7] полезным способом утилизации массивов вредных выбросов в атмосферу с получением ценных индивидуальных нитропродуктов. Для оформления производственного процесса утилизации окислов азота посредством межфазного нитрования достаточно иметь простой аппарат барботажного типа, возможно, иногда и без размешивания.

Исследование механизма и макрокинетики описанных процессов показало их глубокую общность. Основную роль в этих превращениях играет лимитирующий реакцию поток реагента из кислотной фазы в органическую (ОФ). Макрокинетические факторы (диффузия, размешивание) оказываются несущественными для нитрования исследованных углеводородов, если не иметь в виду самые активные из них, к которым можно отнести антрацен и пирен. Последние два арена (иногда и аценафтен), кроме того, способны реагировать в отсутствие кислотной фазы, просто в органическом растворителе.

Постановка задачи. В плане развития найденных методов межфазно-каталитического нитрования оставался невыясненным вопрос влияния природы полярной (кислотной) фазы. Поэтому в настоящей работе исследуются системы с водными растворами серной, соляной и фосфорной кислот при близких величинах кислотностей Гаммета (H_0).

Экспериментальная часть. Исследования проводили в двуполостном стеклянном сосуде. В одной полости генерировались окислы азота добавлением нитрита в 45%-ную серную кислоту. Более

крепкая кислота не использовалась, чтобы избежать потерь реагента вследствие образования нитрозилсерной кислоты. Другая полость сосуда служила собственно реактором, в который помещались раствор аценафтена в хлорбензоле и водная кислота в объёмном соотношении 2:1. Реакционная масса перемешивалась с помощью магнитной мешалки. Начальные скорости нитрования аценафтена определялись по убыли субстрата с использованием метода ГЖХ [5], в качестве внутреннего стандарта применяли нормальный алкан C₁₇H₃₆, который добавляли в исходную реакционную массу. Точность анализа проверяли по стандартным смесям.

Анализ результатов. Полученные данные, приведенные в таблице 1, показывают, что при близких кислотностях Н₀ водных серной и ортофосфорной кислот (см. опыт 1 и опыт 2) начальная скорость нитрования аценафтена во втором случае выше в 16 раз. Применение фосфорной кислоты, помимо того, благоприятно в производстве с точки зрения ингибирования коррозионных процессов в аппаратах из чёрных металлов.

Таблица 1
Влияние природы кислоты на скорость межфазного нитрования аценафтена окислами азота в системе хлорбензол – водная кислота – ГФ

Опыт	Кислота	Концентрация кислоты, %	Н ₀	[C ₁₂ H ₁₀] ₀ , М (в ОФ)	$\frac{[NO+NO_2]}{[C_{12}H_{10}]}$	Начальная скорость, мМ·мин ⁻¹
1	H ₂ SO ₄	44,6	-2,84	0,337	3,0	8,4
2	H ₃ PO ₄	78,0	-2,88	0,341	3,0	136
3	HCl	24,7	-2,70	0,336	3,0	0,7

Для производства более удобным может оказаться применение в таком процессе водно-азотнокислой системы. Этот вариант имеет свои преимущества. В силу установленной идентичности механизмов нитрования аренов окислами азота из газовой фазы и нитритом, добавляемым в реакционную массу, результаты, представленные на рис. 1 свидетельствуют, что замена сернокислотной фазы на азотнокислую при прочих равных условиях должна приводить к ускорению нитрования аценафтена окислами азота ориентировочно в 40÷50 раз (зависимости 1 и 2а). В пользу этого довода имеются основания и теоретического характера. Здесь надо иметь в виду стадии, предшествующие нитрованию, их цепной механизм, вытекающий из окислительных свойств водной азотной кислоты в отличие от серной [7].

В отличие от азотной, использование серной кислоты [7, 8] требует существенных избытков реагента при равной эффективности процесса. Таким образом, применение различных разбавленных водой кислот расширяет возможности приложения метода.

Теоретические аспекты описанных процессов межфазно-каталитического нитрования заслуживают дополнительного более глубокого исследования. Например, экспериментальные результаты, приводимые в табл. 1, могут быть объяснены только предварительно. Сильная дезактивация процесса солянокислой средой, возможно, обусловлена связыванием активной частицы – катиона нитрозония в неактивный хлористый нитрозил:



в котором, как известно, связь N–Cl ковалентна, и равновесие его гидролиза с образованием активной формы в значительной мере смещено влево:



Высокая эффективность нитрования с использованием фосфорнокислой среды, по сравнению с сернокислотной, может быть обусловлена тем, что активный нитрозоний в сернокислотном растворе связывается в молекуле нитрозилсерной кислоты:



Хотя эффективное связывание обычно наблюдалось в 55-60% -ной и более крепкой серной кислоте, в разбавленных средах роль может играть образование ионных пар низкой энергии между нитрозонием и анионом водород сульфата. С другой стороны, известная высокая способность серной кислоты к электрофильной сольватации, несомненно, превосходит таковую фосфорной кислоты. Фактор электрофильной сольватации в исходном состоянии реагентов может распространяться как на нуклеофильный ароматический субстрат, так и на активную форму нитрования, если это гидратные формы, например, H₂O·NO⁺, (H₂O)₂·NO⁺.

Другие важные аспекты механизма реакции здесь не рассматриваются. Нужно только отметить, что пока остаётся не выясненной роль направления реакции с нитрованием через нитрозирование. В условиях проведённых исследований пока никаких свидетельств данного потока реакции не обнаружено.

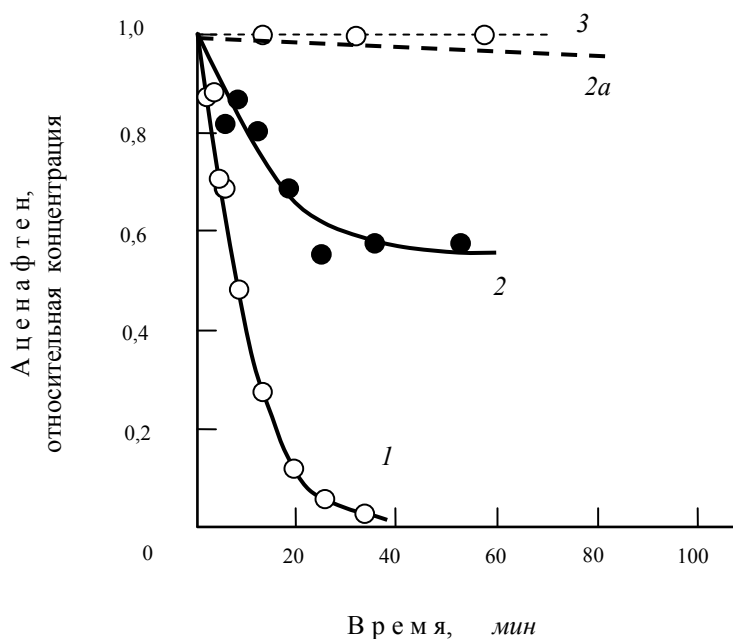


Рис. 1 Кинетические зависимости некаталитического (3) и каталитического (1, 2, 2a, – концентрации катализатора одинаковы) нитрования ацетонафта для сопоставимых условий в системах бензол – водная азотная или серная кислоты. Реагент (или инициатор) – NaNO_2 . 1 – в системе бензол – 21,3 %-ная азотная кислота, NaNO_2 / субстрат = 0,13; 2 – в системе бензол – 25,6 %-ная серная кислота, NaNO_2 / субстрат = 2,0; 2a – расчётная кинетическая кривая для системы бензол – 25,6 %-ная серная кислота и отношения NaNO_2 / субстрат 0,13; 3 – некаталитическая зависимость для систем 1 и 2.

Нерешённой до настоящего времени остаётся проблема разработки высокоэффективных и доступных катализаторов межфазных электрофильных реакций. С межфазными катализаторами нуклеофильных процессов проблема была решена ранее: их производили в Украине. Эти катализаторы показали высокую эффективность в процессах разделения антраценовой фракции, позволивших с почти количественными выходами получить высокочистые антрацен, карбазол, фенантрен.

Выводы. Таким образом, широкая перспектива практического использования полициклических ароматических соединений в новых технологиях, их ресурсы в коксохимической каменноугольной смоле, отработанность современных квалифицированных методов их выделения и переработки дают основание считать весьма целесообразным дальнейшее развитие этого важного направления, как в теоретическом, так и в экспериментальном отношении.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто задачі трансфазного каталізу в області реакцій електрофільних реагентів з поліциклическими аренами. Показано різні способи проведення важливішої для органічної хімії реакції нітрування в умовах трансфазного каталізу. Досліджено вплив природи кислотної фази в процесі нітрування оксидами азоту. Методи дослідження – ГРХ. Обґрунтовано доречність практичного застосування запропонованих авторами розробок. Досліджені процеси можуть і повинні знайти застосування як в практиці синтетичної органічної хімії, так і в виробничій хімії, включно з її екологічним аспектом.

Ключеві слова: трансфазний катализ, поліциклическі ацени, кінетика, нітрування, оксиди азоту, утилізація оксидів азоту.

SUMMARY

Phase transfer catalysis problems in the field of reactions of electrophilic reagents with polycyclic arenes has been considered. Different ways to accomplish the most important for organic chemistry nitration reaction under phase transfer catalysis show. The influence of acid phase nature in process of nitration with nitrogen oxides was studied. The research methods – GLC. The expedience of practical application of the proposed by the authors developments justifies. The studied processes can and should find application in practice of synthetic organic chemistry and in industrial chemistry, including its environmental dimension.

Keywords: Phase transfer catalysis, polycyclic arenes, kinetics, nitration, nitrogen oxides, nitrogen oxides utilization.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Гольдберг Ю. Ш. Избранные главы межфазного катализа / Ю. Ш. Гольдберг. – Рига: Зинатне, 1989. – 554 с.
2. Ichikawa J. Fluorinated tetraarylborates as anionic phase-transfer catalysts an example of molecular design of functional fluoroaromatics / J. Ichikawa, H. Kobayashi, T. Sonoda // Rep. Inst. Advanced Material Study. – 1988. – Vol. 2, N 1. – P. 189-207.
3. Ichikawa J. Anionic Phase-Transfer Catalysis with TFPB Ion / J. Ichikawa, H. Kobayashi, T. Sonoda // J. Synt. Org. Chem. Jpn. – 1988. – Vol. 46. – P. 943-954.
4. Качурин О. И. Phase transfer catalysis in reactions of electrophilic aromatic substitution / О. И. Качурин., А. П. Зарайский, Л. И. Величко, et al. // Russian Chemical Bulletin. – 1995. – Vol. 44, N 10. – P. 1815-1821.
5. Качурин О. И. Межфазный катализ в реакциях электрофильного замещения. IV. Реакционная способность аренов в условиях катализируемого межфазного нитрования / О. И. Качурин, Л. И. Величко, А. П. Зарайский // Журн. орган. химии. – 1995. – Т. 31, вып. 5. – С.705-710.
6. Зарайский А. П. Межфазный катализ в реакциях электрофильного замещения. VIII. Межфазно-каталитическое нитрование аренов нитритом натрия в кислой среде / А. П. Зарайский, О. И. Качурин, Л. И. Величко и др. // Журн. орган. химии. – 1999. – Т. 35, вып. 7. – С. 1063-1067.
7. Зарайський А. П. Трансфазно-каталітичне нітрування ароматичних сполук нітритною кислотою та оксидами азоту / А. П. Зарайський, О. І. Качурін, Н. О. Зарайська та ін. // Вісник Донецького ун-ту, Сер. А: Природничі науки. – 2001. – Вип. 2. – С. 231-234.
8. Зарайский А. П. Межфазный катализ в реакциях электрофильного замещения. IX. Кинетика и механизм межфазно-каталитического нитрования полициклических аренов в системе бензол – водная серная кислота – нитрит натрия / А. П. Зарайский, О. И. Качурин, Л. И. Величко и др. // Журн. орган. химии. – 2003. – Т. 39, вып. 11. – С. 1646-1650.

Поступила в редакцию 16.04.2010 г.

РАЗДЕЛЕНИЕ ИОНОВ МЕДИ И ЦИНКА В КИСЛЫХ СУЛЬФАТНЫХ РАСТВОРАХ

*В. В. Даценко**Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, г. Харьков*

Разработан способ регенерации отработанных травильных растворов α -латуней. Способ включает разделения ионов меди и цинка в кислых сульфатных растворах методом кристаллизации. Показано, что наиболее полное разделение ионов меди и цинка достигается при высаливании только сульфатной кислотой H_2SO_4 .

Ключевые слова: ионы меди, ионы цинка, регенерация, кристаллизация.

Введение. В процессе травления изделий из латуней в травильном растворе накапливаются соли меди и цинка. На практике для размерного травления используют хлоридные травильные растворы; для электрохимического травления – сульфатные травильные растворы. Когда критические концентрации в травильном растворе составляют, г/л: $C_{Zn^{2+}} = 30-40$, $C_{Cu^{2+}} = 10-15$, скорость травления латуней значительно замедляется. Поэтому отработанные травильные растворы обычно сбрасываются в промышленную канализацию, что приводит к потере большого количества цветных металлов и загрязнению окружающей среды. По данным экологических служб сброс меди и цинка с отработанными травильными растворами превышает предельно допустимые санитарные нормы в 8-10 раз, а в отдельных случаях в 40-50 раз [1]. Практика показала целесообразность проведения технологических операций, которые предполагают возвращение ценных компонентов производства или их утилизацию в виде вторичных товарных продуктов. Поэтому разработка эффективных экономичных и малоотходных способов регенерации травильных растворов, а так же извлечение из них металлов остается актуальной и в настоящее время. Разработанные и действующие в настоящее время технологические процессы регенерации травильных растворов после травления медных сплавов не являются надежными и имеют существенные недостатки. В литературе известны основные способы регенерации травильных растворов [2]: вытеснение металлов (цементация); осаждение; электролиз; кристаллизация при различных условиях: высаливание, криоосаждение. Применение этих способов в производственных условиях бесперспективно и нерентабельно. Цементация требует большого расхода более активного металла и затрат для обработки образовавшегося после контактного выделения шлама или раствора [3]. Метод регенерации осаждением очень трудоемкий и требует больших производственных помещений. Регенерация электролизом имеет достаточно высокие показатели по извлечению меди (90-92%), но извлечение цинка этим методом невозможно. Кроме того метод электролиза требует сложного технологического оборудования и больших затрат электричества [2, 4].

Наиболее эффективным и перспективным является метод кристаллизации. Данный метод прост в исполнении, не требует сложного технологического оборудования. Кристаллизацию можно проводить выпариванием, охлаждением раствора, высаливанием, осаждением или экстракцией. В работе [2] рассмотрена регенерация травильных растворов латуней кристаллизацией, она основана на ограниченной растворимости сульфатов меди и цинка в водном растворе сульфатной кислоты. Если путем выпаривания увеличить концентрацию солей меди и цинка в растворе, то по достижении некоторой критической величины концентрации начинается кристаллизация. В работе [5, 6] рассмотрен способ кристаллизации высаливанием, который заключается в добавлении к раствору вещества, понижающего растворимость выделяемой соли, что вызывает пересыщение раствора и его кристаллизацию. Вещества, добавляемые в раствор, обычно имеют одинаковый ион с кристаллизующей солью.

Введение органических растворителей в водные растворы неорганических солей [7] увеличивает эффективность процесса кристаллизации, обеспечивая высокую степень извлечения соли из раствора и возможность получения продукта в чистом виде. Недостатком этого способа является сравнительно высокая стоимость органических растворителей, регенерация которых требует проведения дополнительных операций (например, ректификации и дистилляции) и связана с некоторой потерей реагента.

Цель работы заключается в разработке способа регенерации отработанного раствора электрохимического травления α -латуни. В связи с этим были определены задачи исследования, которые заключались в изучении процесса регенерации кристаллизацией отработанного травильного раствора α -латуни и оптимизации параметров всех его стадий.

Экспериментальная часть и анализ результатов. Контроль содержания ионов меди и цинка в растворе после регенерации проводили на атомно-абсорбционном спектрофотометре «Сатурн» при длине волны $\lambda = 328,1$ нм; щель = 0,1 нм; $J = 10$ мА.

Рентгенофазовый анализ образца осадка, полученного в результате кристаллизации, выполнен на порошковом дифрактометре Siemens D500 в медном излучении с графитовым монохроматором. Полнопрофильная дифрактограмма измерена с шагом 0,02° и временем накопления 60 секунд. Для учета инст-

рументальної функції профіля використовувалась рентгенограма гексаборида лантана, отримана в ідентичних умовах, що необхідно для розрахунок мікроструктурних характеристик уточнюваних фаз (середній розмір кристалітів і наявність мікрореформацій). Первичний пошук фаз виконаний по картоці PDF-1 [8], після чого проводився розрахунок рентгенограм по методу Ритвельда з використанням програми FullProf. Окончателна ідентифікація фаз здійснювалась шляхом порівняння теоретично розрахованих рентгенограм на основі структурних даних і наступними розрахунками по методу Ритвельда.

Морфологічні особливості осаду вивчені по методу електронно-зондового мікроаналізу (EPMA) на скануючому електронному мікроскопі JSM-6390 LV з системою рентгеновського мікроаналізу INCA [9, 10]. Відхилення в визначенні масових часток елементів становили 1,5-8,5 %. Збільшення поверхності зразків знаходилося в межах 100-2000.

Предлагаемый способ регенерации кристаллизацией отработанного травильного раствора латуни обеспечивает снижение концентрации ионов меди в травильном растворе и преобладающее выпадение соединений меди в осадок, что позволяет на следующей стадии электрохимически выделить из раствора цинк и остаточное количество меди до норм технологического процесса и вернуть сульфатсодержащий раствор в технологический цикл процесса электрохимического травления α-латуни.

Известно, что растворимость медного купороса меньше растворимости цинкового купороса в интервале температур 0-80 °С (табл. 1) [11]. При этом с понижением температуры уменьшается и растворимость этих солей в растворе. Следовательно, при охлаждении насыщенного раствора будет протекать кристаллизация меди (II) сульфата.

Таблица 1

Зависимость растворимости соединений меди и цинка от температуры

Вещество	Растворимость на 100 г раствора при температуре						
	0 °С	10 °С	20 °С	30 °С	40 °С	60 °С	80 °С
CuSO ₄	14,3	17,4	20,0	24,4	28,7	39,5	55,5
ZnSO ₄	41,8	47,5	54,1	62,1	70,4	74,8	67,2

Растворимость медного и цинкового купоросов сильно зависит от содержания в растворе сульфатной кислоты, причем с увеличением ее концентрации растворимость солей меди и цинка уменьшается. Эти свойства солей меди и цинка были использованы для их разделения в процессе высаливания.

В ходе работы определены основные стадии способа регенерации травильного раствора латуни (рис. 1):

- разделение ионов меди и цинка в регенерируемом растворе кристаллизацией путем высаливания и охлаждения;
- разделение осадка и фильтрата;
- электрохимическое выделение цинка и остаточного количества ионов меди из фильтрата;
- возвращение в технологический процесс электрохимического травления латуни фильтрата, содержащего сульфат-ионы;
- использование на производстве в качестве медного купороса осадка, содержащего ионы меди с небольшой примесью ионов цинка.

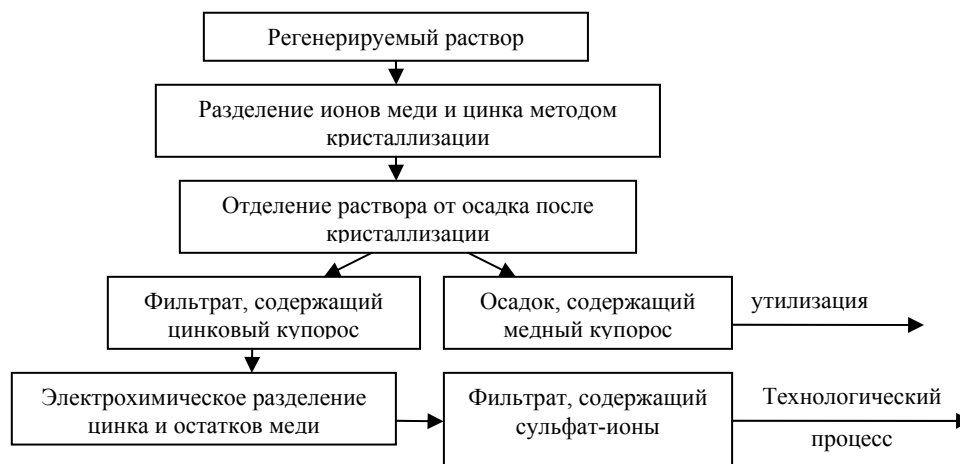


Рис. 1. Схема разделения меди и цинка методом кристаллизации

Для регенерации отработанных травильных растворов выбран метод кристаллизации, основанный на высаливании соединений меди сульфатной кислотой и натрий сульфатом с одновременным охлажде-

нием раствора. Общая концентрация вводимых сульфат-ионов в высаливающийся раствор не превышала 288 г/л. Кристаллизацию проводили в модельных растворах с концентрацией ионов меди и цинка, соответственно, г/л: $C_{Zn^{2+}} = 67,2-77,0$; $C_{Cu^{2+}} = 25,8-25,85$. Согласно первоначальным экспериментальным данным (табл. 2, эксперимент I) более полное разделение ионов меди и цинка наблюдается при совместном добавлении сульфатной кислоты и натрия сульфата при трехкратном превышении концентрации сульфатной кислоты над сульфатом натрия (опыт 3). Усиление высаливания сульфата меди достигали путем охлаждения регенерируемого раствора до температуры $+5,0^{\circ}C$ в течение 5 суток.

Для определения оптимального соотношения количеств натрия сульфата и сульфатной кислоты в высаливающем растворе на стадии кристаллизации проведен эксперимент II (табл. 2). Из его результатов видно, что 5-кратное снижение концентрации меди в фильтрате при постоянной концентрации ионов цинка наблюдается при всех соотношениях $Na_2SO_4:H_2SO_4 = 1:4$ (и более). Однако только в случае опыта 6 концентрация ионов меди в осадке достаточно высока.

Таблица 2

Результаты проведения регенерации отработанных травильных растворов методом кристаллизации при добавлении раствора с избытком сульфат-ионов

№ опыта	Соотношение добавляемых реагентов $Na_2SO_4 : H_2SO_4$		Концентрации ионов металлов, г/л			
			в фильтрате		в осадке	
	Na_2SO_4	H_2SO_4	Cu^{2+}	Zn^{2+}	Cu^{2+}	Zn^{2+}
Эксперимент I						
Высаливание модельного раствора с концентрацией ионов Cu^{2+} и Zn^{2+} , г/л: 25,8; 67,2						
1	1	1	5,7	31,0	14,29	28,5
2	1	2	5,7	40,5	11,43	20,5
3	1	3	5,7	48,0	13,57	12,1
4	2	1	7,1	21,4	15,71	31,5
Эксперимент II						
Высаливание модельного раствора с концентрацией ионов Cu^{2+} и Zn^{2+} , г/л: 25,85; 77,0						
1	1	-	Полное высаливание при отсутствии фильтрата			
2	1	4,0	15,85	75,0	10,0	4,0
3	1	4,3	13,75	73,5	11,25	3,5
4	1	4,5	14,15	70,0	11,65	3,5
5	1	4,7	15,00	75,0	11,25	3,5
6	-	1	13,35	74,0	25,85	12,5
Эксперимент III						
Высаливание модельного раствора с концентрацией ионов Cu^{2+} и Zn^{2+} , г/л: 27,7; 76,0						
1	-	1	14,6	76,0	26,6	9,5

Для получения подтверждения и более детального изучения опыта 6 проведен аналогичный эксперимент при других начальных концентрациях ионов Cu^{2+} и Zn^{2+} (эксперимент III, табл. 2). Контроль содержания разделяемых высаливанием компонентов проводили по материальному балансу компонентов, распределяющихся в жидких и твердых фазах, по формуле

$$V_{исх} \cdot C_{исх} = V_{ф} \cdot C_{ф} + m_{ос},$$

где

$V_{исх}$ – объем исходного раствора, л;

$C_{исх}$ – концентрация компонента (Cu или Zn) в исходном растворе, г/л;

$V_{ф}$ – объем фильтрата после кристаллизации, л;

$C_{ф}$ – концентрация компонента (Cu или Zn) в фильтрате после кристаллизации, г/л;

$m_{ос}$ – содержание компонента (Cu или Zn) в осадке после кристаллизации, г.

Согласно материальному балансу расхождения в содержании меди не превышали 2-12%, цинка – 0,1-10%. Фильтрат, полученный после отделения осадка, подвергается электролизу, в ходе которого удаляются остаточные количества меди из фильтрата и катодно осаждают цинк. Образующийся в результате электролиза сульфатсодержащий электролит может быть вновь использован в качестве травильного раствора электрохимического травления α -латуни.

Для установления состава и структуры полученного в результате кристаллизации осадка, проведены рентгенофазовый анализ и электронно-зондовый микроанализ. Результат рентгенограммы уточнен по методу Ритвельда и приведен рис. 2. Согласно результатам рентгенофазового анализа исследованный образец является неоднородным. При растирании в ступке из образца выделялась жидкость, которую

удаляли фильтровальной бумагой. Полученный таким образом порошок является довольно гидрофильным, окончательное высыхание его происходило во время съемки.

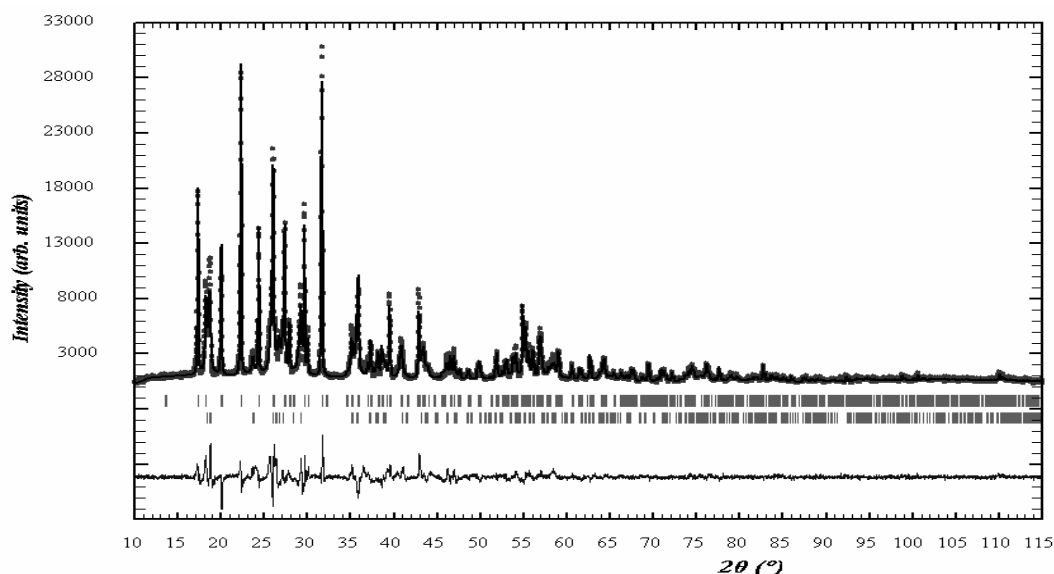


Рис. 2. Результаты уточнения рентгенограммы образца осадка (эксперимент III, табл. 2)

При этом фазовый состав образца незначительно изменялся, что было заметно по появлению слабых диффузных линий и изменению интенсивностей отражений на промежуточных рентгенограммах, которые по окончании съемки были просуммированы, затем суммарная рентгенограмма была использована для расчетов по методу Ритвельда. Основными компонентами в исходном образце являются $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (карт. 22-249, Bonattite [12]) и $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (карт. 33-1476, Gunningite [13]). Структура этих соединений показана на рис. 3, 4.

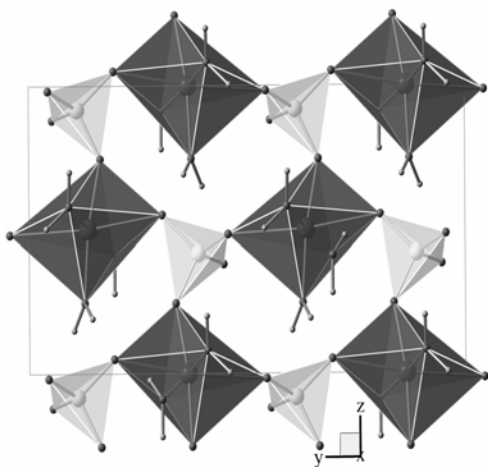


Рис. 3. Структура $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ по данным работы [12] (моноклинный, пр. гр. Cc, $a = 5,592$, $b = 13,029$, $c = 7,341$ Å, $\beta = 97,05^\circ$)

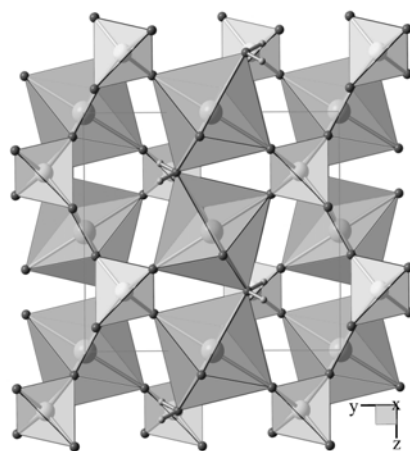


Рис. 4. Структура $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ по данным работы [13] (моноклинный, пр. гр. Cc, $a = 6,925$, $b = 7,591$, $c = 7,635$ Å, $\beta = 118,19^\circ$)

Содержание фаз по результатам уточнения по методу Ритвельда: $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ – 61(2) вес.%, $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ – 39(1) вес.%. Нанокристалличности этих фаз при уточнении не выявлено. Размер кристаллитов для фазы $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ превышает 500 нм, тогда как фаза $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ характеризуется средним размером кристаллитов 108 нм и заметными микронапряжениями в решетке (0,5% деформированных ячеек). Повторная экспрессная съемка высушенного в кювете образца показала, что в результате высыхания в нем появляется заметное количество $\text{CuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (карт. 21-0269, [12]). Поскольку фаза $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ не выявляет тенденций к разрушению, можно предположить, что моногидрат сульфата меди получается не из нее, а изначально содержится в растворе, находящемся в невысохшем образце.

В пересчете на содержание меди и цинка в кристаллогидратах $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ и $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$: Cu – 18,24%, Zn – 14,16%. Элементный состав образца осадка согласно электронно-зондовому микроанализу составляет, %: Cu – 32,8; Zn – 5,4; O – 40,9; S – 20,9. Результаты рентгенофазового, электронно-зондового анализов и расчетные данные приведены в табл. 3.

Таблиця 3

Результати рентгенофазового і електронно-зондового аналізів зразка осаду (експеримент III, табл. 2)

Експериментальні результати				Розрахункові результати			
Рентгенофазовий аналіз		Електронно-зондовий мікроаналіз		Содержание металлов в кристаллическом состоянии вещества, %		Суммарное содержание минералов в кристаллическом и аморфном состояниях вещества, %	
Минералогический состав, %		Элементный состав, %		Cu	Zn	CuSO ₄ ·3H ₂ O	ZnSO ₄ ·H ₂ O
CuSO ₄ ·3H ₂ O	ZnSO ₄ ·H ₂ O	Cu	Zn	Cu	Zn	CuSO ₄ ·3H ₂ O	ZnSO ₄ ·H ₂ O
61	39	32,8	5,4	18,2	14,2	100,0	14,9

Такое расхождение результатов рентгенофазового и электронно-зондового анализов состава зразка осаду можно объяснить частичным образованием веществ в аморфном состоянии. В кристаллическом состоянии вещества превышение содержания (%) меди над цинком составляет 1,28 раз, превышение содержания (%) минерала CuSO₄·3H₂O над ZnSO₄·H₂O – 1,56 раз. Электронно-зондовый микроанализ показывает суммарное содержание элементов в кристаллическом и аморфном состояниях вещества. Превышение суммарного содержания меди над цинком – 6,1 раз; превышение содержания CuSO₄·3H₂O над ZnSO₄·H₂O – 6,7 раз. Таким образом, можно сделать вывод, что соединение CuSO₄·3H₂O первоначально осаждается в аморфном состоянии. Во времени возможна его кристаллизация. Соединение ZnSO₄·H₂O сразу осаждается в кристаллическом состоянии.

Морфологические особенности поверхности зразка осаду (експеримент III, табл. 2) изучены на РЭМ-100У (рис. 5).

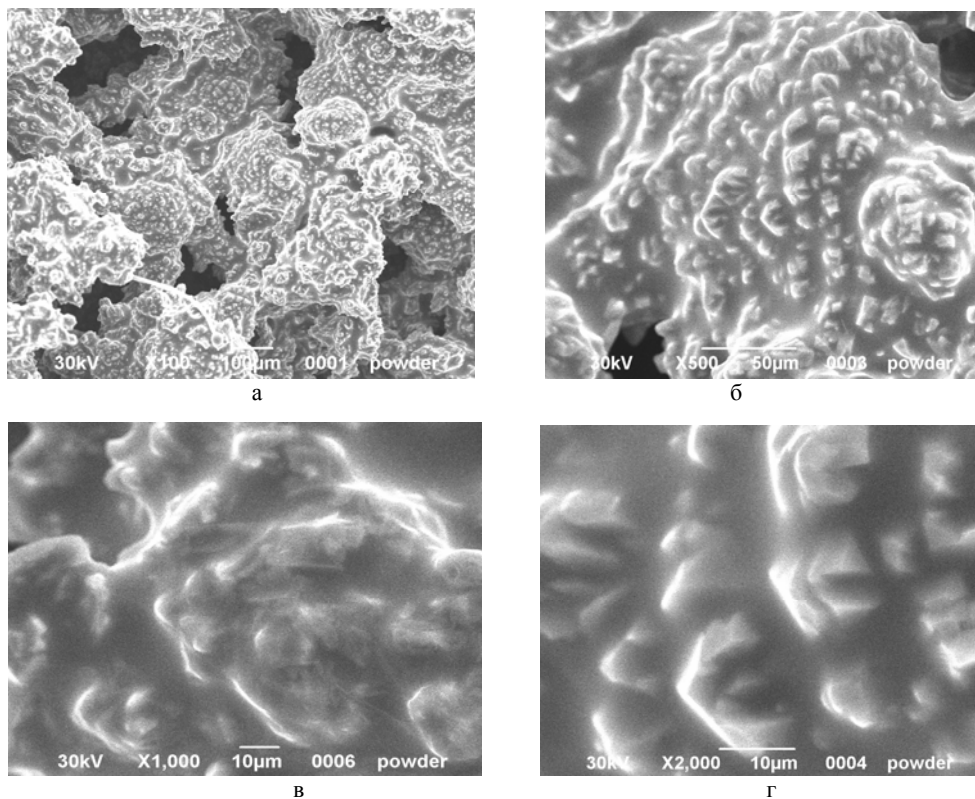


Рис. 5. Микрофотографии поверхности осаду (експеримент III, табл. 2) (увеличение в пределах 100-2000)

Как видно на микрофотографиях (рис. 5) осаду рыхлый, пористый, с пустотами. На фотографиях 5, в, г видно присутствие стеклообразного состояния вещества.

Выводы. В результате проведенных исследований процесса разделения ионов меди и цинка методом кристаллизации, установлено существенное влияние концентраций высаливающих компонентов раствора на полноту кристаллизации соединений меди из раствора. Оптимизация соотношений осадителей Na₂SO₄ и H₂SO₄ может обеспечить разделение ионов меди и цинка между жидкой и твердой фазами. Наиболее полное разделение ионов меди и цинка достигается при высаливании только сульфатной кислотой H₂SO₄. Показано, что сульфат меди первоначально осаждается в аморфном состоянии, а сульфат цинка – в кристаллическом.

РЕЗЮМЕ

Розроблено спосіб регенерації відпрацьованих травильних розчинів α -латуней. Спосіб включає розподіл іонів міді і цинку в кислих сульфатних розчинах методом кристалізації. Показано, що якнайповніше розподіл іонів міді і цинку досягається при висолюванні тільки сульфатною кислотою H_2SO_4 .

Ключові слова: іони міді, іони цинку, регенерація, кристалізація.

SUMMARY

The method of regeneration of exhaust etchanting solutions for brass was developed. The method includes the division of copper and zinc ions in acid sulfate solutions by crystallization method. It was shown that the most complete division of copper and zinc ions is achieved during a salting-out process by sulfate acid H_2SO_4 only.

Keywords: copper ions, zinc ions, regeneration, crystallization.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Вредные химические вещества. Неорганические соединения I–IV группы. Справ. изд. / Под ред. В. А. Филова. – Л.: Химия, 1989. – 592 с.
2. Гопиус А. Е. Травление латуней и методы регенерации травильных растворов / А. Е. Гопиус, Г. С. Постников. – М.: Центральный институт информации цветной металлургии, 1962. – 51 с.
3. Наумов В. И. Утилизация шламов гальванических производств. / Ю. И. Наумов, А. Л. Галкин, Т. В. Сазонтьева // Гальванотехника и обработка поверхности. – 2009. – № 3. – С. 36-40.
4. Кругликов С. С. Регенерация раствора травления меди в производстве печатных плат методом мембранного электролиза / С. С. Кругликов, Д. Ю. Тураев, А. М. Бузикова // Гальванотехника и обработка поверхности. – 2009. – № 1. – С. 40-48.
5. Хамский Е. В. Кристаллизация в химической промышленности / Е. В. Хамский. – М.: Химия, 1979. – 343 с.
6. Матусевич Л. Н. Кристаллизация из растворов в химической промышленности / Л. Н. Матусевич. – М.: Химия, 1968. – 304 с.
7. Пат. 2029790 Российская Федерация, МПК⁷ C22B3/38, C22B15/00, C22B19/00. Способ разделения меди и цинка в слабокислых растворах / Смирнов В. Ф.; Буров В. И.; Чечулин В. И.; заявитель и патентообладатель Научно-производственный кооператив "Доминион". – № 5066982/02; заяв. 08.07.1992; опубл. 27.02.1995.
8. JCPDS PDF-1 File. International Committee for Diffraction Data, release 1994. PA, USA.
9. Гоулдстейн Д. Практическая растровая микроскопия / Д. Гоулдстейн, Х. Яковиц. – М.: Мир, 1978. – 656 с.
10. Электронно-зондовый микроанализ / Под ред. И. Б. Боровского. – М.: Мир, 1974. – 260 с.
11. Никольский Б. П. Справочник химика. – М.-Л.: Химия, 1964. – Т. 3. – 1006 с.
12. Zahrobsky R. F. On the crystal chemistry of salt hydrates. V. The determination of the crystal structure of $CuSO_4(H_2O)_3$ (Bonattite) / R. Zahrobsky, W. Baur // Acta Crystallographica. – 1968. – Vol. 24. – P. 508-513.
13. Wildner M. The crystal structures of kieserite-type compounds. I. Crystal structures of $Me^{(II)}SO_4 \cdot H_2O$ ($Me=Mn, Fe, Co, Ni, Zn$). Neues Jahrbuch für Mineralogie / M. Wildner, G. Giester // Monatshefte. – 1991. – Vol. 7. – P. 296-306.

Поступила в редакцию 07.05.2010 г.

**ВИДІЛЕННЯ ТА ВИЗНАЧЕННЯ СУМИ РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ
У ЛЮМІНОФОРАХ КОМПЮТЕРНИХ МОНІТОРІВ***О. В. Добридин, А. П. Долгих*

Запропоновано новий спосіб триполіфосфатно-карбонатного вилучення суми рідкісноземельних елементів, оптимізовано шляхи та умови отримання аналітичної спектрофотометричної форми. Досліджено селективність запропонованого способу осаджувального вилучення і показано, що на результати не впливають 100-кратні кількості таких елементів, як Ca(II), Mg(II), Sr(II), Cu(II), Co(II), Ni(II), Cr(III), Mo(VI), V(V) при використанні фотометричного реагенту арсеназо I.

Ключові слова: сума рідкісноземельних елементів (РЗЕ), люмінофори, триполіфосфатні комплекси РЗЕ, фотометричне визначення суми РЗЕ, відходи електроніки.

Вступ. Рідкісноземельні елементи (РЗЕ) широко застосовуються у виробництві різноманітних люмінофорів, мікросхем та інших матеріалів для сучасної електроніки. Модернізація електроніки нині відбувається швидкими темпами, що призводить до утворення великої кількості відходів із складною матрицею.

Відходи електронної промисловості є складними багатокомпонентними системами, у яких в значних кількостях можуть міститися РЗЕ [1]. В Україні більшість таких відходів ніхто не переробляє і вони залишаються на звалищах. Розробка нових недорогих і малостадійних методик вилучення та проведення кількісного аналізу на вміст суми РЗЕ дозволила б здійснювати контроль вмісту цих елементів у відходах електроніки і, спираючись на ці дані, розробляти технології їх переробки з виділенням цінних матеріалів.

Основні вимоги до методики визначення – вона повинна бути достатньо простою, не чутливою до можливої зміни матриці відходів електроніки, мати низьку собівартість. Цим вимогам у повній мірі відповідає спектрофотометричний метод визначення суми РЗЕ. Головним недоліком цього методу є його недостатня селективність [2]. Матричні елементи можуть генерувати, або пригнічувати аналітичний сигнал РЗЕ при спектрофотометричному визначенні. Внаслідок цього необхідні нові підходи до розробки методів селективного та повного відділення суми РЗЕ, які б оптимально сполучалися з наступним спектрофотометричним визначенням.

Метою роботи є дослідження специфічного методу виділення суми РЗЕ із багатокомпонентних розчинів люмінофорів з використанням сильного комплексоутворювача – триполіфосфату натрію і розробка на цій основі експресної та малостадійної фотометричної методики визначення суми РЗЕ, яка нечутлива до зміни матриці відходів електроніки.

Експериментальна частина. Всі реактиви використані в роботі були кваліфікації не нижче «ч.д.а». Для приготування штучної суміші суми РЗЕ готували розчини рідкісноземельних елементів з концентрацією $C(Ln^{3+})$ приблизно 1 г/л. Розчини Y(III), Sm(III), Eu(III), Er(III), Yb(III) готували розчиненням при нагріванні відповідних оксидів в азотній кислоті. Розчини Ce(III), Pr(III), Gd(III), Nd(III), Tb(III), Dy(III), Ho(III), La(III) готували розчиненням відповідних нітратних солей у слабкому розчині азотної кислоти для запобігання гідролізу. Розчини Tm(III) та Lu(III) готували розчиненням відповідних сульфатних солей у дистильованій воді, підкисленої сірчаною кислотою. Штучну суміш готували змішуванням рівних об'ємів всіх вищезгаданих розчинів. Точну концентрацію суми РЗЕ в штучній суміші встановлювали комплексонометричним титруванням [3]. Концентрацію отриманого розчину виражали у вигляді вмісту суми оксидів (Ln_2O_3). При розрахунках використовували середню молярну масу всіх вищезазначених РЗЕ [4].

Стандартні розчини елементів, які є супутніми РЗЕ у відходах електронної промисловості Co(II), Mo(V), Cu(II), Ca(II), V(V), Mg(II), Ni(II), Sr(II), Cr(III), з концентрацією 1,000 мг/мл готували за ГОСТ 4212-76. Розчин арсеназо I та арсеназо III (0,05%) готували з кристалічних препаратів розчиненням у воді. Фотометричне визначення суми оксидів РЗЕ виконували на фотоелектроколориметрі КФК-2 з арсеназо I та арсеназо III за відомими методиками [4, 5]. Градувальні залежності лінійні в інтервалі 4-90 мг суми оксидів РЗЕ.

В літературі описані різні методи вилучення суми РЗЕ із багатокомпонентної сировини [6, 7]. Однак для аналітичних цілей в основному пропонується класичний оксалатний метод виділення суми РЗЕ, до недоліків якого можна віднести необхідність двохкратного переосадження гідроксидів та оксалатів, необхідність тривалого відстоювання осаду оксалатів, що призводить до збільшення часу аналізу.

Новий підхід може бути заснований на попередньому зв'язуванні РЗЕ та супутніх елементів у стійкі комплексні сполуки, а потім в селективному осадженні РЗЕ при утриманні у розчині супутніх еле-

ментів. В якості ліганду можна було б використати триполіфосфат-іони (ТПФ-іони). Відомо, що іони $P_3O_{10}^{5-}$ утворюють з Ln^{3+} стійкі комплексні сполуки (табл. 1).

Таблиця 1
Загальні константи стійкості триполіфосфатних комплексів деяких РЗЕ [8]

Елемент	lgβ		
	$[LnHP_3O_{10}]^-$	$[Ln(HP_3O_{10})_2]^{5-}$	$[Ln(P_3O_{10})_2]^{7-}$
Лантан	4,63	8,32	15,85
Самарій	4,89	8,66	16,99
Гадоліній	4,91	8,74	16,93
Ітрій	4,98	8,88	17,22

Триполіфосфат-іони будуть також утворювати комплекси з Co(II), Mo(V), Cu(II), Ca(II), V(V), Mg(II), Ni(II), Sr(II), Cr(III). Селективне осадження суми РЗЕ з ТПФ-розчину запропоновано проводити у вигляді карбонатів, що засновано на значно більш низькій їх розчинності у порівнянні з відповідними карбонатами та гідроксокарбонатами супутніх елементів. Так, значення відповідних ДР складають: $Ln_2(CO_3)_3 - 4 \cdot 10^{-34}$; $CoCO_3 - 1,05 \cdot 10^{-10}$; $CuCO_3 - 2,5 \cdot 10^{-10}$; $CaCO_3 - 3,8 \cdot 10^{-9}$; $MgCO_3 - 2,1 \cdot 10^{-5}$; $NiCO_3 - 1,3 \cdot 10^{-7}$; $SrCO_3 - 1,1 \cdot 10^{-10}$ і т.д.

Основним питанням у запропонованому новому способі виділення РЗЕ є повнота руйнації їх ТПФ-комплексів і ступінь осадження відповідних карбонатів, що в значній мірі буде визначати наявність систематичної похибки методики.

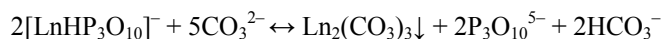
Нами досліджена ефективність традиційних (щавлева кислота) і нетрадиційних (карбонат натрію) реагентів при осадженні РЗЕ із ТПФ-комплексів.

Оцінювали вміст суми РЗЕ у розчині після проведення всього циклу (комплексоутворення – руйнація комплексів – осадження – розчинення осаду – фотометричне визначення Σ РЗЕ) методом «введено–знайдено» (табл. 2).

Таблиця 2
Порівняльна оцінка реагентів-осаджувачів РЗЕ, які можуть використовувалися для руйнації триполіфосфатних комплексів

Осаджувач	Знайдено Σ РЗЕ по відношенню до введеної кількості, %
Щавлева кислота (насичений розчин)	10,0
Щавлева кислота (насичений розчин) + аміак (25%) = 1:1	20,0
Карбонат натрію (10%)	90,0
Карбонат натрію (10%) + аміак (25%)= 1:1	92,5
Карбонат натрію (10%) + гідроксид натрію (15%)= 1:1	99,7

З даних табл. 2 видно, що повнота осадження та руйнація триполіфосфатних комплексних сполук РЗЕ відбувається тільки в сильнолужному середовищі (рН 13-14) в присутності карбонату натрію та кип'ятінні розчинів протягом 3-4 годин. Ймовірно процес, що відбувається, можна записати рівнянням:



Використання менш селективного фотометричного реагенту арсеназо I для подальшого фотометричного визначення РЗЕ дозволяє встановити, які із супутніх елементів переходять у розчин разом з РЗЕ після запропонованого триполіфосфатно-карбонатного способу виділення суми РЗЕ. певні кількості супутніх елементів додавалися до розчину, який містив, Σ РЗЕ та отриманий зразок проводили через всі стадії розділення. Співвідношення елементів до Σ РЗЕ складало 1:10, 1:25, 1:75, 1:100, 1:125, 1:150 та відповідало реальному співвідношенню Σ РЗЕ до супутніх елементів у люмінофорах. Вимірювали оптичну густину розчину комплексів РЗЕ з арсеназо I та арсеназо III. Отримані результати наведено на рис. 1.

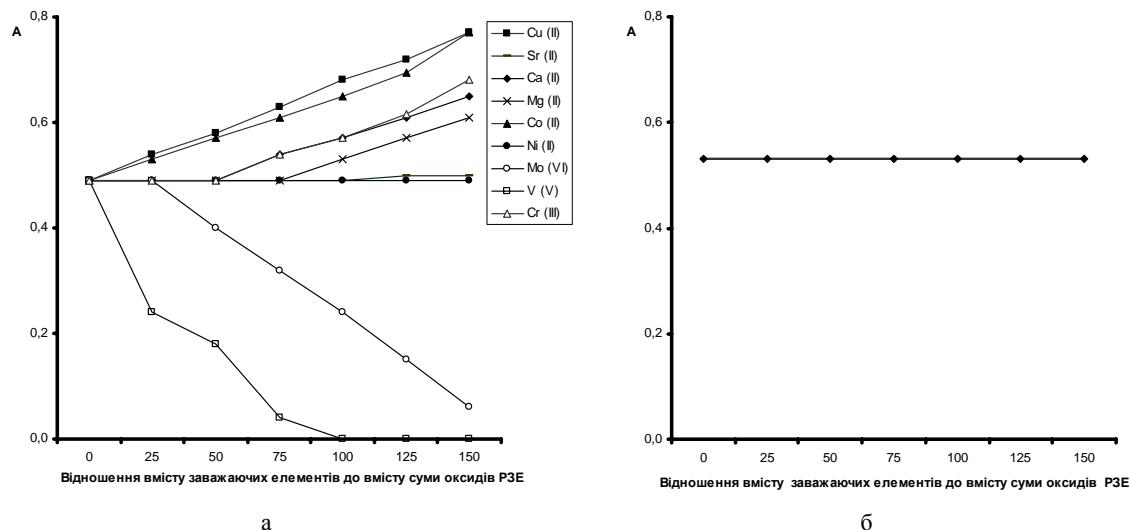


Рис. 1 Вплив заважаючих елементів на оптичну гуστину при визначенні суми оксидів РЗЕ з реагентами арсеназо I (а) та арсеназо III (б). Вміст (Σ РЗЕ) = 43,5 мкг.

З даних рис. 1 видно, що відповідно до запропонованої схеми виділення Σ РЗЕ разом з РЗЕ в розчин переходять Cu(II), Sr(II), Ca(II), Mg(II), Co(II), Ni(II), V(V), Mo(V), що заважає фотометричному визначенню з реагентом арсеназо I. Відмічається як позитивний вплив на аналітичний сигнал РЗЕ (Cu(II), Sr(II), Ca(II), Mg(II), Co(II), Ni(II)), так і негативний (V(V), Mo(V)). Ймовірно, позитивний вплив пов'язаний з взаємодією вказаних іонів з арсеназо I з утворенням забарвлених сполук. Практично не заважає Sr(II) до 100-кратного надлишку. Негативний вплив, напевно, обумовлений блокуванням фотометричного реагенту. Але при використанні більш селективного реагенту арсеназо III завади не спостерігаються (рис. 1(б)). Визначенню не заважає 150-кратний надлишок Cu(II), Sr(II), Ca(II), Mg(II), Co(II), Ni(II), V(V), Mo(V). Арсеназо III дає більш стійкі комплекси з РЗЕ в кислому середовищі та має чітко виражений максимум світлопоглинання при рН 2,5-3.

В якості об'єктів аналізу було обрано модельні розчини люмінофорів типу JANRS-100 та JANRS-5000 та реальний об'єкт – люмінофор відпрацьованого комп'ютерного монітору TOSHIBA M36L GE 128X208. Результати визначення Σ РЗЕ в цих об'єктах та перевірка їх правильності наведені в таблиці 3.

Таблиця 3
Результати визначення в люмінофорах JANRS-100 та JANRS-5000 суми рідкісноземельних елементів, та перевірка правильності розробленої методики (P=0,95; n=5)

Досліджуваний об'єкт	Введено Σ РЗЕ, мкг	Знайдено Σ РЗЕ, мкг			
		з реагентом арсеназо I		з реагентом арсеназо III	
		$\bar{C} \pm \delta$, мкг	S_r	$\bar{C} \pm \delta$, мкг	S_r
JANRS-100	49,5	49,0±1,0	0,05	49,0±0,6	0,04
JANRS-5000	47,0	47,5±0,9	0,04	46,5±0,8	0,04

Правильність методики визначення лантанодів у люмінофорі комп'ютерного монітору TOSHIBA проводили також порівнянням з результатами відомого оксалатного методу вилучення РЗЕ. Результати перевірки наведені у табл. 4. Із даних табл. 4 можна зробити висновок про незначимість систематичних похибок розробленої методики на фоні випадкових. Використання цієї методики дозволило скоротити час проведення аналізу з двох діб (оксалатний метод) до 6 годин (розроблена методика), при збереженні збіжності результатів.

Методика може бути застосована при аналізі відходів електроніки, які містять у своєму складі РЗЕ, а також при контролі вмісту лантанодів при виробництві різноманітних мікросхем, люмінофорів тощо.

Таблиця 4
Перевірка правильності визначення суми РЗЕ у люмінофорі комп'ютерного монітору TOSHIBA M36L GE 128X208 (P=0,95; n=5)

Введено суми РЗЕ, %	Знайдено методами			
	I		II	
	$\bar{C} \pm \delta$, %	S_r	$\bar{C} \pm \delta$, %	S_r
2,15	2,10±0,07	0,05	2,12±0,03	0,05

I – розроблена методика; II – оксалатний метод виділення [2].

Висновки. Таким чином, запропоновано новий триполіфосфатно-карбонатний спосіб вилучення суми РЗЕ із складних багатокомпонентних систем, оптимізовано шляхи та умови отримання аналітичної спектрофотометричної форми. Досліджено селективність запропонованого способу осаджувального вилучення і показано, що на результати не впливають 100-кратні кількості таких елементів, як Ca (II), Mg (II), Sr(II), Cu(II), Co(II), Ni(II), Cr(III), Mo(VI), V(V) при використанні для кінцевого визначення фотометричного реагенту арсеназо I. Розроблена методика триполіфосфатно-карбонатного вилучення суми РЗЕ з подальшим спектрофотометричним визначенням пройшла апробацію на модельних розчинах люмінофорів типу JANRS-100, JANRS-5000 та люмінофорі комп'ютерного монітору TOSHIBA M36L GE 128X208. Доведено правильність методики. Використання цієї методики дозволило скоротити час проведення аналізу з двох діб (оксалатний метод) до 6 годин (запропонований метод).

РЕЗЮМЕ

Предложен новый триполифосфатно-карбонатный способ извлечения суммы редкоземельных элементов, оптимизированы пути и условия получения аналитической спектрофотометрической формы. Исследована селективность предложенного способа извлечения и показано, что на результаты не влияют 100-кратные количества таких элементов, как Ca(II), Mg(II), Sr(II), Cu(II), Co(II), Ni(II), Cr(III), Mo(VI), V(V) при использовании фотометрического реагента арсеназо I.

Ключевые слова: сумма редкоземельных элементов (РЗЭ), люминофоры, триполифосфатные комплексы РЗЭ, фотометрическое определение суммы РЗЭ, арсеназо I, отходы электроники.

SUMMARY

Proposed the new method of the tripolyphosphate-carbonate extraction of sum rare-earth elements, are optimized ways and conditions of obtaining the analytical spectrophotometric form. Is investigated the selectivity of the method of precipitating extraction proposed and it is shown that results do not influence 100-fold quantities of such elements as Ca(II), Mg(II), Sr(II), Cu(II), Co(II), Ni(II), Cr(III), Mo(VI), V(V) with the use of a photometric reagent of arsenazo I.

Keywords: sum of rare-earth elements, phosphors, tripolyphosphate complexes rare-earth elements, the photometric determination of sum of rare-earth elements, the withdrawals of electronics.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Богатырева А. А. Исследование и разработка люминофоров красного и желтого цветов свечения с длительным послесвечением / А. А. Богатырева, А. Ф. Голота // Тез. докл. 11-того Всероссийского семинара-совещания «Оптика и спектроскопия конденсированных сред» (г. Краснодар, 18-23 сентября, 2005). – 2005. – С. 21-25.
2. Контроль содержания активирующих добавок церия, неодима, и европия в сцинтилляционных материалах спектрофотометрическим методом / О. В. Гайдук, Л. В. Гудзенко, Т. И. Ивкова и др. // Вісник Харківського національного університету. Хімія. – 2008. – Вип. 16 (39). – С. 15-21.
3. Бусев А. И. Руководство по аналитической химии редких элементов / А. И. Бусев, В. Г. Типцова, В. М. Иванов. – М.: Химия, 1978. – 432 с.
4. Марченко З. И. Фотометрическое определение элементов / З. И. Марченко. – М: Мир, 1971. – 556 с.
5. Спектрофотометрические и люминесцентные методы определения лантаноидов / Н. С. Полуэтов, Л. И. Кононенко, Н. П. Ефрюшина, С. В. Бельтюкова. – К.: Наукова думка, 1989. – 256 с.
6. А.с. 1599698 СССР, МКИ G 01 1/28, 21/64, 31/22. Способ извлечения редкоземельных элементов / С. Б. Мешкова, З. М. Топилова, Н. С. Полуэтов, Г. И. Герасименко (СССР). – № 4387665/31-26; заявл. 23.11.89 ; опубл. 15.10.90 – Бюл. № 10. – 2 с. : ил.
7. Пат. 214801 Российская Федерация МПК G 01 1/28, 21/64, 31/22. Способ переработки фосфатного редкоземельного концентрата выделенного из апатита/ Лебедев В.Н., Сергеева С.Д., Маслобоев В.А., Локшин Э.П. – № 98121493/12; заявл. 23.11. 98; опубл. 17.10.99 – Бюл. № 10. – 3 с. : ил.
8. Продан Е. А. Триполифосфаты и их применение / Е. А. Продан, Л. И. Продан, Н. Ф. Ермоленко. – Минск: Наука и техника, 1969. – 533 с.

Надійшла до редакції 15.04.2010 г.

УДК 547.789:66.094.3097.8.

АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ ДІГІДРОКСИФЕНІЛТІАЗОЛІВ

В. В. Одарюк, Л. Е. Гринько, Л. В. Каниболоцкая, Н. И. Бураков*, И. Д. Одарюк, А. Л. Каниболоцкий*, В. А. Михайлов*, А. Н. Шендрик

*Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАН Украины, г. Донецк

Исследованы антиоксидантные свойства производных дигидроксибензилтиазола в модельной системе железоиндуцированного окисления полиоксиэтиленсорбитанмоноолеата (Твин-80) кинетическим (по поглощению кислорода) и статическим (по продуктам окисления) методами, а также восстанавливающая способность по отношению к Fe^{3+} . Показано, что изученные соединения являются эффективными антиоксидантами фенольного типа.

Ключевые слова: тиазолы, полифенолы, Твин-80, окисление, антиоксидант, восстанавливающая способность.

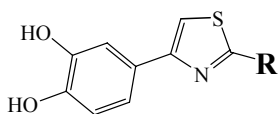
Введение. Роль активных форм кислорода (АФК) и инициируемых ими процессов свободнорадикального окисления, в том числе перекисного окисления липидов (ПОЛ), широко обсуждается в литературе в этиологии патологических состояний [1,2].

Развитие ПОЛ можно предотвратить введением специальных добавок – антиоксидантов. При этом на биологические антиоксиданты накладывается ряд ограничений, связанных с биодоступностью, возможной токсичностью, вероятностью проявления нежелательных побочных эффектов и т.п. Эти факты делают актуальным поиск новых веществ с антиоксидантной активностью среди низкотоксичных гетероциклических соединений.

Соединения тиазольного ряда находят эффективное применение в качестве лекарственных средств, красителей и пр. [3]. В последние годы для некоторых производных тиазола были выявлены антиоксидантные свойства [4-6], однако механизм их действия остается практически неизученным. Согласно данным [7], соединения, содержащие комбинацию фенольного или аминного фрагмента и атома серы, способны проявлять антиоксидантную активность в олеофазе за счет продуктов автоокисления самих ингибиторов, каталитически разлагающих гидропероксиды на молекулярные продукты, и тем самым вызывая многократный обрыв цепей окисления. То есть серусодержащие гетероциклы с полифенольным фрагментом могут выступать полифункциональными антиоксидантами, что повышает их эффективность в окислительных процессах.

В связи с вышесказанным, целью данной работы стало исследование антиоксидантной активности производных дигидроксибензилтиазола в модельной системе Fe^{2+} -инициированного окисления Твина-80 и определение феррицианидным методом их восстанавливающей способности.

Экспериментальная часть. Синтез дигидроксибензилтиазолов проводили по методу Ганча реакцией хлорацетилпирокатехина с соответствующими тиоамидами [8]. Чистоту синтезированных соединений подтверждали методом 1H ЯМР спектроскопии и ВЭЖХ. Структуры изученных тиазолов представлены на рис. 1.



$R = CH_3, -C_6H_5, -p-C_6H_4OH, -Ind, -C_6H_3(OCH_3)_2, -4-Pyr, -3-Pyr$

Рис. 1. Структуры изученных в качестве антиоксидантов тиазолов

Пирокатехин очищали сублимацией в вакууме. Твин-80 (Fluka), Тролокс – 6-гидроксил-2,5,7,8-тетраметилхроман-2-уксусной кислоты (Aldrich), трихлоруксусную кислоту (Clariant, Германия), одно- и двузамещенные фосфаты натрия (Sigma) использовали без дополнительной очистки. 2-Тиобарбитуровую кислоту, гексацианоферрат калия очищали перекристаллизацией из воды, аскорбиновую кислоту перекристаллизовывали из этилового спирта. Диметилсульфоксид (DMSO) очищали перегонкой при пониженном давлении.

Определение восстанавливающей способности. Восстанавливающую способность определяли феррицианидным методом в реакции восстановления гексацианоферрата калия исследуемым антиоксидантом с дальнейшим определением окрашенного комплекса Fe^{2+} (берлинская лазурь, $\lambda=700nm$) согласно методике [9]. Количественно восстанавливающую способность выражали как величину тангенса угла наклона зависимости оптической плотности от концентрации введенного антиоксиданта ($tg\alpha$).

Антиоксидантная активность в процессе железоиницированного окисления Твин-80 (статический метод). Антиоксидантные свойства тиазолов в реакции Fe^{2+} -иницированного окисления Твин-80 определяли по методике [10] с некоторыми модификациями. В склянки темного стекла с притертой пробкой объемом 200 мл вносили реакционную смесь следующего состава: 4 мл 1% водного раствора Твина-80, 0,4 мл $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л раствора сернокислого железа (II), 0,4 мл $1 \cdot 10^{-2}$ моль/л аскорбиновой кислоты, 0,4 мл $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л раствора антиоксиданта. В контрольный раствор вместо испытуемого вещества вносили 0,4 мл растворителя (для пирокатехина – вода, для тиазолов – DMSO). Смесь тщательно перемешивали, закрывали герметично пробкой и термостатировали при 323 К 48 часов. После окисления Твина-80 в опытные пробы добавляли по 0,4 мл соответствующего растворителя, а в контрольные – по 0,4 мл раствора вещества, которое испытывали в качестве антиоксиданта. Далее добавляли 2 мл 40% раствора трихлоруксусной кислоты, смесь перемешивали и выдерживали в течение часа. Затем раствор центрифугировали при 9000 об/мин на ультрацентрифуге, отбирали 3 мл надосадочной жидкости и приливали 6 мл 0,25% водного раствора 2-тиобарбитуровой кислоты. Смесь встряхивали и выдерживали 15 мин при 373 К, затем охлаждали и фотометрировали окрашенный в розовый цвет комплекс при 532 нм. Измерение выполняли на спектрофотометре СФ–2000 (Россия).

Фотоколориметрическое определение концентрации продуктов окисления Твина-80 основано на их комплексообразовании с 2-тиобарбитуровой кислотой. Снижение их концентрации в опытных пробах по сравнению с контрольными свидетельствует об антиоксидантной активности (АОА) испытуемого вещества, которую рассчитывали по следующей формуле:

$$AOA(\%) = \frac{D_{\text{контр}} - D_{\text{оп}}}{D_{\text{конт}}} \cdot 100\% \quad (1)$$

где

$D_{\text{контр}}$ – поглощение контрольной пробы, моль/л;

$D_{\text{оп}}$ – поглощение опытной пробы, моль/л.

Исследование влияния тиазолов на кинетику окисления Твин-80 (кинетический метод).

Ингибированное окисление Твин-80 изучали газовольнометрическим методом [11] в фосфатной буферной системе (pH=7.4). В качестве инициатора окисления использовали сульфат железа (II).

Результаты и их обсуждение. Ненасыщенные жирные кислоты (НЖК), входящие в состав липидов плазматических мембран, являются одной из основных мишеней действия свободных радикалов. Образующиеся аддукты окисления НЖК изменяют свойства мембран, что приводит к изменению их проницаемости, повреждению транспортных АТФаз, изменению поверхностного заряда мембран и т.д. [12].

Для полного предотвращения или замедления таких процессов используют добавки антиоксидантов, первичное тестирование свойств которых проводят на модельных системах.

В качестве модельной системы можно использовать инициированное окисление индивидуальных НЖК, их смесей и сложных соединений в органических средах. Молекула Твин-80 (рис.2) содержит остаток олеиновой кислоты, поэтому процесс окисления данного субстрата может моделировать закономерности, наблюдаемые при окислении НЖК *in vivo*. При этом Твин-80 является водорастворимым поверхностно-активным соединением, что позволяет проводить исследование в водных средах. Это обусловило выбор Твина-80 в качестве модельного соединения для изучения антиоксидантных свойств тиазолов.

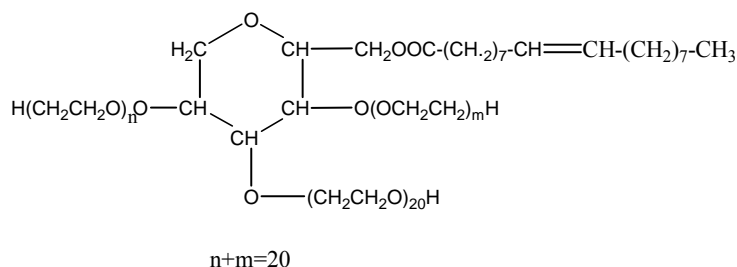


Рис. 2. Структура Твин-80

Так как изучаемые тиазолы содержат о-дигидроксибензольный фрагмент, то в качестве реперного соединения нами был исследован пирокатехин. В качестве «соединения сравнения» в тех же условиях определяли АОА Тролокса – водорастворимого аналога витамина Е.

На рис. 3. представлены данные об антиоксидантных свойствах соединений в процессе окисления Твина-80. Как видно из рис. 3, АОА производных тиазола выше, чем у известного ингибитора фенольного типа – пирокатехина, и для некоторых дигидроксибензилзамещенных тиазолов близки к АОА Тролокса. Замещенные тиазолы, молекулы которых не содержат полифенольный фрагмент, практически не проявляли антиоксидантной активности.

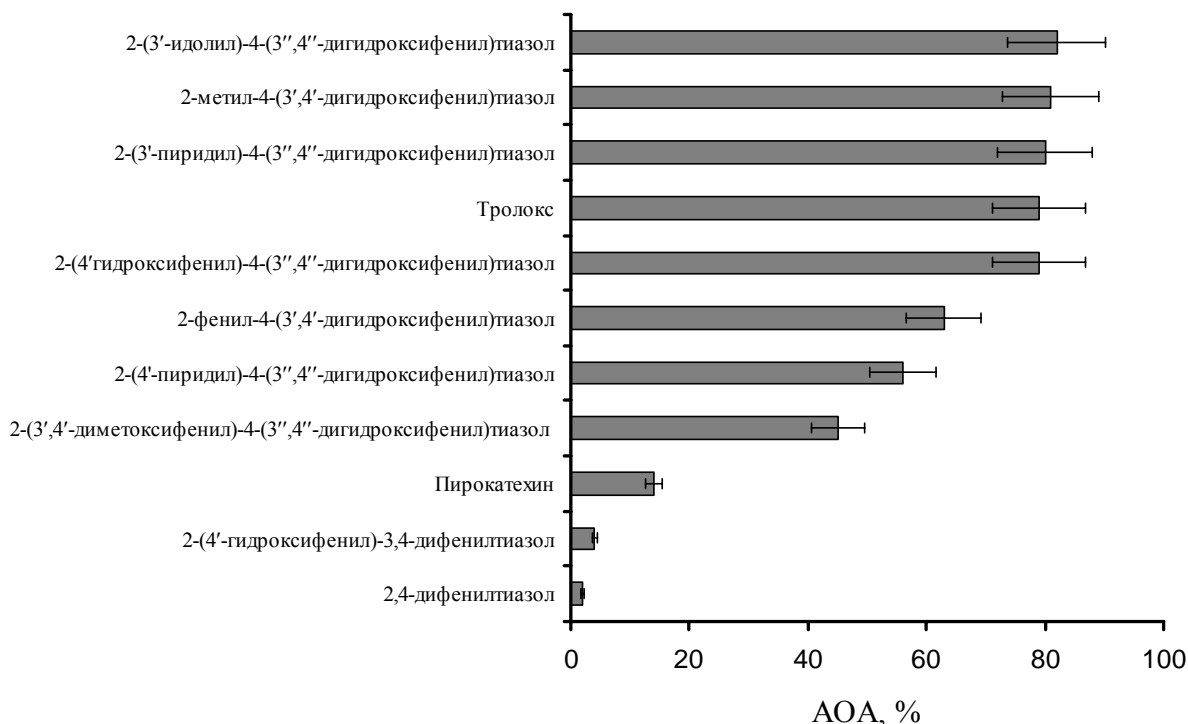


Рис. 3. Антиоксидантная активность производных тиазола в процессе Fe^{2+} -индуцированного окисления Твин-80

Для изучения кинетики окисления Твина-80 газовольюмометрическим методом проведена оптимизация методики и установлены оптимальные концентрации исходных веществ, при которых каждый из реагентов не поглощал бы кислород, а при их совместном присутствии в растворе происходило окисление с заметной скоростью. То есть, чтобы сульфат железа (II) выступал инициатором окисления, а Твин-80 – субстратом.

Кинетические кривые реакции Fe^{2+} -иницированного окисления Твина-80 приведены на рис. 4.

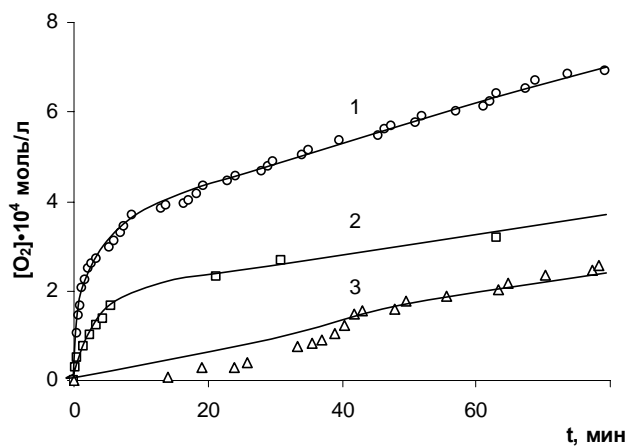


Рис. 4. Fe^{2+} -иницированное окисление Твина-80 без добавок (1), в присутствии пирокатехина (2), 2-фенил-4-(3',4'-дигидроксифенил)тиазола (3). $C_{\text{Твин-80}}=0.1$ моль/л; $C_{FeSO_4}=8 \cdot 10^{-4}$ моль/л, $C_{AO}=1 \cdot 10^{-4}$ моль/л; $T=308$ К, $pH=7.4$

Введение пирокатехина и тиазолов приводит к уменьшению скорости реакции (рис.4.). В присутствии антиоксидантов выход кинетической кривой на насыщение происходит быстро, что делает невозможным достоверный расчет начальной скорости окисления. В связи с этим, для оценки эффективности ингибирующего действия тиазолов в процессе окисления Твина-80 использовали формулу:

$$\text{Эффективность ингибитора} = \frac{C_t(O_2)}{C_t^{\text{inh}}(O_2)}, \quad (2)$$

где

$C_t(O_2)$ – количество кислорода, поглощенного в отсутствие ингибитора за время t ($t=30$ мин);

$C_t^{inh}(O_2)$ – количество кислорода, поглощенного при ингибированном окислении за то же время.

Полученные данные по эффективности тиазольных антиоксидантов в реакции иницированного окисления Твин-80 представлены в табл. 1.

Таблица 1
Эффективность ингибирующего действия тиазолов в процесс окисления Твина-80
 $pH=7.4, T=308K, C_{AO}=1 \cdot 10^{-4}$ моль/л

Антиоксидант	$C_{O_2} \cdot 10^4$, моль/л	Эффективность ингибитора
Неингибированное окисление	4.9	1.0
2-фенил-4-(3',4'-дигидроксифенил)тиазол	1.0	4.9
2-(4'-гидроксифенил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	1.4	3.5
2-метил-4-(3',4'-дигидроксифенил)тиазол	0.6	8.2
2-(3'-индолил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	0.8	6.1
2-(3',4'-диметоксифенил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	0.9	5.4
Пирокатехин	3.1	1.6

Как видно из представленных данных, тиазолы снижают скорость окисления Твина-80. Высокая АОА тиазолов может быть обусловлена влиянием тиазольного цикла и заместителей на донорные свойства полифенольного фрагмента молекулы антиоксиданта. За счет присутствия тиазольного фрагмента возможна дополнительная стабилизация фенокисильного радикала антиоксиданта. С другой стороны, нельзя исключать возможность того, что дигидроксифенилзамещенные тиазолы могут проявлять повышенную антиоксидантную активность за счет полифункциональности и комбинированного механизма ингибирования окисления.

Достоверной корреляция между АОА (статический метод) и эффективностью ингибитора (кинетический метод) не выявлено. Это объясняется, по-видимому, тем, что газоволюмометрическим методом можно оценить влияние ингибитора только на начальный этап процесса окисления Твина-80, в то время как значение АОА позволяет оценить это влияние на более глубоких стадиях реакции. Отсутствие корреляции между АОА и эффективностью ингибитора может указывать на то, что характер влияния одного и того же антиоксиданта на образование промежуточных и конечных продуктов окисления может отличаться.

Еще одной мерой АОА является восстанавливающая способность, которая выражает способность соединением отдавать электрон, возвращая окисленный субстрат в исходное состояние.

Для изученных соединений в интервале концентраций $1 \cdot 10^{-5}$ – $1.5 \cdot 10^{-4}$ наблюдается линейный рост оптической плотности с увеличением количества введенного антиоксиданта. 2,4-Дифенилтиазол, 2-(4'-гидроксифенил)-3,4-дифенилтиазол (табл.2) практически не проявляют восстанавливающей способности. Это согласуется с отсутствием у них антиоксидантных свойств при окислении Твина-80.

Восстанавливающая способность пирокатехина является максимальной среди всех изученных соединений и превышает данную величину для Тролокса в 2.6 раза.

Таблица 2
Восстанавливающая способность субстратов

№ п/п	Субстрат	$tg \alpha \cdot 10^{-4}$
1	2,4-дифенилтиазол	0.7±0.1
2	2-(4'-гидроксифенил)-3,4-дифенилтиазол	0.8±0.1
3	Пирокатехин	17.29±0.06
4	2-(3',4'-диметоксифенил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	9.5±0.4
5	2-(4'-пиридил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	9.0±0.8
6	2-фенил-4-(3',4'-дигидроксифенил)тиазол	4.9±0.2
7	2-(4'гидроксифенил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	5.9±0.3
8	Тролокс	6.6±0.1
9	2-(3'-пиридил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	10.0±0.6
10	2-метил-4-(3',4'-дигидроксифенил)тиазол	15.3±0.1
11	2-(3'-идолил)-4-(3'',4''-дигидроксифенил)тиазол	8±1

Выводы. Комбинирование в молекуле тиазольного и полифенольного фрагментов позволяет получить эффективные ингибиторы окисления органических веществ в жидкой фазе. Присутствие в молекуле тиазольного цикла, очевидно, дополнительно стабилизирует ответственный за антиоксидантную активность соединения пирокатехиновый фрагмент молекулы, в результате чего дигидроксифенилтиазолы являются более эффективными антиокислителями, чем незамещенный пирокатехин.

РЕЗЮМЕ

Досліджено антиоксидантні властивості похідних дигідроксифенілтіазола у модельній системі залізоіндукованого окиснення поліоксетиленсорбітанмоноолеату (Твін-80) кінетичним (за поглинанням кисню) і статичним (за продуктами окиснення) методами, а також відновлююча здатність по відношенню до Fe^{3+} . Знайдено, що досліджені сполуки є ефективними антиоксидантами фенольного типу.

Ключові слова: тіазоли, поліфеноли, Твін-80, окиснення, антиоксидант, відновлююча здатність.

SUMMARY

It has been studied antioxidant properties of dihydroxyphenylthiazole derivatives in the model system of ferrous initiated oxidation of polyoxyethylene sorbitan monooleate (Tween-80) by the kinetic (oxygen consumption) and static (products of oxidation) methods, and reducing power in the reaction with Fe^{3+} . The investigated compounds has been found as effective phenolic-type antioxidants.

Keywords: thiazole, polyphenols, Tween-80, oxidation, antioxidant, reducing power.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Янковский Ю. В. Токсичность кислорода и биологические системы (эволюционные, экологические и медико-биологические аспекты). / Ю. В. Янковский. – СПб: Игра, 2000. – 294 с.
2. Halliwell B. Reactive species and antioxidants. Redox biology is a fundamental theme of aerobic life/ B. Halliwell// Plant Physiology. – 2006. – Vol. 141. – P. 312-322
3. Иванский В. И. Химия гетероциклических соединений / В. И. Иванский – М: Высш. школа, 1978. – 559 с.
4. Исследование антиокислительных свойств тиамин / П. И. Лукиенко, Н. Г. Мельниченко, И. В. Зверинский и др.// Бюллетень экспериментальной биологии и медицины – 2000. – Т. 130, № 9. – С. 303-305.
5. De S. Antioxidant activity of an aminithiazole compounds: possible mechanism / S. De, S. Adhikari, J. Tilak-Jain et al. // Chemico-Biological Interactions. – 2008. – No 173. – P. 215-223.
6. Phenolic thiazoles as novel orally-active neuroprotective agents / J. J. Harnett, V. Roubert, Ch. Dolo et al. // Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. – 2004. – No 14. – P. 157-160.
7. Синтез и исследование антиокислительной активности различных производных 2-амино-4-фенил-1,3-тиазола / И. А. Рзаева, С. Э. Садигова, Т. М. Векилова и др. // Нефтехимия. – Т. 45, № 6. – С. 470-475.
8. Hantzsch A. Ueber Verbindungen des Thiazols (Pyridins der Thiophenreihe) / A. Hantzsch, J. H. Weber // Dtsch. Chemischen Berichte. – 1887. –V. 20, No 2. – P. 3118-3132.
9. Oyaizu M. Antioxidant activity of browning products of glucosamine fractionated by organic solvent and thin-layer chromatography / M. Oyaizu // Nippon Shokunin Kogyo Gakkaishi. – 1986. – No 35. – P.771-775.
10. Определение антиокислительной активности химических соединений/ С. Г. Благородов, А. П. Шепелев, Н. А. Дмитриева и др. // Хим.-фарм. журн. – 1987. – Т. 21, № 3. – С. 292-296.
11. Эмануэль Н. М. Цепные реакции окисления углеводов в жидкой фазе / Н. М. Эмануэль, Е. Т. Денисов, З. К. Майзус. – Москва: Наука, 1965. – 506 с.
12. Halliwell B. Biochemistry of oxidative stress / B. Halliwell // Biochemical Society Transactions – 2007. – No 35. – P. 1147-1150.

Поступила в редакцию 22.03.2010 г.

КИНЕТИКА ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АЦЕТАТА НАТРИЯ ТРИГИДРАТА

В. А. Постников, А.Ю. Соболев, С. В. Горбань*

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, г. Макеевка

*Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского, г. Донецк

Методами термического анализа (ЦТА, ДТА) и визуальной политермии проведено исследование кинетики плавления и кристаллизации ацетата натрия тригидрата (АН-3). Установлен скачкообразный характер перехода кристаллизации от квазиравновесного (с незначительными переохлаждениями) к неравновесно - взрывному типу (с глубокими переохлаждениями). Данное явление связано с предварительным перегревом АН-3 выше критической температуры $T_{cr}^+ \approx 67^\circ\text{C}$. Методом визуальной политермии установлена зависимость линейной скорости продвижения фронта кристаллизации v от величины переохлаждения $v=f(\Delta T)$. Данная зависимость имеет вид «кривой насыщения» и согласуется с литературными данными. Для анализа результатов исследования привлекаются данные по кристаллическим структурам ацетата натрия тригидрата и безводной соли, которая, согласно литературным данным, формируется в переохлажденном жидком состоянии. Наличие глубоких переохлаждений в жидкой фазе связывается с образованием гелеобразной структуры с «антикристаллогидратным» характером.

Ключевые слова: натрия ацетат тригидрат, термический анализ, кинетика плавления и кристаллизации, переохлажденное состояние.

Введение. Ацетат натрия трехводный – $\text{CH}_3\text{COONa}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (АН-3) является объектом повышенного внимания физико-химиков и технологов в силу уникальности его теплофизических свойств, благоприятных для использования в качестве теплоаккумулирующего материала (ТАМ) на основе фазового перехода жидкость - твердое тело [1-6]. Основными требованиями к ТАМ являются: наличие достаточно высокого значения энтальпии плавления ΔH_L , устойчивость и повторяемость эндо- и экзотермических эффектов при многочисленном термоциклировании, управляемость величиной переохлаждения ΔT^- и др. Вместе с тем в литературе мало работ, посвященных систематическим исследованиям плавления и кристаллизации из водных растворов, влиянию термической предыстории (термовременной фактор) жидкой фазы на кинетику кристаллизации, выяснению природы глубоких переохлаждений и механизмов кристаллизации. Малоисследованной остается структура жидкой фазы выше и ниже температуры плавления T_L . Кроме того, в литературе приводятся данные по температуре плавления АН-3 от 57.0 до 58.5°C , а удельная теплота плавления ΔH_L имеет значительный разброс: от 226 до 275 кДж/кг [1-6]. Согласно данным ДСК, полученным в работе [7] с помощью термоаналитического комплекса Du Pont 9900, плавление начинается при 56°C . Среднее значение величины ΔH_L составило 274 кДж/кг. Целью данной работы является исследование кинетики плавления и кристаллизации ацетата натрия тригидрата.

Методика и результаты экспериментов. Процессы плавления и кристаллизации исследовали методами циклического (ЦТА) и дифференциально-термического анализа (ДТА) [8-10], и визуальной политермии. Термоциклировали образцы АН-3 марки Ч массой $2,00$ г в стеклянных герметизированных пробирках в термостатируемой водяной бане со скоростью $0,01 \div 0,2$ К/с в интервале температур от -20 до 100°C . Измерение и запись температуры производили с помощью ХА-термопар диаметром $0,2 \div 0,5$ мм, которые размещали в жидкие образцы, и самописцев КСП-4 со шкалой на 1 и 2 мВ. Дополнительно осуществлялся контроль температуры с помощью датчика цифрового термометра с погрешностью 1 К и разрешением $0,1$ К (Калибровку температуры производили по дистиллированной воде). На каждом образце проводили до 10 непрерывных термоциклов нагревания-охлаждения. Сущность метода визуальной политермии заключается в использовании прозрачной термостатируемой среды (стакан с водой), внутри которой размещается пробирка с исследуемым веществом, для непосредственного наблюдения за плавлением и кристаллизацией. Для этой цели использовали образцы массой $8,0$ г, помещенные в стеклянные пробирки диаметром 15 мм и высотой 120 мм. Съемка процессов плавления и кристаллизации осуществлялась с помощью цифровой фотокамеры Olimpus $\mu 500$.

На рис.1 представлены кривые нагревания и охлаждения трехводного ацетата натрия, характеризующие его плавление и кристаллизацию. Как видно из рисунка, при нагревании со скоростью $0,07$ К/с при температуре $\sim 58^\circ\text{C}$ (в районе точек 2, 7) наблюдается небольшое горизонтальное плато, свидетельствующее о начале плавления. При дальнейшем нагревании АН-3 визуально не наблюдалось выделение жидкости, так что вещество образца оставалось в твердом состоянии вплоть до $\sim 70^\circ\text{C}$. При нагревании выше 70°C наблюдалось двухфазное состояние: прозрачная жидкость с осадком в виде белых кристаллов. По мере дальнейшего нагревания происходило растворение кристаллов, которое полностью заканчивалось при температуре выше 95°C .

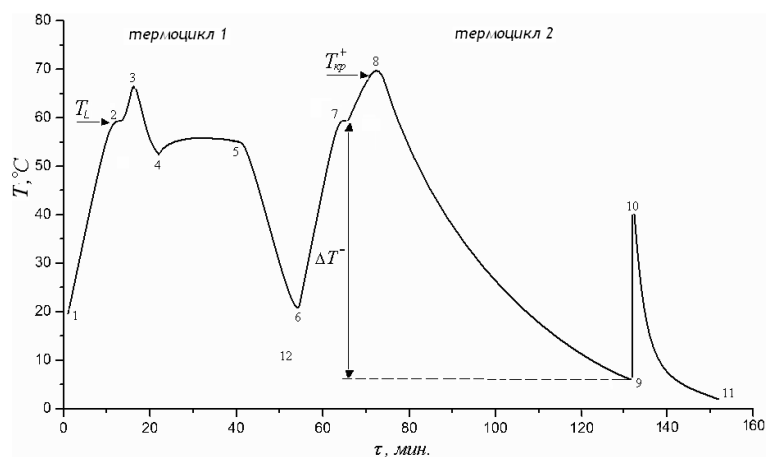


Рис.1. Кривые нагревания и охлаждения АН-3: термоцикл 1 характеризует квазиравновесную кристаллизацию, а термоцикл 2 – неравновесно-взрывную.

Рис.1 характеризует явление скачкообразного перехода от квазиравновесной кристаллизации (КРК) с небольшим переохлаждением (термоцикл 1) к неравновесно-взрывной кристаллизации (НВК) с значительным переохлаждением (термоцикл 2), инициированной с помощью затравки. Закономерность этого явления заключается в зависимости характера кристаллизации от величины перегрева ΔT^+ вещества выше $T_L=58^\circ\text{C}$:

$$\text{Тип кристаллизации} = \begin{cases} \text{КРК}, & \Delta T < \Delta T^+, \\ \text{НВК}, & \Delta T \geq \Delta T^+, \end{cases} \quad (1)$$

где $\Delta T_{cr}^+ = 9\text{ K}$ – критический перегрев жидкой фазы относительно температуры T_L .

Т. о., предварительно не перегретый выше $T_{cr}^+ = T_L + \Delta T_{cr}^+ \approx 67^\circ\text{C}$ образец при охлаждении кристаллизуется с небольшим переохлаждением $\Delta T^- = 3 \div 8\text{ K}$ ($\Delta T^- = T_L - T$, $T < T_L$). После выдержки образца в течение 1,5 часов при $64 \div 65^\circ\text{C}$ кристаллизация также проходила квазиравновесно. Перегретые выше T_{cr}^+ образцы, в основном, сильно переохладились и могли не кристаллизоваться в течение 2-х месяцев при температуре выдержки -15°C . По этой причине взрывную кристаллизацию инициировали с помощью собственных затравок (кристалликов АН-3 массой до 10 мг). В этом случае кристаллизация происходила на порядки быстрее, о чем свидетельствует быстрый прогрев образца сразу же после введения затравки (участок 9-10 на рис.1) и непосредственные визуальные наблюдения. Установлено, что при КРК тепловыделение внутри образца массой 2 г поддерживало температуру $\sim 55^\circ\text{C}$ в течение около 20 мин. (участок 4-5) при температуре окружающей среды 20°C . Кристаллизация из переохлажденного состояния (термоцикл 2) происходила значительно быстрее, и если переохлаждение ΔT^- достигало 30 и более градусов, то образец практически полностью затвердевал по мере прогрева до $T \leq 50^\circ\text{C}$. Эффект скачкообразного перехода от КРК к НВК наглядно представлен на рис. 2 в виде обобщающего графика зависимости величины переохлаждения от перегрева $\Delta T^- = f(\Delta T^+)$.

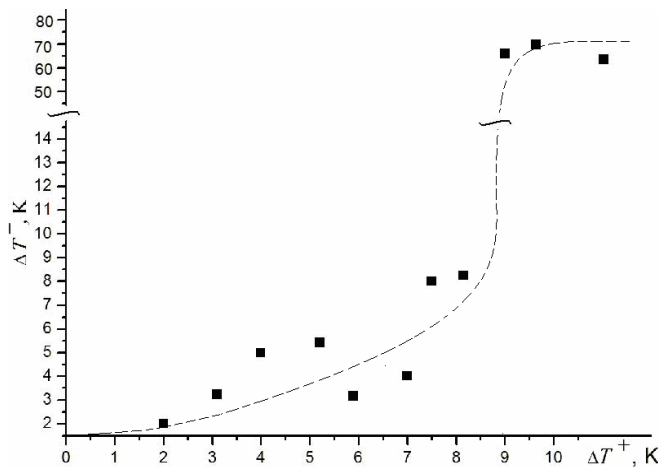


Рис. 2. Зависимость переохлаждения раствора ацетата натрия ΔT^- от перегрева ΔT^+ тригидрата ацетата натрия выше $T_L \approx 58^\circ\text{C}$.

Известно, что существенным недостатком трехводного ацетата натрия, используемого в качестве термоаккумулирующего материала, является его склонность к значительным переохлаждениям. Исходя из полученных на данном этапе результатов, можно сделать важный вывод об управляемости величины

переохладження, и рекомендовать АН-3 в качестве ТАМ предварительно не перегретым в жидком состоянии выше критического значения $\Delta T_{cr}^+ = 9$ К относительно температуры T_L .

На следующем этапе изучали тепловые эффекты при плавлении и кристаллизации АН-3. На рис. 3 представлены кривые ДТА, характеризующие эндо- и экзотермические эффекты при плавлении и кристаллизации: крайний эндо-пик слева характеризует плавление в режиме нагрева образца до 65°C, правый пик – плавление в режиме нагрева образца до 80°C. Как видно из рисунка, при большем перегреве эндотермический эффект выше: количественная оценка дает разницу приблизительно в 1,5 раза.

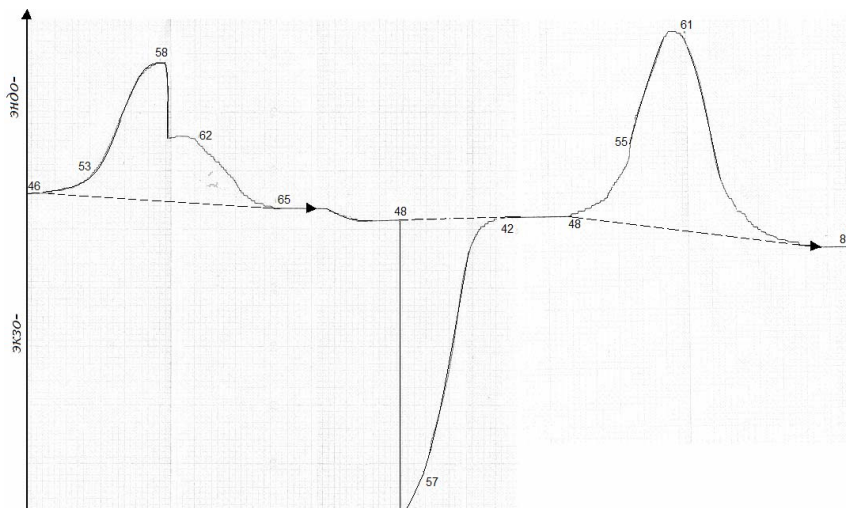


Рис.3. Кривые ДТА, характеризующие плавление и кристаллизацию АН-3 (цифрами указана температура в °С).

Кристаллизация переохлажденного раствора инициировалась не только вводом затравки, но и при механическом воздействии.

При охлаждении жидкого АН-3 в прозрачных пробирках визуально наблюдали следующую картину: по мере снижения температуры в жидкости формируются нитевидные полупрозрачные сгустки (рис.4), имеющие гелеобразную консистенцию. Причем, чем ниже температура раствора, тем больше доля данных образований. При длительной выдержке расплава в переохлажденном состоянии (от 3-х суток и выше) в верхней части образца выделяется прозрачная однородная фаза. При добавлении затравки данная фаза быстро кристаллизуется, что свидетельствует о пересыщенности отделившейся области.

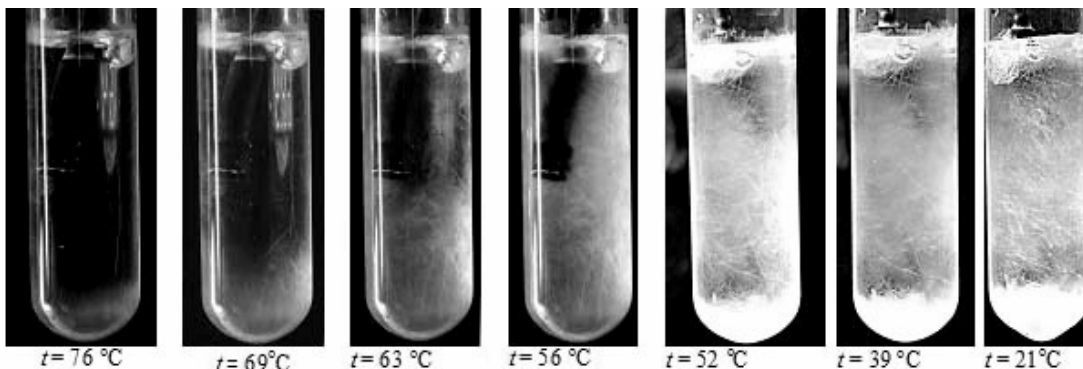


Рис.4. Фотографии макроструктуры жидкого раствора АН-3 при разных температурах

На рис.5 представлены графики зависимости линейной скорости продвижения фронта кристаллизации v от величины переохладения жидкой фазы ΔT^- , полученные методом визуальной политермии. Как видно из рисунка, эта зависимость имеет вид «кривой с насыщением» при средней скорости роста ~ 7.6 мм/с и интерполируется выражением:

$$v = v_m (1 - \exp(-k(\Delta T^-)^n)), \quad (2)$$

где $v_m \approx 7,6$ мм/с – скорость насыщения, $k \approx 0,1045$ и $n \approx 3,513$ – параметры интерполяции (среднеквадратичное отклонение $s = 0.81$ мм/с). На рисунке также приведены данные авторов [6] (точки, соединенные тонкой линией), которые также имеют вид «кривой насыщения», однако установленная ими скорость насыщения $v_m \approx 6$ мм/с, а переохладение «порога насыщения» в районе 20 К, что приблизительно на 10 К превосходит наши результаты.

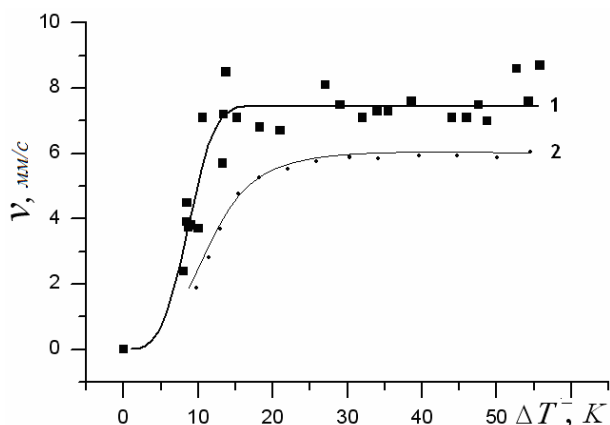


Рис.5. Зависимость линейной скорости продвижения фронта кристаллизации АН-3 от величины переохлаждения (кривая 1). Кривая 2 - данные авторов [6].

Обсуждение результатов. Как показано выше, процесс инконгруэнтного плавления размыт в интервале от T_L до T_{cr}^+ . Существование некоторой «барьерной» температуры T_{cr}^+ (67°C) $>$ T_L (58°C), выше которой перегретый расплав при охлаждении значительно переохлаждается, а недогретый – кристаллизуется с небольшим переохлаждением, указывает на кристалломорфность вещества в указанном интервале температур. Т.е. расплавы, не перегреваемые выше T_{cr}^+ , сохраняют наследственную информацию о твердом состоянии в виде квазикристаллических областей, благодаря которым как на затравках при охлаждении ниже T_L кристаллизация происходит квазиравновесно.

Обратимся к структурам кристаллического и жидкого состояния АН-3 и кристаллического безводного ацетата натрия. Согласно Уббелюде [11], структура ближнего порядка жидкости вблизи фазового перехода жидкость - твердое тело может быть либо квазикристаллической (кристаллоподобной) или антикристаллической (существенно отличной от кристаллической). Если первый тип ближнего порядка жидкости обуславливает достаточно низкий барьер зародышеобразования при небольших переохлаждениях, то последний (антикристаллический) определяет более значительный порог для формирования зародышей кристаллов, тем самым, порождая большие переохлаждения жидкости перед кристаллизацией. Рассмотрим кристаллохимические данные по структуре АН-3. Согласно литературе [12-13] тип решетки – моноклинный (C2/c). Параметры решетки $a=12,475$; $b=10,407$; $c=10,449$ Å; $\beta=112,65^\circ$; $Z=8$, объем ячейки $V=1251,94$ Å³. На рис. 6, а схематически представлена проекция структуры АН-3. Пунктиром показаны водородные связи между молекулами воды и карбоксильными группами ацетатных ионов. Как видно из рисунка, ацетатные ионы образуют кластеры (в плоскости рисунка в кластере 4 иона), причем метильные группы ориентированы внутрь кластера, а карбоксильные – наружу. Т.о., ацетатные кластеры находятся в матрице, состоящей из молекул воды и ионов натрия. Информация о структуре ближнего порядка переохлажденного раствора ацетата натрия практически отсутствует. Однако можно принять во внимание данные об образовании в переохлажденной жидкой фазе кристаллов безводной соли

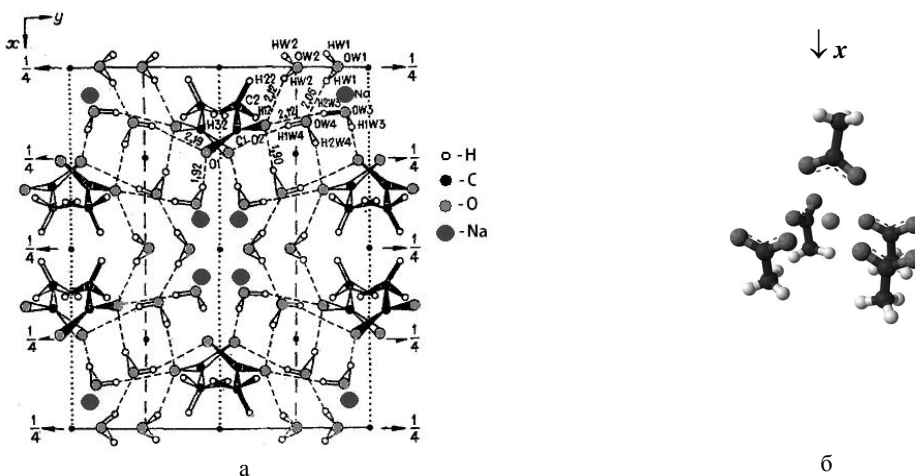


Рис.6. а) – проекция структуры АН-3, видимой вдоль оси z. Водородные связи показаны пунктирными линиями [13]. б) – кристаллическая структура $\text{Na}^+\text{CH}_3\text{COO}^-$ (в центре группы ацетатных ионов находится ион натрия) [14]

CH_3COONa . Согласно литературным источникам [14], безводный ацетат натрия имеет орторомбическую (P_{cca}) решетку с параметрами $a=17.850$, $b=9.982$, $c=6.068$ Å, $Z=12$, $V=1081.2$ Å³, $\rho=1.512$ г/см³. Данная структура имеет Na^+ -карбокисильные слои, чередующиеся с слоями метильных групп. «С-С» – связи вытянуты вдоль оси x (рис. 6 (б)). Представленная информация свидетельствует о существенной разнице структур кристаллов безводного и водного ацетата натрия, из чего следует, что формирование кристаллогидрата путем гидратации из безводной соли связано с кардинальной молекулярной реорганизацией, которая может быть значительно осложнена в кинетическом смысле благодаря наличию разного типа водородных связей.

Перегретый выше T_{cr}^+ расплав, по-видимому, полностью теряет наследственные признаки структуры кристаллогидрата. При охлаждении в переохлажденном водном растворе, вероятно, посредством водородных связей возникает сеть «антикристаллогидратных» кластеров, развитие которой приводит к гелеобразованию. Указанные факторы могут существенно тормозить самопроизвольный генезис кристаллогидратов, тем самым вызывая значительные переохлаждения.

Выводы. Методами термического анализа (ЦТА, ДТА) и визуальной политермии проведено исследование кинетики плавления и кристаллизации ацетата натрия тригидрата (АН-3). Установлен скачкообразный характер перехода кристаллизации от квазиравновесного (с незначительными переохлаждениями) к неравновесно - взрывному типу (с глубокими переохлаждениями). Данное явление связано с предварительным перегревом АН-3 выше критической температуры $T_{cr}^+ \approx 67$ °С. Методом визуальной политермии установлена зависимость линейной скорости продвижения фронта кристаллизации v от величины переохлаждения – $v=f(\Delta T)$. Данная зависимость имеет вид «кривой насыщения» и согласуется с литературными данными. Для анализа результатов исследования привлекаются данные по кристаллическим структурам ацетата натрия тригидрата и безводной соли, которая, согласно литературным данным, формируется в переохлажденном жидком состоянии. Наличие глубоких переохлаждений в жидкой фазе связывается с образованием гелеобразной структуры с «антикристаллогидратным» характером.

РЕЗЮМЕ

Методами термічного аналізу (ЦТА, ДТА) і візуальної політермії проведено дослідження кінетики плавлення й кристалізації ацетату натрію тригідрату (АН-3). Встановлено стрибкоподібний характер переходу кристалізації від квазірівноважного (з незначними переохолодженнями) до нерівноважно - вибухового типу (із глибокими переохолодженнями). Дане явище пов'язане з попереднім перегрівом АН-3 вище критичної температури $T_{cr}^+ \approx 67$ °С. Методом візуальної політермії встановлена залежність лінійної швидкості просування фронту кристалізації v від величини переохолодження – $v=f(\Delta T)$. Дана залежність має вигляд "кривої насичення" і погодиться з літературними даними. Для аналізу результатів дослідження залучаються дані по кристалічних структурах ацетату натрію тригідрату й безводної солі, що, згідно з літературними даними, формується в переохоложеному рідкому стані. Наявність глибоких переохолоджень у рідкій фазі зв'язується з утворенням гелеобразної структури з "антикристалогидратним" характером.

Ключові слова: ацетат натрію тригідрат, термічний аналіз, кінетика плавлення й кристалізації, переохолоджений стан.

SUMMARY

In this paper we study the kinetics of melting and crystallization of sodium acetate trihydrate (SA-3) by thermal analysis (CTA, DTA) and visual polytherm methods. It has been established the jump-like nature of the transition from a quasi-equilibrium crystallization (with slight supercooling) to non-equilibrium- explosive type (deep supercooling). This phenomenon is due to the preliminary overheating of the SA-3 above the critical temperature $T_{cr}^+ \approx 67$ °C. It has been fixed the dependence of the linear movement rate of the solidification front v on the supercooling magnitude – $v=f(\Delta T)$. This dependence has the "saturation curve" form and is agree with published data. In order to analyze the results of the study involved data on the crystal structures of sodium acetate trihydrate and the anhydrous salt, which, according to published data, is formed in supercooled liquid state. The presence of deep supercooling in the liquid phase is associated with the formation of gel-like structure with "anti-crystallgidrate" character.

Keywords: sodium acetate trihydrate, thermal analysis, kinetics of melting and crystallization, supercooled state.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Левенберг В. Д. Аккумуляция тепла/ В. Д. Левенберг, М. Р. Ткач, В. А. Гольстрем – К: Техника, 1991. – 112с.
2. Naumann R. Thermoanalytical investigation of sodium acetate trihydrate for application as a latent heat thermal energy storage material/ R. Naumann, Th. Fanghiinel, H.-H. Emons // Journal of Thermal Analysis. – 1988. – Vol. 33. – P. 685-690.
3. Ulman A. Investigations of sodium acetate trihydrate for solar latent heat storage, controlling the melting point / A. Ulman, B. Valentin // Solar Energy Materials. – 1983. – Vol. 9. – P. 177-181.

4. Cabeza L. F. Thermal performance of sodium acetate trihydrate thickened with different materials as phase change energy storage material / L. F. Cabeza, G. Svensson, S. Hiebler et al. // Applied Thermal Engineering. – 2003. – Vol. 23, Is. 13. – P. 1697-1704.
5. Takahiro Wada. Studies on Salt Hydrates for Latent Heat Storage. IV. Crystallization in the Binary System $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{Na}-\text{H}_2\text{O}$ / Wada Takahiro, Kimura Fumiko, Matsuo Yoshihiro // Bulletin of the Chemical Society of Japan. – 1983. – Vol. 56, N 12. – P. 3827-3829.
6. Takahiro Wada. Studies on Salt Hidrate for Latent Heat Storage, II. Eutectic Mixture of Pseudo-Binary System $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{Na}\cdot 3\text{H}_2\text{O}-\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ / Wada Takahiro, Kimura Fumiko, Yamamoto Riyoichi // Bulletin of the Chemical Society of Japan. – 1983. – Vol. 56, № 4. – P. 1223-1226.
7. Александров В. Д. Анализ тепловых эффектов различных превращений в процессе непрерывного нагревания и охлаждения от водного до безводного ацетата натрия / В. Д. Александров, Н. В. Щebetовская, Е. Э. Самойлова и др. // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Хімія і хімічна технологія. – 2008. – Вип. 137. – С. 47-51.
8. Александров В. Д. Переохлаждения при кристаллизации фенола / В. Д. Александров, В. А. Постников // Журнал физ. химии. – 2005. – Т. 75, № 8. – С. 1357-1361.
9. Александров В.Д. Влияние термовременной обработки жидкой фазы на кристаллизацию сплавов в системе Cd-Bi / Александров В.Д., Фролова С.А. // Вісник Донецького Університету. Серія А: Природничі науки. – 2003. – Вип. 2. – С. 324-330.
10. Александров В. Д. Дослідження передкристалізаційних переохолоджень у системі вода-сульфат натрію / В. Д. Александров, О. В. Соболев, В. А. Постніков // Фізика і хімія твердого тіла. – 2009. – Т.10, № 1. – С. 177-181.
11. Уббелодде А.Р. Расплавленное состояние вещества / А. Р. Уббелодде – М: Металлургия, 1982. – 376 с.
12. Cameron T. S. The crystal structure of sodium acetate trihydrate / T. S. Cameron, K. M. Mannan, M. O. Rahman // Acta Cryst. Section B. – 1976. – Vol. 32. – P. 87-90.
13. Efremov V. A. Refinement of the crystal structure of sodium acetate trihydrate / V. A. Efremov, N. O. Endeladze, V. M. Agre et al. // Journal of Structural Chemistry. – 1986. – Vol. 27, N 3. – P. 177-180.
14. Hsu Leh-Yeh. Structures of two forms of sodium acetate, $\text{Na}^+\cdot\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$ / Leh-Yeh Hsu, C. E. Nordman // Acta Cryst. – 1983. – V. 39. – P. 690-694.

Поступила в редакцію 11.06.2010 г.

УДК 543:662.6

МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ЭТАНОЛА И ОКТАНОВОГО ЧИСЛА ЭТАНОЛСОДЕРЖАЩИХ БЕНЗИНОВ

В. А. Руднев, П. В. Карножицкий, Ю. Л. Александров
Национальный технический университет «ХПИ», г. Харьков

В статье рассмотрены методы исследования этанолсодержащих бензинов, целью которых является установление содержания этанола в бензине и октанового числа смесей бензин-этанол, приготовленных из различных исходных компонентов. При исследовании применялись методы газовой хроматографии, ИК-спектроскопии и кондуктометрии. Рассмотрены возможности применения каждого из методов, учитывая такие параметры, как точность, длительность анализа и влияние исходных компонентов смесей бензин-этанол на полученные результаты.

Ключевые слова: этанол; бензин; газожидкостная хроматография; ИК-спектроскопия; кондуктометрия; октановое число.

Введение. В настоящее время одной из наиболее актуальных и часто обсуждаемых тем, касающихся использования автомобильных бензинов, являются экологические аспекты применения последних и, как следствие, возможные пути уменьшения отрицательного воздействия продуктов сгорания топлива на окружающую среду. Для решения такого рода вопросов предлагаются различные способы, в том числе, применение так называемых альтернативных бензинов, в составе которых содержатся вещества, сохраняющие требуемые технологические параметры, определенные стандартами, но, в то же время, обладающие улучшенными экологическими показателями.

В качестве одной из таких добавок предлагается использовать этанол. Этанол может быть получен из угля, природного газа и биомассы, имеет высокие технологические характеристики, например, октановое число [1]. Применение этанола в качестве добавок к автомобильным бензинам позволяет получить ряд преимуществ по сравнению с классическими бензинами, такие как удаление влаги из топливной системы, облегчение запуска в условиях низких температур, уменьшение выброса оксида углерода (II) и углеводородов в атмосферу при сгорании [2, 3]. Октановые числа этанола по моторному и исследовательскому методам составляют соответственно 90 и 106, 90 и 109, 92 и 108 [4, 5].

Применение этанола в составе автомобильных бензинов определяет необходимость рассчитывать при производстве требуемый компонентный состав бензин-этанол с заданными технологическими параметрами. Кроме того, необходимо контролировать состав уже готовых этанолсодержащих бензинов, причем, в зависимости от требований, возможно применение как методов детального исследования, так и экспресс-методов, позволяющих оперативно оценить состав и технологические параметры бензинов.

Учитывая общемировые тенденции к увеличению использования биотоплив на основе этанола, актуальным представляется исследование бензинов, содержащих большие концентрации этанола, чем это предусмотрено стандартами, действующими на территории Украины (например, ДСТУ 4839:2007 [6], ДСТУ 4063-2001 [7]). К тому же, необходимо учитывать тот факт, что лабораториям, занимающимся исследованием нефтепродуктов, зачастую приходится анализировать бензины, произведенные во внезаводских условиях. Как показывает практический опыт работы авторов, в составе таких бензинов нередко содержится этанол в значительных количествах. У исследователей, оказавшихся перед необходимостью исследовать такие бензины, может вызывать затруднения выбор наиболее подходящего метода исследования с точки зрения имеющегося оборудования и прецизионности измерений.

Необходимо отметить, что подавляющее число газохроматографического оборудования приспособлено для исследования бензинов на содержание бензола и ароматических соединений. Применение специальных методов для исследования этанолсодержащих бензинов, например, метода газовой хроматографии с использованием переключающихся колонок, как показано в стандарте ДСТУ EN 13132:2000 [8], либо с использованием пламенно-ионизационного детектора по кислороду, как показано в стандарте ДСТУ EN 1601:2000 [9], затруднено в связи с ограниченной доступностью оборудования из-за высокой стоимости последнего. Применение газохроматографического метода в соответствии стандарта ASTM D 4815-09 [10] не позволяет анализировать смеси с высоким содержанием этанола (в перечисленных газохроматографических методах ограничивается максимальный уровень 12-15%), а также не позволяет параллельно проводить определение бензола. Определение содержания этанола методом инфракрасной спектроскопии, например, в соответствии стандарту ASTM D 5845-01 [11] также ограничено по максимальному содержанию определяемого этанола. Следует отметить высокую стоимость ИК-спектрометров. Значительная часть таких приборов находится в лабораториях, исследующих широкий круг вопросов, в частности, касающихся бензинов. Программное обеспечение спектрометра изначально может быть предназначено для решения иного типа задач, в которые не входит определение количественных характеристик нефтепродуктов.

Учитывая вышеописанные затруднения, связанные с применением стандартных методик (высокая стоимость оборудования, ограничение по максимально допустимой определяемой концентрации этанола в бензине, невозможность параллельного определения иных компонентов), необходимо рассмотреть возможность применения оборудования, предназначенного для решения широкого круга задач, для определения количественных характеристик содержания этанола в бензинах.

Кондуктометрические исследования смесей бензин-этанол проводились ранее, в частности, методика и результаты показаны в работе [12], где показаны зависимости удельной электрической проводимости от содержания этанола в составе бензина. Однако, представляется актуальным установление наличия функциональной зависимости между такими параметрами, как удельная электрическая проводимость и октановое число, учитывая низкую стоимость кондуктометрического оборудования и возможность широкого применения такого оборудования в производственной практике.

В данной статье предлагается рассмотреть возможность комплексного подхода к решению задачи о составе и свойствах смесевых бензинов, рассматривающихся как смесь базового углеводородного бензина и этанола. Такой подход включает в себя моделирование вариантов по возможным составам бензинов, определение октанового числа и содержания этанола.

Экспериментальная часть. Приготовленные смешиванием компонентов бензин-этанольные смеси исследовали методами ГЖХ, ИК-Фурье спектроскопии и кондуктометрии, а также измеряли октановые числа для установления влияния свойств исходных компонентов на октановые числа модельных смесей.

Измерения октановых чисел проводились на установке УИТ-65 согласно стандарту [13]. Исследования методом ГЖХ проводили на хроматографе «Кристалл-2000М» производства ЗАО СКБ «Хроматэк», методом ИК-спектроскопии на ИК-Фурье спектрометре «Nicolet 380» производства «Thermo Electron Corporation», методом кондуктометрии на кондуктометре «СКВ» производства ООО «ИЦПК».

При приготовлении модельных смесей использовались прямогонные газоконденсатные фракции с октановыми числами по моторному методу 51,1; 53,2; 58,6; 60,4; 62,6; 65,5 и абсолютизированный (безводный) этанол. Безводный этанол получали путем дополнительного обезвоживания лабораторного образца этанола, заключающегося в кипячении этанола с магниевой стружкой с обратным холодильником в присутствии четыреххлористого углерода, последующим добавлением этанола, кипячении и перегонке [14]. При приготовлении бензин-этанольных смесей необходимо учитывать их стабильность. Расслаиваются бензин-этанольные смеси, содержащие воду, хотя в определенных диапазонах концентраций даже смеси бензин-этанол-вода стабильны в течение значительного периода времени.

Исследования методом ГЖХ проводились при следующих технических условиях: газ-носитель – азот, тип детектора – пламенно-ионизационный, колонка – Quadrex 007-1 50 м * 0,25 мм, неподвижная фаза – полидиметилсилоксан, температура детектора – 180 °С, температура испарителя 200 °С, расход газа-носителя – 20 мл/мин, начальная температура колонки – 35 °С, длительность изотермической части – 10 мин, скорость нагрева – 5 °С/мин, максимальная температура колонки 200 °С, длительность анализа – 110 мин. Расчет площадей пиков, их идентификацию производили с помощью программы «Хроматэк-Аналитик 2.5» (ЗАО СКБ «Хроматэк»), пересчет в объемные концентрации производили с помощью программы «Gasoline» (ЗАО СКБ «Хроматэк»).

Исследования методом ИК-Фурье спектроскопии проводились с использованием метода спектроскопии внутреннего отражения (нарушенного полного внутреннего отражения) [15]. Регистрация, нормировка, корректировка спектров с учетом выбранного метода, качественная и количественная интерпретация полос поглощения, проводились автоматически с использованием программы EZOMNIC 7.4 (Thermo Electron Corporation). В настоящее время известно значительное количество методов исследования нефтепродуктов, основанных на спектроскопии в ИК-области [16]. Спектры поглощения бензинов в ИК-области обладают определенным сходством ввиду некоторой близости своего углеводородного состава, в то время как спектр этанола обладает собственными полосами поглощения, отличными от бензиновых.

Предложенный метод спектроскопического определения этанола также позволяет определять количественное содержание этанола в диапазоне высоких концентраций при использовании предложенных отношения интенсивностей характеристических полос поглощения бензинов и этанола, что сводит к минимуму операции по калибровке прибора (учитывая линейность полученной зависимости) и расчету результатов, что особенно важно также при базовом наборе программного обеспечения, используя которое, зачастую, затруднительно или невозможно выполнить операции по построению градуировочных зависимостей и исследованию образцов автоматически. Исследование методом кондуктометрии проводилось для смесей бензин-этанол при термостатировании при 20 °С.

Обсуждение результатов. Октановые числа измерялись для модельных смесей, содержащих 0, 20, 40, 50, 60, 80 % об. этанола в смеси с бензином. Значение октанового числа этанола по моторному методу принималось равным 91,7 (как среднее значение из работ [4, 5]) Результаты измерения октановых чисел представлены на рис. 1 в виде зависимостей октанового числа от содержания этанола в смеси, которые представляют собой полиномы четвертой степени. Прямогонные газоконденсатные фракции с ок-

тановими числами по моторному методу 51,1; 53,2; 58,6; 60,4; 62,6; 65,5, используемые при приготовлении модельных смесей, условно обозначены на рис.1 точками соответственно 6, 5, 4, 3, 2, 1.

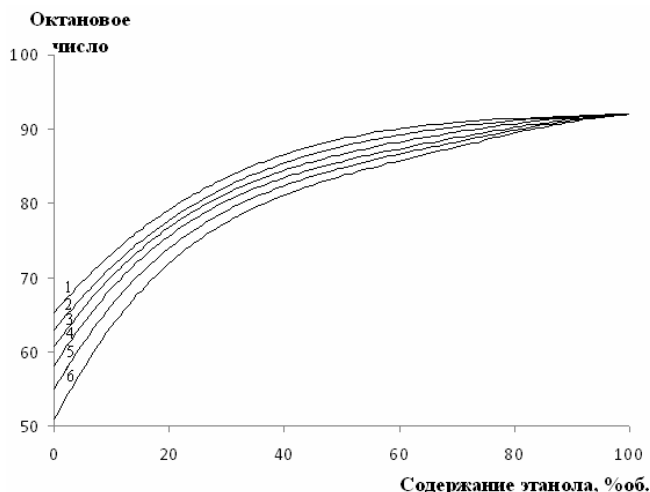


Рис. 1. Зависимость октанового числа по моторному методу смеси бензин-этанол от содержания этанола

Хроматографическое исследование. Применение метода газожидкостной хроматографии в совокупности с обработкой полученных хроматограмм с помощью программы «Gasoline» позволяет производить идентификацию пиков и расчет состава бензинов, используя метод процентной нормировки по площади с учетом коэффициентов чувствительности пламенно-ионизационного детектора. Такой подход позволяет определять значительную часть компонентов, несмотря на то, что некоторые компоненты остаются неидентифицированными. Неидентифицированные компоненты, массовая доля которых на практике оказывается < 5%, учитываются программно как такие, что имеют среднестатистический характер. При этом остается открытым вопрос о применении данного подхода при высоких содержаниях отдельных компонентов, что может иметь место при исследовании этанолсодержащих бензинов. Целью проведения данного хроматографического исследования являлось установление возможности количественного определения этанола в значительных концентрациях при параллельном определении других углеводородов, для чего хроматографированию подвергали прямогонные бензины с заведомо известным содержанием этанола, и не являлось детальное определение параметров прецизионности выбранного метода [17], чему может быть отведена отдельная статья.

Проведенные хроматографические исследования показали высокую селективность при определении этанола в бензин-этанольных смесях. Этанол элюируется между бутаном и изопентаном. В исходных бензинах, как показывает практика, содержание каких-либо соединений, также элюирующихся между бутаном и изопентаном, чрезвычайно низкое, по сравнению с содержанием этанола. Определение этанола не мешает определению других компонентов, в частности, ароматических. На рис. 2 приведен фрагмент хроматограммы ГЖХ смеси бензин-этанол (содержание этанола 40%об.).

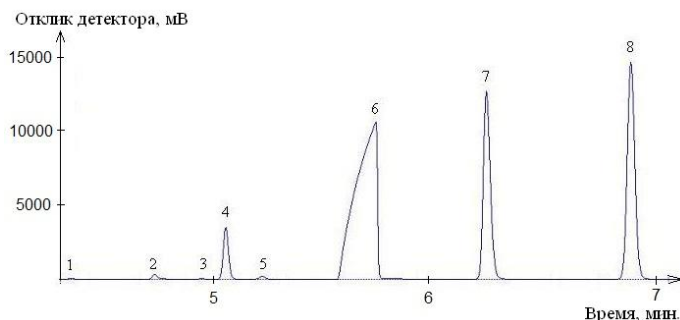


Рис. 2. Фрагмент хроматограммы смеси прямогонного бензина с этанолом

Значение введенной концентрации этанола принималось равным постоянному значению. В таком случае, среднее незначимо отличается от константы, если выполняется неравенство:

$$\frac{|\bar{w} - w_{введ.}|}{S_x} \sqrt{n} < t(P; f), \tag{1}$$

где

Как видно из рис. 1, влияние исходного бензина на октановое число смеси уменьшается с увеличением содержания этанола в смеси, о чем свидетельствует нелинейный характер зависимости октанового числа от содержания этанола. При содержании этанола от 40 до 60 % об. достигаются октановые числа по моторному методу, соответствующие товарным бензинам марок А-92, А-95 и А-98 (имеющие октановые числа по моторному методу соответственно 82,5, 85,0, 88,0) [7].

Точность метода определения октановых чисел автомобильных бензинов устанавливается стандартом [13], которым допускается отклонение от среднего результата $\pm 0,5$ октановой единицы для измерений, выполненных одним оператором последовательно на одной установке.

На рис. 2 цифрами обозначены пики следующих компонентов: 1 – пропан, 2–изобутан, 3–бутен-1, 4– н-бутан, 5– бутен-2 , 6–этанол, 7–изопентан, 8– н-пентан.

Исследовались модельные смеси бензин-этанол, содержащие 30, 50, 70 % об. этанола. Учитывая значительную длительность анализа, определение содержания этанола проводилось в серии из 4-х параллельных определений. Сравнение полученных средних значений проводилось с использованием *t*-критерия в соответствии с [18].

\bar{w} – измеренное среднее содержания этанола; $w_{введ.}$ – значение введенной концентрации этанола; n – количество параллельных измерений; S_x – стандартное отклонение среднего результата измерений; $t(P;f)$ – коэффициент Стьюдента при доверительной вероятности $P=0,95$ и числе степеней свободы $f=3$.

Полученные экспериментальные значения содержания этанола незначимо отличаются от введенного значения ($t_{расч.} < t_{табл.}$) при величине доверительного интервала от $\pm 1,90$ до $\pm 2,94$ % отн., что позволяет сделать вывод о возможности применения метода газожидкостной хроматографии с применением указанной хроматографической колонки, технологических условий работы хроматографа и метода программного расчета при определении содержания этанола в бензинах.

Результаты хроматографических исследований показаны в табл. 1.

Таблица 1
Результаты хроматографического исследования бензин-этанольных смесей.

№ п/п	Введенное значение, %об.	Рассчитанное среднее значение, % об.	Стандартное отклонение	Доверительный интервал, % отн.	$t_{расч.}$ ($t_{табл.}=3,18$)
1	30	29,74	0,35	1,90	2,65
2	50	50,16	0,64	2,04	1,80
3	70	69,78	1,29	2,94	1,89

Спектроскопическое исследование. Исследование в средней ИК-области показало, что спектр поглощения этанола в ИК-области существенно отличается от спектра бензинов качественными и количественными характеристиками собственных полос поглощения.

Оптическая плотность

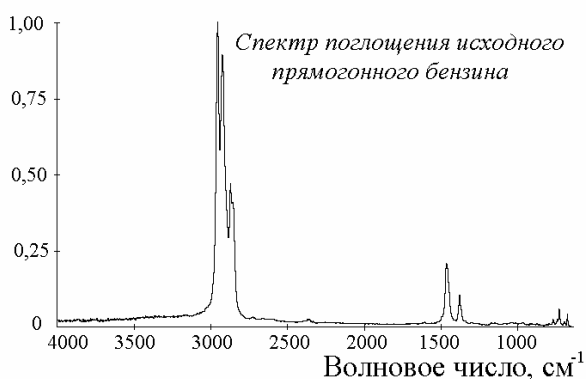


Рис. 3. Спектры поглощения прямогонного бензина и смеси бензин-этанол в ИК-области

Спектры типичного прямогонного бензина и смеси бензин-этанол в равном объемном соотношении приведены на рис. 3. Шкала оптической плотности нормирована по высоте наиболее интенсивной полосы поглощения. Для исследования готовились смеси из шести ранее приведенных бензинов с октановыми числами по моторному методу от 51,1 до 65,5 с содержанием этанола в смеси от 0 до 100 % (об.) через 10 % (об.).

При определении количественных характеристик содержания этанола в данной работе предлагается использовать отношение суммы высот полос поглощения при 1090-1091, 1051-1051, и 880-882 $см^{-1}$ (наиболее характеристичных для этанола) к сумме высот полос поглощения при 2957-2977 и 2927-2935 $см^{-1}$ (наиболее характеристичных для углеводородных частей молекул) [19-22]. Полученное отношение обозначено коэффициентом k .

При обработке экспериментальных значений зависимости коэффициента k от содержания этанола получена градуировочная зависимость вида

$$k = 0,0193 \cdot w - 0,0147 \tag{2}$$

где w – содержание этанола (% об.).

Величина достоверности аппроксимации (R^2) составляет 0,9983.

Статистическая обработка при построении градуировочной зависимости и оценке результатов проводилась в соответствии [23]. Искомое значение w находили из функции анализа, обратной полученной градуировочной зависимости:

$$w = (k - a) / b \tag{3}$$

где $a = -0,0147$; $b = 0,0193$ (коэффициенты уравнения (2)).

Стандартное отклонение для w получают из выражения:

$$S_x = \frac{S_0}{b} \sqrt{\frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \left(\frac{S_b}{b}\right)^2 \cdot \left(\frac{\bar{k} - \bar{k}}{S_0}\right)^2} \tag{4}$$

где S_x – стандартное отклонение для среднего значения концентрации w ; S_0 – стандартное отклонение между опытными (k_i) и рассчитанными (K_i) по уравнению (1) значениями ($S_0=0,0297$); m – количество точек при градуировке, включая параллельные определения ($m=36$); n – количество параллельных опытов при измерении по полученной градуировочной зависимости ($n=3$, см. ниже); \bar{k} – среднее значение, полученное при измерении с использованием градуировочной зависимости; $\overline{\overline{k}}$ – среднее значение коэффициентов k , применявшихся при построении градуировочного графика ($\overline{\overline{k}} = \sum_{i=1}^m \frac{k_i}{m}$, $\overline{\overline{k}}=0,9514$); S_b – стандартное отклонение коэффициента b ($S_b=0,000145$).

Значение S_0 рассчитывается по формуле

$$S_0 = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^m (k_i - K_i)^2\right) / (m - 2)}. \tag{5}$$

Для вычисления S_b используется формула

$$S_b = \sqrt{\frac{S_0^2}{\sum_{i=1}^m (w_i - \bar{w})^2}}, \tag{6}$$

где w_i – известные значения концентрации этанола, используемые при градуировке; \bar{w} – среднее из известных значений концентраций этанола, используемых при градуировке.

Коэффициент k

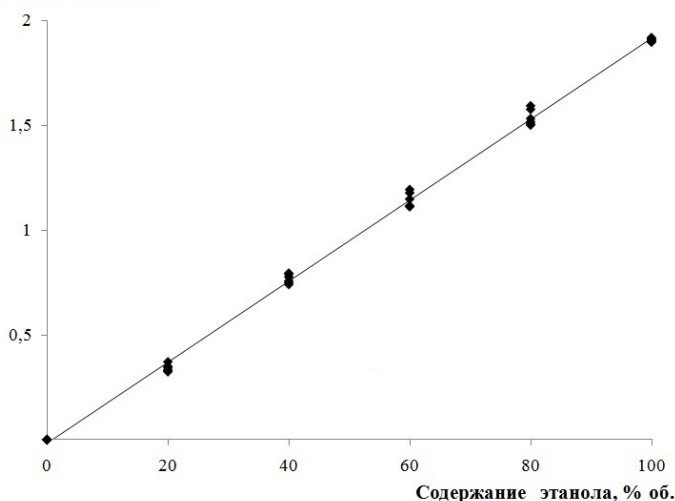


Рис. 4. Зависимость коэффициента k от содержания этанола в смеси бензин-этанол

Правильность полученной градуировки проверяли методом введено-найденно в диапазоне концентраций этанола 30-70% об., что соответствует октановым числам такого же уровня, каким обладают товарные высокооктановые бензины марок А-92, А-95, А-98 (не менее: 82,5; 85,0; 88,0 единиц по моторному методу соответственно) [7].

В качестве стандартного образца готовилась смесь четырех произвольно отобранных образцов прямогонного бензина с неизвестным октановым числом с этанолом. Всего были приготовлены три модельных смеси с содержанием этанола 30, 50, 70% об. этанола. Снятие спектра каждого образца и расчеты проводились трижды ($n=3$). Проводился расчет среднего значения \bar{k} по трем параллельным опытам. По значению \bar{k} вычислялась концентрация этанола в смеси, а также стандартное отклонение для концентрации по уравнению (4).

Проверка значимости различия между полученным средним значением концентрации этанола и введенным рассчитывалась в соответствие с [18] по формуле (1) при числе степеней свободы $f=m-2$.

Значения тестовой статистики представлены в табл. 2. Полученные экспериментальные значения содержания этанола незначимо отличаются от введенного значения, что позволяет сделать вывод о пригодности использования предложенной функциональной зависимости отношения сумм оптических плотностей полос поглощения этанола и бензина к содержанию этанола.

Таблица 2

Результаты ИК-спектроскопического исследования бензин-этанольных смесей.

№ п/п	Введенное значение, %об.	Рассчитанное среднее значение, % об.	Стандартное отклонение	Доверительный интервал, % отн.	$t_{расч.}$ ($t_{табл.}=2,03$)
1	30	30,96	0,924	3,50	1,80
2	50	49,43	0,938	2,22	1,06
3	70	71,06	0,980	1,62	1,87

Кондуктометрическое исследование. Целью кондуктометрического исследования этанол-бензиновых смесей является установление наличия взаимосвязи между октановым числом этанолсодержащих бензинов и их удельной электрической проводимостью.

Для исследования готовились модельные смеси, состоящие из бензина (0-70 об.) и этанола (100-30% об.). Измерения проводились при термостатировании смесей при температуре 20⁰С, учитывая зависимость удельной электропроводности от температуры [24, 25].

Для приготовления модельных смесей использовался бензин с октановым числом 60,4 (по моторному методу). Значения удельной электрической проводимости вычисляли из четырех параллельных опытов. На рисунке 4 показаны значения удельной электрической проводимости, соответствующие октановым числам при содержании этанола в модельных смесях от 20 до 100%, что обусловлено техническими характеристиками оборудования. Коэффициент корреляции удельной электрической проводимости и октановых чисел составил 0,987, величина достоверности аппроксимации полиномом второй степени составила 0,983.

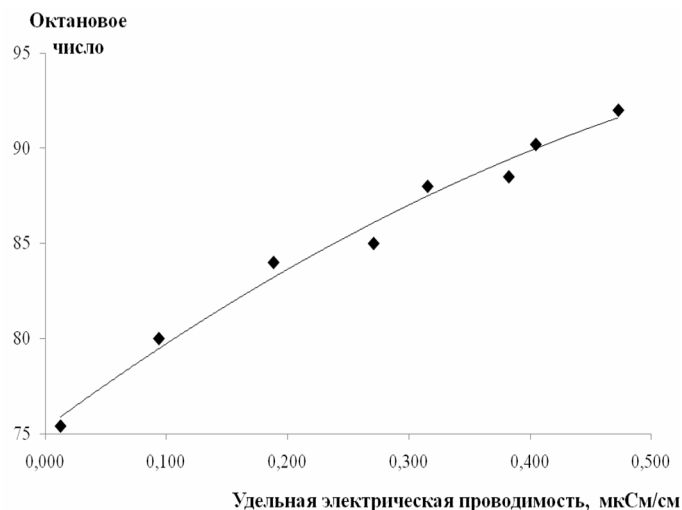


Рис. 5. Взаимосвязь октанового числа с удельной электрической проводимостью.

Учитывая нелинейную зависимость октанового числа (что было проиллюстрировано в начале данной работы) и удельной электрической проводимости [12, 24] от содержания этанола, а также высокую корреляцию между октановым числом этанол-бензиновых смесей и их удельной электрической проводимостью, логично предположить о существовании функциональной взаимосвязи последних. Это предоставляет возможность экспрессно диагностировать непосредственно октановое число этанолсодержащего бензина, минуя стадию определения содержания этанола. Такой метод может быть более предпочтителен для применения при известном октановом числе исходного (углеводородного) бензина, который применялся для приготовления смесового (этанолсодержащего) бензина,

либо для оценки октанового числа при высоких концентрациях этанола, когда уменьшается влияние октанового числа исходного бензина на октановое число полученного смесового бензина.

Выводы. В результате проведенных измерений показана возможность применения различных методов и подходов для решения вопросов, связанных с установлением компонентного состава этанолсодержащих бензинов. Применение метода газожидкостной хроматографии позволяет с высокой точностью определять наличие и количественное содержание этанола с использованием стандартных методик детального исследования состава бензинов. Однако газохроматографический метод требует значительного времени проведения анализа. В условиях ограниченного времени (в основном, при экспресс-анализах) возможно применение иных методов исследования, таких как метод ИК-спектроскопии и метод кондуктометрии.

Метод ИК-спектроскопии позволяет определять наличие и количественное содержание этанола в исследуемых смесевых бензинах, используя характеристические полосы поглощения этанола в ИК-области. Учитывая существенные концентрации этанола, которые необходимы для обеспечения требуемых стандартами октановых чисел [6, 7], определение наличия таких полос и их математическая обработка не должна вызывать затруднений. Возможности применения жидкостных кювет, использующих принцип метода полного внутреннего отражения, а также набора стандартных бензинов для калибровки указываются в стандартных методиках исследования [26], однако в данной работе показана возможность применения многофункциональной приставки (для исследования как жидкостей, так и твердых объектов), использующей метод нарушенного полного внутреннего отражения. Также применение предложенного метода не требует использования специального программного обеспечения, помимо базового. Применение относительных параметров количественного содержания этанола в смесевых бензинах позволяет проводить измерения без использования кювет с заданной толщиной слоя исследуемого объекта.

Метод кондуктометрии, несмотря на высокую чувствительность к удельной электропроводности исходных компонентов смеси [12], может применяться при контроле качества выпускаемой продукции, оценке октанового числа, приемоотпускных операциях, а также для решения диагностических вопросов, связанных с возможностью установления наличия в бензинах этанола, что основано на значительном отличии электрофизических свойств этанола и углеводородных компонентов бензинов [27].

Следует отметить, что возможности используемых методов могут варьироваться в зависимости от задач, поставленных перед исследователями, а также объектов, подлежащих исследованию. Применение

экспресс-методов на стадии оценки свойств и качества исследуемых бензинов позволяет более четко и правильно сформулировать этапы предстоящего, более детального исследования (в общем случае) и предотвратить выполнение этапов, не несущих необходимой информации (в каждом конкретном случае).

РЕЗЮМЕ

В статті розглянуто методи дослідження етанолвмісних бензинів, метою яких є визначення вмісту етанолу у бензині та октанового числа сумішей бензин-етанол, які були приготовлені з різних вихідних компонентів. При дослідженні застосовувалися методи газової хроматографії, ІЧ-спектроскопії та кондуктометрії. Розглянуто можливості застосування кожного з методів, враховуючи такі параметри, як прецизійність, тривалість аналізу та вплив вихідних компонентів сумішей бензин-етанол на отримані результати.

Ключові слова: Етанол; Бензин; Газорідинна хроматографія; ІЧ-спектроскопія; Кондуктометрія; Октанове число.

SUMMARY

The methods of research the ethanol content gasoline to determine the content of ethanol in gasoline and determine an octane number of petrol-ethanol mixtures, prepared from different initial components, are investigated. The methods of gas chromatography, IR-spectroscopy and conductometry are applied. The possibilities of application each of method are considered, taking into account such parameters, as precision, measurements time and influence of the initial components of the petrol-ethanol mixtures to the obtained results.

Keywords: Ethanol; Gasoline; Gas-liquid chromatography; IR-spectroscopy; Conductometry; Octane number.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- Gao J. Spray properties of alternative fuels: A comparative analysis of ethanol-gasoline blends and gasoline / J. Gao, D. Jiang, Z. Huang // *Fuel*. – 2007. – Volume 86, Issues 10-11. – P. 1645-1650.
- Hamid H. Handbook of MTBE and other gasoline oxygenates. / H. Hamid, M. A. Ali. – New York: Basel, 2004. – 375 p.
- Palmer F.H. Vehicle performance of gasoline containing oxygenates / F.H. Palmer // *International conference on petroleum based and automotive applications*. London: Institution of Mechanical Engineers Conference Publications, MEP. – 1986. – P. 36-46.
- Reyton K. B. Ondeo/Nalco fuel field manual / K. B. Peyton // McGraw-Hill Professional, 2nd edition, 2001. – 400 p.
- Киселев В. П. Альтернативные методы определения детонационной стойкости бензинов и их компонентов / В. П. Киселев, Ю. В. Киселев // *Катализ и нефтехимия*. – 2001. – № 9-10. – С. 77-86.
- ДСТУ 4839:2007 Бензини автомобільні підвищеної якості. Технічні умови. Введ. 2007-10-03. Київ.: Держстандарт України. 2007. – 14 с.
- ДСТУ 4063-2001 Бензини автомобільні. Технічні умови. Введ. 2001-11-29. – Київ.: Держстандарт України. 2001. – 53 с.
- ДСТУ EN 13132:2000 Нафтопродукти рідкі. Бензин неетильований. Визначення органічних кисневмісних сполук та загального вмісту органічно зв'язаного кисню газохроматографічним методом з перемиканням колонок. Введ. 2008-06-01. – 21 с.
- ДСТУ EN 1601:2000 Нафтопродукти рідкі. Бензини неетильовані. Визначення органічних кисневмісних сполук та загального вмісту органічно зв'язаного кисню методом газової хроматографії (О-ПІД). Введ. 2004-10-01. – 18 с.
- ASTM D 4815 Standard Test Method for Determination of MTBE, ETBE, TAME, DIPE, tertiary-Amyl Alcohol and C1 to C4 Alcohols in Gasoline by Gas Chromatography. Publ. 2009-10-01. – 10 p.
- ASTM D 5845-01 Standard Test Method for Determination of MTBE, ETBE, TAME, DIPE, Methanol, Ethanol and tert-Butanol in Gasoline by Infrared Spectroscopy. Publ. 2006-12-01. – 5 p.
- Rocha M. S. A simple impedance method for determining ethanol and regular gasoline mixtures mass contents / M. S. Rocha, J. R. Simoes-Moreira // *Fuel*. – 2005. – Vol. 84, No. 4. – P. 447-452.
- ГОСТ 511-82 Топливо для двигателей. Моторный метод определения октанового числа. Введ. 1983-07-01. – Москва: ИПК Издательство стандартов. – 2001. – 12 с.
- Гордон А. Спутник химика. Физико-химические свойства, методики, библиография / А. Гордон, Р. Форд. – М.: Мир, 1976. – 541 с.
- Еленский А. А. Определение фазового состояния бинарных смесей ТВИН-80-вода методом ИК-спектроскопии / А. А. Еленский, Б. Н. Тарасевич, Г. П. Ямпольская // *Вест. Московского ун-та. Сер. 2. Химия*. – 2006. – Т. 47, Вып.6. – С. 383-386.
- Иванова Л. В. ИК-спектрометрия в анализе нефти и нефтепродуктов. / Л. В. Иванова, Р. З. Сафиева, В. Н. Кошелев // *Вестник Башкирского университета*. – 2008. – Т. 13, вып.14. – С. 869-874.
- ГОСТ Р ИСО 5725-2-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Часть 2. Основной метод определения повторяемости и воспроизводимости стандартного метода измерений. Введ. 2002-04-23. – 43 с.
- Гармаш А. В. Метрологические основы аналитической химии / А. В. Гармаш, Н. М. Сорокина. – М.: Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, 2005. – 42 с.
- Казицина Л. А. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии / Л. А. Казицина, Н. Б. Куплетская. – М.: Высшая школа, 1971. – 264 с.
- Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. Основы, техника, аналитическое применение. / А. Смит. – М.: Мир, 1982. – 328с.

21. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул / Л. Беллами. – М.: Издательство иностранной литературы, 1963. – 592 с.
22. Купцов А. Х. Фурье-спектры комбинационного рассеяния и инфракрасного поглощения полимеров. Справочник / А. Х. Купцов, Г. Н. Жижин. – М.: Физматлит, 2001. – 656 с.
23. Дерффель К. Статистика в аналитической химии / К. Дерффель. – М.: Мир, 1994. – 268 с.
24. Kirk D. W. Conductivity of gasoline-ethanol-water mixtures / D. W. Kirk // Fuel. – 1983. – Vol. 62, No 12. – P. 1512-1513.
25. ASTM D 2624-00 Standard test methods for electrical conductivity of aviation and distillate fuels. Publ. 2009-12-01. – 11 p.
26. ГОСТ Р 52256-2004 Бензины. Определение МТБЭ, ЭТБЭ, ТАМЭ, ДИПЭ, метанола, этанола и трет-бутанола методом инфракрасной спектроскопии. Введ. 2004-09-29. – М.: ИПК Издательство стандартов, 2004. – 8 с.
27. Никольский Б. П. Справочник химика. В 7 т. / Б. П. Никольский // М.: Химия, 1966. – Т. 1 – 1072 с.

Поступила в редакцию 19.03.2010 г.

КАТАЛИЗ БЕНЗОАТАМИ ТЕТРААЛКИЛАММОНІЯ РАСПАДА ПЕРОКСИДА БЕНЗОІЛА

Н. А. Туровский, Н. А. Голубицкая*, Е. В. Ракша, Е. Н. Пастернак

*Национальный медицинский университет им. А. А. Богомольца, г. Киев

Установлено каталитическое действие бензоатов тетраалкиламмония в реакции распада пероксида бензоила. Определены кинетические параметры реакции. Показано, что с увеличением собственного объема катиона бензоатов уменьшается эффект химической активации пероксида бензоила в данной системе. Предложен механизм реакции.

Ключевые слова: пероксид бензоила, бензоаты тетраалкиламмония, катализ, химическая активация.

Введение. Широкий спектр радикально-цепных промышленных процессов полимеризации, окисления органического сырья молекулярным кислородом, структурирования полимеров требуют наличия инициаторов – химического источника свободных радикалов. Органические пероксиды обеспечивают необходимые скорости иницирования в достаточно широком температурном интервале [1, 2]. Управлять реакционной способностью пероксидов можно путем варьирования их структуры либо введением различных активаторов. Окислительно-восстановительные системы пероксид – соль металла переменной валентности позволяют генерировать радикальные частицы при низких температурах [3], однако их практическое использование ограничено вследствие быстрой дезактивации катализатора уже на ранней стадии протекания процесса [4]. Альтернативой солям металлов могут выступать органические соли. Селективными и эффективными катализаторами радикально-цепного окисления углеводородов являются четвертичные аммониевые соли [4, 5]. Доказана высокая эффективность иницирующих систем на основе пероксида бензоила и солей четвертичного аммония как в реакции полимеризации метилметакрилата [6, 7], так и при жидкофазном окислении алкиларенов [8, 9].

Известно, что при взаимодействии пероксида бензоила с галогенидами четвертичного аммония одним из продуктов реакции является бензоат-анион, который наряду с тетраалкиламмоний галогенидами может активировать распад пероксида при более низкой температуре по сравнению с термолизом инициатора. Поэтому целью данной работы стало установление кинетических закономерностей и причин возможной активации распада пероксида бензоила (ВРО) бензоатами тетраалкиламмония (Alk₄NBenz).

Экспериментальная часть. Пероксид бензоила очищали двукратной перекристаллизацией из насыщенного этанольного раствора. Его чистоту (99,9 %) контролировали методом йодометрии по содержанию активного кислорода [10]. Растворитель (ацетонитрил) перегоняли над P₂O₅. Его чистоту контролировали кондуктометрически ($\chi = (8.5 \pm 0.2) \cdot 10^{-6} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ при 303 К). Бензоаты тетраалкиламмония (Me₄NBenz, Et₄NBenz, Pr₄NBenz, Bu₄NBenz) очищали переосаждением из насыщенного ацетонитрильного раствора.

Каталитическое действие Me₄NBenz в реакции распада ВРО изучали в стеклянном термостатируемом реакторе при постоянном перемешивании в инертной атмосфере. Реакцию распада ВРО в присутствии аммониевых бензоатов (Et₄NBenz, Pr₄NBenz, Bu₄NBenz) проводили в стеклянных запаянных ампулах, содержимое которых продували аргоном. Контроль за протеканием процесса осуществляли методом йодометрического титрования с потенциометрическим фиксированием точки эквивалентности.

Результаты и их обсуждение. В условиях каталитического содержания Me₄NBenz уже при 323 К наблюдается увеличение скорости распада пероксида бензоила в ацетонитриле. Скорость термического распада пероксида в этих условиях пренебрежимо мала. Введение Me₄NBenz ($2,0 \cdot 10^{-2}$ моль·дм⁻³) в выдержанный в течение двух часов раствор пероксида ([ВРО]₀ = $1,0 \cdot 10^{-1}$ моль·дм⁻³) приводит к активации системы и началу распада ВРО с заметной скоростью (рис. 1, кривая 1). Через 10 часов после введения соли изменение концентрации пероксида бензоила составило $\Delta[\text{ВРО}] = 9 \cdot 10^{-2}$ моль·дм⁻³ (90%), что в 4,5 раза превышает исходную концентрацию бензоата в системе. Кинетическая кривая удовлетворительно описывается кинетическим законом первого порядка. Такое соотношение количества израсходованного пероксида и начальной концентрации бензоата, а также характер кинетической кривой указывает на каталитическое действие Me₄NBenz в реакции распада пероксида бензоила. После полного расходования пероксида в систему ввели новую его порцию (рис. 1, кривая 2). Снова наблюдали распад пероксида с аналогичной скоростью. Следовательно, в данной системе не происходит дезактивации катализатора.

Изучение влияния концентрации Me₄NBenz на скорость реакции распада ВРО (исходная концентрация в реакционной смеси составила [ВРО]₀ = $0,1$ моль·дм⁻³) проводили в диапазоне концентраций соли $2,0 \cdot 10^{-3}$ – $2,0 \cdot 10^{-2}$ моль·дм⁻³ при 323 К до конверсии пероксида 50–60%. Кинетические кривые линеаризуются в координатах первого порядка. Определяемая в этих условиях константа скорости реакции (k , с⁻¹) линейно возрастает с увеличением концентрации бензоата в широком диапазоне

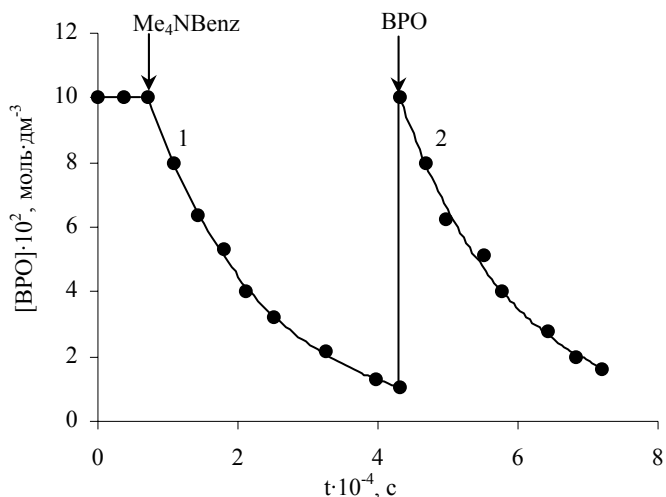


Рис.1. Кинетические кривые каталитического распада пероксида бензоила в ацетонитриле ($[Me_4NBenz]_0=2,0 \cdot 10^{-2}$ моль·дм⁻³, T = 323 K)

соотношений концентраций реагентов $[BPO]_0 : [Me_4NBenz]_0$ от 5:1 до 50:1. Полученные величины k приведены ниже:

$k \cdot 10^5, c^{-1}$	0.73 ± 0.02	1.29 ± 0.05	3.0 ± 0.1	6.6 ± 0.2
$[Me_4NBenz]_0 : [BPO]_0$	1 : 50	1 : 25	1 : 10	1 : 5
$[Me_4NBenz]_0 \cdot 10^3, \text{моль} \cdot \text{дм}^{-3}$	2	4	10	20

Нужно отметить, что даже при указанном соотношении реагентов 50:1 при 323 K величина k превышает константу скорости термоллиза ВРО [11] в 28 раз, что дает возможность пренебречь вкладом термического распада пероксида. Реакция распада пероксида бензоила в присутствии Me_4NBenz является реакцией первого порядка ($n = 0.93 \pm 0.04$) по бензоату.

При изучении влияния природы органических солей на их реакционную способность в процессе радикального распада ВРО показано, что ключевая роль принадлежит аниону соли [12]. Но позднее для реакции химически активированного распада пероксида лаурилы [13] в присутствии органических солей показано влияние природы катиона соли. Для изучения влияния природы катиона бензоатов тетраалкиламмония в реакции распада ВРО проведены систематические кинетические исследования реакции в температурном интервале 303-333 K. Реакции проводили при соотношении исходных концентраций реагентов $[BPO]_0 : [Alk_4NBenz]_0 = 5:1$. Кинетические кривые, полученные в этих условиях, удовлетворительно описываются кинетическим уравнением первого порядка до глубины конверсии пероксида не менее 60%. На основе полученных констант скорости (k, c^{-1}) рассчитаны активационные параметры реакции распада ВРО в присутствии Alk_4NBenz с различной структурой катиона (табл. 1).

Таблица 1
Кинетические параметры реакции распада пероксида бензоила, активированного бензоатами тетраалкиламмония ($[BPO]_0 = 0,1$ моль·дм⁻³, $[Alk_4NBenz]_0 = 2,0 \cdot 10^{-2}$ моль·дм⁻³)

Alk ₄ NBenz	$k \cdot 10^5, c^{-1}$					$E_a,$ кДж/моль	lgA (A. c ⁻¹)
	303 K	313 K	323 K	328 K	333 K		
Me ₄ NBenz	1.14 ± 0.05	2.7 ± 0.1	6.6 ± 0.3	9.9 ± 0.3	14.0 ± 0.5	71 ± 3	7.3 ± 0.5
Et ₄ NBenz	0.78 ± 0.03	2.1 ± 0.1	5.1 ± 0.2	8.0 ± 0.2	12.4 ± 0.5	77 ± 3	8.2 ± 0.3
Pr ₄ NBenz	0.55 ± 0.02	1.60 ± 0.05	4.1 ± 0.1	6.7 ± 0.3	10.9 ± 0.5	83 ± 4	9.0 ± 0.4
Bu ₄ NBenz	0.37 ± 0.01	1.20 ± 0.03	3.3 ± 0.1	5.8 ± 0.2	9.7 ± 0.2	91 ± 4	10.2 ± 0.5

Изменение структуры катиона Alk_4NBenz позволяет регулировать реакционную способность пероксида в пределах 20 кДж·моль⁻¹. В случае наиболее активной соли - Me_4NBenz понижение активационного барьера реакции по сравнению с энергией активации термоллиза ВРО в ацетонитриле составляет 65 кДж·моль⁻¹.

Установлено наличие компенсационной зависимости активационных параметров реакции каталитического распада ВРО в присутствии бензоатов тетраалкиламмония. Это может быть связано с влиянием заместителя в структуре катиона и указывать на однородность механизма протекания реакции при варьировании катиона соли. Изокинетическая температура для данной реакционной серии (360 ± 5 K) не представляет практического интереса, поскольку лежит в области температур, где скорость термического распада данного инициатора достаточно высока [11].

Наблюдается уменьшение эффекта химической активации пероксида (рис. 2) при увеличении собственного объема (V^0) катиона соли (величины V^0 для тетраалкиламмониевых катионов приведены в работе [14]).

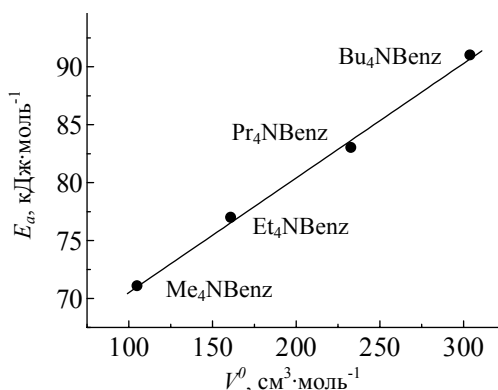
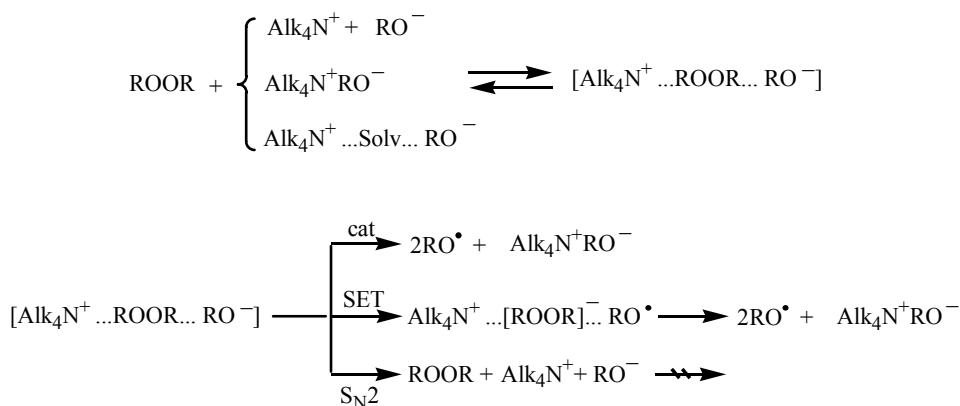


Рис. 2. Зависимость между энергией активации распада пероксида бензоила в присутствии Alk₄NBenz от собственного объема четвертичного аммониевого катиона соли (R = 0.9984; SD = 0.59079)

Комплексный анализ литературных данных и результатов, полученных в данной работе, позволяет предположить протекание активированного Alk₄NBenz распада ВРО по следующей схеме:



Наблюдаемый каталитический эффект Alk₄NBenz в реакции распада ВРО позволяет исключить вероятность протекания реакции по S_N2-механизму, поскольку в случае реализации данного пути не наблюдалось бы изменения концентрации пероксида. Каталитический распад и механизм одноэлектронного переноса возможны. В случае любого из этих двух направлений в системе при распаде ВРО генерируются два радикала и сохраняется бензоат-анион, играющий ключевую роль в активации О-О связи. Данный факт хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемыми высокими выходами радикалов и, соответственно, высокой иницирующей способностью бинарной систем ВРО - Alk₄NBenz в радикально-цепных процессах полимеризации метилметакрилата [6] и жидкофазного окисления кумола молекулярным кислородом [8, 15] при довольно низкой температуре.

Причина повышения реакционной способности пероксида бензоила в присутствии Alk₄NBenz – химическая активация пероксидной связи. Для каталитического распада пероксидов в присутствии ониевых солей характерно наличие стадии образования реакционно-активного комплекса пероксид-катализатор [12, 13, 16]. Нельзя исключить возможность образования комплекса с катионом, анионом, ионной парой, сольвато-разделенной ионной парой, учитывая состояние ониевых солей в ацетонитриле [14]. Поскольку очевидным является влияние природы как аниона, так и катиона соли на кинетику протекания реакции, целесообразно рассматривать совместное действие катиона и аниона совместную атаку этих ионов при образовании указанного комплекса. Предполагаемая структура ассоциата ВРО и представлена на рис. 3.

Все расчеты выполнены в приближении метода AM1 с помощью программного комплекса МОРАС2009. Проводилась полная оптимизация геометрии с последующим расчетом колебательных частот. Приведенная конфигурация соответствует стационарной точке на поверхности потенциальной энергии. В комплексе такого типа происходит структурная реорганизация диацил-пероксидного фрагмента С(О)ООС(О): конформация пероксидного фрагмента меняется от клинальной до антиперипланарной, при этом значительно изменяются конформация ацилпероксидных фрагментов. Такой структурный эффект сопровождается уменьшением прочности пероксидной связи, что согласуется с наблюдаемым экспериментально увеличением реакционной способности ВРО в присутствии Alk₄NBenz.

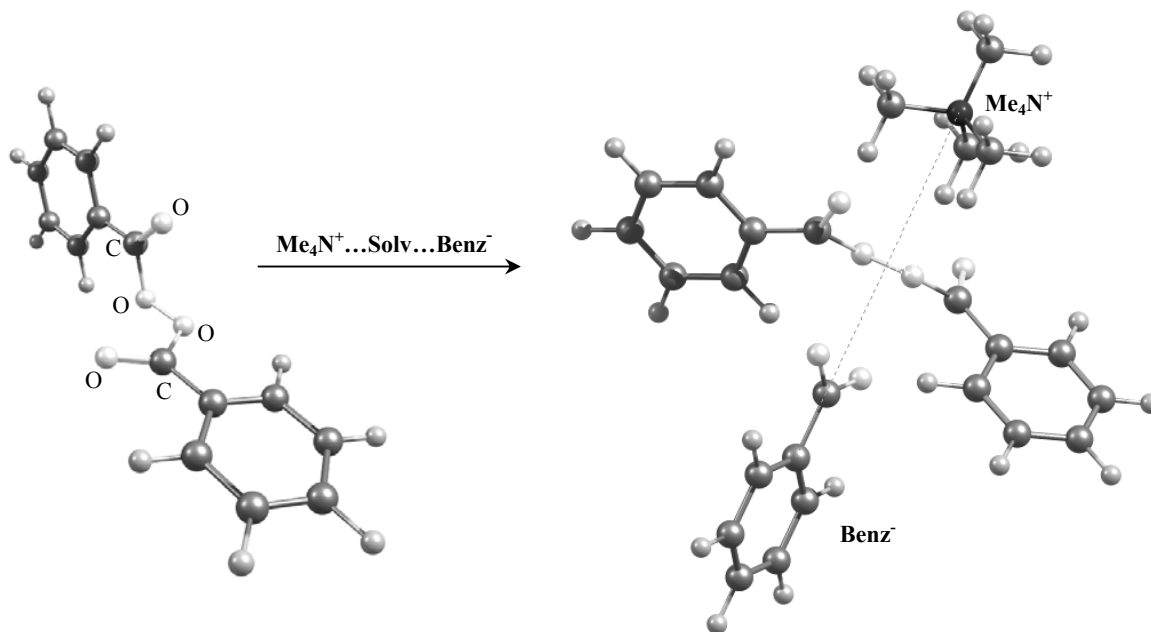


Рис. 3. Структурна реорганізація реакційного центра пероксида бензоїла при утворенні комплексу з іонами бензоату тетраметиламонія

Выводы. На основе экспериментальных исследований кинетики распада пероксида бензоила в ацетонитриле в присутствии бензоатов тетраалкиламмония показан каталитический характер действия Alk_4NBenz . Эффект химической активации пероксида уменьшается в ряду исследованных солей с увеличением собственного объема катиона: $\text{Me}_4\text{NBenz} > \text{Et}_4\text{NBenz} > \text{Pr}_4\text{NBenz} > \text{Bu}_4\text{NBenz}$. Предложена возможная схема реакции распада ВРО. Активации пероксидной связи способствует структурная реорганизация реакционного центра при совместном действии катиона и аниона бензоатов тетраалкиламмония.

РЕЗЮМЕ

Встановлено каталітичну дію бензоатів тетраалкіламонію в реакції розпаду пероксиду бензоїлу. Визначені кінетичні параметри реакції. Показано, що із збільшенням власного об'єму катіона бензоатів зменшується ефект хімічної активації пероксиду бензоїлу в дослідженій системі. Запропоновано механізм реакції.

Ключові слова: пероксид бензоїлу, бензоати тетраалкіламонію, каталіз, хімічна активація.

SUMMARY

The catalytic action of the tetraalkylammonium benzoates in the reaction of benzoyl peroxide decomposition has been shown. Kinetic parameters of the reaction have been obtained. Chemical activation of the benzoyl peroxide has shown to decrease with increasing of the tetraalkylammonium cation volume. The mechanism of the reaction has been proposed.

Keywords: benzoyl peroxide, tetraalkylammonium benzoates, catalysis, chemical activation.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Антоновский В. Л. Физическая химия органических пероксидов / В. Л. Антоновский, С. Л. Хурсан. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2003. – 391 с.
2. Denisov E. T. Handbook Of free Radical Initiators / E. T. Denisov, T. G. Denisova, T. S. Pokidova. – Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons Inc, 2003. – 879 p
3. Белецкая И. П. Катализ – важнейший инструмент «зеленой химии» / И. П. Белецкая, Л. М. Кустов // Успехи химии. – 2010. – Т. 79, № 6. – С. 493-515.
4. Матиенко Л. И. Селективное каталитическое окисление углеводородов. Новые перспективы. / Л. И. Матиенко, Л. А. Мосолова, Г. Е. Заиков // Успехи химии. – 2009. – Т. 78, № 3. – С. 227-247.
5. Исследование каталитической активности тетраэтиламоний бензоата в реакции окисления кумола / И. А. Опейда, Н. М. Залевская, А. Ю. Васильев и др. // Нефтехимия. – 1992. – Т. 32, № 6. – С. 47-51.
6. Иницирование полимеризации метилметакрилата системами пероксид бензоила – ониевая соль и пероксид бензоила – аминотирилпиридин / Н. А. Туровский, И. А. Опейда, О. В. Куш, Е. Л. Барановский // ЖПХ. – 2004. – Т. 77, № 11. – С. 1887-1890.
7. Initiation of methyl methacrilate polymerization with benzoyl peroxide - quaternary salts and benzoyl peroxide - 4-[4-(dimethylamino)styryl]pyridine and its N-oxide / М. А. Turovskiy, I. O. Opeida, O. V. Kusch et al // in: Synthesis and Properties of Low- and High-Molecular Compounds. Quantitative Level. /Editors: G. E. Zaikov, I. V. Savenkova, K. Gumargalieva. – New York: Nova Science Publishers. – 2006. – P. 213-221.

8. Опейда И. А. Пероксид бензоила – тетраалкиламмоний йодид как иницирующая система низкотемпературного окисления кумола / И. А. Опейда, Н. М. Залевская, Е. Н. Туровская // Кинетика и катализ. – 2004. – Т. 64, № 6. – С. 221-228
9. Окисление кумола кислородом в присутствии низкотемпературной иницирующей системы пероксид бензоила-тетраалкиламмоний бромид / И. А. Опейда, Н. М. Залевская, Е. Н. Туровская, Ю. И. Собка // Нефтехимия. – 2002. – Т. 42, № 6. – С. 460-465.
10. Антоновский В. Л. Аналитическая химия органических пероксидных соединений / В. Л. Антоновский, М. М. Бузланова. – М.: Химия, 1978. – 309 с.
11. О влиянии структуры катиона на активированный хлоридными солями аминов распад диацетилпероксидов / Н. А. Туровский, С. Ю. Целинский, И. А. Опейда и др. // ТЭХ. – 1992. – Т. 28, № 4. – С. 324-328.
12. Туровський М. А. Квантохімічний аналіз розпаду діацильних пероксидів, активованого хлоридними солями четвертинного амонію / М. А. Туровський, С. Ю. Целінський // Укр. хим. журн. – 1994. - Т. 60, № 1. – С. 16-19.
13. Supramolecular decomposition of lauroyl peroxide activated by tetraalkyl ammonium bromides / N. A. Turovskij, E. N. Pasternak, E. V. Raksha et al // in: Success in Chemistry and Biochemistry: Minds's flight in time and space. Edited by E.M. Pearce, G. E. Zaikov. – Vol. 4. – New York: Nova Science Publishers, Inc., 2009. – P. 555-573.
14. Ионная сольватация / Г. А. Крестов, Н. П. Новоселов, И. С. Перелыгин и др. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
15. Исследование каталитической активности тетраэтиламмонийбензоата в реакции окисления кумола / Опейда И. А., Залевская Н. М., Васильев А. Ю. и др. // Нефтехимия. – 1992. – Т. 32, № 6. – С. 509-514.
16. Супрамолекулярная активация диоксидидиклогексилпероксида бромидом тетраэтиламмония / Н. А. Туровский, И. А. Опейда, Е. Н. Туровская и др. // Химическая и биологическая кинетика. Новые горизонты. Том 1. Химическая кинетика. под ред. Е.Б. Бурлаковой, С.Д. Варфоломеева, Г.Е. Заикова и др. – Москва: Химия, 2005. – С. 658-673.

Поступила в редакцию 26.05.2010 г.

УДК 591.112:547.831.1

БІОЛОГІЧНА АКТИВНІСТЬ S-ЗАМІЩЕНИХ 2-МЕТИЛ-4-МЕРКАПТО-8-МЕТОКСИХІНОЛІНУ

В. І. Генчева, Л. О. Омелянчик, О. А. Бражко, М. П. Завгородній
Запорізький національний університет, м. Запоріжжя

Вивчено вплив похідних хіноліну на показники вуглеводного, енергетичного обміну, на рівень креатинфосфокінази. Встановлено, що на нейропротекторну активність вивчених речовин впливає природа меркаптокарбонової кислоти в 4 положенні хінолінового цикла.

Ключові слова: S-заміщені 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну, вуглеводний, енергетичний обмін, нейропротекторна активність.

Вступ. На сьогодні, лікування мозкових інсультів потребує сучасних засобів нейропротекції. Відомі нейропротектори мають ряд побічних ефектів при тривалому застосуванні, у зв'язку з відсутністю вірогідного терапевтичного ефекту, їх неможливо застосувати в клініці в гострий період гострого порушення мозкового кровообігу (ГПМК) [1,2]. Відомо, що гетероциклічна система хіноліну є основою багатьох синтетичних і природних лікарських засобів, тому актуальним і перспективним є пошук нових ефективних нейропротекторів серед S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну.

Метою даної роботи є дослідження біологічної, а саме, нейропротекторної активності S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну та встановлення залежності «біологічна дія – хімічна структура».

Матеріали та методи. Були досліджені похідні хіноліну (сполуки 1, 2), які синтезовані за методикою [3].

За допомогою віртуального скринінгу, який здійснювали на основі комп'ютерної програми PASS, були відібрані сполуки 1 і 2, для яких прогнозується вірогідність наявності (Pa) нейропротекторної активності.

Гостру токсичність визначали в дослідях на білих безпородних мишах масою тіла 18 – 25 г за методом Прозоровського [4].

Стан вуглеводно-енергетичного обміну визначали за рівнем АТФ, лактату, пірувату, малату. Для визначення їх рівня використовували уніфіковані методи [5,6]. Аденілові нуклеотиди визначали методом тонкошарової хроматографії [5]. Рівень лактату, малату (мкмоль/г/тканини) визначали за методом Хохорста [5]. Вміст пірувату (мкмоль/г тканини) визначали за методом Цоха-Ломпрехта [5].

Для оцінки нейропротекторної дії досліджуваних сполук була використана модель неповної глобальної ішемії головного мозку, яка найбільш адекватна клінічним проявам ішемічного інсульту [7]. Цю модель відтворили шляхом двосторонньої перев'язки загальних сонних артерій білих щурів лінії Вістар обох статей, масою 220 – 260 г, яких утримували у віварію при вільному доступі до їжі і води, при природній зміні дня і ночі. Щури одержані з розплідника Інституту фармакології і токсикології АМН України. Усі експериментальні процедури та оперативні втручання здійснювали відповідно до «Положення про використання тварин в біомедичних дослідженнях» [8].

Дослідження проведені на 5 групах тварин: перша група – інтактні тварини; друга-п'ята групи – тварини з двосторонньою перев'язкою загальних сонних артерій; друга група – оперовані тварини (контроль). Тваринам третьої – четвертої груп вводили відповідно досліджувані сполуки: натрієву сіль (8-метокси-2-метилхінолін-4-ілтію)оцтової кислоти (сполука 1), натрієву сіль (8-метокси-2-метилхінолін-4-ілтію) пропанової кислоти (сполука 2). Тваринам з п'ятої групи вводили еталон порівняння – пірацетам (рис. 1).

Сполуки 1 та 2 вводили один раз на добу протягом всього експерименту внутрішньочеревно в дозі 50 мг/кг маси; тваринам п'ятої групи вводили еталон порівняння – 2-оксо-1-піролідінілацетамід (пірацетам) внутрішньочеревно в дозі 250 мг/кг маси за тією ж самою схемою.

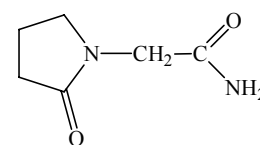
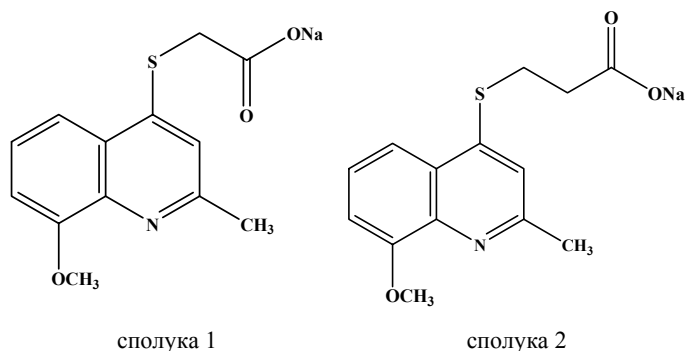


Рис. 1. Пірацетам

Критерієм ішемічного ушкодження тканин були показники гіперферментомії ізоферменту креатинфосфокінази (ВВ-КФК, К.Ф. 2.7.3.2). Активність ВВ-КФК (мкм/л/година) визначали після поділення на сефадексі ДЕАЕ-А-50, використовуючи оптичний тест Варбурга [5]. Статистичну обробку отриманих результатів проводили, застосовуючи t-критерій Стьюдента [9].

Результати та обговорення. Синтез натрієвих солей (2-метил-8-метоксихінолін-4-ілтію) карбонових кислот проводили наступним чином: до розчину 0,01 мол відповідної (2-метил-8-метоксихінолін-4-ілтію)карбонОВОЇ кислоти в 30 мл спирту додавали 0,01 мол розчин натрій гідроксиду, суміш нагрівали на водяному нагрівачі 5-7 хвилин, розчинник відганяли, додавали 100 мл ацетону. Осад, що утворився, збирали, промивали ефіром, сушили (перекристалізували з метанолу).

Будову синтезованих сполук підтвердили ІЧ-спектрами, хромато-мас-спектрами. Індивідуальність – ПМР-спектрами, чистоту – методом тонкошарової хроматографії у різних системах розчинників. Тонкошарову хроматографію провели на пластинках “Silufol UV-254” у різних системах розчинників. Проявлення хроматограм здійснено за допомогою УФ-променів або парами йоду. Визначення температури плавлення провели відповідно до вимог ДФ XI [10]. Фізико-хімічні властивості отриманих сполук представлені в табл. 1.

Таблиця 1
Фізико-хімічні властивості натрієвих солей (2-метил-8-метоксихінолін-4-ілтію)карбонОВИХ кислот

№ сполук	Брутто-формула	Т пл., °С	Вихід, %	Системи розчинників	
				5*	6**
1	2	3	4	5*	6**
1	C ₁₃ H ₁₂ NO ₃ SNa	252-4	93	36	55
2	C ₁₄ H ₁₄ NO ₃ SNa	252-4	83	20	57

Примітки:

* – система: хлороформ : метанол (4:1)

** – система: оцтова кислота : вода (1:1)

Для вивчення нейропротекторної активності синтезованих сполук, які моделюються на експериментальних тваринах, виникла необхідність дослідити їхню гостру токсичність – середня летальна доза – ЛД₅₀ (мг/кг). ЛД₅₀ вивчених сполук знаходиться в межах від 898±71 (сполука 2) до 1131±89мг/кг (сполука 1), що дозволяє їх віднести до мало та нетоксичних сполук за класифікацією Сидорова.

Біохімічні дослідження показали, що двостороння перев’язка загальної сонної артерії призводить до типових ішемічних порушень: дефіциту макроергічних фосфатів, дискоординації в циклі Кребса, активації анаеробного гліколізу, розвитку оксидативного стресу.

При курсовому призначенні S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну в гострому періоді ішемії головного мозку виявлено виражений їх вплив на окремі ланки вуглеводного обміну, активізуючи при цьому як анаеробні так і аеробні шляхи утворення енергії (табл. 2, 3).

Аналізуючи показники енергетичного обміну у клітинах мозку щурів спостерігали, що введення сполук приводило до збільшення синтезу АТФ за рахунок активації аеробного шляху окиснення (табл. 2). Порушення процесів окиснення вуглеводів визначає зниження макроергічних фосфатів (АТФ) на 53,7% у тварин з гострим порушенням мозкового кровообігу. Введення досліджуваних сполук підвищує рівень АТФ, причому сполука 2 конкурує за силою ефекту з препаратом порівняння – пірацетамом.

При введенні сполуки 1, яка має в своїй структурі залишок карбонОВОЇ кислоти, спостерігається підвищення рівня АТФ на 23,6% порівняно з контролем. Збільшення ланцюга на СН₂-групу в карбонОВОМУ ланцюзі (сполука 2), збільшує вміст АТФ на 44,0%, що наближає цей показник до рівня інтактної групи тварин, перевищує при цьому дію еталона порівняння – пірацетаму.

Таблиця 2
Вплив S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну на вміст АТФ в головному мозку в сироватці крові тварин після гострого порушення мозкового кровообігу

Група тварин	АТФ мкмоль/г тканини	% змін
Інтактні тварини	2,01±0,02	–
Тварини з ГПМК	0,93±0,01	53,7
Тварини з ГПМК + 1 ¹	1,15±0,02	23,6
Тварини з ГПМК + 2	1,34±0,02*	44,0
Тварини з ГПМК + пірацетам	1,33±0,04*	43,0

Примітки:

* – P<0,05 відносно контролю;

¹ – № сполуки.

На четверту добу експерименту після двосторонньої перев’язки сонної артерії має місце активація анаеробного гліколізу, яка проявляється гіперпродукцією лактату (на 284%) відносно інтактної групи тварин (табл. 3).

Таблиця 3

Вплив S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну на показники вуглеводного обміну в головному мозку після гострого порушення мозкового кровообігу

Група тварин	Лактат, мкмоль/г тканини	% змін	Піруват, мкмоль/г тканини	% змін	Малат, мкмоль/г тканини	% змін
Інтактні тварини	2,50±0,03	–	0,48±0,05	–	0,28±0,03	–
Тварини з ГПМК	9,60±0,05	284,0	0,18±0,014	62,5	0,10±0,04	64,3
Тварини з ГПМК + 1 ¹	5,70±0,001*	40,6	0,26±0,02	44,4	0,21±0,01*	110,0
Тварини з ГПМК + 2	5,40±0,002*	43,7	0,34±0,02*	88,8	0,24±0,02*	140,0
Тварини з ГПМК + пірацетам	14,80±0,02*	54,1	0,30±0,04*	66,6	0,18±0,02*	80,0

Відбувається різке пригнічення окислювального метаболізму глюкози, про що свідчить зниження концентрації пірувату на 62,5% у контролі (ГПМК). Паралельно спостерігається гальмування реакцій у циклі Кребса, про що свідчить зниження рівня малату на 64,3% у контрольній групі тварин.

Сполуки, що досліджувались, по-різному впливали на рівень лактату. При дії сполуки 1 вміст лактату зменшився на 40,6% відносно контролю (P<0,05). Збільшення ланцюга на СН₂-групу в залишку карбонової кислоти (сполука 2) впливає на достовірне зменшення вмісту лактату на 43,7% (P<0,05). Всі досліджені сполуки перевищують дію еталона – пірацетаму.

Введення S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну після гострого порушення мозкового кровообігу достовірно підвищувався рівень пірувату в головному мозку відносно контролю (див. табл. 3). Введення натрієвої солі 3-(8-метокси-2-метилхінолін-4-ілтіо)пропанової кислоти (сполука 2) перевищує дію еталона – пірацетам на 22,2%.

Рівень малату після гострого порушення мозкового кровообігу зменшився на 64,3%. Всі сполуки впливали на підвищення показників рівня малату. Наявність залишку оцтової кислоти (сполука 1) впливає на достовірне збільшення рівня малату (на 110 %) відносно контролю. Збільшення карбонового ланцюга на СН₂-групу (сполука 2) призводить до зростання вмісту малату на 140% (P<0,05), що на 60% перевищує показник препарату порівняння – пірацетам.

В енерготропній дії пірацетаму відмічалася активація анаеробних реакцій і підсилення лактоацидозу. Важливу роль в енергозабезпеченні клітин грає окиснення НАДН в лактатдегідрогеназній реакції в цитозолі, яку можуть активувати тіоли, що входять до складу молекул досліджуваних сполук. Позитивно впливаючи на утилізацію відновлених форм піридиннуклеотидів, похідні хіноліну здатні гальмувати утворення активних форм кисню (АФК) енергетичними системами.

Встановлено, що S-заміщені 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну впливають на окислювальну модифікацію білка (ОМБ), внаслідок чого утворюються альдегідфенілгідрозон (АФГ) і карбоксилфенілгідрозон (КФГ) продукти окислювальної модифікації білка (табл. 4). Зміни метаболізму мозкової тканини призводять до активації шляхів утворення АФК й подальшої активації вільнорадикального окиснення.

Після гострого порушення мозкового кровообігу у контрольній групі тварин спостерігається збільшення показників АФГ і КФГ (на 184,3% та 250,0% відповідно). При введенні сполук 1, 2 спостерігалось наближення показників альдегідфенілгідрозону і карбоксилфенілгідрозону до рівня інтактних тварин.

Таблиця 4

Вплив S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну на окислювальну модифікацію білка в головному мозку тварин після гострого порушення мозкового кровообігу

Група тварин	Продукти ОМБ, у.о./г білка			
	АФГ (270 нм)	% змін	КФГ (363 нм)	% змін
Інтактні тварини	6,4±0,33	–	9,0±0,31	–
Тварини з ГПМК	18,2±0,13	184,3	31,5±0,20	250,0
Тварини з ГПМК + 1 ¹	15,0±0,21	17,6	18,6±0,12*	41,0
Тварини з ГПМК + 2	13,0±0,10*	28,6	15,0±0,11*	52,4
Тварини з ГПМК + пірацетам	15,0±0,10	17,6	18,2±0,20*	42,3

Пошкодження структурної цілісності клітинних мембран супроводжувалося збільшенням активності ВВ-ізоформи КФК у сироватці крові на 250% (рис. 2).

При курсовому призначенні S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну спостерігалась зменшення рівня ВВ-ізоформи креатинфосфокінази на 28,5-45,0%, наближаючи до рівня інтактних тварин, що свідчить про нейропротекторну активність досліджених сполук (рис. 2).

Наявність залишку оцтової кислоти в 4-му положенні хінолінового циклу (сполука 1) впливає на достовірне зменшення рівня ВВ-КФК (на 28,5%) відносно контролю (P<0,05). Збільшення ланцюга на СН₂-групу в залишку карбонової кислоти (сполука 2) призводить до значного зменшення показника ВВ-КФК (на 45,0%).

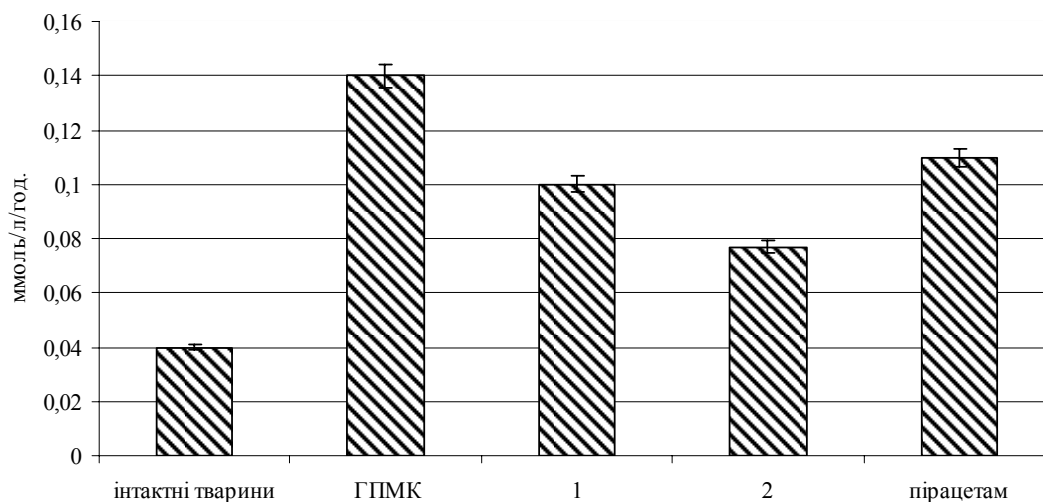


Рис. 2. Вплив натрієвих солей S-заміщених похідних 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну на активність ВВ-ізоформи КФК при гострому порушенні мозкового кровообігу

Висновки. Результати проведених досліджень підтвердили дані комп'ютерного прогнозу щодо прояву нейропротекторної активності. Натрієві солі S-заміщених 2-метил-4-меркапто-8-метоксихіноліну на моделі двосторонньої перев'язки загальної сонної артерії (*in vivo*) виявляють властивості ефективних біорегуляторів з нейропротекторною дією. В результаті аналізу експериментальних даних виявлено, що найбільш активною сполукою є натрієва сіль 3-(8-метокси-2-метилхінолін-4-ілтію)пропанової кислоти (сполука 2), яка за показникам вуглеводного, енергетичного обміну перевищує препарат порівняння – пірацетам. Також встановлено, що найбільшу нейропротекторну дію при пошкодженні цілісності клітинних мембран головного мозку проявляє натрієва сіль 3-(8-метокси-2-метилхінолін-4-ілтію)пропанової кислоти, тобто подовження карбонового ланцюга на $-CH_2$ -групу впливає на збільшення показників.

РЕЗЮМЕ

Изучено влияние производных хинолина на показатели углеводного, энергетического обмена, на уровень креатинфосфокиназы. Установлено, что на нейропротекторную активность исследуемых веществ влияет природа меркаптокарбоновой кислоты в 4 положениях хинолинового цикла.

Ключовые слова: S-замещенные 2-метил-4-меркапто-8-метоксихинолина, углеводный, энергетический обмен, нейропротекторная активность.

SUMMARY

Influence of derivatives of quinoline is studied on the indexes of carbohydrate, power exchange, on the level of creatinifosfokinazy. It is set that on neuroprotector activity of the probed matters nature of merkaptokarbonovoy acid influences in 4 positions of quinolinovogo cycle.

Keywords: S-derivative 2-methyl-4-merkapto8-methoxyquinoline, energy, carbohydrate metabolism, neuroprotective activity.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Гусев Е. И. Церебральный инсульт: проблемы и решения / Е. И. Гусев, В. И. Скворцова, М. Ю. Мартынов // Вестник РАМН. – 2003. – № 11. – С. 44-48.
2. Fieschi C. Prevention of Ischemic Stroke / C. Fieschi, M. Fischer. – Martin: Dunitz. Ltd, 2000. – 290 p.
3. Синтез, фізико-хімічні властивості $\alpha(\beta)$ -[S-(4-хінолін)] тіоалканкарбонових кислот та їх ефірів / С. І. Коваленко, О. А. Бражко, І. А. Мазур та ін. // Фізіологічно активні речовини. – 2002. – № 2(34). – С. 15–19.
4. Прозоровский В. Б. Табличный экспресс-метод определения средних эффективных мер воздействия на биологические объекты / В. Б. Прозоровский // Токс. вестник. – 1998. – № 1. – С. 28-32.
5. Современные методы биохимических исследований (липидный и энергетический обмен) / Под ред. М. И. Прохоровой. – Л.: Изд. Ленинградского университета, 1982. – 272 с.
6. Лабораторные методы исследования в клинике / Под ред. В. В. Меньшикова. – М.: “Медицина”, 1987. – 368 с.
7. Гусев Е. И. Ишемия головного мозга / Е. И. Гусев, В. И. Скворцова. – М.: “Медицина”, 2001. – 328 с.
8. Етика лікаря та права людини: положення про використання тварин у біомедичних дослідях // Експер. та клін. фізіол. і біохімія. – 2003. – № 2(22). – С. 108-109.
9. Лакин Г. Ф. Биометрия / Г. Ф. Лакин – М.: Высшая школа, 1990. – 352 с.
10. Государственная Фармакопея СССР: Вып. 1. Общие методы анализа / МЗ СССР. – М.: Медицина, 1987. – 336 с.

Надійшла до редакції 13.05.2010 р.

**ПСИХОФИЗИОЛОГИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ ВО ВЗАИМОСВЯЗИ
С ХОЛИНЭСТЕРАЗНОЙ АКТИВНОСТЬЮ КРОВИ***И. Г. Герасимов**НИИ медицинских проблем семьи ДонНМУ им. М. Горького, г. Донецк*

У 23 человек обоего пола (18-24 лет) оценен уровень психофизиологических реакций и холинэстеразная активность (ХЭА) крови. Между многими психофизиологическими показателями (ПФП), а также между ПФП и ХЭА выявлены парные линейные взаимосвязи. Кроме того, для ряда ПФП их зависимость от ХЭА оказалась параболической, причем ее экстремум интерпретирован как оптимум, который имеет разные значения в случае различных ПФП. Сделан вывод о том, что закономерности протекания психофизиологических реакций определяются ХЭА, а одновременная оптимизация по всем ПФП не представляется возможной.

Ключевые слова: нервная система, работоспособность головного мозга, реакция на движущийся объект, сенсомоторные реакции, активность холинэстеразы.

Введение. Установление закономерностей протекания психофизиологических реакций представляет несомненный теоретический и практический интерес. Например, показатели, характеризующие работоспособность головного мозга [1], силу нервной системы [2], уровень функционирования систем [3], точность (время) реакции на предъявленный стимул [4], реакции левой и правой руки [5], рабочую память [6] исследовали в норме и при патологии. Не вызывает сомнения, что психофизиологические реакции обусловлены, в частности, согласованным функционированием в нервной системе различных биохимических веществ, обеспечивающих, прежде всего, проведение нервного импульса. Как известно, ведущим нейромедиатором является ацетилхолин, участвующий в процессах возбуждения и торможения. Для реализации ацетилхолином его медиаторной функции необходимы ферменты, обладающие холинэстеразной активностью (ХЭА). Такими ферментами являются, в первую очередь, ацетилхолинэстераза (НФ 3.1.1.7), локализованная преимущественно в нервной ткани, и бутирилхолинэстераза (НФ 3.1.1.8), большей частью которой находится в крови. Обнаружены корреляции между ХЭА в мозге и крови [6], причем каждый из двух ферментов, в одинаковой мере коррелирует с другими маркерами ХЭА в мозге [7]. Тем не менее, ожидаемые взаимосвязи между психофизиологическими показателями (ПФП) выявлены не в полной мере [8], что может быть, в частности обусловлено определенной трудностью работы с большими массивами данных, анализ которых предполагает предварительное их просеивание на предмет исключения разного рода артефактов [9]. С другой стороны, возможные взаимосвязи между ХЭА и ПФП остаются не исследованными. При этом нет технических трудностей для проведения такого рода исследований, в отношении ХЭА крови, что и явилось целью данной работы.

Материалы и методы исследования. Обследовали 23 добровольцев обоего пола (11 мужчин, 12 женщин, возраст 18-24 лет). С помощью пакета компьютерных программ [10] по методикам [8, 11-13] определяли следующие ПФП: работоспособность головного мозга (РГМ) – количество ошибок на предъявленный стимул (%), коэффициент силы нервной системы (КСС), функциональный уровень нервной системы (ФУС), точность реакции на движущийся объект (РДО), – все в условных единицах (усл. ед.), функциональную подвижность нервных процессов (ФПП), скорость простой сенсомоторной реакции (ССР), скорость реакции выбора (СРВ) и отдельно СРВ правой (СВП) и левой (СВЛ) рукой – все в мс. Измеряли суммарную ХЭА (мккат/л) крови, взятой из пальца [14]. Анализ взаимосвязей проводили с учетом положений, высказанных в [9], проводили с помощью пакета программ "STATISTUCA for WINDOWS". Качество линейных взаимосвязей оценивали посредством коэффициента парной линейной корреляции Пирсона (r) и уровня его значимости (p). Параметры регрессионных моделей находили по методу наименьших квадратов (метод приближения квази-ньютона).

Результаты и обсуждение. Прежде всего, сопоставили величины ПФП у мужчин и у женщин. Различия в уровне психофизиологических реакций у лиц разного пола исследованного возраста выявить не удалось ($p > 0,5$).

Анализ линейных взаимосвязей между ПФП позволил установить следующие факты. Оказалось, что коэффициенты корреляций между РГМ и ФУС, а также между указанными ПФП, с одной стороны, и всеми исследованными ПФП, с другой, невелики (взаимосвязи слабые) и малозначимы ($|r| < 0,3$, $p > 0,3$). Вместе с тем имеют место следующие достаточно значимые положительные взаимосвязи: между КСС, с одной стороны, и остальными ПФП, с другой ($r = 0,6 - 0,7$, $p < 0,01 - 0,1$), за исключением РВП ($r = 0,44$, $p = 0,1$); между ССР, с одной стороны, и остальными (помимо перечисленных) ПФП, с другой ($r = 0,5 - 0,6$, $p < 0,01 - 0,05$), за исключением СРВ ($r = 0,68$, $p < 0,01$) и РДО ($r = 0,40$, $p < 0,2$); между СРВ, с одной стороны, и РВП и РВЛ, с другой ($r = 0,94$, $p < 0,001$); между РВП и РВЛ ($r = 0,83$, $p < 0,001$). Знак коэффициентов корреляций указывает на то, что рост значений одного из ПФП (исключая РГМ и ФУС) сопровождается увеличением другого и, наоборот, уменьшению величины одного из ПФП сопутствует

снижение другого. Таким образом, изменение функционирования всех психофизиологических систем, которые характеризуются перечисленными ПФП, происходит взаимосвязано и однонаправлено, что и следовало ожидать в нормальном состоянии, когда организму не предъявляются какие-либо дополнительные стимулы.

Отсутствие сильных и существенных парных линейных взаимосвязей в случае РГМ и ФУС указывает на то, что механизмы взаимодействия между ПФП, характеризуемыми данными показателями, могут быть более сложными, нежели предполагаемые в линейной модели. Очевидно, и в ряде других случаев взаимосвязь между ПФП может быть отлична от линейной. В таких ситуациях значимый коэффициент корреляций указывает лишь на близость нелинейной модели к линейной, как, например, в случае зависимости, которая представлена преимущественно одной ветвью параболы, причем характер такого рода взаимосвязей может определяться ХЭА. Для проверки сделанного предположения проанализировали ПФП во взаимосвязи с ХЭА.

Между ХЭА, с одной стороны, и следующими ПФП, с другой, обнаружены парные линейные положительные взаимосвязи: КСС ($r = 0,84, p < 0,001$), ССР ($r = 0,95, p < 0,001$), СРВ ($r = 0,71, p = 0,004$), РВП ($r = 0,55, p < 0,05$), РВЛ ($r = 0,66, p = 0,01$), ФПП ($r = 0,59, p < 0,05$), РДО ($r = 0,44, p = 0,12$). Знак корреляций указывает на то, что увеличение ХЭА сопровождается ростом ПФП и, наоборот, уменьшение ХЭА – снижением ПФП. Такой характер взаимосвязи в обсуждаемых случаях закономерен, поскольку именно уровень ХЭА может обеспечивать адекватное протекание психофизиологических реакций [1 – 5]. Следует заметить, что коэффициент корреляции для ХЭА и РГМ, хотя и малозначим ($r = -0,20, p < 0,5$), но отрицательный, что также закономерно, поскольку последний ПФП, согласно примененной методике, определяется числом ошибок, количество которых, очевидно, уменьшается с ростом ХЭА. В случае ФУС и РГМ не выявлено сильных парных линейных взаимосвязей с ХЭА ($p > 0,75$). Полученный результат при одновременном низком уровне значимости ($p > 0,50$) коэффициентов корреляций между ФУС и РГМ, с одной стороны, и другими ПФП, с другой, указывает на то, что к интерпретации результатов, полученных с помощью предложенного теста оценки обсуждаемых ПФП следует подходить иначе, нежели при наличии сильных взаимосвязей. Очевидно, в случае оценки ФУС и РГМ реакция организма на предъявляемый стимул нелинейно связано с ПФП.

Действительно, взаимосвязь ФУС с ХЭА нелинейна (рис. 1). Зависимость РГМ от ХЭА аналогична приведенной на рисунке. Кроме того, ПФП, линейные взаимосвязи которых с ХЭА не очень значимы, также нелинейно связаны с последней величиной. К таким ПФП относятся КСС, РДО и ФПП; в качестве примере приведена зависимость КСС от ХЭА (рис. 2).

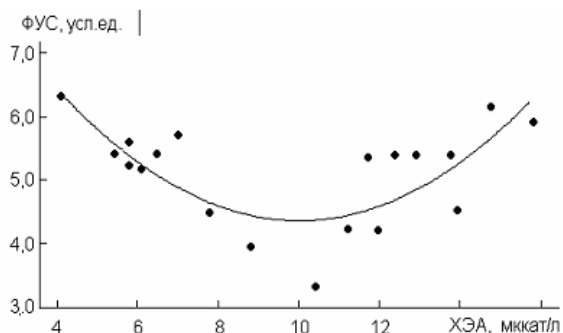


Рис. 1. Зависимость ФУС от АХЭ в крови

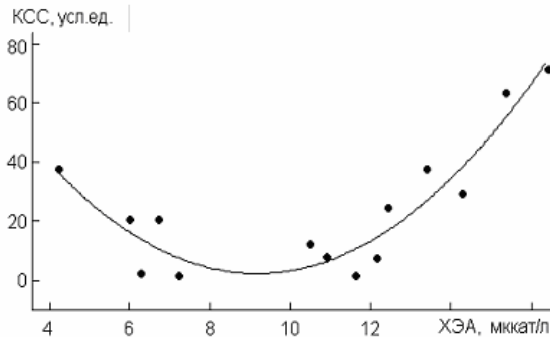


Рис. 2. Зависимость КСС от АХЭ в крови

Уравнение, которым описали зависимость перечисленных ПФП от ХЭА, является уравнением параболы

$$\text{ПФП} = \text{ПФП}_0 + \text{ПФП}_{\text{ск}} \times (\text{ХЭА} + \text{ХЭА}_{\text{кр}})^n, \tag{1}$$

где

$\text{ПФП}_0, \text{ПФП}_{\text{ск}}, \text{ХЭА}_{\text{кр}}, n$ – эмпирические константы,

ПФП_0 – минимальное значение ПФП, единицы измерения ПФП,

$\text{ПФП}_{\text{ск}}$ – скорость изменения ПФП, (единицы измерения ПФП)/(мккат/л)⁻ⁿ,

$\text{ХЭА}_{\text{кр}}$ – критическое значение ХЭА, мккат/л.

Критическая точка с координатами ($-\text{ХЭА}_{\text{кр}}, \text{ПФП}_0$), очевидно, определяет оптимальное психофизиологическое состояние, которому соответствует определенный уровень ХЭА. Отклонение величины ХЭА от $\text{ХЭА}_{\text{кр}}$ приводит к ухудшению психофизиологических реакций, причем направленность ветвей параболы уравнения (1) указывает на то, что значения ФУС, РДО, КСС, ФПП возрастают при удалении ХЭА от оптимальной величины. При этом зависимость РГМ от ХЭА принципиально отличается от остальных ($n = -0,5$): у одной группы лиц с ростом ХЭА наблюдается уменьшение РГМ, тогда как у другой – наоборот, увеличение ХЭА приводит к уменьшению РГМ. Тем не менее, и в данном случае оптималь-

ному состоянию соответствует значение $XЭА_{кр} = 4,24$ мккат/л, совпадающее с таковым в случаях КСС и ФПП (таблица).

Таблица
Параметры уравнения (1) и значение R

ПФП	Единицы измерения (ЕИ)	ПФП ₀ , ЕИ	ПФП _{ск} , ЕИ×(мккат/л) ⁿ	-XЭА _{кр} , мккат/л	n	R
ФУС	усл. ед.	4,33	0,0547	10,4	2,00	0,75
КСС	усл. ед.	2,35	1,39	9,19	9,19	0,93
РДО	усл. ед.	0,932	0,00144	4,24	2,14	0,83
ФПП	мс	352	1,59	4,23	1,92	0,63
РГМ	%	19,9	4,87	4,24	-0,50	0,75

Тип психофизиологической реакции группы лиц, у которых $XЭА > XЭА_{кр}$ или $XЭА < XЭА_{кр}$ можно определить как, соответственно, гиперхолинергический и гипохолинергический. Ввиду наличия не единственного значения $XЭА_{кр}$ (табл.), принадлежность человека к тому или иному типу холинергической реакции может быть различна в зависимости от функции нервной системы, которая обуславливает определенную психофизиологическую реакцию, и которая оценивается с помощью соответствующего теста. Более того, очевидно, что одновременное оптимальное в указанном смысле протекание всех психофизиологических реакций невозможно, поскольку значение $XЭА_{кр}$ в зависимости от оцениваемого ПФП может находиться как минимум в двух интервалах (таблица) и, кроме того, многие ПФП изменяются с ростом XЭА линейно. Такое положение означает, что приближение к оптимальному состоянию по одному или нескольким из ПФП будет неизбежно удалять от такового по многим другим. Учитывая, что XЭА коррелирует в крови и мозге [6], аналогичные закономерности должны иметь место и в случае XЭА в мозге.

Выводы. Закономерности психофизиологических реакций в значительной мере определяются XЭА. Ее уровень обеспечивает для некоторых психофизиологических реакций оптимальное их протекание, причем для разных реакций оптимальный уровень XЭА различен. С учетом данного факта, а также того, что для многих психофизиологических реакций оптимум XЭА не наблюдается, одновременная оптимизация психофизиологических процессов по всем ПФП не представляется возможной.

РЕЗЮМЕ

У 23 людей обох статей (18 – 24 лет) оцінене рівень психофізіологічних реакцій і холінестеразна активність (ХЕА) крові. Між багатьма психофізіологічними показниками (ПФП), а також між ПФП і ХЕА виявлені парні лінійні взаємозв'язки. Крім того, для ряду ПФП їх залежність від ХЕА виявилась параболічною, при чому її екстремум інтерпретовано як оптимум, який має різні значення у випадках різних ПФП. Зроблено висновок про те, що закономірності перебігання психофізіологічних реакцій визначаються ХЕА, а одночасна оптимізація за всіма ПФП не уявляється можливою.

Ключові слова: нервова система, працездатність головного мозку, реакція на рухливий об'єкт, сенсомоторні реакції, активність холінестерази.

SUMMARY

The level of psychophysiological reactions and cholinesterase activity (CEA) of blood are assessed in 23 people of both sexes (18 – 24 years). Between many psychophysiological values (PPV), and also between PPV and CEA the pair linear correlations are revealed. In addition, for the PPV rank their dependence on CEA appeared parabolic, at that extremum is interpreted as optimum, which has different values for various PPV. A conclusion, the regularities passing of psychophysiological reactions are determined by CEA, and simultaneous optimization by all PPV is impossible.

Keywords: nervous system, efficiency brain, reaction on moving object, sensomotory reaction, cholinesterase activity.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- Holzman P. S. Recent studies of psychophysiology in schizophrenia / P. S. Holzman // Schizophrenia Bulletin – 1987. – Vol. 13, No 1. – P. 49-75.
- Mecacci L. Trends in the psychophysiology of individual differences / L. Mecacci // Pavlov's Journal Biological Science. – 1976. – Vol. 11, No 2. – P. 93-104.
- Effects of a Mandibular Repositioning appliance on sleep structure, morning behavior and clinical symptomatology in patients with snoring and sleep-disordered breathing / A. Saletu, P. Anderer, S. Parapatics, et al. // Neuropsychobiology. – 2007. – Vol. 55, No 3-4. – P. 184-193.
- Yetkin Y. Do environmental and hereditary factors affect the psychophysiology and left-right shift in left-handers? / Y. Yetkin // International Journal Neuroscience – 2001. – Vol. 110, No 3-4. – P. 109-134.
- Shin E. Multiple levels of stimulus representation in visual working memory / E. Shin, M. Fabiani, G. Gratton // Journal Cognition Neuroscience – 2006. – Vol. 18, No 5. – P. 844-858.

6. Equine butyrylcholinesterase protects rats against inhalation exposure to sublethal sarin concentrations / J. Bajgar, L. Bartosova, J. Fusek, et al. // Archives Highest Radametry Toksikological – 2006. – Vol. 57, No 4. – P. 391-395.
7. Distribution in brain and retina of four enzymes of acetyl CoA synthesis in relation to choline acetyl transferase and acetylcholine esterase / V. Yip, J. G. Carter, M. E. Pusateri, et al. // Neurochemistry Research. – 1991. – Vol. 16, No 6. – P. 629-635.
8. Макаrchук М. Ю. Кореляційний аналіз основних психофізіологічних показників людини / М. Ю. Макаrchук, Н. Б. Філімонова, Т. В. Кравець // Вісник Київського національного університету ім. Тараса Шевченка. Фізіологія. – 2003. – Вип. 39-41. – С. 72-74.
9. Дидэ Э. Методы анализа данных / Э. Дидэ. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 357 с.
10. Опыт апробации компьютерной методики определения психофизиологических параметров. / И. А. Зайцев, И. В. Вяхирева, В. Н. Жидких, и др. // Вопросы экспериментальной и клинической медицины – 1999. – Т. 2, № 3. – С. 48 – 51.
11. Чайченко Г. М. Психофизиологический рейтинг как показатель эффективности умственной деятельности / Г. М. Чайченко., Л. И. Томила // Физиология человека. – 1995. – Т. 21, № 5. – С. 30-36.
12. Егорычев А. О. Методика диагностики спортивных способностей студентов с использованием психофизиологического комплекса / А. О. Егорычев // Медицинская техника. – 2005. – № 1. – С. 46-48.
13. Программно-аппаратное обеспечение компьютерных комплексов для психофизиологических исследований / Е. В. Матвеев, И. В. Гальегов, А. А. Васильев и др. // Медицинская техника. – 2005. – № 1. – С. 4-7.
14. Герасимов И. Г. Оптимизация условий определения холинэстеразы / И. Г. Герасимов // Клиническая лабораторная диагностика. – 2004. – № 5. – С. 35-38.

Поступила в редакцию 27.04.2010 г.

СОРБЦІЯ МЕТОТРЕКСАТА ТЕНЯМИ ЭРИТРОЦИТОВ

О. И. Доценко

Изучено взаимодействие метотрексата с нативными тенями эритроцитов и их белок-липидным матриксом (периферические белки экстрагированы). Рассчитаны параметры связывания. Установлено, что связывание метотрексата с мембраной эритроцитов определяется взаимодействием с тремя структурными участками. Показано влияние электрохимических и поверхностных свойств теней эритроцитов на параметры связывания метотрексата.

Ключевые слова: тени эритроцитов, метотрексат, константы связывания.

Введение. Метотрексат – цитостатический препарат из группы антиметаболитов, антагонистов фолиевой кислоты. Оказывает выраженное иммуносупрессивное действие даже в относительно низких дозах, не обладающих заметной гематологической токсичностью. Благодаря этому метотрексат применяется шире, чем другие цитостатики с иммуносупрессивной активностью [1-3]. Наряду с этим, назначение метотрексата часто сопровождается возникновением серьезных побочных эффектов, что обуславливает отказ от использования этого препарата [1, 3, 4].

Почти все лекарственные препараты, распределяющиеся между тканями и органами организма через систему кровообращения, вступают в контакт с форменными элементами крови. Известно, что метотрексат (МТХ) накапливается в эритроцитах в виде полиглутамата МТХ и его концентрация достигает устойчивого стационарного состояния после нескольких недель введения препарата [1]. Известно также, что существуют большие индивидуальные различия в ответ на терапию МТХ [5]. Как только МТХ транспортируется в клетку, он прогрессивно добавляется к полиглутаматам МТХ (МТХ-РG₂₋₇) фолиполиглутамил синтазой (FPGS) и сохраняется в клетке в течение долгого времени. С другой стороны, МТХ-РG₂₋₇ преобразуется назад в МТХ γ -глутамил гидролазой (GGH), после чего он транспортируется во внеклеточную среду. Поэтому, внутриклеточный МТХ-РG₂₋₇ может быть основным веществом, посредством которого МТХ проявляет терапевтический эффект [1, 5]. Таким образом, контроль содержания МТХ в эритроцитах, отражающего концентрации МТХ-РG в целевых клетках, таких как мононуклеарные клетки, лимфоциты, или синовиальные клетки, мог бы быть полезным в подборе оптимальной дозы МТХ для больных с различными патологиями. В этом случае несомненную ценность может представлять информация о характере связывания МТХ с компонентами мембраны эритроцитов и влиянии на параметры связывания электрохимических свойств белок-липидного матрикса. Изучению этих вопросов и посвящена данная статья.

Материалы и методы исследований. В экспериментах использовали кровь белых беспородных мышей. Эритроциты отделяли от других форменных элементов крови по общепринятым методикам и тщательно отмывали в большом объеме изотонического буфера (ИБ) (15 мМ Na-фосфатный буфер, рН 7,4; 150 мМ NaCl) путем центрифугирования.

Для анализа процесса сорбции МТХ на мембранах эритроцитов в работе использовали нативные замкнутые тени эритроцитов и тени эритроцитов, с которых были предварительно экстрагированы периферические белки.

Замкнутые тени эритроцитов получали путём быстрого введения 10 мМ Na-K-фосфатного буфера, рН 7,4 в суспензию эритроцитов. Тени эритроцитов отмывали 3-4 раза изотоническим буфером с последующим центрифугированием. Осадок теней ресуспендировали в ИБ.

Для экстракции периферических белков [6] к осадку теней добавляли 1М раствор KCl, рН 9,0 и при непрерывном встряхивании инкубировали 1 час при 37°C. Затем суспензию центрифугировали при 3000 об/мин в течение 10 мин. Отделяли надосадочную жидкость, а оставшийся осадок теней промывали ИБ, с последующим центрифугированием. Суспензию теней доводили до нужного объема ИБ и использовали в эксперименте.

Общее содержание белка определяли содержанием белка по методу Лоури [7]. Содержание белка рассчитывали по калибровочной кривой, построенной по растворам альбумина известной концентрации. Концентрация альбумина в стандартных растворах альбумина варьировала от $5,9 \cdot 10^{-5}$ – $8,85 \cdot 10^{-4}$ г/дл.

Для изучения взаимодействия метотрексата с мембраной эритроцитов использовали суспензию теней эритроцитов с содержанием белка 0,25 г/л. Аликвотную часть суспензии (0,2 мл) инкубировали в растворах, с различными концентрациями МТХ в течение 10 минут. Концентрацию метотрексата варьировали от $1,84 \cdot 10^{-5}$ до $1,84 \cdot 10^{-4}$ моль/л. Объём всех точек серии поддерживался постоянным и равным 5,2 мл. До общего объёма растворы доводились добавлением ИБ. Время инкубирования в экспериментах составило 10 мин. Мембраны осаждали центрифугированием и в супернатанте определяли концентрацию МТХ, соответствующую равновесной концентрации несвязанного мембранами лиганда. Несвязанную концентрацию МТХ определяли на спектрофотометрически ($\lambda = 400$ нм). Эксперименты были вы-

полнены при двух температурах – 25 и 37°C.

Изотермы связывания строили в координатах: связанная концентрация– исходная концентрация метотрексата (моль/г-белка).

Для определения количества центров связывания различных типов и расчета констант связывания для молекул МТХ мембраной эритроцитов и белок–липидным матриксом использовали математическое моделирование. Параметры связывания молекул метотрексата с мембраной эритроцитов определяли исходя из предположения возможного кооперативного связывания, используя подход Хилла.

Уравнение материального баланса для МТХ представляли в виде

$$L_{общ.L} = L + \sum_{j=1}^m (v_{j1} + v_{j2}) \cdot N_j, \quad (1)$$

где N_j – общая концентрация центров связывания типа j эритроцитарной мембраны, отнесенная к количеству белка в г (моль/г белка), $L_{общ.L}$ концентрация лиганда, отнесенная к количеству белка в г (моль/г белка), L – свободная (несвязанная) концентрация лиганда, отнесенная к количеству белка в г (моль/г белка), v_{j1} – число молей лиганда, связанных с 1 молекул центров связывания j -го типа при отсутствии кооперативного связывания, v_{j2} – число молей лиганда, связывающегося кооперативно с 1 молекул центров связывания j -го типа.

Константа некооперативного связывания лиганда с центрами j -го типа определялась по уравнению (2), а для случая кооперативного связывания – по уравнению (3)

$$K_j = \frac{v_{j1} N_j}{L \cdot N_j (1 - v_{j1})}, \quad (2)$$

$$K_j^{n_j} = \frac{v_{j2} N_j}{L^{n_j} \cdot N_j (1 - v_{j2})}, \quad (3)$$

где $K_j^{n_j}$ – константа кооперативного связывания для лиганда в центрах типа j ; n_j – количество центров связывания типа j , на которых лиганд связывается кооперативно.

Подставляя уравнения 2 и 3 в уравнение 1 получаем общую концентрацию лиганда для i точек серии

$$L_{общ.L_i} = L_i + \sum_{j=1}^m N_j \left(\frac{L_i \cdot K_j}{1 + K_j L_i} + \frac{L_i^{n_j} \cdot K_j^{n_j}}{1 + L_i^{n_j} \cdot K_j^{n_j}} \right), \quad (4)$$

где i – номер экспериментальной точки, отличающиеся концентрацией вводимого лиганда, m – число типов центров связывания.

Наличие математической модели позволяет построить процедуру сопоставления экспериментальных данных, которыми являются свободные концентрации глюкозы в каждой экспериментальной точке и априорных представлений о схеме протекания процесса связывания с мембраной.

На начальном этапе моделирования константы образования K_j , N_j , n_j задают в виде ориентировочных величин (“нулевая гипотеза”). Для каждой точки рассчитывали величину теоретического значения свободной концентрации глюкозы ($L_i^{теор}$), после чего находят в каждой точке разность ($L_i^{теор} - L_i^{эксп}$) и минимизировали функционал $F = \sum_j (L_i^{теор} - L_i^{эксп})^2$ по всем экспериментальным

точкам i . В ходе поисковой оптимизации определяли такой набор K_j , N_j , n_j , при котором F достигает своего минимума.

Задача решалась с применением методов поисковой оптимизации. Для отыскания минимума функции применен метод «деформируемого многогранника». Основное требование к модели: оптимальные значения параметров должны обеспечивать наименьшие отклонения рассчитанных свойств системы от соответствующих экспериментальных значений этих свойств.

Вычисление параметров связывания проводили с использованием специально созданных компьютерных программ.

Результаты эксперимента и их обсуждение. Изотерма связывания МТХ с мембраной нативных тений эритроцитов показана на рис. 1 (зависимость 1, (25°C) и зависимость 2 (37°C)).

Для математического анализа связывания метотрексата с мембраной эритроцитов использована модель, включающая три центра связывания и обеспечивающая наименьшее расхождение между экспериментальными и расчетными значениями связанной концентрации МТХ.

Рассчитанные параметры связывания метотрексата с нативной мембраной эритроцитов при двух температурах приведены в табл. 1.

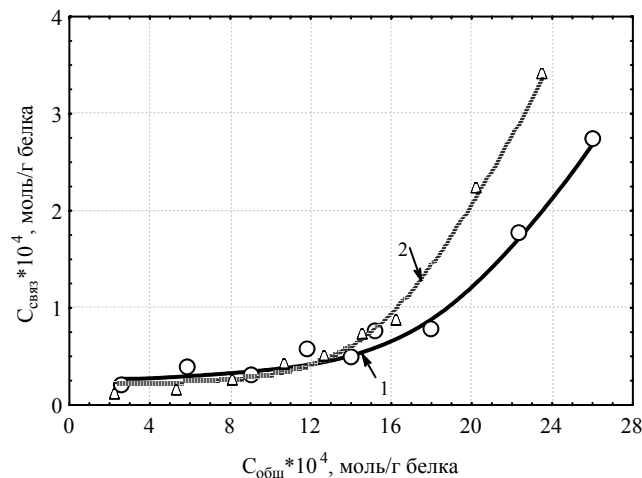


Рис. 1. Изотермы связывания метотрексата с нативной мембраной тени эритроцитов при 25°C (1) и при 37 (2). Точками нанесены экспериментальные данные. Сплошная линия – расчетная кривая связывания.

Результаты расчета показали, что центры связывания для метотрексата различаются как по сродству, так и емкостью. Первый тип характеризуется чрезвычайно высоким сродством ($K_1=9,89 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ (25°C) и $9,11 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ (37°C)) и низкой емкостью, второй тип центров характеризуется низким сродством ($K_2=456,2 \text{ M}^{-1}$ (25°C) и $532,4 \text{ M}^{-1}$ (37°C)) и средней емкостью, третий тип характеризуется низким сродством ($K_3=22,1 \text{ M}^{-1}$ (25°C) и $21,7 \text{ M}^{-1}$ (37°C)), и чрезвычайно высокой емкостью (не насыщается при концентрации МТХ $2,60 \cdot 10^{-3}$ моль/л (последняя точка серии).

Таблица 1

Параметры связывания метотрексата с нативной мембраной эритроцитов

T, °C	Центр связывания, j	Константа связывания, K_j	Концентрация центров связывания, моль/г белка, N_j	Степень кооперативности n_j
25°C	1	$9,89 \cdot 10^6$	$2,13 \cdot 10^{-5}$	2
	2	456,2	$3,18 \cdot 10^{-4}$	10
	3	22,1	$4,08 \cdot 10^{-3}$	2
37°C	1	$9,11 \cdot 10^6$	$1,82 \cdot 10^{-5}$	2
	2	532,4	$4,38 \cdot 10^{-4}$	10
	3	21,7	$2,28 \cdot 10^{-3}$	2

Из рис. 1 видно, что повышение температуры до 37°C увеличивает сорбцию метотрексата, причем увеличение сорбции наблюдается в области высоких концентраций МТХ. Это может быть связано как с увеличением центров связывания второго типа, так и константы связывания с этими центрами. Как показали расчеты, количество центров связывания других типов и констант связывания с ними достоверно не изменяются (табл. 1).

Изотермы связывания метотрексата с белок-липидным матриксом мембраны, полученным после экстрагирования периферических белков показаны на рис. 2. Параметры связывания, полученные расчетным путем, приведены в табл. 2. Видно, что экстракция периферических белков привела к снижению сорбции метотрексата. Однако, если при 25°C связывание МТХ снизилось в интервале низких концентраций ($C_{общ} = (2 \div 18) \cdot 10^{-4}$ моль/г-белка), то при 37°C связывание МТХ снижается при $C_{общ} > 18 \cdot 10^{-4}$ моль/г-белка, а в интервале низких концентраций достоверно не изменяется.

Удаление периферических белков привело к снижению концентрации центров связывания первого типа, при этом возросла константа связывания с центрами этого типа. Константы связывания с центрами второго типа достоверно не изменилась, в то время как количество центров связывания незначительно уменьшилось. Константы связывания с центрами третьего типа снизились, в то время как их концентрация возросла.

Известно [8, 9], что экстракция периферических белков приводит к изменению структуры интегральных белков и электрохимических свойств белок-липидного матрикса мембран. Вместе с тем, данные литературы указывают на наличие взаимодействий между периферическими белками и липидным бислоем [9].

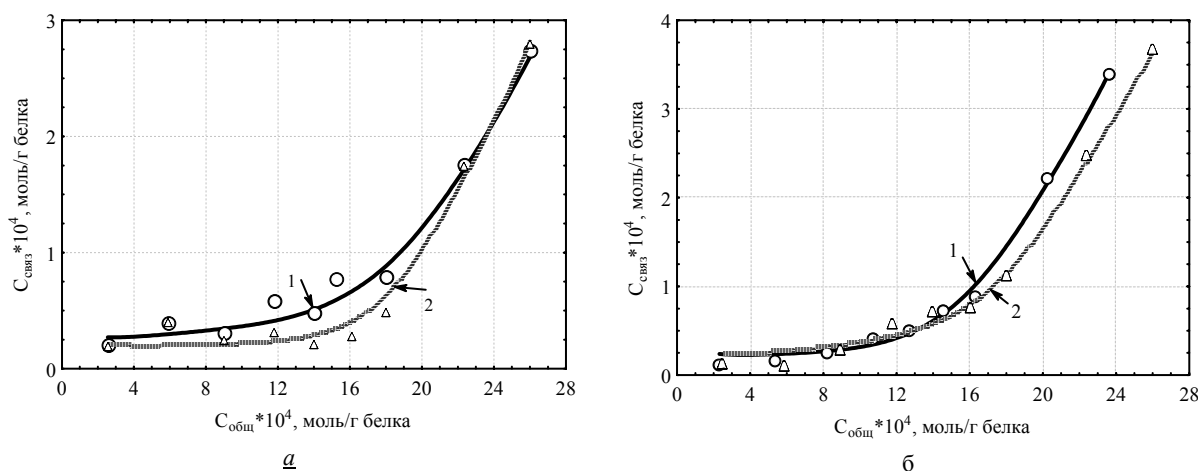


Рис. 2. Изотермы связывания метотрексата с нативной мембраной теней эритроцитов (1) и ее белок – липидным матриксом (2). А– Т 25°С, Б– Т 37°С. Точками нанесены экспериментальные данные. Сплошная линия – расчетная кривая связывания.

Таблица 2

Параметры связывания метотрексата с белок-липидным матриксом эритроцитов

T, °C	Центр связывания, j	Константа связывания, K _j	Концентрация центров связывания, моль/г белка, N _j	Степень кооперативности n _j
25°С	1	16,13·10 ⁶	1,67·10 ⁻⁵	2
	2	476,2	3,08·10 ⁻⁴	15
	3	15,7	4,49·10 ⁻³	2
37°С	1	14,62·10 ⁶	1,72·10 ⁻⁵	2
	2	501,4	3,57·10 ⁻⁴	12
	3	18,6	4,85·10 ⁻³	1,4

Изменение стандартной свободной энергии связывания МТХ с мембраной можно определить по формуле

$$\Delta G^0 = -RT \ln K ,$$

где R – газовая постоянная, T – абсолютная температура в К, K – константа связывания. Изменение стандартной свободной энергии при связывании метотрексата с центрами различных типов приведены в табл. 3.

Электростатическое взаимодействие характеризуется, как известно, небольшими величинами ΔG^0 : 12–16 кДж/моль. Таким образом, с центрами второго и третьего типа МТХ связывается только электростатически. Скорее всего, с этими центрами МТХ связывается неспецифически. Центры третьего типа вероятно представлены липидной компонентой мембраны эритроцита, т.к. их количество увеличивается при удалении периферических белков.

На центрах первого типа МТХ фиксируются помимо дальнедействующих электростатических сил также силами ближнего порядка: водородными связями, Ван-дер-ваальсовыми силами, гидрофобными взаимодействиями. На основании полученных экспериментальных данных и данных, имеющихся в литературе, можно предположить, что эти центры связывания локализованы на интегральных белках и, возможно, на периферических белках мембраны эритроцитов.

Установлено, что при связывании молекул, имеющих заряд с интегральными мембранными белками, их молекулы локализуются на границе между полярной и неполярной областями мембраны [9]. Связывание заряженных молекул лигандов, к которым относится и метотрексат с поверхностью мембраны, имеющей определенный зарядовый рельеф, определяется двумя факторами: сродством лиганда к центру связывания и поверхностным потенциалом ϕ , определяющим концентрацию лиганда в двойном электрическом слое. В этом случае удаление периферических белков приводит к изменению поверхностного потенциала и соответственно к изменению концентрации лиганда в примембранных слоях. Процесс связывания метотрексата с центрами первого типа наиболее чувствителен к изменению электроповерхностных свойств мембраны. Рассчитанная в соответствии с данной моделью величина константы связывания с центрами первого типа на нативной мембране теней эритроцитов составляет $9,89 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ и возрастает после удаления периферических белков до $16,13 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ (при 25°С).

Таблиця 3

Изменение стандартной свободной энергии при связывании метотрексата с центрами различных типов

T, °C	Вид мембраны	ΔG^0 связывания метотрексата с центрами типа j , кДж/моль		
		$j=1$	$j=2$	$j=3$
25°C	Нативная мембрана (периферические белки не экстрагированы)	-39,9	-15,17	-7,6
	Белок-липидный матрикс	-41,1	-15,27	-6,8
37°C	Нативная мембрана (периферические белки не экстрагированы)	-41,3	-16,18	-7,9
	Белок-липидный матрикс	-42,5	-16,02	-7,5

Согласно известному закону распределения Больцмана, концентрация (C_i) в примембранном слое определяется величиной поверхностного потенциала на мембране:

$$C_i = C_0 \exp(zF\varphi/(RT)), \tag{5}$$

где z – заряд молекул МТХ (-2), C_0 – концентрация ионов в объеме раствора, F – число Фарадея.

Как следует из уравнения 5, соотношение величин констант связывания описывает изменение поверхностного потенциала мембраны:

$$\varphi_2 - \varphi_1 = RT/(zF) \ln K_1/K_2, \tag{6}$$

где K_1 и K_2 – константы связывания молекул с мембраной тенью эритроцитов до и после экстракции периферических белков.

В случае изменения константы связывания от $9,89 \cdot 10^6$ до $16,13 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ при удалении периферических белков, поверхностный потенциал вблизи центров первого типа изменяется на величину $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = 6,28$ мВ. Если учесть, что МТХ в растворе находится в анионной форме, то снижение поверхностного заряда вблизи центров первого типа и приводит к росту константы связывания. Согласно с установленным ранее фактом [8, 9], при экстракции периферических белков отрицательный потенциал мембраны становится более высоким. Более высокий отрицательный потенциал мембраны с экстрагированными периферическими белками легко объяснить, если учесть, что экстрагируемые периферические белки являются поликатионами. В нативной мембране периферические белки, связываясь за счет электростатических сил, частично компенсируют отрицательный заряд белок-липидного матрикса мембран. Снижение поверхностного заряда вблизи групп первого типа указывает на их модификацию в процессе удаления периферических белков, что и объясняет уменьшение концентрации центров связывания.

Константа связывания с центрами третьего типа снижается с 22,1 до $15,7 \text{ M}^{-1}$, что означает изменение поверхностного потенциала в области их локализации на -4,4 мВ. Наличие периферических белков, являющихся противоионами по отношению к белок-липидному матриксу, должно приводить к стабилизации структуры мембраны. Поэтому можно ожидать, что экстракция периферических белков сопровождается значительными структурными изменениями белок-липидного матрикса в сторону неупорядоченности и увеличения подвижности белкового и липидного компонентов мембраны. Этот факт может объяснить рост количества центров неспецифического связывания для МТХ.

Выводы. Установлено, что на мембране эритроцитов существует три типа центров связывания для метотрексата, различающихся как по сродству, так и емкостью. Показано, что первый тип центров связывания для метотрексата локализован на белках. Свободная энергия связывания с центрами первого типа находится в пределах от -39 до -41 кДж/моль. Величина свободной энергии связывания (-15,8 и -7,9 кДж/моль) указывает на электростатический характер взаимодействий метотрексата с центрами второго и третьего типов.

Показано, что удаление поверхностных белков с нативной мембраны эритроцитов приводит к снижению отрицательного заряда, локализованного вблизи центров первого типа и, возможно, к их модификации. Следствием этого является снижение количества центров связывания данного типа. Показано, что экстракция периферических белков сопровождается значительными структурными изменениями белок-липидного матрикса и росту поверхностного отрицательного заряда вблизи центров связывания третьего типа, что может усиливать процессы неспецифической сорбции МТХ эритроцитами.

РЕЗЮМЕ

Вивчена взаємодія метотрексату з нативними тіннями еритроцитів та їх білок-ліпідним матриксом (периферичні білки екстраговані). Розраховані параметри зв'язування. Установлено, що зв'язування метотрексату з мембраною еритроцитів визначається взаємодією із трьома структурними ділянками. Показаний вплив електрохімічних і поверхневих властивостей тіней еритроцитів на параметри зв'язування метотрексату.

Ключові слова: тіні еритроцитів, метотрексат, константи зв'язування.

SUMMARY

The interaction of methotrexate with native erythrocytes ghosts and their protein-lipid matrix (the peripheral proteins were extracted) was studied. The binding parameters were calculated. Demonstrated that the binding of methotrexate to erythrocytes' membrane is determined by its interaction with three structural sites. Influence of electrochemical and surface properties of erythrocytes ghosts on binding parameters methotrexate is shown.

Keywords: erythrocytes ghosts, methotrexate, the constants of binding.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Hornung N. Patients with rheumatoid arthritis treated with methotrexate (MTX): concentrations of steady-state erythrocyte MTX correlate to plasma concentrations and clinical efficacy / N. Hornung, T. Ellingsen, J. Attermann, et al. // J. Rheumatol. – 2008. – Vol. 35, N 9. – P. 1709-1715.
2. Warren R.B. Outcomes of methotrexate therapy for psoriasis and relationship to genetic polymorphisms / R.B. Warren, R.L. Smith, E. Campalani, et al. // Br. J. Dermatol. – 2009. – Vol. 160, N 2. – P. 438-441.
3. French D. Acquired variation outweighs inherited variation in whole genome analysis of methotrexate polyglutamate accumulation in leukemia / D. French, W. Yang, C. Cheng, et al. // Blood. – 2009. – Vol. 113, N 19. – P. 4512 - 4520.
4. Dervieux T. Pharmacogenetic and metabolite measurements are associated with clinical status in patients with rheumatoid arthritis treated with methotrexate: results of a multicentred cross sectional observational study / T. Dervieux, D. Furst, D. O. Lein, et al. // Ann. Rheum. Dis. – 2005. – Vol. 64, N 8. – P. 1180-1185.
5. Inoue S. Erythrocyte methotrexate-polyglutamate assay using fluorescence polarization immunoassay technique: application to the monitoring of patients with rheumatoid arthritis / S. Inoue, M. Hashiguchi, S. Kawai, M. Mochizuki // J. Pharm. Soc. Japan. – 2009. – Vol. 129, N 8. – P. 1001-1005.
6. Макурина О. Н. Изменение периферических и интегральных белков микросом печени кур в онтогенезе / О. Н. Макурина, В. И. Древаль // Изв. АН СССР. – Сер. Биология. – 1986. – № 6. – С. 926-929.
7. Кочетов Г. А. Практическое руководство по энзимологии / Г. А. Кочетов. – М.: Высшая школа, 1980. – 272 с.
8. Древаль В. И. Исследование связывания бромтимолового синего с плазматическими мембранами / В. И. Древаль, А. В. Финашин, Е. А. Баранник // Укр. биохим. журн. – 1989. – Т. 62, № 2. – С. 94-98.
9. Древаль В. И. Изменение структуры липидного компонента плазматических мембран при экстракции периферических белков / В. И. Древаль // Укр. биохим. журн. – 1989. – Т. 63, № 1. – С. 91-94.

Поступила в редакцію 07.05.2010 г.

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ІНДУКЦІЇ ФЛУОРЕСЦЕНЦІЇ ХЛОРОФІЛУ ПРИ ВИВЧЕННІ ВПЛИВУ НЕКОРЕНЕВОГО ПІДЖИВЛЕННЯ КУКУРУДЗИ КАРБАМІДОМ

С. Г. Зуза, Я. А. Погромська, В. О. Зуза

Донецька дослідна станція Національного наукового центру «Інститут ґрунтознавства та агрохімії
імені О. Н. Соколовського», м. Дзержинськ Донецької області

За допомогою методу індукції флуоресценції хлорофілу досліджені зміни стану системи фотосинтезу при некореневому підживленні кукурудзи карбамідом на фоні застосування мінеральних добрив та регуляторів росту. Показано, що обробка по листю карбамідом служить причиною короткочасного стресу, вихід з якого залежить від стану рослин і рівня мінерального харчування.

Ключові слова: система фотосинтезу, індукція флуоресценції хлорофілу, карбамід, некореневе підживлення.

Вступ. Флуоресценція хлорофілу є поки єдиним показником, що дозволяє досліджувати в живих об'єктах протікання фотохімічних реакцій, пов'язаних з роботою так названої фотосистеми 2 (ФС2) вищих рослин - системи, найбільш чутливої до факторів зовнішнього середовища. Результати таких досліджень сприяють більш глибокому розумінню регуляторних механізмів, що забезпечують ефективне перетворення енергії в первинних і наступних стадіях фотосинтезу.

З огляду на те, що флуоресценція - непродуктивний шлях реалізації енергії кванту, інтенсивність її несе інформацію про "КПД" фотосистеми. Метод індукції флуоресценції хлорофілу (ІФХ), який полягає у детектуванні індукованої флуоресценції хлорофілу при опроміненні адаптованого до темряви листя рослини, вже має деяке застосування. Так, є роботи по вивченню впливу стресових факторів на стан фотосистеми рослин за допомогою методу ІФХ [1], впливу некореневої обробки мікроелементами та поєднання некореневої обробки мікродобривом і кореневого підживлення повним комплексним добривом [2]. Метод є перспективним, та має буди всесторонньо вивченим і адаптованим до виробничого застосування.

Ціль, об'єкти та методи дослідження. Перед нами було поставлене завдання по застосуванню методу індукції флуоресценції хлорофілу при вивченні впливу некореневого підживлення карбамідом на стан фотосистеми кукурудзи на різному фоні кореневого живлення та на фоні обробки рослин стимулюючими препаратами по листю (табл. 1).

Таблиця 1

Схема вегетаційного дослідження

Варіант	Некореневе живлення 30 % розчином карбаміду	Зміст варіанту дослідження
1	Так/ Ні	Контроль
2	Так/ Ні	N ₆₀
3	Так/ Ні	N ₉₀
4	Так/ Ні	N ₉₀ P ₆₀
5	Так/ Ні	N ₉₀ P ₆₀ K ₄₀
6	Так/ Ні	P ₆₀ K ₄₀
7	Так/ Ні	K ₄₀
8	Так/ Ні	«Реаком», 5 л/га
9	Так/ Ні	«Гуміам», 100 мл/га
10	Так/ Ні	«Емістим С», 5 мл/га

Для постановки досліджень було закладено вегетаційний дослід за стандартною методикою [3] по схемі, представленій у табл. 1. На варіантах 1-7 добрива вносилися, як основні, у ґрунт при закладці дослідження. У якості азотного добрива використовувалася аміачна селітра, у якості фосфорного – подвійний суперфосфат, у якості калійного – хлорид калію. Посів проведено 10 травня 2009 року, обробку регуляторами росту (обприскування) – 6 червня, у фазі 7 листів, в подальшому некореневий обробіток 30% розчином карбаміду застосовано 3 серпня, у фазі 9-10 листків. Забір висоти рослин проведено 31 липня (фаза 5-7-ми листків), перед некореневим підживленням карбамідом, та 2 вересня (початок цвітіння), перед збиранням. Під час вегетації було зроблено три серії замірів індукованої флуоресценції хлорофілу (ІФХ) за методикою [1] з п'ятикратною повторністю для кожного варіанту. Перший забір проведено 28-29 липня (фаза 5-7-ми листів), другий – в перші дні після обробки карбамідом (3-5 серпня, фаза 9-10 листків), третій – практично через місяць, після некореневого підживлення (28-31 серпня, початок цвітіння). Аналіз даних по ІФХ проводили відповідно відомої методики [2, 4].

У роботі використано хронофлуориметр "Флоратест", розроблений в Інституті кібернетики НАН України [1]. Адаптація листя до темряви становила 5 хв. Довжина хвилі висвітлення – у максимумі

470±15 нм; освітленість у межах плями не менш 20 Вт/м². Спектральний діапазон виміру флуоресценції становить 670–800 нм. Виміри проведено у режимі 10 с, тобто детектування швидкої індукції флуоресценції хлорофілу А (Хла) фото системи 2 (ФС2) [4]. Інтерпретацію кривої ІФХ проведено у відповідності с ОЛР- кінетикою, яка враховує активність комплексу ФС2, що виділяє кисень (КВК) [2]. Для аналізу впливу факторів живлення рослин використано наступні показники. Fo – інтенсивність флуоресценції Хла при «відкритих» реакційних центрах (РЦ) ФС2, коли всі первинні акцептори електрону Qa окиснені. Для флуорометра «Флоратест» Fo, по рекомендації розробників, відповідає першим показникам прибору. Fp – інтенсивність флуоресценції Хла при «закритих» РЦ ФС2, коли всі Qa відновлені та не можуть приймати електрони e⁻ від РЦ; Fj – точка кривої ІФХ, обумовлена кількістю систем ФС2, що не відновлюють вторинний акцептор електрону Qv (Qv-невідновлюючих), у яких відсутній контакт між двома послідовними акцепторами Qa и Qv; FI – точка кривої ІФХ, що обумовлена ефективністю донорної частини ФС2 (системи фотолізу води); τ_{0,5} – час досягнення половини значення флуоресценції Fp. Для аналізу використано розрахункові показники [4]: (Fp-Fo)/Fp – квантовий вихід (ефективність) ФС2; (Fj-Fo)/Fv – доля Qv- невідновлюючих ФС2; (Fj-Fo)/Fp – ефективність розділення заряду, величина, яка характеризує якість комплексу, що збирає світло, (ССК) та РЦ ФС2; (Fp-Fj)/Fp – ефективність електронтранспортного ланцюгу (ЕТЛ) передачі електрону на фото систему 1 (ФС1). Для оцінки ефективності донорної сторони ФС2 (КВК) використано показник (Fp-Fo)/FI=Fv/FI – ефективність фотолізу води [2]. Дисперсійний та регресійний аналіз даних проведено за допомогою пакету STATISTICA 6.

Результати досліджень та їх обговорення. Отримані при інтерпретації серії кривих ІФХ показники дозволили проаналізувати у динаміці вплив некореневої обробки карбамідом кукурудзи на стан фотосистеми 2. Середні по обробці карбамідом представлені у табл. 2 (зірочками помічені достовірні на рівні 95% за різницею дані, одинарними та двійними між собою відповідно). У якості контролю виступає ряд варіантів, не оброблених карбамідом, з яким порівнювалися середні дані ряду варіантів, на яких застосовувалося некоренева підживлення.

Таблиця 2

Вплив некореневої обробки карбамідом на показники стану ФС2

Показник	Через добу після обробки карбамідом		Через місяць після обробки карбамідом	
	контроль	карбамід	контроль	карбамід
Fp, відн. од.	0,190	0,191	0,203	0,212
Fo, відн. од.	0,088**	0,109*	0,105**	0,103
Квантовий вихід ФС2, відн. од.	0,539**	0,433*	0,481**	0,512*
Доля Qv-невідновлюючих ФС2, відн. од.	0,364*	0,438**	0,343	0,373**
Ефективність розділення зарядів, відн. од.	0,197**	0,188	0,167**	0,194
Ефективність ЕТЛ, відн. од.	0,342*	0,247**	0,311	0,318**
Ефективність фотолізу, відн. од.	0,630*	0,490**	0,600	0,634**
τ _{0,5} , мс	1,3*	1,1*	1,1	1,2
τ, мс	226*	277*	195	210

Аналіз показників стану ФС2 з таблиці 2 показав, що некоренева підживлення карбамідом має істотний вплив на стан системи фотосинтезу. Швидка реакція на карбамід по листю характеризується суттєвим зниженням квантового виходу ФС2 при збільшенні інтенсивності флуоресценції Хла при «відкритих» реакційних центрах ФС2 (Fo) та зниженні ефективності розділення зарядів, ЕТЛ та фотолізу. Доля Qv-невідновлюючих ФС2 суттєво збільшується при зменшенні τ_{0,5} (часу досягнення половини максимальної інтенсивності флуоресценції). Тобто, збільшуються втрати енергії кванту на світлозбиральному комплексі та гальмуються початкові стадії фотосинтезу - передача електрону між первинним акцептором Qa та пластохіноном Qb. Однак τ, час досягнення інтенсивності флуоресценції Fp, що відповідає заповненню ЕТЛ електронним потоком, суттєво збільшується, скоріш за все, за рахунок появи альтернативного шляху утилізації електронного потоку через активізацію азотного обміну. Все це говорить про те, що некоренева обробка карбамідом є стресовим фактором для системи фотосинтезу. Але через місяць після підживлення спостерігається покращення стану показників фотосистеми відносно контрольного ряду (дивись табл. 2). Преш за все – збільшується квантовий вихід ФС2 та ефективність фотолізу. Це говорить про перебудову первинної системи фотосинтезу у напрямку її оптимізації.

Для вивчення дії добрив було проаналізовано середні на варіантах без застосування основного добрива під час закладання досліду (фази 1,8,9,10) та середні на варіантах, в яких основні добрива було внесено (варіанти 2-7).

З результатів табл. 3 (зірочками помічені достовірні на рівні 95% за різницею дані, одинарними та двійними між собою відповідно) можна помітити, що вплив добрив на стан показників ФС2 був суттєвим, особливо у період інтенсивного росту рослин. Підвищення значень Fo, зниження квантового виходу ФС2, зниження ефективності розділення зарядів, ефективності ЕТЛ, показника τ_{0,5} та підвищення часу τ були достовірні на 95% рівні ймовірності. Такі зміни в показниках говорять про те, що додаткове коренева живлення провокує навантаження на фотосистему, насамперед через активізацію додаткових шляхів

електронного відтоку за рахунок інтенсифікації анаболізму. Підвищення інтенсивності F_0 та F_r одночасно можуть бути обумовлені зростанням вмісту хлорофілу (за рахунок підсилення процесів його синтезу) та з інтенсифікацією споживання АТФ, що призводить до зниження нефотохімічного гасіння флуоресценції [1, 4].

Таблиця 3

Вплив добрив на стан та динаміку показників ФС2

Показник	Без застосування основних добрив (середні по варіантах 1, 8-10)			На фоні застосування основних добрив (середні по варіантах 2-7)		
	фаза 7-ми листіків	фаза 9-10 листіків	початок цвітіння	фаза 7-ми листіків	фаза 9-10 листіків	початок цвітіння
F_r , відн. од.	0,169*	0,191*	0,196	0,170*	0,198*	0,207
F_0 , відн. од.	0,077**	0,090*	0,108	0,085**	0,086*	0,103*
Квантовий вихід ФС2, відн. од.	0,545**	0,525*	0,448**	0,498**	0,549*	0,503**
Доля Qb-невідн. ФС2, відн. од.	0,289*	0,365*	0,327	0,280*	0,365*	0,354
Ефект. розд. зарядів, відн. од.	0,163	0,192*	0,147**	0,141*	0,201*	0,181**
Ефективність ЕТЛ, відн. од.	0,383**	0,333*	0,301*	0,357**	0,348	0,322
Ефективність фотолізу, відн. од.	0,659**	0,640*	0,551**	0,596**	0,623	0,634**
$\tau_{0,5}$, мс	1,23**	1,35*	1,08*	1,12**	1,32*	1,15
τ , мс	254*	216	197*	272	233	194

При зростанні інтенсивності флуоресценції взагалі протягом місяцю (що може бути обумовлено збільшенням вмісту хлорофілу [4] у більш зрілому листі) квантовий вихід ФС2 та ефективність системи фотолізу води на фоні добрив збільшуються, на відміну від показників варіантів без застосування добрив. Це говорить про оптимізацію системи фотосинтезу, покращення утилізації енергії світла на фоні добрив у період цвітіння. То ж в цілому, використання добрив сприяє покращенню стану первинних процесів фотосинтезу.

Регресійний аналіз низки варіантів без обробітку карбамідом показав від'ємну залежність ваги рослин та інтенсивності флуоресценції при відкритих реакційних центрах F_0 періоду початку цвітіння (рис. 1): $y=206,0 - 1588,1 \cdot x$ ($r^2 = 0,625$; $r = -0,791$, $p = 0,011$), де x – F_0 у період початку цвітіння; y – вага рослин, г.

Аналіз ряду варіантів без обробки карбамідом показав від'ємну залежність висоти рослин у період інтенсивного росту (у фазі 9-10 листів, перший замір) та долі Qb-невідновлюючих ФС2 (рис. 2): $y=120,836 - 142,393 \cdot x$ ($r^2 = 0,447$; $r = -0,669$, $p = 0,035$), де x – доля Qb-невідновлюючих ФС2; y – висота рослин у фазі 9-10 листів, см.

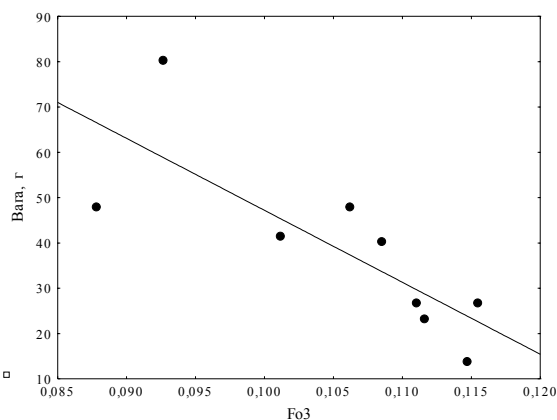


Рис. 1. Регресійна залежність ваги однієї рослини кукурудзи та інтенсивності флуоресценції при відкритих РЦ ФС2 у період початку цвітіння.

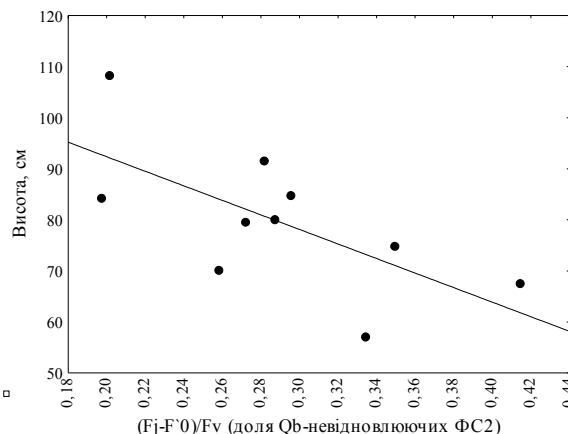


Рис. 2. Залежність висоти рослин кукурудзи у фазі 9-10 листів та долі Qb-невідновлюючих ФС2.

При виключенні з аналізу варіантів зі стимуляторами, застосування яких включає гормональні механізми регулювання розвитку рослин, що торкаються не тільки системи фотосинтезу (варіанти 8,9 та 10), 5, отримали позитивну залежність ваги та ефективності фотолізу в період початку цвітіння ($r^2 = 0,870$; $r = 0,933$, $p = 0,007$). Тож збільшення певною мірою показника ефективності фотолізу та зменшення F_0 та долі Qb-невідновлюючих ФС2 можуть служити позитивним індикатором врожайності.

Композитивне застосування некореневого підживлення карбамідом та основного добрива під посів, яке містить азот, показало, що варіанти з різними дозами азотного добрива (N_{60}) та (N_{90}) відрізняються за показником урожаю та реакцією на карбамід (табл. 4, 5, 6).

Таблиця 4

Швидка реакція на карбамід по листю. Період інтенсивного росту, фаза 9-10 листів

Варіант ¹	F ₀ , відн. од.		Квантовий вихід ФС ₂ , відн. од.		Доля Q _b -невідн. ФС ₂ , відн. од.		Ефективність розділення зарядів, відн. од.		Ефективність ЕТЛ, відн. од.		Ефективність фотолізу, відн. од.		τ, мс	
	контроль	карбамід	контроль	карбамід	контроль	карбамід	контроль	карбамід	контроль	карбамід	контроль	карбамід	контроль	карбамід
1	0,101	0,112	0,495	0,448	0,232	0,342	0,115	0,153	0,380	0,294	0,578	0,523	241	264
2	0,085	0,085	0,562	0,486	0,352	0,321	0,199	0,157	0,363	0,328	0,655	0,541	249	241
3	0,084	0,085	0,542	0,495	0,383	0,646	0,211	0,315	0,331*	0,181*	0,603	0,553	206	325
4	0,088	0,100	0,546	0,509	0,368	0,405	0,202	0,203	0,344	0,305	0,623	0,571	209	271
5	0,078	0,107	0,583	0,424	0,373	0,377	0,220	0,160	0,363	0,264	0,650	0,479	268	250
6	0,096	0,100	0,514	0,511	0,366	0,366	0,188	0,189	0,326	0,322	0,605	0,631	193	236
7	0,081	0,127	0,558	0,291	0,326	0,443	0,185	0,128	0,373	0,163	0,616	0,317	297	300
8	0,090	0,117	0,516	0,386	0,390	0,554	0,199	0,215	0,316	0,171	0,615*	0,418*	202	392
9	0,076	0,147	0,602	0,602	0,423	0,464	0,255	0,140	0,347*	0,162*	0,775*	0,324*	159	252
10	0,098	0,120	0,483	0,402	0,364	0,503	0,170*	0,206*	0,313	0,196	0,580*	0,451*	264	211

Примітка: ¹ - варіанти згідно табл.1; * - дані, що відрізняються від варіанту 1 достовірно на рівні 95%.

Таблиця 5

Показники ФС₂ початку цвітіння

Варіант	F ₀ , відн. од.		Квантовий вихід ФС ₂ , відн. од.		Ефективність фотолізу, відн. од.	
	контроль	карбамід	кконтроль	карбамід	контроль	карбамід
1	0,111	0,099	0,455	0,495	0,573	0,628
2	0,115	0,107	0,454	0,503	0,565	0,598
3	0,093*	0,099	0,550*	0,537	0,709	0,643
4	0,112	0,099	0,499	0,547	0,623	0,690
5	0,098	0,112	0,494	0,507	0,645	0,648
6	0,109	0,104	0,492	0,500	0,622	0,596
7	0,088*	0,124*	0,523	0,441	0,646	0,540
8	0,101	0,099	0,436	0,544	0,531	0,708
9	0,116	0,094	0,457	0,550	0,541	0,683
10	0,106	0,099	0,436	0,489	0,556	0,605

Примітка: * - дані, що відрізняються від варіанту 1 достовірно на рівні 95%.

Таблиця 6

Характеристики зростання та урожаю кукурудзи по варіантах

Варіант	Збільшення висоти рослин за місяць після підживлення, %		Вага однієї рослини, г	
	контроль	карбамід	контроль	карбамід
Контроль	5,2	17,0	27	28
N ₆₀	11,0	6,1	13	38
N ₉₀	10,2	7,3	80	26
N ₉₀ P ₆₀	4,3	2,9	23	29
N ₉₀ P ₆₀ K ₄₀	12,3	4,6	4	41
P ₆₀ K ₄₀	4,1	2,3	40	30
K ₄₀	37,6	4,6	48	36
«Реаком», 5 л/га	1,8	2,2	41	33
«Гуміам», 100 мл/га	9,0	6,8	27	19
«Емістим С», 5 мл/га	11,9	3,2	48	16

Показники системи фотосинтезу говорять про те, що варіант з застосуванням N₆₀ у фазі 7-ми листів мало відрізняється від контрольного (табл. 7). Тільки збільшення часу досягнення максимальної інтенсивності флуоресценції τ було збільшено на 30 %, ймовірно за рахунок стоку електронів на обмін азоту при інтенсифікації білкового синтезу.

Вплив варіантів на показники ФС2 у фазі 7-ми листів

Варіант	F ₀ , відн. од.	квантовий вихід ФС2, відн. од.	доля Qb-невідновлюючих ФС2, відн. од.	ефективність розділення зарядів, відн. од.	ефективність ЕПЛ, відн. од.	ефективність фотолізу, відн. од.	τ, мс
Контроль	0,066	0,588	0,296	0,177	0,411	0,767	271
N ₆₀	0,076	0,528	0,259	0,139	0,389	0,654*	346*
N ₉₀	0,089*	0,455*	0,202*	0,092*	0,362*	0,544*	243
N ₉₀ P ₆₀	0,088*	0,540	0,273	0,147	0,393	0,644*	285
N ₉₀ P ₆₀ K ₄₀	0,088*	0,475*	0,335	0,161	0,314*	0,545*	281
P ₆₀ K ₄₀	0,095*	0,454*	0,282	0,129	0,325*	0,536*	219*
K ₄₀	0,082*	0,520	0,351	0,182	0,337*	0,624*	215*
«Реаком», 5 л/га	0,089*	0,481*	0,198*	0,095*	0,386	0,571*	281
«Гуміам», 100 мл/га	0,068	0,597	0,416*	0,252*	0,345*	0,667	220
«Емістим С», 5 мл/га	0,083*	0,519	0,288	0,152	0,367	0,604*	220

Примітка: * - дані, що відрізняються від варіанту 1 достовірно на рівні 95%.

Варіант з високою дозою азотних добрив (N₉₀) має знижені показники квантового виходу ФС2 на 22 % відносно контролю, долі Qb-невідновлюючих ФС2 (-32 %), низьку ефективність розділення зарядів (-48 %), ефективність фотолізу (-29 %), найменше значення τ_{0,5} (-23 %) та малий час τ (-10 % від контролю) у період інтенсивного росту фази 7-ми листів (табл. 7). Це говорить про напруженість системи фотосинтезу. Лімітуючою стадією у ньому, виходячи з пониження τ, є відтік електронів на азотний цикл, відновлення нітритів, що узгоджується з літературними даними [5]. Тобто, на підвищеному фоні азотного живлення можливе накопичення нітритів, що сприяє розвитку окисного стресу.

Внесення карбаміду у некореневе підживлення на фоні помірних доз амонійної селітри не спричинило суттєвих стресових змін. Тому і реакція варіанту з N₆₀ у якості основного добрива за показниками фотосинтезу мало відрізняється від контролю як зразу після обприскування, так і при відновленні через місяць (табл. 4, 5). Варіант з помірним внесенням азоту (N₆₀) при застосуванні позакореневого підживлення карбамідом дав більший приріст по масі рослин, ніж контроль (майже у 2 рази проти біля 10 % на контролі) (табл. 6). На фоні ж підвищеного рівня азотного живлення спостерігається зниження урожаю від застосування карбаміду більш ніж у 2 рази.

Варіанти з внесенням калію та при застосуванні регуляторів росту (7, 8, 9, 10) мають негативну реакцію на карбамід за показниками врожаю (табл. 6). При цьому швидка реакція на некореневу обробку полягає, як і у разі з підвищеним нітратним живленням, у різкому та суттєвому підвищенні долі Qb-невідновлюючих ФС2 (табл. 4).

Ще один ефект некореневого живлення карбамідом, який спостерігався у досліді – це стимуляція росту молодого листя на варіантах з підвищеними дозами азотного добрива без додатково внесеного калію та на варіанті з обробкою листя «Гуміамом». Відомо, що накопичення нітратного азоту [6] у листі ускладнює відтік асимілятів (продуктів фотосинтезу у формі сахарози) з нього, при цьому відбувається їх накопичення в апопласті. До того ж активізація азотного обміну активує гліколатний метаболізм, утворення амінокислот, та через шикиматну путь – утворення фітогормонів [7], у тому числі і цитокиніни. То ж додаткове азотне живлення спричиняє гормональні зміни [8]. При внесенні карбаміду по листю у рослину клітину потрапляє азот в амонійній формі. Амонійний азот прискорює відтік асимілятів з листя в грани-акцептори [6]. При цьому накопичені цитокиніни знімають апікальну домінанту. Формується нове листя у якості акцепторів потоку асимілятів. Подібний ефект на варіанті з застосуванням «Гуміаму» можна пояснити наявністю амонійного азоту у препараті, що стимулював синтез амінокислот і фітогормонів, та власною фітогормональною активністю препарату.

На варіанті з «Емістимом», 5 мл/га по листю, після обробки карбамідом спостерігалось скорочення міжвузлів та відмирання листя. Це можна пояснити гормональним дисбалансом. Відомо, що препарат сам змінює співвідношення фітогормонів у листі в бік збільшення абсцизової кислоти (АБК) відносно цитокинінів. І при завданому обробкою карбамідом по листю тимчасовому стресі також підвищується вміст АБК [7]. Надлишок АБК і спричиняє ефект, який спостерігається при композитивному застосуванні даного регулятору та карбаміду у некореневе підживлення. Суттєвий дисбаланс у співвідношенні фітогормонів на користь АБК проявляється у скороченні міжвузлів та передчасному відмиранні листів.

Висновки. За допомогою методу ІФХ було встановлено наступне.

1. Некореневе підживлення карбамідом спричиняє короточасний стрес системи фотосинтезу кукурудзи, який згладжується на фоні використання помірних доз амонійної селітри (N₆₀) у якості основного добрива під посів.

2. Внесення добрив під посів сприяє напруженню ФС2 у початковий період вегетації кукурудзи та навантаженню фотосистеми, насамперед через активізацію додаткових шляхів електронного відтоку за

рахунок інтенсифікації анаболізму, та подальшій оптимізації системи фотосинтезу, покращенню утилізації енергії світла на фоні добрив у період цвітіння.

3. Аналіз даних ІФХ та результатів вегетаційного дослідження дозволив припустити, що некореневе підживлення карбамідом на фоні підвищеного азотного живлення, та на фоні попередньої обробки «Гуміамом» 100 мл/га по листю, стимулює відтік асимілятів фотосинтезу, зміну гормонального статусу та утворення молодого листа, що спостерігалось у досліді.

4. «Емістим», 5 мл/га, по листю є не найкращим попередником для внесення карбаміду у некореневе живлення. Таке поєднання обробок спричиняє гормональний дисбаланс на користь АБК, що помітно гальмує розвиток рослини та спричиняє старіння і відмирання листя.

5. Існування регресійних залежностей між показниками системи фотосинтезу, ваги та зросту рослин дає можливість прогнозування та регулювання урожаю. Збільшення ефективності фотолізу та зменшення F_0 та долі Q_b -невідновлюючих ФС2 можуть служити позитивним індикатором врожайності.

Таким чином за допомогою методу ІФХ стало можливим дослідити швидку реакцію та подальші зміни фотосистеми 2 рослин при некореновому підживленні, проаналізувати вплив добрив та стимуляторів на стан системи фотосинтезу та спрогнозувати результати композитивного застосування прийомів інтенсифікації сільськогосподарського виробництва.

РЕЗЮМЕ

С помощью метода индукции флуоресценции хлорофилла исследованы изменения состояния системы фотосинтеза при некорневой подкормке кукурузы карбамидом на фоне применения минеральных удобрений и регуляторов роста. Показано, что обработка по листе карбамидом служит причиной кратковременного стресса, выход из которого зависит от состояния растений и уровня минерального питания.

Ключевые слова: система фотосинтеза; индукция флуоресценции хлорофилла; карбамид; некорневая подкормка.

SUMMARY

By means of a method of an induction of fluorescence of chlorophyll the changes of a state of system of photosynthesis at use of foliar processing of maize by a carbamide depending on mineral fertilizers and growth regulators are studied. It is shown that processing of sheet by urea leads to short-term stress, from which the exit depends on states of a plant and level of a mineral food

Key words: system of photosynthesis; induction of fluorescence of chlorophyll; carbamide; foliar processing.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Галелюка І. Б. Портативний флуориметр для експрес-діагностики стану рослин: методи віртуального проектування і результати дослідного використання / І. Б. Галелюка, М. С. Качановська, Є. В. Сарахан. – К., 2006. – 53 с.
2. Байрак Н. В. Применение метода индукции флуоресценции хлорофилла для изучения неоднородности системы фотосинтеза растений / Н. В. Байрак, В. А. Зуза, Я. А. Погромская // Вісник Харківського університету імені В.Н. Каразіна. Серія: біологія. – 2008. – № 814. – С. 181-186.
3. Доспехов Б. А. Методика полевого опыта / Б. А. Доспехов. – М.: Колос. 1973. – 416 с.
4. Корнеев Д. Ю. Информационные возможности метода индукции флуоресценции хлорофилла / Д. Ю. Корнеев. – К.: Альтапрес, 2002. – 188 с.
6. Рубин А. Б. Регуляция первичных процессов фотосинтеза / А. Б. Рубин, Т. Е. Кренделева // Успехи биологической химии. – 2003. – Т. 43. – С. 225-266.
7. Чиков В. И. Эволюция представлений о связи фотосинтеза с продуктивностью растений / В. И. Чиков. // Физиология растений. – 2008. – Т. 55, № 1. – С. 140-154.
8. Особенности физико-химических и регуляторных свойств гликолатоксидаз из C3- и C4-растений / А. Т. Епринцев, А. Е. Семенов, М. Навид, В. Н. Попов // Физиология растений. – 2009. – Т. 56, № 2. – С. 184-185.
9. Трапезников В. К. Локальное питание растений. / В. К. Трапезников, И. И. Иванов, Н. Г. Тальвинская - Уфа: Гилем, 1999. – 260 с.

Надійшла до редакції 21.04.2010 р.

УДК 633.15

**ВПЛИВ ГУСТОТИ РОСЛИН ТА СПОСОБІВ СІВБИ НА УРОЖАЙНІСТЬ
ЗЕРНА КУКУРУДЗИ В УМОВАХ СХІДНОЇ ЧАСТИНИ СТЕПУ УКРАЇНИ***В. Ю. Комарський, О. Л. Грицун, С. О. Пантюшенко**Донецький інститут агропромислового виробництва НААНУ, м. Донецьк*

У статті висвітлені результати вивчення впливу густоти рослин та способу сівби кукурудзи різних груп стиглості на урожайність зерна. Зменшення ширини міжрядь позитивно впливало на такі структурні показники, як довжину качанів, їх середню вагу, кількість зерен на качані та врожай зерна і навпаки, збільшення густоти рослин призводило до зменшення цих показників.

Ключові слова: густота рослин, кукурудза, ширина міжряддя, фотосинтез, урожай.

Вступ. Глобальне потепління клімату і пов'язана з ним часта повторюваність посух обумовлює необхідність визначення можливості протистояння цим явищам в тому числі і за рахунок визначення оптимальної густоти рослин та способу сівби. Кукурудзу вирощують як зернову, кормову і технічну культуру. Вона характеризується універсальністю використання і високою врожайністю [1]. Кукурудза займає провідне місце в світі серед зернових культур. Так, по посівних площах ця культура займає третє місце в світі після пшениці і рису, а в групі зернофуражних культур – перше. У США її площа складає 25,5 млн. га, Китаї – 20,6 млн. га, в Бразилії – 11,8 млн. га. Значні площі кукурудза займає і в Європі (Франція – 1,62 млн. га, Румунія – 2,80 млн. га, Угорщина – 1,00 млн. га). Такого поширення ця культура набула завдяки можливості різностороннього використання її в народному господарстві. За даними міжнародної організації з продовольству при ООН (ФАО) у всьому світі з кукурудзи виготовляють більше 500 різних основних і побічних продуктів. Ось деякі з них: комбікорм, премікси, екстракт, крупа, мучка, консерви, масло, спирт, цукор, харчові концентрати, пиво, вино, крохмаль, медикаменти, ацетон, фурфурол, папір, волокно, лінолеум та інші.

На відміну від інших зернових культур зерно кукурудзи відрізняється високими кормовими якість. У 1 кг сухого зерна міститься 1,34 корм. од, тоді як в 1 кг зерна ячменю – 1,2, вівса – 1 корм. од. По калорійності зерно кукурудзи перевищує пшеничне на 11,9%, ячменю – на 23,6%, вівсяне – на 28,4%. Її зерно придатне для годування всіх видів тварин і птахів. Перетравленість кукурудзяного зерна у великої рогатої худоби і свиней досягає 90%. У зв'язку з цим в структурі зернової частини комбікорму кукурудзи повинно бути не менше 40%. Кукурудза є невід'ємною культурою сівозміни для підвищення родючості ґрунту, очищення полів від шкідників, хвороб і бур'янів, а також страховою культурою при недосіві або поганій перезимівлі озимини. У східній частині Степу України, а саме у Донецькій області кукурудза завжди займала питому вагу у зерновому балансі. Посівні площі її сягали 160 тис. га, урожайність 38,8 ц/га, а валові збори зерна біля 650 тис. тон, або до 25,0 % від валового збору зернових.

Однак, у останній період в основному у зв'язку з не дуже сприятливими погодними умовами ці показники дещо погіршилися. Окрім цього селекціонерами виведені і запропоновані виробництву нові гібриди кукурудзи. В умовах східної частини Степу України вони ще не вивчалися. Тому нами було поставлено завдання по вивченню в цих умовах впливу густоти рослин та способу сівби на урожайність зерна кукурудзи.

Умови та методика проведення досліджень. Досліди виконували в східній частині Степу на дослідному полі польової сівозміни лабораторії землеробства, рослинництва та механізації Донецького інституту агропромислового виробництва. Клімат зони помірно посушливий, відносно теплий. Середньорічна кількість опадів 512 мм. У дослідному 2009 році за період квітень-серпень випало всього 167,2 мм опадів при багаторічних 249 мм. У денні часи температура повітря досягала 35-37 °С, на поверхні ґрунту 63-65 °С. Ґрунтовий покрив на дослідних ділянках – переважно чорнозем звичайний, мало гумусний важко суглинковий. Вміст гумусу – 4,65 %, загальних форм азоту – 0,25%, рН – слабо лужна.

Метою досліджень є виявлення оптимальної густоти рослин гібридів кукурудзи (ранньостиглого та середньораннього) при різних способах сівби в східній частині Степу. Об'єктом досліду були гібриди кукурудзи: ранньостиглий Квітневий 187 СВ та середньоранній Оржиця 257СВ. Предмет досліду – спосіб сівби (з міжряддям 45 та 70 см), густота рослин від 30 до 60 тис/га. З інтервалом 10 тис/га (табл. 1). Посівна площа ділянок 56,0-72,0 м², облікова – 25,0 м², повторність чотирикратна. Попередник – парова озима пшениця.

Основний обробіток ґрунту складався з дискування попередника та осінньої оранки на 25-27 см. Весною провели ранню, на глибину 10-12 см, та передпосівну, на 6-8 см, культивування. Мінеральні добрива у дозі N₆₀P₃₀K₃₀ внесли під першу культивування начіпним розкидувачем мінеральних добрив. Під передпосівну культивування обприскувачем «Брандт» внесли ґрунтовий гербіцид Оскар у дозі 2,5 л/га.

Таблиця 1

Схема досліду

Назва гібриду	Група стиглості	Ширина міжрядь, см	Густота рослин, тис./га			
			30,0	40,0	50,0	60,0
Квітневий 187МВ	ранньостиглий	70	30,0	40,0	50,0	60,0
		45	30,0	40,0	50,0	60,0
Оржиця 257 СВ	середньоранній	70	30,0	40,0	50,0	60,0
		45	30,0	40,0	50,0	60,0

В досліджах вивчали особливості росту та розвитку, фотосинтетичну діяльність рослин та формування продуктивності нових гібридів (Квітневий 187 СВ та Оржиця 257 СВ). Деякі вчені виявили, що комплексний вплив способів посіву і густоти рослин обумовлює урожай зерна. Проте вирішальну дію надає густина рослин [2, 3]. Спосіб посіву, як чинник, впливає на урожай слабше. Агротехнічний ефект дії і взаємодії цих прийомів визначається поєднанням їх градацій і погодними умовами [4].

Результати досліджень. Ефективність використання сонячної радіації та вологи значною мірою визначається кількістю рослин на одиницю площі. Негативний вплив через мірного загушення виражається в підвищенні конкуренції між складовими агрофітоценозами за основні фактори життєдіяльності поживними речовинами, вологою, світлом. В той же час зрідження посіву в наслідок недостатньої кількості рослин, не можуть забезпечити значного приросту урожайності. Тому максимальний урожай можна отримати лише при умовах поєднання максимальної продуктивності рослин і найбільш раціональної їх кількості на одиницю площі. Результати дослідів, які проводились в 2009 році підтверджують, що кукурудза є пластичною культурою. Це дозволяє формувати високий урожай при різних способах сівби та в діапазоні густоти від 30 до 60 тис/га.

При підвищенні густоти стеблостою з 30 до 60 тис./га площа листової поверхні однієї рослини у фазу 11-12 листків кукурудзи зменшувалась. При другій даті визначення показники площі листової поверхні однієї рослини були більшими порівняно з першим строком. У фазі воскової стиглості зерна площа листової поверхні однієї рослини, порівняно з попереднім строком, зменшувалась у гібрида Квітневий 187СВ на 70 см на 939,2 -326,2 см², на 45 см – на 1027,7-250,8 см². У гібрида Оржиця 257СВ з міжряддям 70 см на 881,5-863,6 см², з міжряддям 45 см на 373,1-407,9 см². Більша площа листків була в обох гібридів при ширині міжряддя 70 см (табл. 2).

Таблиця 2

Площа листків однієї рослини в залежності від гібридів, ширині міжрядь та густоти рослин, 2009 р., см²

Назва гібриду	Ширина міжрядь, см	Густота рослин, тис/га			
		30,0	40,0	50,0	60,0
У фазі 10-11 листків					
Квітневий 187СВ	70	1795,3	1686,0	1536,4	1543,2
	45	1842,5	1667,5	1545,8	1469,1
Оржиця 257СВ	70	1947,2	1945,7	1971,8	1904,2
	45	1932,8	1818,3	1748,5	1705,5
У фазі цвітіння					
Квітневий 187СВ	70	3834,8	3480,5	3200,8	3175,9
	45	3245,1	3124,9	2646,0	2364,4
Оржиця 257СВ	70	3931,9	3876,8	3802,4	3729,9
	45	3127,4	3052,3	2863,0	2755,1
У фазі воскової стиглості					
Квітневий 187СВ	70	2895,6	2869,3	2858,6	2849,7
	45	2217,4	2766,5	2132,9	2113,6
Оржиця 257СВ	70	3050,4	2983,4	2985,1	2866,3
	45	2754,3	2678,1	2558,6	2447,2

Однією з ознак кукурудзи є те, що при рідших посівах рослини мають більшу масу, а при загущенні маса окремих рослин знижується (табл. 3). В наших дослідженнях найбільшою вона була у гібрида Оржиця 257 СВ і складала 192,8 г, при густоті стеблостою 30 тис/га і ширині міжрядь 70 см. Деяко нижчою при ширині міжрядь 45 см – 187,2 г. А при збільшенні густоти посіву від 30 до 60 тис/га маса однієї

рослини чітко знижується. Наприклад на варіантах 50-60 тис/га x 70 см гібрида Квітневий 187 СВ різниця до 60 тис/га становила 6,3-9,4 г починаючи з фази 10-11 листків, коли при ширині міжрядь 45 см – 8,4 і 8,1 відповідно. У гібрида Оржиця 257 СВ 3,8-4,1 г відповідно при ширині міжрядь 70 см та на 2,1-3,6 відповідно при ширині міжрядь 45 см.

Таблиця 3

Маса однієї рослини в абсолютно сухому стані в залежності від гібридів, ширини міжрядь та густоти рослин, 2009 р., г

Назва гібриду	Ширина міжрядь, см	Густота рослин			
		30,0	40,0	50,0	60,0
10-11 листків					
Квітневий 187СВ	70	22,5	18,6	16,2	13,1
	45	20,1	17,0	11,7	12,0
Оржиця 257СВ	70	15,4	13,0	11,6	11,3
	45	14,0	12,4	11,9	10,4
У фазі цвітіння					
Квітневий 187СВ	70	93,6	116,2	110,1	104,8
	45	109,6	102,8	93,6	92,6
Оржиця 257СВ	70	128,0	114,8	111,6	110,5
	45	120,8	112,9	110,1	104,9
У фазі воскової стиглості					
Квітневий 187СВ	70	187,4	180,3	148,8	120,6
	45	192,8	180,1	121,8	104,0
Оржиця 257СВ	70	194,0	177,8	176,0	175,7
	45	187,2	177,3	154,8	142,7

Інтенсивність фотосинтезу рослин – комплексний показник реакції рослин на умови зростання. Нами було встановлено, що в цьому році спосіб сівби мало вплинув на інтенсивність фотосинтезу. В період досягнення максимальної величини листової поверхні чиста продуктивність фотосинтезу в сильно загущених посівах (від 30 до 60 тис/га) знижувалась, так як при цьому збільшується загальна площа листків посіву, отже і ступінь їх затінювання. Найвища продуктивність фотосинтезу 10,2 г/м² була у гібрида Квітневий 187СВ при густоті стояння 30 тис/га та ширині міжряддя 45 см.(табл. 4).

Таблиця 4

Чиста продуктивність фотосинтезу в залежності від гібридів, ширини міжрядь та густоти рослин, 2009 р., г/м²

Назва гібриду	Ширина міжрядь, см	Густота рослин, тис/га			
		30,0	40,0	50,0	60,0
Квітневий 187СВ	70	9,3	6,7	4,3	1,7
	45	10,2	8,7	3,9	1,7
Оржиця 257СВ	70	6,3	6,1	6,3	6,9
	45	7,5	7,5	5,5	4,8

Чиста продуктивність фотосинтезу (г/м² доба) визначалась на варіантах у ті ж строки, що і при відборі проб на приріст з урахуванням вимірювання площі листків за формулою Кідда, Веста і Бріггса:

$$\text{Фч. пр.} = (B_2 - B_1) / (L_1 + L_2 / 2) * \Pi,$$

де Фч. пр. – чиста продуктивність фотосинтезу;

B₁ і B₂ – маса сухої речовини рослин на початку і наприкінці облікового періоду П (20 діб);

(L₁ + L₂)/2 – середня площа листової поверхні на початку і наприкінці того ж облікового періоду.

В наших дослідях зменшення ширини міжрядь позитивно вплинуло на такі структурні показники, як довжину качанів, їх середню вагу та кількість зерен. Збільшення густоти рослин призвело до зменшення цих показників (табл. 5). Наприклад у гібрида Квітневий 187 СВ довжина качанів при ширині міжряддя 70 см склала 14,5-12,7 см в залежності від густоти, що на 0,3-0,8 см менше, ніж при ширині міжряддя 45 см. Середня вага при ширині міжрядь 70 см склала 118-164 г, що на 5-8 г менше, ніж при ширині міжряддя 45 см, відповідно зменшується і кількість зерен на качані.

Таблиця 5

Вплив ширини міжрядь та густоти рослин різних за стиглістю гібридів кукурудзи на їх структурні показники, 2009 р.

Назва гібриду	Густина рослин, тис/га	Довжина качана, см		Середня вага качана, г		Кількість зерен на качані, шт.		Маса 1000 зерен, г		Продуктивність, шт.	
		Ширина міжряддя, см									
		70	45	70	45	70	45	70	45	70	45
Квітневий 187МВ	30,0	14,5	14,9	164	167	529	547	253,6	294,6	97	89
	40,0	13,6	14,3	146	152	464	490	237,9	270,5	98	94
	50,0	13,0	13,8	127	132	441	462	231,9	269,5	91	86
	60,0	12,7	13,0	118	126	437	441	227,0	267,5	88	89
Оржиця 257СВ	30,0	14,9	15,2	160	161	503	585	205,4	251,9	96	85
	40,0	14,3	14,1	150	156	483	554	194,8	244,6	96	86
	50,0	13,6	13,9	141	148	464	543	188,1	232,1	93	87
	60,0	13,2	13,2	125	132	432	502	182,6	215,6	89	79

При посіві з шириною міжряддя 45 см кількість продуктивних качанів зменшується, відносно рослин, які були посіяні з міжряддям 70 см. Якщо продуктивність з міжряддям 70 см зменшується із збільшенням густоти стояння, то такої залежності не спостерігається при сівбі на ширину 45 см.

Отже і врожай зерна кукурудзи змінюється відповідно. Зменшення ширини міжрядь призвело до збільшення врожаю зерна, а збільшення густоти рослин - до його зниження (табл. 6).

Таблиця 6

Урожай зерна кукурудзи різних за стиглістю гібридів в залежності від ширини міжрядь та густоти рослин, 2009 р., т/га

Назва гібриду	Ширина міжрядь, см	Густина рослин, тис./га	Середній врожай, т/га	Відхилення від найбільшого в повторенні	
				т/га	%
Ранньостиглий Квітневий 187МВ	70	30	3,17	-0,37	-10,5
		40	3,54	-	-
		50	3,23	-0,31	-8,8
		60	3,15	-0,39	-11,0
	45	30	3,60	0,14	4,0
		40	4,00	0,46	13,0
		50	3,94	0,40	11,3
		60	3,35	-0,19	-5,4
Середньоранній Оржиця 257СВ	70	30	3,39	-0,40	-10,6
		40	3,79	-	-
		50	3,37	-0,42	-11,1
		60	2,98	-0,81	-21,4
	45	30	3,66	-0,13	-3,4
		40	3,77	-0,02	-0,5
		50	3,91	0,12	3,2
		60	3,65	-0,14	-3,7

Гібрид Квітневий 187 СВ сформував вищу врожайність при ширині міжрядь 45 см з густотою стояння 40 тис/га (4,0 т/га), а при сівбі з міжряддям 70 см урожайність дещо нижча – 3,54 т/га. Це можна пояснити тим, що зменшення ширини міжрядь з 70 до 45 см змінює форму площі живлення, в сторону зменшення відношення ширини та довжини. Тому в посівах з міжряддям 45 см рослини більш рівномірно розташовані в рядках. Теж саме спостерігається і у гібрида Оржиця 257 СВ. Для отримання більш обґрунтованих даних дослідження будуть продовжені.

Висновки. Зменшення ширини міжрядь позитивно впливає на такі структурні показники, як довжину качанів, їх середню вагу та кількість зерен на качані і навпаки, збільшення густоти рослин призводить до зменшення цих показників. При посіві на 45 см кількість продуктивних качанів зменшується відносно рослин, які були посіяні з міжряддям 70 см. Отже і врожай зерна кукурудзи змінюється в такій самій відповідності. Зменшення ширини міжрядь позитивно впливає на збільшення врожаю зерна, а збільшення густоти рослин - до його зменшення.

РЕЗЮМЕ

В статті приведені результати изучения влияния густоты растений и способа сева кукурузы разных групп спелости на урожайность зерна. Уменьшение ширины междурядий положительно влияло на такие структурные показатели, как длину початков, их средний вес, количество зерен на початках и урожай зерна и наоборот, увеличение густоты растений приводило к уменьшению этих показателей.

Ключевые слова: густота растений, кукуруза, ширина междурядья, фотосинтез, урожай.

SUMMARY

In the articles lighted up results of study of influence of density of plants and method of sowing of corn of different groups of ripeness are on the productivity of grain. Diminishing of width of spaces between rows positively influenced on such structural indexes, as length of heads, them middle-weight, amount of grains on rocked and harvest of grain and vice versa, the increase of density of plants resulted in diminishing of these indexes.

Key words: density of plants, corn, width of space between rows, photosynthesis, harvest.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Влох В. Г. Рослинництво / В. Г. Влох, С. В. Дубковецький, Г. С. Кияк. – К.: Вища школа, 2005. – 382 с.
2. Крамарев С. М. Оптимальная густота растений на участках гибридизации среднеспелых гибридов у кукурузы / С. М. Крамарев, В. П. Бондар // Кукуруза и сорго. – 2002. – № 6. – С. 14-15.
3. Писаренко П. В. Густота стояння рослин гібридів кукурудзи в умовах південного Степу / П. В. Писаренко, Ю. О. Лавриненко, С. В. Коковіхін // Хранение и переработка зерна. – 2002. – № 7. – С. 28-30.
4. Циков В. С. Кукуруза: технология, гибриды, семена / В. С. Циков. – Днепропетровск: Зоря, 2003. – 296 с.

Надійшла до редакції 26.04.2010 р.

УДК 581.132

**ВМІСТ ФОТОСИНТЕТИЧНИХ ПІГМЕНТІВ В ТРАНСГЕННИХ РОСЛИНАХ ЦИКОРІЮ
З ГЕНОМ ТУБЕРКУЛЬОЗНОГО АНТИГЕНА ESAT6**

Н. А. Матвеева, О. Ю. Кваско

Інститут клітинної біології та генетичної інженерії НАН України, м. Київ

Вивчено особливості вмісту пігментів фотосинтетичного комплексу у трансгенних рослин *Cichorium intybus* var. *foliosum* з геном *esxA*, що кодує синтез туберкульозного антигена ESAT6. Показано, що вміст хлорофілів *a*, *b* та каротиноїдів у трансгенних рослин через 30 діб росту в культурі *in vitro* є вищим відповідно до 2,16, 3,76 та 1,7 разів, ніж у контрольних рослин, співвідношення хлорофілів *a/b* зменшується, а відношення суми хлорофілів до каротиноїдів збільшується у порівнянні з аналогічними показниками вихідних рослин.

Ключові слова: фотосинтетичні пігменти, трансгенні рослини, хлорофіли *a* та *b*, каротиноїди.

Вступ. Протягом останніх 30 років розроблено методи трансформації ядерного та хлоропластного геномів і коло видів трансформованих рослин дуже широке. Генетична трансформація рослин здійснюється як з суто науковою метою (наприклад, дослідження функціонування генів), так і з метою створення рослин, що синтезують певні сполуки та можуть бути використані в селекції, промисловості, медицині. Однак, досі комплексно та системно не вивчалися характеристики трансформованих рослин у порівнянні з вихідними. Разом з тим, становить інтерес вивчення того, чи впливає трансгенез – перенесення чужорідного гена – на морфологічні, біохімічні, фізіологічні параметри трансформованих рослин та з'ясування того, чи є відмінності, зокрема, у прирості біомаси, рості кореневої системи, синтезі пігментів, активності ферментів, накопиченні білку, вторинних метаболітів та ін.

Пігменти вищих рослин, хлорофіли та каротиноїди, забезпечують протікання в клітинах світлових реакцій фотосинтезу. За участі пігментів енергія кванту світла трансформується в макроергічні сполуки, які далі використовуються для синтезу в рослині органічних сполук. Вміст фотосинтетичних пігментів, динаміка їх зміни протягом вегетативного періоду є одним з показників фізіологічного стану рослин, характеристикою фотосинтетичної здатності та продукційного процесу сільськогосподарських культур.

Основними фотосинтезуючими пігментами вищих рослин є хлорофіли *a* та *b*, що являють собою Mg-вмісні порфірини. Основна їх частина включена до складу світлозбираючих комплексів, забезпечує поглинання та передачу світлової енергії до реакційних центрів, в яких відбуваються фотосинтетичні реакції. Жовті пігменти – каротиноїди – відіграють роль світлозбирання та виконують функцію захисту фотосинтетичного апарату від фотопошкодження [1].

Вміст хлорофілів у різних рослин коливається в межах 0,7-1,1 г на 1 кг зеленої маси рослин, а співвідношення хлорофілів *a* та *b* зазвичай становить близько 3:1. Вміст хлорофілів та їх співвідношення залежать від ряду факторів – рівня освітленості, температури, наявності добрив, дії токсичних сполук (наприклад, важких металів), зараженості патогенами тощо та є одним з показників фізіологічного стану і адаптивних можливостей рослин.

Відомо, що кількість хлорофілу залежить від освітленості рослин [2, 3]. При темній обробці рослин вміст хлорофілу зменшується [4, 5], а зелене та синє світло збільшує вміст хлорофілу [6].

Стресові абіогенні фактори, такі як дефіцит вологи, засоленість ґрунту, наявність токсичних металів також впливають на вміст пігментів рослин, як хлорофілів, так і каротиноїдів. Так, при наявності токсичних металів (кадмію, міді, нікелю, кобальту, цинку) кількість хлорофілу зменшується [7-11]. Зменшення вмісту води супроводжується зменшенням вмісту хлорофілів *a* та *b*, а збільшення кількості хлорофілів призводить до збільшення здатності рослин утримувати вологу [12]. Вміст хлорофілу також залежить від складу ґрунту, концентрації в ньому деяких хімічних сполук та елементів (наприклад, вмісту магнію) [13].

Стресові фактори впливають не тільки на загальний вміст пігментів фотосинтетичного комплексу, але й на їх співвідношення. Співвідношення хлорофілів *a/b* та суми хлорофілів (*a+b*) до каротиноїдів характеризує здатність рослин пристосовуватися до різних умов (наприклад, до зміни інтенсивності освітлення, зволоження, дії токсичних сполук). Так, при дії нікелю в рослинах кукурудзи співвідношення *a/b* зростало на початку обробки металом (до 8 діб) та зменшувалося при тривалій обробці (більше 13 діб) [9]. При тривалій дії іонів калію доля хлорофілу *a* та каротиноїдів зменшувалася, в той час як доля хлорофілу *b* збільшувалася. Іони Na^+ та Ca^{2+} справляли аналогічну дію на співвідношення пігментів [14].

Отже, вміст пігментів фотосинтетичного комплексу залежить від низки абіогенних та біогенних факторів і змінюється у стресових для рослин умовах. Перенесення чужорідного гена до геному рослин може розглядатися як стресовий фактор. В культурі *in vitro* синтез пігментів відрізняється від такого у рослин в природних умовах. Разом з тим, становить інтерес дослідити, чи відбуваються індуквані шляхом перенесення гена (генів) зміни кількості хлорофілів і каротиноїдів у трансформованих рослинах та

порівняти вміст фотосинтетичних пігментів при культивуванні трансгенних рослин на середовищах, що відрізняються за наявністю/відсутністю регуляторів росту. В подальшому планується дослідження особливостей синтезу фотосинтетичних пігментів у ти самих рослин в умовах *in vivo*. Представлена робота є частиною досліджень фізіологічних та біохімічних відмінностей трансформованих рослин листового цикорію *Cichorium intybus* var. *foliosum* L. з геном *esxA*, що кодує синтез туберкульозного антигена ESAT6.

Матеріали і методи. Вихідним матеріалом для отримання трансгенних рослин було насіння цикорію сорту Пала росса (агрофірма “Елітсортнасіння”, Україна). Насіння стерилізували протягом 1 хв. у 70% етанолі, 10 хв. у 25% розчині препарату “Білізна” (НПФ “Біолайт”, Україна), промивали дистильованою водою (60 хв.) та пророщували на агаризованому середовищі MS [15] при 16 –годинному світловому фотоперіоді та температурі 24°C.

Трансформацію проводили шляхом інкубування сім'ядоль цикорію у суспензії бактерій *Agrobacterium tumefaciens* штаму GV3101 з геном *esxA* секреторного білка ESAT6. Після трансформації експланти переносили на агаризоване середовище MS з регуляторами росту (2,5 мг/л кінетину (DUCHEFA Biochemie B.V. The Netherlands) і 0,5 мг/л α-нафтилуксусної кислоти (НУК, DUCHEFA Biochemie B.V. The Netherlands) та антибіотиками (25 мг/л канаміну (“Київмедпрепарат”, Україна) і 500 мг/л цефотаксиму (“Дарниця”, Україна), а через 1 місяць – на середовище MS з 0,5 мг/л кінетину, 0,05 мг/л НУК, 25 мг/л канаміну і 500 мг/л цефотаксиму для селекції зелених трансгенних рослин. Регенеровані рослини укорінювали на середовищі MS з антибіотиками в тих же концентраціях. Для досліджень рослини розмножували шляхом відділення бокових пагонів та вирощували на середовищах MS та MS з 0,5 мг/л індолілмасляної кислоти (ІМК).

Вміст пігментів визначали у 30-денних рослин спектрофотометричним методом, екстракцію пігментів проводили ацетоном [16]. Подрібнену наважку (0,5 г) розтирали в ступці, переносили на фільтр Шота (загальний об'єм розчинника 10 мл) та фільтрували. Сумарну концентрацію зелених пігментів (C_{a+b}) в екстрактах визначали при довжині хвилі 652 нм та обчислювали за формулою:

$$C_{a+b} = 29 D_{652} \text{ (мг/л)}$$

Концентрацію хлорофілів *a* (C_a) і *b* (C_b) визначали при довжині хвиль 665 і 649 нм і розраховували за формулами:

$$C_a = 11,63 D_{665} - 2,39 D_{649} \text{ (мг/л);}$$

$$C_b = 20,11 D_{649} - 5,18 D_{665} \text{ (мг/л).}$$

Концентрацію каротиноїдів ($C_{к+кс}$) визначали при довжині хвилі 440 нм за формулою:

$$C_{к+кс} = 4,695 D_{440} - 0,268 C_{a+b} \text{ (мг/л).}$$

Вміст пігментів розраховували відповідно їх концентрації у розчині та масі вихідного матеріалу у мг/г маси листків. Контролем слугували нетрансформовані рослини того ж сорту, що вирощувалися *in vitro* в аналогічних умовах (склад живильного середовища, освітлення, температура). Статистичну обробку проводили за допомогою програми EXEL (0,05).

Результати та їх обговорення. Нами досліджено особливості вмісту хлорофілу у трансгенних рослинах цикорію, що містили ген *esxA* туберкульозного антигена ESAT 6 у порівнянні з нетрансформованими рослинами. Через 30 днів вміст хлорофілу *a* при вирощуванні на середовищі MS у трансформованих рослинах виявився вищим у 1,7-2,16 рази ніж у контрольних рослинах, що вирощувалися в тих же умовах (рис.1, а). Схожа картина спостерігалася і для хлорофілу *b* – вміст його у трансгенних рослинах був вищий у 2,38-3,76 рази у порівнянні з контрольними (рис. 1, б).

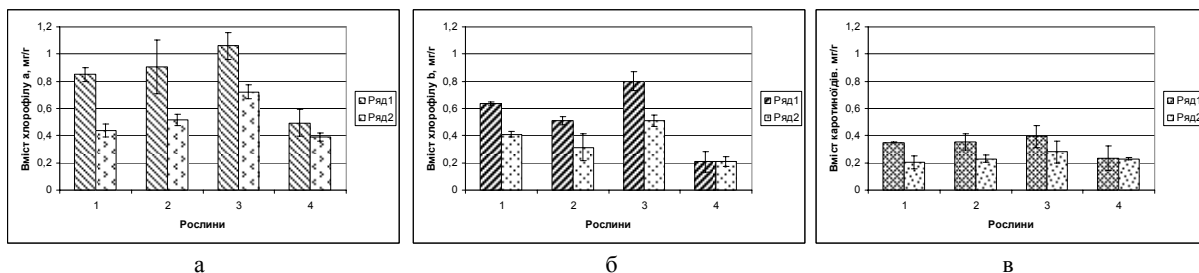


Рис. 1 – Вміст хлорофілів *a* (а), *b* (б) і каротиноїдів (в) у трансгенних (1-3) та контрольних (4) рослинах на середовищах MS (ряд 1) і MS+0,5 мг/л ІМК (ряд 2)

Різниця у вмісті каротиноїдів між трансгенними та контрольними рослинами виявилася меншою, ніж різниця у вмісті хлорофілів. Так, на середовищі MS у трансгенних рослин концентрація каротиноїдів була вищою лише у 1,5-1,7 рази. Каротиноїди слугують захистом фотосинтетичного апарату від стресових факторів та поліпшують адаптаційні характеристики рослин. Отже, збільшення кількості каротиноїдів у 30-денних трансформованих рослинах може свідчити про більшу адаптаційну здатність цих рослин у порівнянні з вихідними.

Індолілмасляна кислота є регулятором росту, додавання якого до живильного середовища призводить до більш швидкого росту кореневої системи у порівнянні з наземною частиною рослин. При куль-

тивуванні рослин цикорію на середовищі, що містило ІМК, показники вмісту хлорофілів та відмінності між трансгенними та нетрансформованими рослинами були меншими, ніж на середовищі без ІМК. Так, вміст хлорофілів *a* та *b* у трансгенних рослинах був вищим відповідно у 1,07-1,8 та 1,5-2,5 рази у порівнянні з контрольними.

Індолилмасляна кислота є регулятором росту, додавання якого до живильного середовища призводить до більш швидкого росту кореневої системи у порівнянні з наземною частиною рослин. При культивуванні рослин цикорію на середовищі, що містило ІМК, показники вмісту хлорофілів та відмінності між трансгенними та нетрансформованими рослинами були меншими, ніж на середовищі без ІМК. Так, вміст хлорофілів *a* та *b* у трансгенних рослинах був вищим відповідно у 1,07-1,8 та 1,5-2,5 рази у порівнянні з контрольними.

Вміст каротиноїдів у трансгенних рослин цикорію на середовищі з ІМК виявився меншим, ніж на середовищі MS – відповідно 0,021-0,028 та 0,035-0,039 мг/г сирої маси. Достовірних відмінностей вмісту каротиноїдів у трансгенних та контрольних рослин при культивуванні на цьому середовищі не виявлено.

Відмінності у вмісті хлорофілів та каротиноїдів при вирощуванні трансгенних рослин цикорію на середовищах MS та MS+ІМК свідчать про те, що трансформовані рослини є більш чутливими до наявності регулятора росту (ІМК), адже при культивуванні контрольних рослин на досліджуваних середовищах достовірних відмінностей у вмісті фотосинтезуючих пігментів не виявлено.

Співвідношення *a/b* та $(a+b)/\text{каротиноїди}$ зазвичай в нормі є стабільним, але реагує на вплив екстремальних факторів: співвідношення *a/b* зменшується при несприятливих умовах, а відношення вмісту хлорофілів до каротиноїдів збільшується. За літературними даними, відношення *a/b* у нормально розвинутих рослин становить 2,5–3 [17].

В наших експериментах співвідношення хлорофілів *a/b* через 30 діб росту на середовищі MS коливалося у трансформованих рослин від 1,35 до 1,8, в той час як у контрольних дорівнювало 2,4 (рис. 2, а). Відношення вмісту хлорофілів до вмісту каротиноїдів у трансформованих рослин становило 4-4,7, а у контрольних було нижчим –3 (рис. 2). Співвідношення хлорофілів *a/b* на середовищі з ІМК у трансформованих рослин становило 1,05-1,64, у контрольних –1,85, а відношення хлорофілів до каротиноїдів – відповідно 3,6-4,39 та 2,61 (рис.2, б).

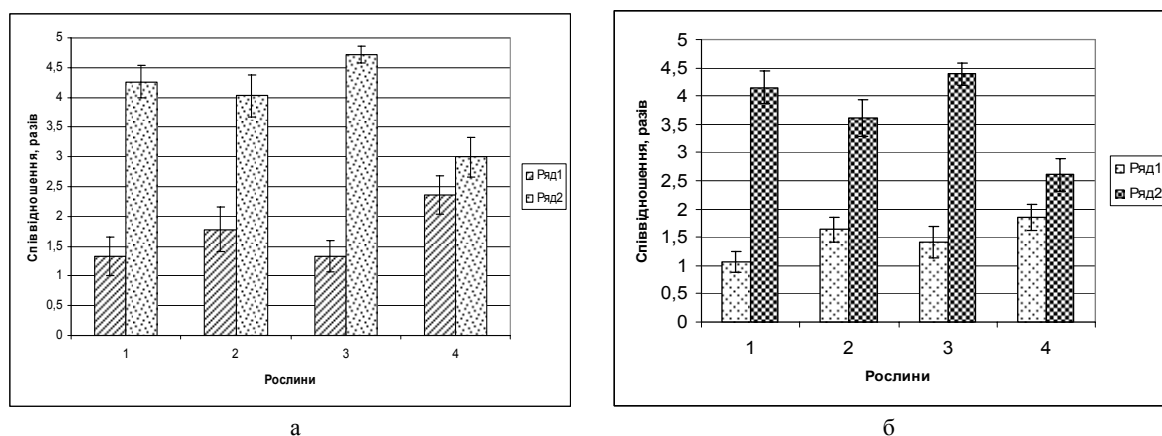


Рис.2 – Відношення вмісту хлорофілів *a/b* (ряд 1) та суми хлорофілів до каротиноїдів (ряд 2) у трансгенних (1-3) та контрольних рослин (4) на середовищі MS (а) та MS+ІМК (б)

Таким чином, додавання ІМК до живильного середовища дещо зменшувало співвідношення *a/b* та хлорофілів до каротиноїдів, причому такий ефект спостерігався як у трансгенних, так і у контрольних рослин.

Відомо, що найбільша ефективність фотосинтетичного апарату забезпечується за таким співвідношенням пігментів: хлорофілів *a* - близько 50%, *b* – 30%, каротиноїдів – 20 %, оскільки основну функцію у складі світлозбирального комплексу виконує хлорофіл *a*, а хлорофіл *b* та каротиноїди є додатковими та захисними пігментами.

За відсотковим вмістом хлорофілу *a* трансформовані рослини цикорію практично не відрізнялися від контрольних, причому це не залежало від складу живильного середовища. Разом з тим, доля хлорофілу *b* у загальному вмісті фотосинтетичних пігментів трансгенних рослин була більша, а каротиноїдів менша, ніж у нетрансформованих рослин.

Отже, у 30-денних трансгенних рослин цикорію, як на середовищі MS, так і в присутності ІМК, зменшено співвідношення хлорофілів *a/b* і підвищено вміст хлорофілів *a* та *b* у порівнянні з контрольними. Наведені результати можуть свідчити про збільшення розмірів фотосистеми II, більшу тіневитривалість рослин та, можливо, кращі адаптаційні характеристики фотосинтетичного апарату трансгенних рослин у порівнянні з контрольними. Разом з тим, зменшення співвідношення хлорофілів *a/b* та збільшення відношення вмісту хлорофілів до каротиноїдів у трансгенних рослин подібне до реакції рослин на дію

абіогенних стресових факторів. В той же час, не можна однозначно стверджувати, що в даному випадку має місце класична реакція рослин на стрес, адже загальний вміст пігментів (хлорофілів та каротиноїдів) у трансгенних рослин виявився вищим, ніж у контрольних, в той час як при дії стресів зменшується загальний вміст пігментів, у першу чергу хлорофілу *a*.

Висновки. Вивчення особливостей вмісту фотосинтетичних пігментів, хлорофілів та каротиноїдів, у трансгенних рослинах листового цикорію з геном туберкульозного антигену ESAT6 показало достовірні відмінності у кількості хлорофілів *a*, *b* та каротиноїдів при культивуванні на середовищі MS, причому вміст хлорофілів *a*, *b* та каротиноїдів у трансгенних рослинах був більший відповідно у 1,7-2,16, 2,38-3,76 та 1,5-1,7 рази у порівнянні з контрольними. В той же час, на середовищі з ІМК відмічено меншу різницю у вмісті хлорофілів, а достовірні відмінності у вмісті каротиноїдів у трансформованих та контрольних рослинах при вирощуванні у цих умовах відсутні.

Співвідношення хлорофілів *a/b* на середовищі MS у трансформованих рослин було меншим, ніж у контрольних, а відношення вмісту хлорофілів до вмісту каротиноїдів збільшувалося. Це відбувалося за рахунок збільшення відсотку хлорофілу *b* у трансформантів та зменшення відсотку каротиноїдів.

Отримані результати дозволяють припустити, що перенесення чужорідних генів впливає на вміст фотосинтетичних пігментів у трансгенних рослин, призводить до підвищення вмісту як хлорофілів, так і каротиноїдів (MS) або тільки хлорофілів (MS+ІМК). Зміни у вмісті фотосинтетичних пігментів, у тому числі, у співвідношенні хлорофілів *a/b* та суми хлорофілів до каротиноїдів у порівнянні з контролем, збільшення відсотку хлорофілу *b* (з 22% в контролі до 35% у трансгенних рослин), можливо, є адаптаційною реакцією фотосинтетичного апарату трансгенних рослин до стресового фактору – перенесення чужорідних генів.

РЕЗЮМЕ

Изучены особенности содержания фотосинтетических пигментов в трансгенных растениях цикория с геном *esxA*, кодирующим синтез туберкулезного антигена ESAT6. Показано, что содержание хлорофиллов и каротиноидов у трансгенных растений через 25 суток роста в культуре *in vitro* выше, чем в контрольных растениях, соотношение хлорофиллов *a/b* уменьшается, а отношение суммы хлорофиллов к каротиноидам увеличено по сравнению с аналогичными показателями исходных нетрансформированных растений.

Ключевые слова: фотосинтетические пигменты, трансгенные растения, хлорофиллы *a* и *b*, каротиноиды.

SUMMARY

The features of maintenance of photosynthetic pigments are studied in transgenic plants of chicory with the gene of *esxA*, encoding the synthesis of tubercular antigen of ESAT6. It is shown that maintenance of chlorophylls and carotenoids at transgenic plants in 25 days of growth in the culture of *in vitro* higher, than in control plants, correlation of chlorophylls *a/b* diminishes, and attitude of sum of chlorophylls toward carotenoids is megascopic as compared to the analogical indexes of the parent untransformed plants.

Keywords: photosynthetic pigments, transgenic plants, chlorophylls *a* and *b*, carotenoids.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Scheer H. Chlorophylls and carotenoids in: Encyclopedia of Biological Chemistry / H. Scheer. – 2004. – P. 430-437.
2. Photosynthetic activity, chloroplast ultrastructure, and leaf characteristics of high-light and low-light plants and of sun and shade leaves / H. K. Lichtenthaler, C. Buschmann, M. Döll, et al. // Photosynthesis Res. – 1981. – Vol. 2, No 2. – P. 115-141.
3. Adaptation of chloroplast-ultrastructure and of chlorophyll protein levels to high-light and low-light growth conditions / H. K. Lichtenthaler, G. Kuhn, U. Prenzel, et al. // Z. Naturforsch. – 1982. – Vol. 37, No 1. – P. 464-475.
4. Effects of light on the photosynthetic apparatus and a novel type of degradation of the photosystem I peripheral antenna complexes under darkness / J. Y. Yamazaki, Y. Kamimura, K. Nakayama, et al. // J. Photochem. Photobiol. B. – 2000. – Vol. 55, No 1. – P. 37-42.
5. Is light quality involved in the regulation of the photosynthetic apparatus in attached rice leaves? / J. Y. Yamazaki, Y. Kamimura, K. Nakayama, et al. // Photosynth. Res. – 2010. – Vol. 105, No 1. – P. 63-71.
6. Zhang R.H. Effects of shading light quality at seedling stage on the photosynthesis and growth of ginger / R.H. Zhang, K. Xu // Ying Yong Sheng Tai Xue Bao. – 2008. – V. 19, N 3. – P.499-504.
7. Bajguz A. Suppression of *Chlorella vulgaris* growth by cadmium, lead, and copper stress and its restoration by endogenous brassinolide / A. Bajguz // Arch. Environ. Contam. Toxicol. – 2010. – Vol. 4, No 2. – P. 362-368.
8. Overexpression of osmotin gene confers tolerance to salt and drought stresses in transgenic tomato (*Solanum lycopersicum* L.) / D. Goel, A.K. Singh, V. Yadav, et al. // Protoplasma. – 2010. – Vol. 1, No 3. – P. 125-128.
9. Dąrzkiwicz M.. Interference of nickel with the photosynthetic apparatus of *Zea mays* / M. Dąrzkiwicz, T. Baszyński // Ecotoxicol. Environ. Saf. – 2010. – Vol. 73, No 5. – P. 982-986.
10. Zengin F.K. Effects of copper on chlorophyll, proline, protein and abscisic acid level of sunflower (*Helianthus annuus* L.) seedlings / F.K. Zengin, S. Kirbag // J. Environ. Biol. – 2007. – Vol. 28, No 3. – P. 561-566.
11. Zengin F.K. The effects of Co^{2+} and Zn^{2+} on the contents of protein, abscisic acid, proline and chlorophyll in bean (*Phaseolus vulgaris* cv. Strike) seedlings / F.K. Zengin // J. Environ. Biol. – 2006. – Vol. 27, No 2. – P. 441-448.
12. Кушниренко М. Д. Реакция хлоропластов растений различной устойчивости к засухе на водный стресс / М. Д. Кушниренко // Проблемы засухоустойчивости растений. – М.: Наука, 1978. – С. 72-81.

13. Ясар Ф. Действие засоления на антиокислительные защитные системы, перекисное окисление липидов и содержание хлорофилла в листьях фасоли / Ф. Ясар, С.Элиальтиглу, К. Ильдис // Физиология растений. – 2008. – Т. 55, № 6. – С. 869-873.
14. Кулагин А. А. Древесные растения и биологическая консервация промышленных загрязнителей / А. А. Кулагин, Ю. А. Шагиева. – М.: Наука, 2005. – 190 с.
15. Murashige T. A revised medium for rapid growth and bioassay with tobacco tissue culture / T. Murashige, F. Skoog // Physiol. Plant. – 1962. – Vol.15, No 3. – P. 473-496.
16. Мусієнко М. М. Фізіологія рослин. Практикум. / М. М. Мусієнко. – Київ, 1995. – 191 с.
17. Шлык А. А. Определение хлорофиллов и каротиноидов в экстрактах зеленых листьев / А. А. Шлык // Биохимические методы в физиологии растений. – М.: Наука, 1975. – С. 154-170.

Надійшла до редакції 13.05.2010 р.

**МЕЖВИДОВЫЕ ОТНОШЕНИЯ ПАСТУШКОВЫХ ПТИЦ (*Rallidae*)
СЕВЕРНОГО ПРИАЗОВЬЯ В ГНЕЗДОВОЙ ПЕРИОД**

И. С. Павлюк

Мелитопольский государственный педагогический университет имени Богдана Хмельницкого

Впервые описываются межвидовые отношения гнездящихся в Северном Приазовье видов пастушковых птиц (*Rallidae*): лысухи (*Fulica atra* Linnaeus, 1758), камышницы (*Gallinula chloropus* Linnaeus, 1758), малого погоньша (*Porzana parva* Scopoli, 1769), водяного пастушка (*Rallus aquaticus* Linnaeus, 1758) у гнездовой период. Установлено, что, несмотря на агрессивное поведение пастушковых в период размножения, они не могут вытеснять из свойственных стадий другие виды прибрежных птиц. На их гнездовых территориях обычны случаи гнездования различных видов птиц.

Ключевые слова: пастушковые птицы, гнездовое соседство, Северное Приазовье, лысуха, камышница, малый погоньш, водяной пастушок.

Введение. Древность происхождения пастушковых птиц, с одной стороны, и обитание их в сравнительно молодых биоценозах пресноводных водоемов, в условиях изменчивой среды (особенно в умеренных зонах) – с другой, обуславливают многообразие и сложность их поведения. Резко выраженный гнездовой территориализм, разнообразие и выразительность поведенческих реакций издавна привлекали к ним внимание экологов и этологов. Пастушковые относятся к экологической группе водных и околоводных птиц. Они тесно связаны с различными типами водоемов, где заселяют прибрежные зоны с густыми зарослями водной и надводной растительности. В настоящей работе впервые проводится анализ межвидовых отношений пастушковых и других водоплавающих и околоводных птиц Северного Приазовья в период размножения и выращивания птенцов на основании многолетних данных.

Материал и методы. Сбор материала по межвидовым отношениям пастушковых птиц проводился нами в 2006 – 2009 гг. в Северном Приазовье, под которым понимается северное побережье Азовского моря, шириной до 150 – 200 км [1], в пределах Запорожской и Донецкой областей. Основные исследования выполнены на юге Запорожской области.

В качестве модельного водоема взяты верховья Молочного лимана на базе охотничьего хозяйства УООР «Камыши» (с 1998 года оно перешло в ведение Мелитопольского госохотлеспхоза) и плавни р. Молочная вблизи с. Светлодолинское (охотугодя Мелитопольского госохотлеспхоза), где нами велись многолетние стационарные наблюдения. Сравнение двух соседних мест гнездования пастушковых птиц – в верховьях Молочного лимана и плавнях у с. Светлодолинское, расположенных в 45-50 км друг от друга показало, что на втором водоеме, малом по площади, экологические, прежде всего гидрологические условия, меняются значительно резче и чаще, чем на большем по размерам лимане. Численность гнездящихся на этом водоеме пастушковых птиц определяется уровнем воды в плавнях и состоянием тростниковых зарослей. На двух водоемах густые непроходимые заросли тростника и рогоза изобилуют «заломами», чередуются с разреженными зарослями – «ределями», островками, участками открытой воды – плесами. Характерно обилие водной растительности, открытых плесов, всевозможных кочек, заломов тростника и рогоза.

Картирование гнезд в тростниковых зарослях проводилось глазомерно на пеших или лодочных маршрутах, в зависимости от доступности мест, путем прочесывания зарослей 3-7 учетчиками одновременно, идущими параллельно в 4-8 м друг от друга, чтобы избежать пропуска гнезд. Отмечалась видовая принадлежность обнаруженных гнезд пастушковых и сопутствующих видов, расстояние между соседними гнездами, их расположение, характер устройства, состояние кладки и птенцов, выборочно проводились промеры гнезд и яиц. Каждый учетчик наносил встреченные гнезда на схему маршрута; по окончании учета составлялась общая схема гнездования на миллиметровой бумаге. Визуальные наблюдения за поведением птиц вели из укрытия: сидя в лодке, замаскированной в зарослях; в яме; в шалаше на берегу. Статистическая обработка количественного материала осуществлялась по стандартным методикам [2]. Она проведена на персональном компьютере с использованием пакета программ MS CSS и MS EXEL.

Количественный материал по гнездовому соседству пастушковых птиц Северного Приазовья за 1988-2005 гг. взят из предоставленных дневников заведующего кафедрой зоологии и охраны окружающей среды Мелитопольского государственного педагогического университета им. Б. Хмельницкого профессора, д.б.н. А.И. Кошелева, которому, пользуясь случаем, выражаю искреннюю благодарность.

Характеристика водно-болотных угодий. Молочный лиман - характерный полузакрытый лиман Северного Приазовья. Вытянут в меридиональном направлении на 36 км, его площадь 22000 га. Соленость и глубина воды, а также площадь мелководий зависят от сезона года, количества осадков, ветрово-

го режима и степени изолированности лимана от моря. Обширные тростниковые массивы в верховьях лимана, с вкраплением участков рогоза, камыша и клубнекамыша, чередуются с плесами, протоками, куртинами и островками тростника, создавая благоприятные условия для гнездования пастушковых птиц. В северной части лимана расположена дельта реки, имеющая несколько проточных и непроточных рукавов, поросших густыми зарослями тростника обыкновенного (*Phragmites australis* L.). Для дельты характерны небольшие пойменные озерца и полусухие возвышенные участки. Такая мозаичность создает хорошие условия для многих гидрофильных видов птиц, включая и пастушковых. Основными гнездовыми и кормовыми биотопами пастушковых птиц на Молочном лимане являются: тростниковые заросли и водно-болотная растительность в плавнях рек, краевых участках крупных островов и кос, мелководий. В лиман впадают р. Молочная и р. Ташенак, где в зарослях тростника также гнездятся пастушковые. Впадая в лиман, р. Молочная разветвляется на два рукава, образуя сеть проток вдоль старого русла, систему плесов среди густых зарослей тростника. Гидрологический режим в плавнях определяется уровнем воды в лимане, весенними паводками реки, а также сгонно-нагонными ветрами. Многолетняя, сезонная и суточная динамика гидрорежима оказывает огромное влияние на состояние растительности и население птиц плавней. Плавни р. Молочная у села Светлодолинское образуются в месте впадения в р. Молочная двух притоков, разветвленной сети глухих и открытых проток; тростниковые заросли образованы мощными густыми стеблями высотой до 4-5 м, площадь их до 80-100 га, в них гнездятся пастушковые птицы.

Результаты и обсуждение. Взаимоотношения лысухи с другими видами водоплавающих и околоводных птиц чрезвычайно разнообразны, изменчивы и резко отличаются в гнездовой период и вне него. Лысуха (*Fulica atra* L.) прилетает весной в конце марта – начале апреля. Сразу после прилета она не проявляет по отношению к особям других видов (уткам, поганкам и т. д.) никакой агрессивности. В начале апреля мы наблюдали мирно кормящихся лысух, уток: крякву (*Anas platyrhynchos*, Linnaeus, 1758), красноголовую чернетку (*Aythya ferina*, Linnaeus, 1758) рядом друг с другом. Позднее лысухи разбиваются на пары и начинают активно охранять гнездовой участок, нетерпимо относясь к пребыванию на их территории чужих птиц. Мы часто наблюдали успешное нападение лысух на уток и поганок и изгнание их с территории своих участков. Причем самцы лысух проявляли большую агрессию, чем самки. Из них только большая (*Podiceps cristatus*, Linnaeus, 1758) и серощекая (*Podiceps grisegena*, Boddaert, 1783) поганки вступают в драки с лысухой и даже выходят победителями. Именно для этих видов в Северном Приазовье характерно гнездовое соседство, а позже – соседство выводков. При этом часто границы их участков совпадают и перекрываются. Лысухи успешно изгоняли как одиночных уток, так и их группы из 10-15 особей. На лебедей и серых гусей лысуха не нападала, держась в стороне от них в 5-15 м, пока они не уплывали с ее территории.

Очень напряженные отношения у лысухи с камышницей. В конфликтах побеждает лысуха как более сильная. Но в ряде случаев камышница оказывает сопротивление, имеет место взаимная демонстрация поз угрозы и превосходства, внешне сходных у этих видов. Наши наблюдения по взаимоотношениям между лысухой и камышницей совпадают с литературными данными [3]. Такие отношения между этими видами связаны, по-видимому, с конкуренцией за гнездовую территорию и пищу в случае совместного обитания. Тем не менее, нами были отмечены случаи близкого гнездового соседства: камышницы и лысухи (9 случаев) (табл.1); водяного пастушка и лысухи (3 случая) (табл.2).

Таблица 1

Гнездовое соседство камышницы в Северном Приазовье

Общее кол-во гнезд n = 154	N кол-во гнезд	% абс.	% ± m Стриата ± ошибка*	Расстояние между центрами гнезд, м			Количество гнезд, шт		
				lim min – max	G отклонение	M ± m среднее ± ошибка	lim min-max	G отклонение	M ± m среднее ± ошибка
Изолировано	39	25,33	0,25 ± 0,04	85 - 100	6,45	92,50 ± 0,34	5 - 16	5,19	9,75 ± 0,83
Камышница	10	6,49	0,06 ± 0,02	10 - 60	21,75	41,25 ± 1,69	1 - 6	2,38	2,5 ± 0,75
Малый погоныш	3	1,95	0,02 ± 0,01	20 - 25	3,54	22,5 ± 0,53	1 - 2	0,71	1,5 ± 0,41
Водяной пастушок	4	2,60	0,03 ± 0,01	8 - 35	14,36	24,33 ± 1,68	1 - 2	0,58	1,33 ± 0,29
Лысуха	9	5,84	0,06 ± 0,02	20 - 45	13,23	30 ± 1,39	1 - 5	2	3 ± 0,67
Кряква	3	1,95	0,02 ± 0,01	10 - 14	2,83	12 ± 0,58	1 - 2	0,71	1,5 ± 0,41
Рыжая цапля	10	6,49	0,06 ± 0,02	7-12	2,52	9,33 ± 0,48	1 - 6	2,52	3,33 ± 0,80
Серая цапля - СЦ	33	21,43	0,21 ± 0,03	под гнездом СЦ			33		
Сорока	2	1,30	0,01 ± 0,01	под гнездом сороки 1 гнездо + 1 гнездо на расстоянии 2 м					

Табл. 1 (продолжение)

У колонии озерной чайки	1	0,65	0,01 ± 0,01	6			1		
Большая белая цапля - ББЦ	3	1,95	0,02 ± 0,01	под гнездом ББЦ			3		
У колонии рыжей цапли	4	2,60	0,03 ± 0,01	4 - 7	2,12	5,50 ± 0,64	1 - 3	1,41	2 ± 0,71
Гнезда камышницы в колонии ББЦ+РЦ+СЦ	33	21,43	0,21 ± 0,03	2 - 10	2,67	5,63 ± 0,40	1 - 9	3,04	3,88 ± 0,55

* - статистический процент с учетом погрешности (табл. 1- 4)

Таблица 2

Гнездовое соседство водяного пастушка в Северном Приазовье

Общее кол-во гнезд n = 104	N кол-во гнезд	% абс.	% ± m Стриата ± ошибка	Расстояние между центрами гнезд, м			Количество гнезд, шт		
				lim min - max	G от- клоне	M ± m среднее ± ошибка	lim min -max	G откло- нение	M ± m среднее ± ошибка
Изолировано	23	22,12	0,22±0,04	60 -100	14,4	82,86± 0,59	2 - 5	1,38	3,29 ± 0,29
Водяной пастушок	3	2,88	0,03±0,02	40 - 45	3,54	42,5± 0,38	1 - 2	0,71	1,5 ± 0,41
Лысуха	3	2,88	0,03±0,02	10 - 11	0,71	10,5± 0,15	1 - 2	0,71	1,5 ± 0,41
Серая цапля (СЦ)	25	24,04	0,24±0,04	3 - 9	2,41	6,4 ± 0,43	3 - 9	2,55	5,0 ± 0,51
В колонии рыжей цапли (РЦ)	3	2,89	0,03±0,02	6 - 8	1,41	7± 0,38	1 - 2	0,71	1,5 ± 0,41
Смешанная колония СЦ + РЦ	6	15,39	0,15±0,04	2 - 9	2,58	5,67± 0,44	1 - 4	1,21	2,67 ± 0,30
Усатая синица	3	2,88	0,03±0,02	2 - 3	0,71	2,5± 0,32	1 - 2	0,71	1,5 ± 0,41
Соловьиный сверчок	3	2,88	0,03±0,02	2 - 3	0,71	2,5 ± 0,32	1 - 2	0,71	1,5 ± 0,41
В колонии СЦ под гнездом	25	24,04	0,24±0,04	0	—	—	25	—	—

При этом гнездование сторон было успешным. В данном случае напряженность межвидовых отношений смягчают различия в способах добывания пищи и наборе кормов; в выборе мест кормежки. Только вдоль кромки зарослей кормятся все гнездящиеся в Северном Приазовье виды пастушковых, но в разное время.

Конфликтные ситуации между семьями пастушковых и других видов водоплавающих птиц в Северном Приазовье носят преимущественно территориальный характер. Они возникают при заходах выводков слабо территориальных видов (кряква, большая поганка) на выводковые участки строго территориальных видов (лысуха). Конфликты возникают также на границах и в зонах совпадения соседних участков по кромке зарослей вдоль открытой воды. У лысухи границы участка охраняют оба партнера, но в связи с разделением функций самец затрачивает на его защиту значительно больше времени. Заметив нарушителя границ, хозяин участка издает предостерегающий крик и плывет к нему в позе нападения – втягивает голову и шею в плечи, оперение взъерошено, особенно на спине. При этом клювом почти касается воды, чтобы на черном фоне оперения отчетливо были видны белые бляшка и клюв, направленный в сторону противника. Часто с целью устрашения противника при приближении к нему нападающая птица привстает и топчется на поверхности воды, высоко поднимая грудь, взъерошивает оперение, склоняя голову вниз и направляя клюв к ногам. Такое поведение мы наблюдали по отношению к поганкам и кряквам. Подплыв к нарушителю, лысуха нападает на него и клюет, а если противник ныряет, топчется над ним по воде. С дальнего расстояния лысуха нападает в полете – полностью выходит из воды, размахивает крыльями и бежит по поверхности с взъерошенным оперением, изогнутой вниз шеей и обращенной в сторону противника бляшкой, при этом часто переходит в свободный полет низко над водой, касаясь ее поверхности концами крыльев. При конфликте на суше нападающая лысуха бежит в сторону противника, изогнув шею вперед – вниз, чтобы была видна бляшка. Белая лобная бляшка лысухи играет важную роль в ее демонстрационном поведении. Демонстрация бляшки противнику – это сигнал угрозы и нападения. Укрывание бляшки говорит о покорности и страхе одной птицы перед другой. Обитание пастушковых птиц в условиях густых тростниковых зарослей привело к выработке хорошо развитой звуковой маркировке границ участков и своего местонахождения. У лысухи эту роль выполняют громкие отрывистые крики самок; негромкие крики самцов применяются для защиты границ территории.

Между лысухами – соседями в Северном Приазовье территориальные конфликты часто возникают на стыке границ гнездовых участков. В таком случае подплыв к границе, разделяющей соседние участки,

противники останавливаються, піднімають високо над спиной крильця, взерошивають оперення, шею изгибають вниз и втягивают в плечи, клюв направляют в сторону противника – т.е. демонстрируют позу превосходства. В таком положении птицы – соперники плавают параллельно границе 5-20 минут. Редко от этих действий лысухи переходят к драке. Противники набрасываются друг на друга, опрокидываются назад, опираясь хвостом и распушенными крыльями о воду, бьют друг друга ногами и клюют, стараясь попасть в голову. Каждая птица пытается взобраться на спину противника и утопить его. По окончании драки птицы отплывают на свою территорию, часто привстают и энергично размахивают крыльями, отряхивая воду и приводя в порядок оперение. Бывает, что на стыке границ нескольких гнездовых участков в драках участвуют одновременно 6-8 лысух – соседей.

В межвидовых территориальных конфликтах преимуществом пользуется хозяин участка, а при совпадении границ выводковых участков доминируют особи крупных по размерам тела видов (лебедь-шипун, серый гусь).

Анализируя территориальное поведение лысухи Северного Приазовья, мы пришли к выводу, что оно носит избирательный характер; зависит от индивидуальных особенностей птиц и этапа гнездового периода. В одних ситуациях лысухи сразу нападают на чужих птиц, вторгшихся на территорию их участка, в других демонстрируют весь набор предупреждающих и угрожающих поз, действий и криков, а иногда относятся безразлично к нарушителям.

Хотя лысухи в Северном Приазовье стремятся гнездиться на значительном расстоянии друг от друга – 105-115 м (71 гнездо), в годы с высокой численностью гнездящихся лысух (2006 г.), мы фиксировали их гнезда, расположенные на расстоянии 2 м (1 гнездо), 8 м (2 гнезда), 10 м (2 гнезда) друг от друга. При этом гнездование было успешным – во всех гнездах зафиксировано по 6-7 вылупившихся птенцов плюс 1-3 наклеивающихся яйца. В годы с низкой численностью лысух на гнездовье (1990 – 3 пары на 2 км тростниковой кромки; 2008-2009 г.г.) последние ведут себя очень осторожно – не кричат, невидны на воде. Тем не менее, при нашем приближении к гнезду насиживающие птицы не убегали, а сидели открыто в 3-5 м от гнезда.

В большинстве случаев лебеди – шипуны (*Cygnus olor*, Gmelin, 1789) и серые гуси (*Anser anser*, Linnaeus, 1758) не терпят в районе своего гнезда присутствия гусей, уток и лысух изгоняя их. Однако мы нашли гнездо лысухи в 15 м от построек шипуна (1 случай) и в 6 -10 м от гнезд серых гусей (4 случая) и между ними не замечали антагонизма (табл. 3).

Таблица 3

Гнездовое соседство лысухи в Северном Приазовье

Общее кол-во гнезд n = 179	Кол-во гнезд	% абс.	% ± m Стриата ± ошибка	Расстояние между центрами гнезд, м			Количество гнезд, шт		
				lim min-max	G отклонение	M ± m среднее ± ошибка	lim min-max	G отклонение	M ± m среднее ± ошибка
Изолировано	71	39,66	0,40±0,04	105-115	5,00	110 ± 0,28	19-28	4,51	23,67±0,54
Серощекая поганка	35	19,55	0,20±0,03	1 - 4	1,29	2,5 ± 0,41	5-10	2,63	8,75 ± 0,44
Большая поганка	19	10,62	0,11±0,02	1 - 15	4,42	6 ± 0,60	1 - 3	0,93	2,1 ± 0,21
Кряква	5	2,79	0,03 ± 0,01	15 -25	5,03	19,67± 0,66	1 - 3	1,15	1,67 ± 0,52
Лысуха	13	7,26	0,07±0,02	2-70	24,63	29,11± 1,52	1 - 2	0,53	1,44 ± 0,15
Серая цапля	6	3,35	0,03±0,01	2 - 6	1,71	4,25 ± 0,41	1 - 2	0,58	1,5 ± 0,24
Болотный лунь	1	0,56	0,01±0,01	20	–	–	1	–	–
Серый гусь	4	2,24	0,02±0,01	6-10	2,83	8 ± 0,71	1 - 3	1,41	2 ± 0,71
Лебедь – шипун	1	0,56	0,01±0,01	15	–	–	1	–	–
Большая выпь	2	1,12	0,01±0,01	9-15	4,24	12 ± 0,87	1 - 1	0	1 ± 0
Малая выпь	1	0,56	0,01±0,01	10	–	–	1	–	–
Чайка хохотунья	3	1,68	0,02±0,01	9 - 15	3,01	12,17±0,50	1 - 1	0	1 ± 0
Озерная чайка	2	1,12	0,01±0,01	6 - 7	0,71	6,50 ± 0,20	1 - 1	0	1 ± 0
Сорока	1	0,56	0,01±0,01	4	–	–	1	–	–
Дроздовидная камышевка	1	0,56	0,01±0,01	2	–	–	1	–	–
Индийская камышевка	3	1,68	0,02±0,01	2 - 3	0,71	2,50 ± 0,32	1 - 2	0,71	1,50 ± 0,41
Желтоголовая трясогузка	2	1,12	0,01±0,01	3 - 4	0,71	3,50 ± 0,27	1 - 1	0	1 ± 0
Тростниковая овсянка	2	1,12	0,01±0,01	2 - 4	1,41	3,0 ± 0,58	1 - 1	0	1 ± 0
В колонии серой цапли (СЦ) под гнездом СЦ	6	3,35	0,03±0,01	–	–	–	6	–	–
В смешанной колонии СЦ + большой белой цапли (ББЦ) под гнездом ББЦ	1	0,56	0,01±0,01	–	–	–	1	–	–

Рядом с гнездами лысух нами обнаруживались гнезда уток (кряква – 7 случаев), расположенных на расстоянии 15-25 м. Гнездовые микростации лысухи и уток не совпадают: первые устраивают гнезда в

зарослях на воде, а вторые на сплавах, кочках и заламах, что смягчает между ними конкурентные отношения. К тому же утки, особенно речные, добираются до своего гнезда по сплаvine, минуя территорию лысухи. Утки явно стремились гнездиться под защитой лысухи. Семьи уток с маленькими утятами лысухи не трогают, они ограничиваются в этих случаях демонстрацией предупреждающего и угрожающего поведения. В случае нападения лысухи на маленьких утят – утка моментально бросалась на их защиту, и лысуха отступала, уплывая в заросли. Тем не менее, лысухи нападают и успешно изгоняют со своей территории выводки уток с подростками утятами; последние, спасаясь от их атак, ныряют или улетают.

По нашим наблюдениям, подростки (от 40 дней) оперяющиеся птенцы лысухи пытаются копировать поведение своих родителей: также изгоняют с территории своего семейного участка птенцов кряквы, причем, иногда успешно. Птенец лысухи плывет к меньшему по размерам утенку и клюет его. С взрослыми утками они в конфликт не вступают и быстро отплывают в сторону при их приближении. Взрослые утки (летные молодые, линные и перелинявшие особи) избегают близкого соседства лысух с выводком, уступают им место и дорогу, улетают при атаках со стороны последних.

Гнездовые микростации поганок и лысухи совпадают, первые часто селятся вблизи гнезд лысух (в 1-15 м). Это особенно свойственно серошекой поганке, в меньшей степени – большой поганке. В плавнях Молочного лимана нами неоднократно отмечалось токование поганок в пределах гнездовых участков лысух, но владельцы участка не обращали на токующих птиц никакого внимания, хотя иногда подплывали к ним на расстояние нескольких метров. При этом наблюдается некоторая синхронность в сроках размножения птиц – соседей, особенно у серошекой поганки. Гнездование поганок начинается во второй декаде мая. Запаздывание сроков гнездования поганок по сравнению с лысухой свидетельствует о том, что именно они ищут защиты вблизи лысухи. По нашим наблюдениям соседствующие птицы умеют распознавать друг друга и взаимно избегают столкновений. Их птенцы часто плавают и кормятся по соседству, в 0,5-5 м друг от друга и от взрослых птиц другого вида, без видимых угроз со стороны последних.

Вблизи гнезд лысухи селятся и другие околводные птицы. В 9-15 м от ее гнезд нами обнаружены гнезда большой и малой выпей (*Botaurus stellaris*, Linnaeus, 1758; *Ixobrychus minutus*, Linnaeus, 1766). Из чаек – озерной и хохотуньи (*Larus ridibundus*, Linnaeus, 1766; *Larus cachinnans*, Pallas, 1811) в 6-15 м. В 2-4 м гнезда воробьиных – дроздовидной и индийской камышевок (*Acrocephalus arundinaceus*, Linnaeus, 1758; *Acrocephalus agricola*, Jerdon, 1845), желтоголовой трясогузки и тростниковой овсянки (*Motacilla citreola*, Pallas, 1776; *Emberiza schoenichus*, Linnaeus, 1758). Найдено также гнездо болотного луня (*Circus aeruginosus*, Linnaeus, 1758), расположенное в 20 м от гнезда лысухи, причем лысуха успешно вывела птенцов (табл. 3). В данном случае, остроту конкуренции, по-видимому, снимало расположение их гнезд в разных ярусах.

В свою очередь лысухи стремятся по возможности устраивать гнезда вблизи сильных и агрессивных птиц: лебедей, серого гуся, чайки-хохотуньи (*Larus cachinnans*, Pallas, 1811). При этом лысуха гнездится в более поздние сроки рядом с ними. Не менее охотно она селится в колониях озерной чайки, также как и камышица (табл. 1), где они становятся недосыгаемы для пернатых врагов, т.к. при приближении последних чайки издают крики тревоги и преследуют врага. Сами лысухи, по нашим наблюдениям, подвергаются нападению чаек только в том случае, когда они прямо направляются к их гнездам.

Уменьшению числа территориальных конфликтов между особями разных видов способствует также их временное распределение. Например, лысухи кормятся днем, а ночью спят на отмелях или в зарослях. Гуси же и утки кормятся в заливах утром, вечером и ночью, а отдыхают обычно днем.

Межвидовые отношения лысухи с другими водными и околводными птицами в послегнездовое время носят слабовыраженный агрессивный характер. В целом птицы ведут себя неагрессивно, отношения между ними нейтральны. Птицы в массовых скоплениях чувствуют себя в полной безопасности. Лысухи часто отдыхали на расстоянии 0,5-1 м от нашего укрытия, лебеди – шипуны и серые гуси кормились на расстоянии 2-2,5 м. В массовых скоплениях смешанного состава, состоящих из птиц разных видов, прямые столкновения между ними крайне редки. Чаще дело ограничивается предупреждающими и угрожающими позами и действиями, реже – соответствующими криками.

Наиболее распространенной причиной возникающих конфликтов являются лучшие кормовые участки, удобные сухие места для отдыха и чистки оперения. Доминируют в конфликтах особи более крупных видов. Чайки избегают садиться в плотных скоплениях лысухи, и кормятся только в разреженных. Лебеди и серые гуси отгоняют лысух во время кормежки, а сами лысухи избегают соседства с сидящими на воде цаплями. Лысухи в скоплениях стараются держаться очень плотной массой, отгоняя приближающихся уток, чаек. Если среди скопления лысух садится серая или большая белая цапля, то лысухи быстро отплывают от них на расстоянии от 10-30 м и более.

Неоднократно в скоплениях птиц мы наблюдали пищевой паразитизм, проявляющийся у особей одних видов по отношению к другим. Несколько лысух выхватывали пищу из клюва лебедя – шипуна, а также подбирали после них остатки рдестов на местах кормежки. Это происходило во время нагонных ветров на глубоководных местах – лебедь легко достает пищу со дна водоема, а лысухам приходится за ним нырять, что они делают весьма неохотно. Лысухи отбирают корм также у кряквы. Иногда пищу у

лысухи отбирают озерные чайки. В большинстве случаев отношения между птицами оставались нейтральными, только лебеди отгоняли от себя надоевших лысух.

Рассматривая особенности межвидовых отношений лысухи и других околоводных и водоплавающих птиц Северного Приазовья, мы пришли к выводу, что, несмотря на агрессивное поведение лысухи в период размножения, она не может вытеснить из свойственных стаций другие виды прибрежных птиц. На ее гнездовых территориях обычны случаи гнездования различных видов птиц.

Столкновения (драки) между птицами разных видов отмечаются редко. Кроме доминирующей роли отдельных видов (ранжирование по размерам тела), столкновения предотвращаются также временной и пространственной разобщенностью особей разных видов, их территориальным распределением и перераспределением в течение одних или нескольких суток, различиями в суточной ритмике их деятельности, обилием корма, а также кормовой специализацией каждого вида.

Конфликты не возникают также благодаря соблюдению нейтральных отношений, при которых сохраняется индивидуальная дистанция. В таких случаях взаимоотношения ограничиваются предупреждающими и угрожающими криками и действиями без последующего нападения.

Камышница (*Gallinula chloropus*, Linnaeus, 1758) для гнездования предпочитает густые высокие заросли тростника и рогоза, где и проводит все время. Она очень редко, если ее не беспокоят, выходит на открытую воду, не удаляясь далеко от зарослей. В период размножения камышница строго территориальная, каждая пара занимает и защищает свой участок. Границы участка защищают оба партнера. Для нее, как и для лысухи, характерна ярко выраженная звуковая маркировка своих участков.

При нашем приближении к гнезду камышницы ведут себя шумно: издают характерные звуки (ворчат, стрекочут); подбегают на расстояние 1-2 м, топчутся, т.е. делают все возможное, чтобы отпугнуть или отвести от гнезда. Выводки камышницы держатся в густых зарослях вплоть до отлета. С выводком находятся оба родителя. Подросшие птенцы выходят иногда утром и вечером из зарослей на открытую воду, удаляясь на расстояние 5-15 м. При первой опасности сразу укрываются в зарослях тростника.

Вблизи гнезд камышницы, так же были обнаружены гнезда других видов птиц (табл. 1). Во всех случаях преобладали нейтральные взаимоотношения. Изоляция гнездовых стаций с водяным пастушком и малым погонышем снимает конкуренцию с ними. Сказываются также различия в образе жизни и характере питания. Во всех случаях гнездование было успешным. В тростниковых зарослях плавней Молочного лимана, в конце июня 2008 г., мы наблюдали образовавшуюся ночевку скворцов прямо над гнездом камышниц. Хотя на этом участке стебли тростника были изломаны и густо облиты пометом, включая гнезда камышниц, гнездование последней было успешно. Обнаружено 2 гнезда камышниц под одиночными гнездами сороки в кустах тростника: камышницы успешно вывели птенцов.

Следует отметить, что камышница, как и другие виды пастушковых Северного Приазовья, охотно гнездятся в колониях цапель. Видами-основателями (организаторами) колоний являются рано прилетающие, крупные по размерам, агрессивные к хищникам птицы (серая и большая белая цапли). В зависимости от качества тростника, цапли размещают свои гнезда в его зарослях на высоте 0,5-3,5 м, в первом ярусе. Структура и плотность колоний определяется характером гнездовой стации, численностью каждого вида, погодными и гидрологическими условиями весеннего периода. В колониях серых (*Ardea cinerea*, Linnaeus, 1758) и больших белых (*Egretta alba*, Linnaeus, 1758) цапель селятся лысуха, водяной пастушок, камышница, малый погоныш, т.е. все гнездящиеся в Северном Приазовье виды пастушковых (табл. 1-4). По-видимому, пастушковых птиц привлекает сюда, в первую очередь, лучшая защита от пернатых хищников. В смешанной колонии цапель, в тростниковых плавнях дельты реки Молочной, впадающей в верховья Молочного лимана, расположенной вблизи с. Мордвиновка Мелитопольского района в 2009 г. мы обнаружили многочисленные гнезда камышницы (33 гнезда), расположенные как в 2-10 м от гнезд цапель, так и непосредственно под гнездами серой и рыжей цапель (табл. 1).

Такое "гнездовое соседство" сопровождается разьединением собственно гнездовых и кормовых, а позднее и выводковых участков. Возможные причины возникновения и существования явления "гнездового соседства" у птиц, по литературным данным [4-6], сводятся к следующим пассивным

1. недостаток удобных мест для гнезд;
2. схожесть экологических требований у разных видов к гнездовым стациям;
3. высокая плотность гнездования одного или нескольких видов;
4. привлекательность недоступных для сухопутных и пернатых хищников изолированных островов, кос, плавней;
5. совпадение сроков гнездования особей одного или разных видов.

и активным вариантам

1. социальная привлекательность поселений и колоний для других видов, в т.ч. неколонизальных;
2. стремление гнездиться под защитой особей более сильного и агрессивного вида;
3. взаимное притяжение (кооперация) социально и эмоционально близких видов;
4. антропогенное влияние.

Звуковой фон, постоянные взлеты и перелеты цапель в колониях стимулируют их размножение. В колониях изменяется поведение пастушковых, насиживающих кладки: при опасности они заблаговре-

менно, ориентируясь на взлеты и тревожные крики цапель, оставляют свои гнезда, не прикрывают кладку пухом. Расстояние между соседними гнездами одних и различных видов пастушковых птиц сокращается в колониях до 2-10 м, а вне колоний оно достигает 30-100 м; а плотность гнездования достигает – 40-50 гнезд/га. Сохранение гнезд и кладок пастушковых птиц в колониях цапель значительно выше, чем за их пределами. На пастушковых птиц в колониях цапли внимания не обращают, конфликтов с ними мы не наблюдали. Их гнезда размещены в разных ярусах, они не являются конкурентами цапель, даже если их гнезда размещены под гнездами цапель. Отношение серых и больших белых цапель к подлетающим близко “чужим” птицам своего и других видов всегда враждебное, они шипят и стараются их клонуть, но они явно опознают соседей и не обращают внимания на снижающихся к соседнему гнезду особей.

В колониях цапель нами не было отмечено случаев гибели птенцов пастушковых птиц; при высоком уровне воды там концентрируются выводки лысух, укрываясь от нападения болотного луня. В колониях четко прослеживается пространственная (горизонтальная и вертикальная), экологическая, видовая и временная структуры, что уменьшает и снимает напряженность межвидовых и внутривидовых отношений, позволяет вселяться в колонии другим, сопутствующим видам птиц в течение всего гнездового периода. Каждый вид занимает в колонии свою экологическую микронишу.

Малый погоныш (*Porzana parva*, Scopoli, 1769) предпочитает гнездиться на мелководных заросших тростником участках. Занимает и держится на гнездовом участке. Территориальное поведение проявляется в брачных криках. При приближении к гнезду опасности насиживающая птица незаметно убегает на 2-3 метра в сторону, а затем издает негромкие крики. Иногда явно старается привлечь к себе внимание для отвода от гнезда – взлетает и садится на верхушки тростника, подергивает вертикально поднятым хвостом, размахивает крыльями, взъерошивает оперение, издает негромкие звуковые сигналы. Затем отлетает дальше и скрывается в зарослях. Нами зафиксированы случаи нападения малого погоныша на близко подплывающих к гнезду камышниц (4 случая) и крякв (2 случая). Во всех случаях малые погоныши насаживали на них с приподнятыми крыльями и взъерошенным оперением. Нападению предшествовал резкий, отрывистый предупреждающий крик. При нашем приближении к гнезду, в большинстве случаев, насиживающая птица не спешила убежать, а подпускала на расстояние «вытянутой руки», затем быстро убегала в заросли, где держалась неподалеку. Иногда птица незаметно сходила с гнезда, но вскоре возвращалась. Обе птицы, самец и самка, бегали рядом, в 1,5-2 м от гнезда, распутив крылья и взъерошив оперение, издавая тихие звуки, иногда резкий отрывистый крик, чистятся, отряхивают оперение.

Малый погоныш, также как и все виды пастушковых, гнездящихся в Северном Приазовье, предпочитает гнездиться изолировано от других птиц, но в большей степени (табл. 4).

Таблица 4

Гнездовое соседство малого погоныша в Северном Приазовье

Общее кол-во гнезд n = 58	Кол-во гнезд	% абс.	% ± m Стриата ± ошибка	Расстояние между центрами гнезд, м			Количество гнезд, шт		
				lim min -max	G отклонение	M±m среднее ± ошибка	lim min -max	G отклонение	M±m среднее ± ошибка
Изолировано	48	82,76	0,83±0,05	60-100	14,35	78,57±0,61	3 - 12	3,13	6,86±0,45
Болотный лунь	1	1,72	0,02±0,02	25	–	–	1	–	–
В колонии цапель, под старым гнездом СЦ	4	6,90	0,07±0,03	под гнездом	–	–	4	–	–
Малый погоныш	5	8,62	0,09±0,04	10-50	28,28	30±3,65	2 - 3	0,71	2,5±0,32

Рядом с его гнездами нами были зафиксированы только гнезда малого погоныша, расположенные на расстоянии 10 м (2 гнезда) и 50 м (3 гнезда). Также найдено одно гнездо болотного луня, расположенное на расстоянии 25 м от гнезда малого погоныша, в котором находилось 4 яйца. Как и в случае с лысухой, остроту конкуренции, по-видимому, снимало расположение их гнезд в разных ярусах.

Выводки малого погоныша держатся в пределах гнездовых участков в зарослях, иногда, чаще в сумерках, выходят на кромку к открытой воде для кормежки.

Водяной пастушок (*Rallus aquaticus*, Linnaeus, 1758). Для гнездования водяного пастушка в Северном Приазовье был оптимальным средний уровень воды в реке и лимане, при котором сохраняется часть кочек и заломов тростника. Водяной пастушок, как и все гнездящиеся в Северном Приазовье виды пастушковых, строго территориален. Каждая пара занимает гнездовой участок в густых зарослях у воды на кочках, сплаvine, в кустах тростника, в залеме прошлогодней растительности. Как и у всех пастушковых, самец и самка водяного пастушка активно защищают гнездо и гнездовую территорию от вторжения посторонних. Конфликты, возникающие на границе гнездового участка, в основном ограничиваются демонстрацией поз угрозы: водяной пастушок взъерошивает оперение, приподнимает крылья над спиной, наклоняет голову вниз, клюв опускает косо к земле. В таком виде птица бежит перед противником на расстоянии 1-2 м вдоль границы гнездового участка, изредка издавая при этом резкий крик угрозы и делая демонстративные броски в сторону противника.

Очень редко, в основном к птицам более мелкого вида, водяной пастушок ведет себя более агрессивно по отношению к нарушителю: с взъерошенным оперением и приподнятыми крыльями набрасывается, как петух, на противника, клюет его, подсакивает, стараясь ударить ногами. Аналогично поведение водяного пастушка и при приближении к гнезду опасности – птиц своего и другого вида. Демонстрацию бросков и поз угрозы мы фиксировали по отношению к камышнице, малому погонышу, водяному пастушку, лысухе при приближении последних к гнезду. Несмотря на агрессивное поведение водяного пастушка, мы зафиксировали гнезда лысухи, расположенные в 10-11 м (табл. 2).

В двух случаях в гнезде водяного пастушка находилось по 8 сильно насиженных яиц, а лысухи уже вывели птенцов, с которыми находились по близости – в 11 м от гнезда водяного пастушка кормились у кромки тростника, либо отдыхали на гнезде. В третьем случае лысуха насиживала на гнезде 9 яиц, гнездо водяного пастушка было построено полностью в 10 м, в кусте густого высокого тростника под заломом, но еще пустовало. В 2-3 м от гнезда самец токовал. При нашем приближении к гнезду водяные пастушки вели себя однозначно: обе птицы находились на расстоянии 1-3 м от гнезда, кричали, издавая отрывистый визг, бродили или бегали, тихо ворчали, барабанили глухим треском.

Выводы. Все пастушковые держатся в сезон размножения парами, занимают и защищают гнездовые участки. В этот период у них наиболее полно проявляется богатство и разнообразие поведенческих реакций и звуковых сигналов. Демонстративное территориальное поведение с разнообразными позами и действиями выработалось хорошо у лысухи, менее у камышницы, в связи с выходом на открытую воду.

Для пастушковых Северного Приазовья характерно стремление гнездится под защитой особей более сильного и агрессивного вида - они охотно гнездятся в колониях цапель.

Реакция пастушковых птиц на появление вблизи пернатых хищников однозначна – они издают крик тревоги, скрываются сами и уводят птенцов в заросли.

Такие особенности экологии пастушковых, как территориальная разобщенность пар и выводков, относительно равномерное распределение пар, звуковая сигнализация, различия в образе жизни, способах добывания пищи и наборе кормов, в выборе мест кормежки снижают напряженность межвидовых отношений.

РЕЗЮМЕ

Вперше описуються міжвидові відносини видів, що гніздяться в Північному Приазов'я, пастушкових птахів (*Rallidae*): лисухи (*Fulica atra Linnaeus, 1758*), камішници (*Gallinula chloropus Linnaeus, 1758*), малого погоныша (*Porzana parva Scopoli, 1769*), водяного пастушка (*Rallus aquaticus Linnaeus, 1758*) у гніздовий період. Установлено, що, незважаючи на агресивне поведіння пастушкових у період розмноження, вони не можуть витіснити з властивих стацій інші види прибережних птахів. На їхніх гніздових територіях звичайні випадки гніздування різних видів птахів.

Ключові слова: пастушкові птахи, гніздове сусідство, Північне Приазов'я, лисуха, камішница, малий погоныш, водяний пастушок.

SUMMARY

For the first time the interspecific relation of the nesting pastushkovy birds (*Rallidae*) in Northern Priazovye are described: bald-coots (*Fulica atra Linnaeus, 1758*), moorhen (*Gallinula chloropus Linnaeus, 1758*), small pogonysh (*Porzana parva Scopoli, 1769*), water herdbo (*Rallus aquaticus Linnaeus, 1758*) during the nested period. It is established that, despite the aggressive behavior pastushkovy birds during the reproduction period, they cannot supersede from peculiar stations other kinds of coastal birds. In their nested territories nesting cases are usual for different kinds of birds.

Keywords: Pastushkovy birds, nested neighbourhood, Northern Priazovye, bald-coots, moorhen, small pogonysh, water herdbo.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Филонов К.П. Численность птиц в различных ландшафтах Северного Приазовья / К.П. Филонов // Вестн. зоол. – 1972. – № 4. – С. 20-27.
2. Лакин Л. Н. Биометрия / Л. Н. Лакин. – М.: Изд-во МГУ, 1982. – 240 с.
3. Кошелев А.И. Распространение и биология пастушковых птиц (*Rallidae*) на юге Западной Сибири/ А.И. Кошелев, В.М.Чернышов // Фауна и экология позвоночных Сибири. – Новосибирск: Наука, 1980. – С. 197-226.
4. Казаков Б. А. Результаты авиаобследования поселений колониальных околотовных птиц в долинах Дона и Западного Маньча / Б. А. Казаков, Н. Х. Ломадзе // Современные сведения по составу и распространению околотовных птиц Северного Кавказа. – Ставрополь: Изд-во СГПИ, 1991. – С. 84-87.
5. Лысенко В.И. Колониальные птицы Северного Приазовья / В.И. Лысенко // Колониальные гнездовья околотовных птиц и их охрана. – М: Наука, 1975. – С. 145-146.
6. Мазинг В.В. Консорции как элементы функциональной структуры биоценозов / В.В. Мазинг // Тр. МОИП. –1966. – Т. 27. – С. 16-32.

Поступила в редакцию 06.04.2010 г.

УДК 678.5:621.039.7:539.6

**СОЕДИНЕНИЕ РАЗНОРОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ КОНСТРУКЦИОННОГО МАТЕРИАЛА
КОНТЕЙНЕРА ДЛЯ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ**

А. Ю. Андрианов, А. В. Кулик, Д. А. Орлянский

Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара, г. Днепропетровск

Разработана методика процесса соединения дисперсно-наполненного эпоксидного композита и многослойного металлического пакета, являющихся компонентами конструкционного материала для изготовления средств изоляции радиоактивных отходов. Соединение основано на адгезионном сцеплении эпоксидного связующего композита с поверхностью внешнего стального или алюминиевого слоя многослойного пакета. Отработана методика экспериментального определения прочности адгезионного соединения на сдвиг. Установлена зависимость прочности соединения от количества дисперсного наполнителя в адгезиве.

Ключевые слова: контейнеризация радиоактивных отходов, конструкционный материал, адгезионное соединение, методика соединения, прочность соединения.

Введение. Повышение требований к обеспечению безопасной и надежной изоляции радиоактивных отходов создает необходимость в исследовании и разработке новых контейнерных материалов с повышенными эксплуатационными свойствами, такими как коррозионная стойкость, герметичность, удельная по массе механическая прочность и радиационная защита. Учитывая сложность обеспечения всех свойств одним однородным материалом, в последнее время уделяют значительное внимание композиционным материалам с гетерогенной структурой. Одним из таких материалов является конструкционный материал, разрабатываемый в рамках проекта Научно-технологического центра в Украине, сотрудниками Днепропетровского национального университета имени Олеся Гончара и Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт».

Конструкционный материал (КМ) представляет собой комбинацию двух разнородных композитов. Первый из них представляет многослойный пакет (МП), состоящий из металлов с разным атомным номером. Сочетание разных металлов в определенном порядке позволяет повысить альбедо гамма-квантов, и таким образом, уменьшить интенсивность гамма-излучения после прохождения слоя пакета. Вторым материалом относится к широко используемым в ракетно-космической технике армированным полимерным композитам (ПК), включающим высокодисперсные наполнители на основе тяжелых металлов, которые позволяют увеличить коэффициент ослабления гамма-излучения.

Постановка задачи. Разработка метода и технологии соединения указанных компонентов является одной из основных задач, возникших в процессе формирования КМ. Решение поставленной задачи осуществлялось в четыре этапа: выбор и обоснование метода соединения; формирование соединения; экспериментальная отработка методики испытаний соединения; оптимизация параметров соединения. Целью данной публикации является краткое описание результатов и хода работы первых трех этапов решения поставленной задачи.

Выбор и обоснование метода соединения. Для решения поставленной задачи был проведен анализ существующих методов получения гетерогенных материалов: физических, сопровождаемых изменением физического состояния одного из соединяемых компонентов; химических, получаемых в результате химических реакций; механических, при которых не происходит физико-химических превращений, а также их сочетаний. Примеры формирования гетерогенных материалов путем совмещения металлов и полимеров приведены в табл. 1. Кроме того, рассматривались два технологических подхода соединения компонентов КМ: независимое формирование компонентов с последующим соединением; формирование одного из компонентов на поверхности другого компонента. Одновременное формирование компонентов не рассматривалось ввиду сложности совместного обеспечения разнородных физических условий, необходимых при их получении.

Таблица 1

Примеры методов формирования гетерогенных материалов на основе металлов и полимеров

Механические	Физические	Химические
соединение крепежными элементами	выпаривание, осаждение	восстановление
	пайка, сваривание	разложение
соединение путем изменения формы	электролиз, фотолиз, радиолит	
	адгезия (футерование, напыление, выкладка)	

При выборе метода соединения в первую очередь учитывается необходимость обеспечения следующих параметров: герметичность стыка; инертность структуры и свойств компонентов по отношению

к технологическим условиям процесса соединения; многовариантность возможных конструкций; технологичность.

Анализ рассмотренных методов соединения разнородных материалов в условиях различных технологических подходов позволяет выделить их основные недостатки: использование крепежных элементов нарушают сплошность компонентов и снижают степень герметичности соединения; соединение путем изменения формы компонентов ограничивает альтернативные конструкции конечного изделия; использование ряда физико-химических методов (таких как выпаривание, осаждение, восстановление, разложение) в большинстве случаев рационально только для однородных материалов, в тоже время компоненты конструкционного материала являются гетерогенными; электролиз, фотолиз, радиолит характеризуются низкой технологичностью (которая не в последнюю очередь заключается в использовании специфического оборудования); пайка и сварка являются причиной возникновения остаточных напряжений в материалах вследствие температурных воздействий, особенно при значительных различиях в коэффициентах теплового расширения; адгезионные соединения характеризуются относительно невысокой прочностью по сравнению с другими методами соединения.

В процессе определения условий эксплуатации разрабатываемого КМ установлено, что наибольшая его эффективность проявляется при совместном использовании с традиционными конструкционными материалами, что в свою очередь позволяет объединить в одной структуре механические свойства одних материалов (прочность) и физико-химические свойства других (ослабление гамма-излучения, коррозионная стойкость).

Таким образом, адгезионный метод соединения реализуется при объединении рассматриваемых компонентов КМ со следующими преимуществами: возможность соединения гетерогенных материалов, высокая герметичность, снижение веса за счет отсутствия механических креплений, повышение прочности при увеличении площади соединяемых поверхностей, создание многослойных конструкций.

Целесообразность использования данного метода также подтверждается наличием высоких адгезионных свойств связующего полимерного компонента КМ, в качестве которого используется эпоксидная смола. Анализ различных связующих, используемых для изготовления адгезивов, согласно литературе [1] показывает, что эпоксидная смола при высокой адгезии к металлам сохраняет высокую стойкость к воздействию различных веществ, что важно с точки зрения обеспечения атмосферной стойкости (табл. 2).

Таблица 2

Десятибалльная оценка стойкости эпоксидных смол к химически активным веществам по сравнению с другими видами связующих

Связующее	Адгезия к металлам	Стойкость к воздействию				Стоимость
		воды	растворителей	щелочей	кислот	
Эпоксидное	8	8	9	9	8	7
Полиэфирное	2	7	6	1	6	4
Силиконовое	7	10	7	6	10	6
Полиуретановое	10	7	8	4	4	9

В процессе обоснования выбранного для исследования метода соединения установлено также, что эксплуатация адгезионных соединений эпоксидных композиций оправдывает себя даже в условиях высокого радиационного облучения. Эпоксидное покрытие на корпусе контейнера для долгосрочного хранения отработанного ядерного топлива после длительной эксплуатации в течение 14 лет в условиях значительного перепада температур от $-28,9^{\circ}\text{C}$ до $+37,8^{\circ}\text{C}$ практически не имеет никаких повреждений за исключением отшелушивания в нескольких местах [2]. По другим данным [3] экспериментально установлено, что свойства эпоксидных клеев практически не изменяются при облучении дозами до 100 кГр .

Экономия затрат при реализации адгезионного соединения заключается в отсутствии необходимости использования специального оборудования высокой стоимости или дефицитности. Также нет значительных затрат на энергоносителях, особенно в условиях использования адгезионных веществ, отверждение которых осуществляется в условиях комнатных температур и нет необходимости в использовании печей, вакуумных камер, автоклавов и т.п. Технологический процесс создания адгезионного соединения несложный и включает следующие операции: подготовка поверхности субстрата; подготовка адгезива (смешение исходных компонентов, добавление модификаторов); формирование адгезива на поверхности субстрата; монтаж соединения; отверждение адгезива.

Сравнивая адгезионный метод соединения с другими методами важно отметить следующие аспекты, подтверждающие целесообразность его использования: отсутствие короблений, изменения цвета, коррозии или ухудшения качества склеиваемых компонентов, вследствие действия других факторов негативного воздействия; сокращение затрат на технологическое оснащение, включая снижение объема механических работ; возможность совместного использования с другими методами соединения или способами, позволяющими усилить прочность и качество соединения.

Формирование адгезионного соединения. При формировании адгезионного соединения наиболее рациональным признан подход, основанный на независимом изготовлении МП с последующим фор-

мированием ПК на его поверхности. Это позволяет использовать связующее полимерного композита в качестве адгезива соединения.

Реализация данного подхода фактически предопределяет ПК по своему целевому назначению, структуре, технологии формирования к высокоармированным композитным покрытиям, которые в последнее время широко используются в специальном строительстве. Этот вид материалов представляет собой химически-стойкие покрытия, упрочняемые одним или двумя слоями стеклоткани. Они применяются как в виде самостоятельных антикоррозийных покрытий, которые используются в условиях действия агрессивной среды, так и с целью образования непроницаемого слоя в комбинированных защитных покрытиях. Армированные покрытия имеют большую механическую прочность и стойкость к абразивному износу по сравнению с лакокрасочными покрытиями, что позволяет значительно увеличить их ресурс особенно в условиях радиационного и атмосферного воздействия. Это достигается, прежде всего, увеличением толщины покрытия (до 1 см) по сравнению с другими покрытиями в десятки раз, что положительно также влияет на ослабление гамма-излучения. Обеспечение защитных свойств покрытия значительно повышает степень целесообразности их использования в средствах изоляции радиоактивных отходов.

Причисление ПК к высокоармированным композитным покрытиям позволяет сократить номенклатуру технологических методов формирования КМ. Основную роль в обеспечении прочности сцепления компонентов КМ играет состав эпоксидной композиции, используемой в соединении в качестве адгезива и в составе ПК в качестве связующего.

Для получения максимальной прочности соединения к адгезиву предъявляется ряд требований, наиболее важными из которых для выбранной структуры КМ следует считать минимальное расхождение в коэффициентах теплового расширения адгезива и субстрата, а также высокую технологичность: удовлетворительная вязкость, возможность холодного отверждения, высокая жизнеспособность, полимеризация с минимальной усадкой и без выделения катализаторов коррозии. Большая часть из указанных технологических параметров обеспечивается правильным выбором марки эпоксидной смолы и модифицирующих добавок.

Одна из основных сложностей, возникших в процессе формирования соединения, заключается в сильном различии теплофизических свойств компонентов КМ. Согласно оптимальной структуре КМ, обеспечивающей максимальное альбедро гамма-квантов, контактирующий с полимером слой МП должен включать элементы с большим атомным номером, для которых характерны низкие значения коэффициента теплового расширения (КТР) порядка 10^{-6} K^{-1} . В тоже время эпоксидная смола без наполнителя характеризуется высокими значениями КТР порядка 10^{-4} K^{-1} . Согласование коэффициентов теплового расширения соединяемых слоев достигается двумя способами. Первый заключается в использовании переходного элемента в зоне контакта – слоя металла или сплава с наименьшими значениями КТР порядка 10^{-5} K^{-1} , второй – во внесении повышенного содержания наполнителя в эпоксидное связующее для снижения КТР адгезива до значений субстрата. Технология формирования МП (по методу PVD – физического осаждения из плазменной фазы или VHR – горячей прокатки в вакууме) позволяет создавать многослойные композиты практически из любых металлов или сплавов, поэтому в качестве переходных слоев КМ рассматриваются такие распространенные в промышленности металлические материалы как сталь и алюминий.

В процессе экспериментального исследования прочности адгезионного соединения в зависимости от различного наполнения используются две марки эпоксидной смолы: распространенная модифицированная смола КДА-2 по ТУ 6-05-1380-76 с отвердителем ТЭТА и более технологичная смола Эпофлекс-09 по ТУ У 23981176.015-2008, включающая кроме смолы и фирменный отвердитель. В качестве наполнителей кроме высокодисперсного порошка вольфрама, обеспечивающего поглощение гамма-излучения, дополнительно рассматривается ряд доступных минеральных и неорганических порошков, таких как тальк (влияющий на тиксотропные свойства композита), силикат (прочность), железный сурик (электрические и теплофизические свойства), каолин и мел (теплофизические свойства). Эти же порошки также играют важную роль в обеспечении равномерного распределения тяжелого вольфрама в объеме эпоксидного композита. Для образцов адгезивов, рассматриваемых в данной публикации, используются наполнители смеси порошков вольфрама с мелом или с каолином, при объемном содержании вольфрама в наполнителе 45%.

Методология экспериментальной отработки процесса формирования КМ путем адгезионного соединения его компонентов заключается в выполнении относительно несложных приемов, легко воспроизводимых в производственных условиях с использованием внелабораторного оборудования (табл. 3).

Для определения комплексной прочности соединения необходимо проанализировать прочность сцепления адгезива, состоящего из эпоксидной композиции с наполнителем различного состава и содержания, с компонентами КМ: субстратом (переходной материал между МП и ПК – сталь или алюминий), армирующим компонентом (стеклоткань), связующим ПК (эпоксидная композиция с наполнителем). Экспериментально прочность сцепления адгезива по двум последним вариантам не отрабатывалась, поскольку анализ адгезии эпоксидных связующих и армирующих стеклянных наполнителей играет основную роль при оценке прочности КМ и широко проанализирован в соответствующей литературе. Адгезионная же прочность эпоксидных композиций схожего состава практически соответствует когезионной.

В качестве субстрата используется конструкционная сталь, что связано с более сложными условиями эксплуатации соединения по сравнению с использованием в качестве субстрата алюминия, который имеет более близкое к адгезиву значение КТР. Кроме того, выбранный вариант более точно соответствует области применения разрабатываемого КМ, использование которого наиболее рационально совместно с существующими материалами для изоляции радиоактивных отходов (сталь и/или бетон).

Таблица 3

Технологические приемы формирования ПК на поверхности МП

Этапы	Приемы
Подготовка субстрата и компонентов адгезива	Подготовка поверхности субстрата ПК зачисткой металлической щеткой, шлифованием наждачной бумагой и обезжириванием промышленными растворителями с последующей сушкой в печи
	Изготовление наполнителя путем механического смешения в заданных пропорциях исходных компонентов по отработанному режиму
Изготовление адгезива	Механическое смешение компонентов эпоксидной композиции (смоляная часть, отвердитель, растворитель) до нужной вязкости
	Внесение в подготовленную смесь адгезива наполнителя с последующим механическим смешением по отработанному режиму
Соединение ПК с МП	Формирование слоя адгезива на поверхности субстрата методом распыления (для крупногабаритных образцов), контактным методом с помощью кисти и валика (для малогабаритных образцов) с последующей выдержкой в нормальных условиях для предварительного отверждения (схватывания)
Формирование ПК	Послойное нанесение композиции на поверхности сформированного слоя адгезива методом распыления (для крупногабаритных образцов), контактным методом с помощью кисти и валика (для малогабаритных образцов)
	Промежуточная выкладка армирующего компонента ПК с последующим выглаживанием с помощью валика
	Окончательное отверждение сформированных слоев в нормальных условиях в течение заданного времени (не менее 7 суток)

Экспериментальная отработка соединения на прочность. В основу исследования адгезионной прочности эпоксидного адгезива со стальным субстратом положена методика, которая основана на стандартном методе определения прочности клеевого соединения при сдвиге по ГОСТ 14759-69 [4], соответствующему международному стандарту ISO 4587-79. Метод позволяет определить статическую прочность при сдвиге клеевых соединений листовых металлов, путем определения величины разрушающего усилия при растяжении образцов стали, склеенными внахлест, с приложением усилий, смещающих одну пластинку образца относительно другой. Металлические пластинки для изготовления образцов изготавливаются из стали 3 по размерам, заданным в стандарте. Для испытаний используется разрывная машина FM-1000 (Германия).

Методика изготовления образцов должна определяться методом формообразования ПК (напылением). Однако данный способ является нерациональным при изготовлении образцов с малой контактной площадью ~300 мм², а контактное нанесение вручную позволяет значительно упростить процесс подготовки образцов для испытаний. Для упрощения технологии изготовления образцов проведена экспериментальная отработка двух методов нанесения адгезионной смеси: контактным методом (с использованием кисти) и напылением. В последнем случае лишний объем смеси снимается с краев образца тканью.

Адгезионная смесь изготавливается двух составов: 1) смола КДА-2 (отвердитель ТЭТА), наполнитель на основе вольфрама и мела (содержимое наполнителя 32%); 2) смола Эпофлекс-09, наполнитель тот же. Согласно полученным результатам испытаний значительного расхождения между прочностью образцов, изготовленными разными методами за пределами погрешности не наблюдается (рис. 1). В связи с этим дальнейшие испытания проводятся на образцах, в которых адгезионная смесь наносится контактным методом.

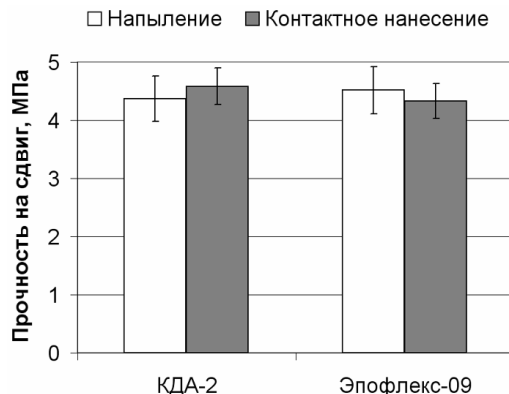


Рис. 1. Прочность образцов, изготовленных разными методами

Формирование адгезионных соединений с использованием эпоксидных композиций осуществляется без приложения нагрузки. Однако соединение может испытывать контактные давления, вызванные условиями формирования последующих слоев ПК. В процессе отработки методики испытаний возникает необходимость в сравнении прочности адгезионных соединений, сформированных под давлением с малыми нагрузками, вызванными весом слоев армирующей стеклоткани, давлением валика при выглаживании и другими технологическими процессами. В результате исследования адгезивов с содержанием наполнителя 48% из порошков вольфрама и мела установлено, что для малых нагрузок зависимость между величиной давления и прочностью соединения отсутствуют (рис. 2). При увеличении нагрузки на

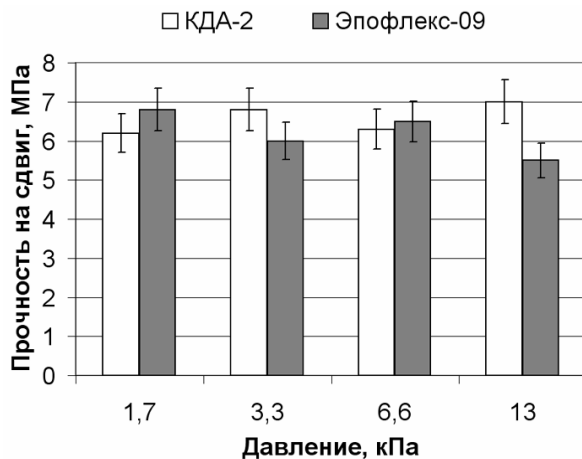


Рис. 2. Прочность образцов, склеенных под давлением

образцы наблюдается вытеснение адгезионной композиции, что также мало влияет на прочность соединения. Таким образом, все последующие образцы формируются при незначительном давлении (до 35 г/см²), прилагаемом с целью удержания верхней пластинки субстрата в необходимом положении при склеивании.

При изготовлении экспериментальной партии образцов контролируется также толщина нанесения адгезива. Для большинства образцов она не выходит за пределы 150-220 мкм. При рассмотрении 20 образцов с адгезивом одного состава (смола эпофлекс-09 с 48%-м содержанием наполнителя из порошков вольфрама и мела) в определенном диапазоне толщин зависимости между их величинами и адгезионной прочностью не выявлено (рис. 3). В дальнейших исследованиях влияние толщины на прочность соединения не рассматривается.

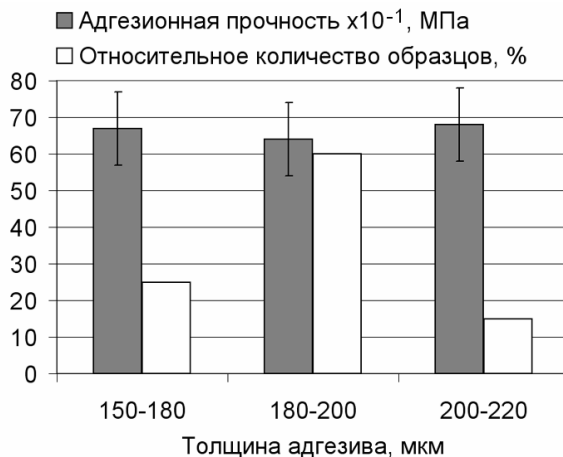


Рис. 3. Прочность образцов с адгезивом разной толщины

При отработке методики испытания анализируется влияние малых дефектов, характерных для адгезионного соединения: возникновение пустот как в объеме адгезива, так и на его границе (особенно по уголкам пластинок) вследствие усадки или подтекания адгезива, а также в результате несоответствия формы пластинок заданному стандарту. Такие дефекты приводят или к возникновению внутренних напряжений, или к возникновению непроклеев. Следует отметить, что даже незначительные дефекты, например, такие как непроклеи пластинок по углу пластинки площадью не более 2×2 мм приводят к значительному падению адгезионной прочности, не смотря на незначительное уменьшение контактной площади соединения с 300 мм² до 256 мм².

На рис. 4 приведены результаты адгезионной прочности для 18 образцов одного состава (смола КДА-2 и наполнитель из порошков вольфрама и каолина), но с разным содержанием наполнителя. Два

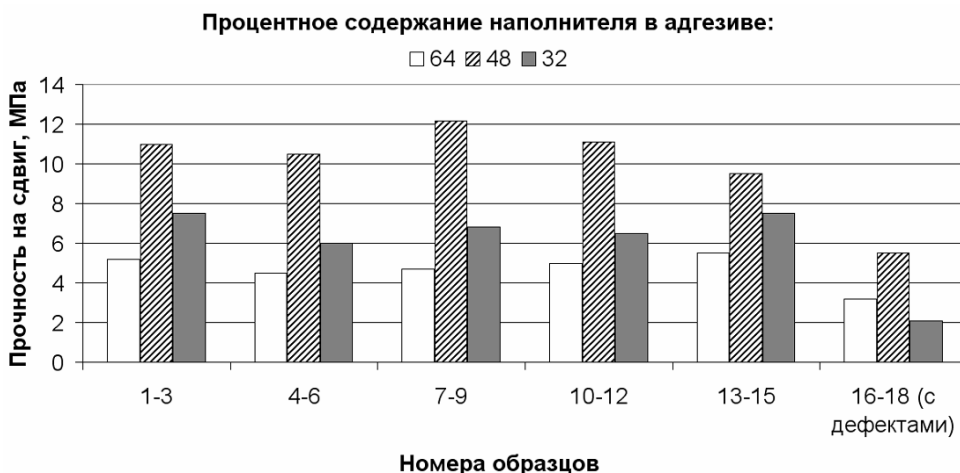


Рис. 4. Влияние дефектов на адгезионную прочность образцов с разным содержанием наполнителя в адгезиве

образца №16 и №17 имеют дефект подтекания адгезива с содержанием наполнителя 48% и 64%, образец №18 (содержание наполнителя в адгезиве 32%) – непрочней шириной не более 0,5 мм по стороне образца длиной 20 мм. Результаты адгезионной прочности при выполнении дальнейших исследований, направленных на оптимизацию соединения, учитываются только для тех образцов, в которых не было подобных дефектов.

Наличие экстремума на диаграмме (рис. 4) также наблюдается в работе [5], связанной с исследованием адгезионной прочности эпоксидных модифицированных смол (состав и марка смолы не приводится), наполненных порошками электропроводящих металлов. Однако в [5] экстремум наблюдается при содержании наполнителя в пределах 30-35% и по абсолютному значению прочность на сдвиг составляет порядка 16 МПа; при повышенном содержании наполнителя 40-60% наблюдается снижение прочности на сдвиг адгезива до 3-8 МПа.

Следует отметить, что для адгезива на основе смолы эпофлекс-09 с наполнителями разного состава экстремальной зависимости прочности на сдвиг от количества наполнителя, характерной для смолы КДА-2, не зафиксировано (рис. 5). Полученный результат, а также более высокая технологичность смолы

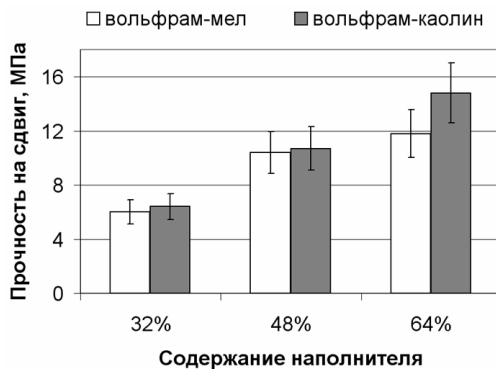


Рис. 5. Зависимость адгезионной прочности соединения на основе смолы эпофлекс-09 от содержания наполнителя двух составов

эпофлекс-09 стало основной причиной ее преимущественного использования при изготовлении образцов, используемых для дальнейшей оптимизации адгезионного соединения.

Выводы. В ходе выполнения работ по созданию нового радиационно-защитного КМ решена задача по соединению его компонентов, состоящих из разнородных гетерогенных материалов. Соединение компонентов КМ осуществляется за счет адгезии связующего ПК к поверхности МП, что предопределяет методику изготовления КМ: МП изготавливается отдельно, после чего на его поверхности формируются слои ПК. Прочность соединения на сдвиг в процессе отработки методики соединения составляет 10-14 МПа в зависимости от состава и содержания адгезива на основе эпоксидной композиции и двухкомпонентного высокодисперсного наполнителя, что является достаточным для обеспечения структурной прочности КМ. Дальнейшие работы по созданию КМ должны быть направлены на оптимизацию состава адгезива, которая позволит обеспечить стабильные показатели прочности соединения с учетом влияния различных факторов, включающих технологические условия формирования соединения и температурные воздействия.

РЕЗЮМЕ

Розроблена методика процесу з'єднання дисперсно-наповненого епоксидного композита та багатошарового металевго пакету, які є частиною конструкційного матеріалу для виготовлення засобів ізоляції радіоактивних відходів. З'єднання засновано на адгезійному зчепленні епоксидного зв'язуючого композиту з поверхнею зовнішнього сталюого або алюмінієвого шару багатошарового пакету. Відпрацьована методика експериментального визначення міцності адгезійного з'єднання на зсув.

Ключові слова: контейнеризація радіоактивних відходів, конструкційний матеріал, адгезійне з'єднання, методика з'єднання, міцність з'єднання.

SUMMARY

The method of joining process of epoxy composite containing dispersed powders with multilayered metallic pack is developed. These components are integral parts of structural material of container for radioactive waste. Joining of components is based on adhesion of binder of epoxy composite with steel or aluminium layer of multilayered pack. The method of experimental determination of shearing strength of adhesive joint is worked-out. Dependence between shearing strength and content of dispersed filler in adhesive is defined.

Keywords: containment of radioactive waste, constructional material, adhesive joint, method of joint, strength of joint.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ковачич Л. Склеивание металлов и пластмасс / Л. Ковачич; [пер. со словацк. И.В. Холодова]. – М.: Химия, 1985. – 240 с.
2. Understanding and managing ageing of material in spent fuel storage facilities: Technical reports series No. 443 – Vienna: International Atomic Energy Agency, 2006. – 107 p.
3. Радиационная стойкость некоторых полимеров и эпоксидных клеев / С. Н. Гладких, В. В. Голиков, Г. Д. Кекелидзе и др. – Дубна: Издат. отдел Объед. инст-та ядерн. исслед., 2001. – 6 с.
4. Клеи. Метод определения прочности при сдвиге: ГОСТ 14759-69. – [Введ. 1970-01-01]. – М.: Изд-во стандартов, 1998. – 13 с. – (Государственный стандарт Союза ССР)
5. Пещерова Т. Н. Технология формирования и повышения прочности клеевых соединений деталей машиностроительных конструкций: автореф. дис. на соискание степени канд. техн. наук: спец. 05.02.08 «Технология машиностроения» / Т. Н. Пещерова. – Москва, 2007. – 26 с.

Поступила в редакцию 15.04.2010 г.

УДК 574.21+574.24:546.4:582.475.2

**ПРОДУЦИРОВАНИЕ МЕТАЛЛСВЯЗЫВАЮЩИХ СЕРУСОДЕРЖАЩИХ БЕЛКОВ
В ХВОЕ ЕЛИ ОБЫКНОВЕННОЙ (*PICEA ABIES (L.) KARST.*) В ЗАВИСИМОСТИ
ОТ УСЛОВИЙ ПРОИЗРАСТАНИЯ**

В. С. Дорошкевич, А. Н. Шендрик

Определено содержание меди и цинка, белка, серусодержащих соединений в хвое Ели обыкновенной (*Picea Abies (L.) Karst.*) в экологически чистых регионах Украины (АР Крым) и в городах с интенсивной промышленностью (г. Донецк, Мариуполь, Краматорск, Запорожье, Артемовск). Показано, что с увеличением степени загрязнения окружающей среды соединениями тяжелых металлов в хвое Ели обыкновенной (*Picea Abies (L.) Karst.*) интенсифицируются процессы выработки специфичных белков и серусодержащих соединений.

Ключевые слова: металлотионеины, метод Лоури, мониторинг, загрязнение окружающей среды, тяжелые металлы, колоночная хроматография, атомно-эмиссионная спектроскопия.

Введение. На большинство живых организмов тяжелые металлы оказывают двойное действие: с одной стороны, они необходимы для жизнедеятельности биологических систем, с другой - могут быть токсичными. Существует огромное количество примеров, демонстрирующих негативные последствия дефицита меди, железа, цинка, кобальта, марганца и других металлов в клетках [1-3]. В основном, при устранении недостатка микроэлементов, растения возвращаются в нормальное состояние. При поступлении большого количества токсикантов происходит их накопление и, как следствие, гибель. Однако, в большинстве случаев, концентрация металлов в тканях поддерживается строго постоянной в течение всей жизни. Для сохранения общего баланса функционируют системы, препятствующие накоплению токсичных веществ. Существует общее мнение, что у организмов различного уровня организации в процессе эволюции сформировался механизм детоксикации, в основе которого лежит связывание и изоляция токсичных ионов металлов. При этом, основную роль выполняют специальные белки - металлотионеины. Синтез данного типа белков индуцируется при поступлении как меди и цинка, так и других тяжелых металлов.

Целью настоящей работы было выделить металлсвязывающие серосодержащие белки и сравнить содержание белков в хвое Ели обыкновенной (*Picea abies (L.) Karst.*) произрастающей в участках с различной техногенной нагрузкой по ионам тяжелых металлов меди, цинка, железа, свинца.

Постановка задачи и материал исследования. Для реализации цели были запланированы следующие задачи. Выяснить степень загрязнения медью и цинком хвои деревьев, произрастающих в местах отбора проб. Провести ранжирование испытываемых участков по степени загрязненности на контрольную, парковую и промышленную зоны. Рассмотреть каждый объект исследования на предмет изменения морфологии поверхности хвои. Определить биохимические показатели: общее содержание белка, серусодержащих соединений. Провести фракционирование цитоплазматического белка посредством колоночной хроматографии и сопоставить его содержание с серусодержащими соединениями в каждой фракции.

В качестве объекта исследования была выбрана годичная хвоя, отобранная до периода вегетации. Хвою отбирали в городах Украины с интенсивно развитой промышленностью (г.г. Донецк, Мариуполь, Краматорск, Запорожье, Артемовск, Макеевка) и, для сравнения, в зонах условного контроля - курортных городах АР Крым (г.г. Ялта, Алушта) и Донецкой области (г. Славянск, п.г.т. Урзуф). В табл. 1 приведено расположение участков отбора проб.

Таблица 1
Характеристика участков произрастания Ели обыкновенной (*Picea abies (L.) Karst.*)

№	Район произрастания	Расположение участка	
1	Донецкая область: г. Славянск, сан. «Донбасс», п.г.т. Урзуф	Курортные зоны, крупные промышленные предприятия отсутствуют или не работают.	
	п.г.т. Мигово, Закарпатская область, Украина	Горно-лыжный курорт	
	АР Крым	г. Алушта, Ялта	Курортные города на побережье Черного моря
		поселок Краснокомянка Ялтинского региона, г. Ялта	Выращивают виноград сорта белый мускат.
	Гора «Эклизи Бурун», плато Чатыр-Даг.	Подножье горы.	
2	г. Краматорск, парк «Юбилейный», г. Мариуполь, «Приморский парк»	Парковые зоны расположены практически в центре города, по периметру расположены автодороги.	
3	г. Донецк, парк им. Щербакова	Расположен в центре города. Вблизи парка Донецкий металлургический завод (ДМЗ) – один из крупнейших металлургических заводов Украины.	

Табл. 1 (продолжение)

4	г. Донецк, Ботанический сад НАН Украины	Располагается за городом, поблизости нет промышленных предприятий. Уровень техногенного и отрицательного антропогенного воздействия относительно низок.
5	г. Краматорск, ул. Социалистическая, г. Донецк, ул. Университетская	Уличное озеленение, участки расположены на разделительной полосе дороги с достаточно интенсивным движением.
6	г. Краматорск, территория Новокраматорского машиностроительного завода (НКМЗ)	НКМЗ является крупнейшим предприятием машиностроения, специализируется на выпуске деталей, изготовленных из специальных легированных сталей. Цинк, никель, хром используются для покрытия деталей
7	г. Запорожье, завод «Запорожсталь»	Одно из крупных промышленных предприятий Украины. Производитель, экспортер чугуна, стали, проката
8	г. Курахово, район Кураховской теплоэлектростанции СЕ ООО «Востокэнерго»	Тепловая электростанция в Марьинском районе Донецкой области, мощность электростанции составляет 1460 МВт (1 блок мощностью 200 МВт и 6 блоков – 210 МВт). Работает на отходах угольной промышленности.
9	Трасса Донецк – Мариуполь, г. Донецк, автовокзал «Путиловский»	Участки с очень интенсивным автомобильным движением.
10	г. Артемовск, территория железнодорожного вокзала	Станция обслуживает пригородные поезда и поезда дальнего следования.

Экспериментальная часть. Уровень техногенной нагрузки испытуемого участка определяли по содержанию меди и цинка на поверхности хвои методом атомно-эмиссионной спектроскопии с использованием спектрометра СЭВ – 30 (Украина, «СЕЛМИ»). Поверхность хвои исследовали на сканирующем электронном микроскопе JSM 6490 LV (Япония). Водорастворимые цитоплазматические белки после выделения [4] разделяли с помощью колоночной гель-хроматографии на Sephadex G-75 (Pharmacia, Швеция) с соблюдением соответствующих условий [4]. Для определения содержания белка в фракциях использовали модифицированный метод Лоури [5]. Количество SH-групп определяли по образованию метиленовой сини при взаимодействии с N,N-диметиламиноанилином в присутствии железа (III) при длине волны $\lambda = 665$ нм [6].

Результаты исследований. Посредством сканирующей электронной микроскопии на поверхности хвои взятой из экологически неблагоприятных районов были обнаружены скопления инородных тел, которые состоят преимущественно из SiO₂, оксидов железа и цинка, сульфидов свинца и цинка, а также карбонатов кальция и магния. Общий вид поверхности хвои (увеличение 120 раз) и устьиц (увеличение 1000 раз) представлен на рис. 1.

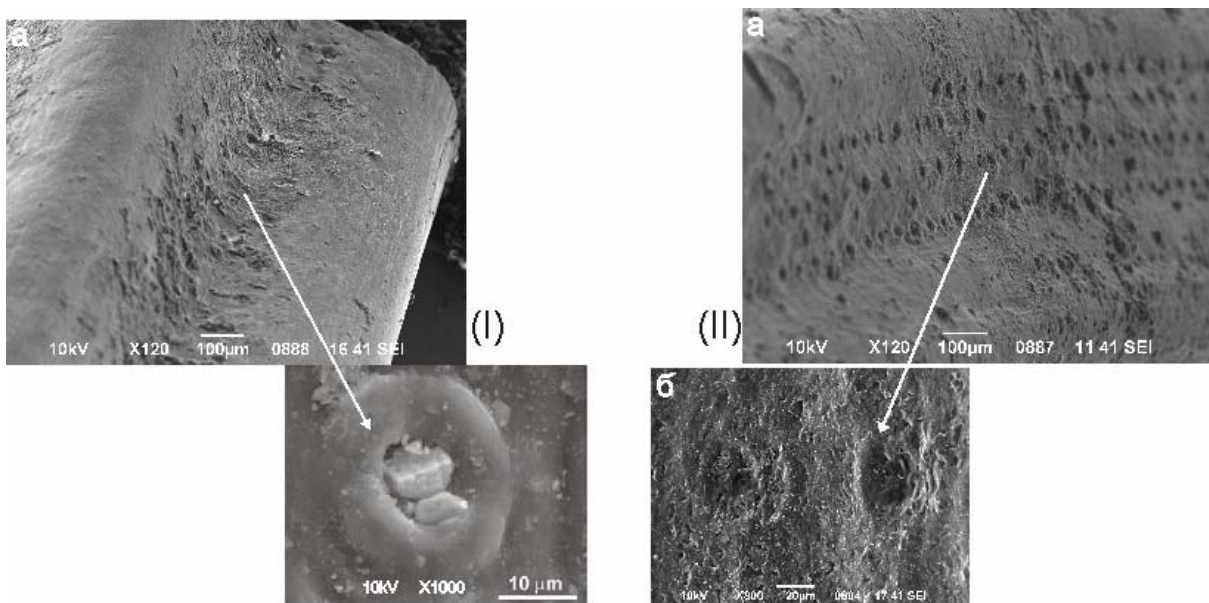


Рис. 1. Микрофотографии поверхности хвои (а) и устьиц (б) Ели обыкновенной (*Picea abies* (L.) Karst.), произрастающей в загрязненной (I) и экологически - чистых (II) зонах.

На поверхности хвои экологически чистых регионов Крыма (г.г. Алушта, Ялта) и Закарпатья (с. Мигово) подобные агломераты отсутствуют. В отдельных объектах хвои годичного прироста имеется засоренность транспирационных ходов.

Для ранжирования исследуемых участков по зонам техногенной нагрузки определяли содержание тяжелых металлов. Валовое содержание меди в диапазонах 1-40 мг/кг соответствовало контрольному

участку, територіально отнесенному к парковым и курортным местам. От 40-230 мг/кг к зоне средней техногенной нагрузки. Более 230 мг/кг определено в городах с высоко развитой промышленностью – промышленным зонам. Участки по содержанию цинка разделились следующим образом: 1-90 мг/кг, 100-160 мг/кг и более 160 мг/кг для контрольной, магистральной и промышленной зон соответственно.

Данные атомно-эмиссионного анализа по меди и цинку наглядно отображены на рис. 2 и рис. 3.

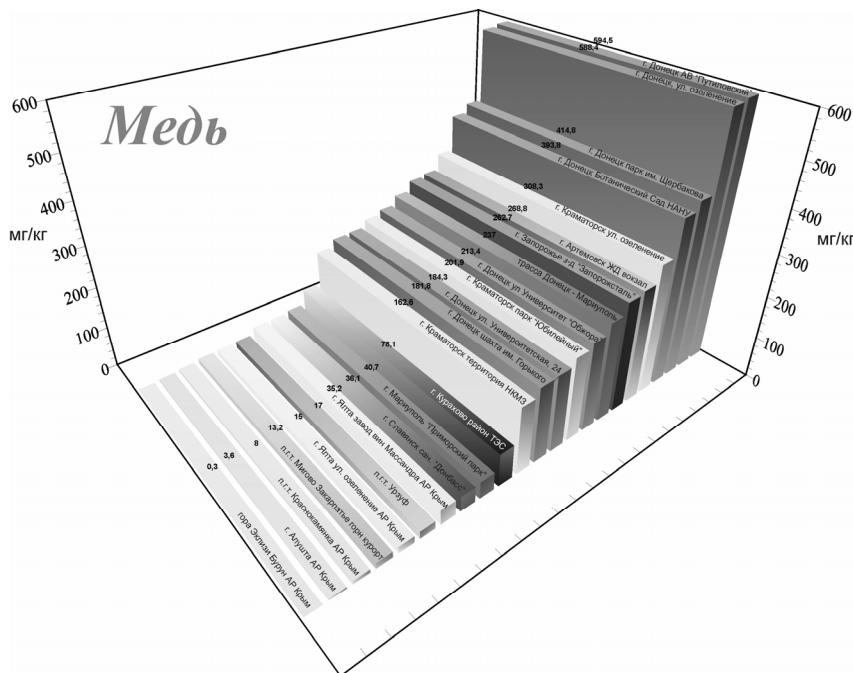


Рис. 2. Содержание меди в хвое Ели обыкновенной (*Picea abies* (L.) Karst.)

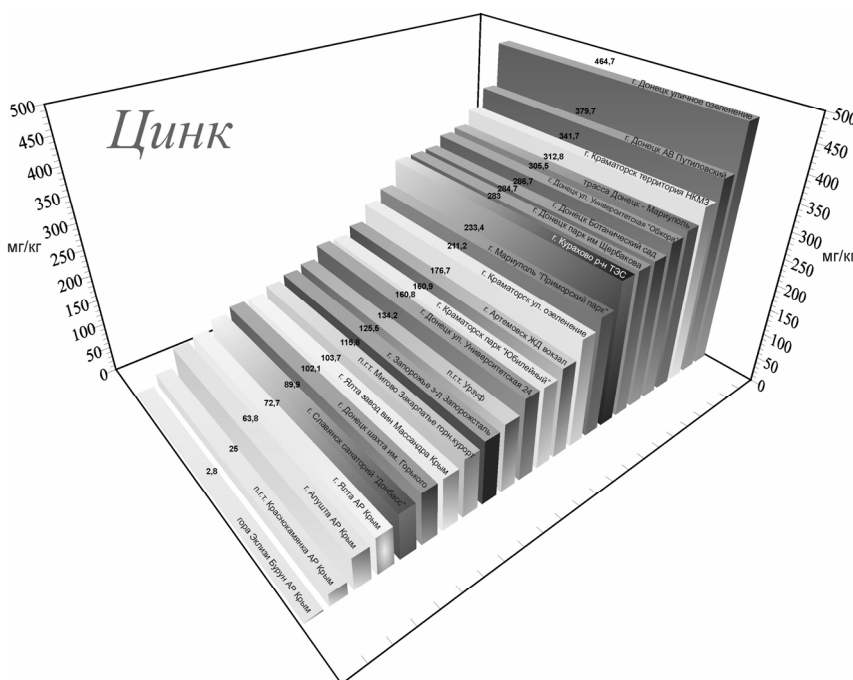


Рис. 3. Содержание цинка в хвое Ели обыкновенной (*Picea abies* (L.) Karst.)

Содержание металлов представлено в порядке увеличения концентраций. В хвое ели, произрастающей на участках Донецкой области, содержание металлов рознится по меди в 3,2, а по цинку – 4,5 раз. Наибольшее количество железа было обнаружено в хвое санитарно - защитной зоны металлургических предприятий г. Мариуполь. Высокие показатели загрязнения свинцом и медью были получены на участках с интенсивным движением автотранспорта.

Наименьшее содержание тяжелых металлов определено в курортных зонах г. Славянска, Закарпатья и АР Крым.

В зависимости от техногенной нагрузки испытываемые участки распределились следующим образом (загрязненность металлами увеличивается в ряду):

Курортные зоны < Краматорск < Артемовск < Донецк.

Деревья, произрастающие на испытываемых участках, сравнивали по морфологическим признакам. Учитывали прирост, длину и количество хвои 1-3 годов роста. Данные отображены в табл. 2.

Таблица 2

Морфологические признаки 1-3 годов прироста

Морфологические признаки	Промышленные зоны	Магистральные зоны	Курортные зоны
Длина побега 1-го года, см	9.7	7.7	7.9
Длина побега 2-го года, см	7.9	4.2	4.9
Длина побега 3-го года	7.3	6.4	5.8
Длина хвои 1-го года, см	2.8	1.9	3.1
Длина хвои 2-го года, см	3.0	2.3	3.5
Длина хвои 3-го года, см	3.2	2.6	4.1
Кол-во хвои на 1 см побега 1-го года, шт.	7.5	10.0	9.3
Кол-во хвои на 1 см побега 2-го года, шт.	6.0	3.0	6.2
Кол-во хвои на 1 см побега 3-го года, шт.	6.3	1.4	4.0

В промышленных зонах, прирост побегов первого года больше предыдущих. Для всех испытываемых участков поверхность хвои увеличивается только на протяжении 1-3 годов роста, в последующие годы рост прекращается. В загрязненных участках длина годовичного прироста больше чем в магистральных и курортных зонах. Можно предположить, что в ответ на необратимую закупорку транспирационных ходов, ель пытается нарастить вегетационную массу за счет увеличения поверхности хвои или ее количества на 1 см². В связи с этим, длина хвои в загрязненных регионах больше, чем в чистых контрольных зонах. При проведении колоночной хроматографии в образцах хвои было получено 8 типов белковых фракции. На рис. 4 показаны фракции цитоплазматического белка, коррелирующие с SH-соединениями.

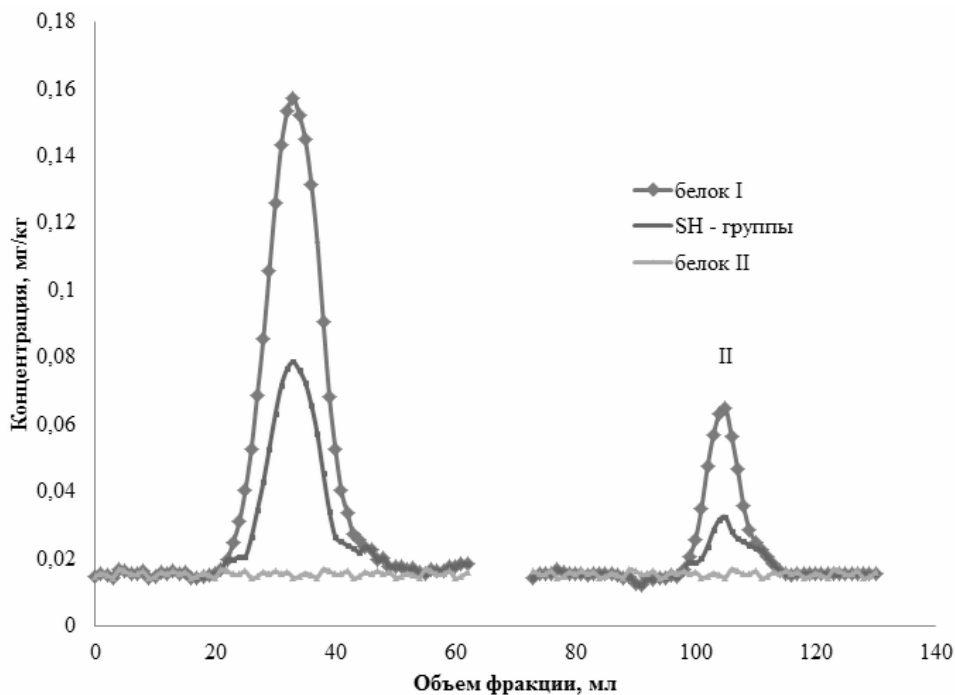


Рис 4. Фрагмент хроматограммы белковых фракций хвои ели, произрастающей в участках с высокой техногенной нагрузкой (I) и в курортных зонах (II).

Во всех фракциях, определяли сумму серусодержащих соединений и содержание белка спектрофотометрическим методом [7]. Оказалось, что у двух типов белка присутствуют SH - соединения. Содержание белка составляло 0,12±0,04 мг/кг в случае первого типа и 0,07±0,02 мг/кг у второго. Как видно из рис. 4, наибольшее содержание белка соответствует объемам 45 мл и 110 мл.

Содержание SH-групп в курортных и промышленных зонах рознится, а общий белок совпадает в пределах погрешности. В хвое деревьев, произрастающих в экологически чистых регионах, обнаружены те же белковые фракции. В них определено низкое содержание суммы серусодержащих соединений.

Используя маркеры низкомолекулярных белков, было определено, что они соответствуют массе в 15 и 85 кДа. Однако, молекулярная масса белков, определенная в ходе эксперимента, отличается от массы металлопротеинов, описанных в литературе [8]. Эти расхождения можно объяснить тем, что хроматография на колонке с сефадексом G-75 позволяет выделить фракции димеров или тетрамеров белков-протеинов.

Выводы. Результаты исследования, касающиеся содержания тяжелых металлов в хвое Ели обыкновенной (*Picea abies* (L.) Karst.) показали, что биосфера индустриального Донбасса сильно загрязнена. Наиболее загрязненным регионом Донецкой области является г. Донецк. Обнаружена корреляция серо-содержащих соединений с некоторыми белковыми фракциями. Белок не соответствует по своим характеристикам металлопротеиновым белкам, найден у хвойных растений произрастающих как в экологически неблагополучных, так и курортных зонах.

РЕЗЮМЕ

Визначено вміст міді і цинку, булку, сірковмісних сполук у хвої Ялини Звичайної (*Picea Abies* (L.) Karst.) в екологічно чистих регіонах України (АР Крим) та в містах з важкою промисловістю (м. Донецьк, Маріуполь, Краматорськ, Запоріжжя, Артемівськ). Показано, що зі збільшенням ступеня забрудненості доквілля сполуками важких металів в хвої Ялини звичайної (*Picea Abies* (L.) Karst.) інтенсифікуються процеси синтезу специфічних білків і сірковмісних сполук.

Ключові слова: металопроїєїни, метод Лоурі, моніторинг, забруднення доквілля, важкі метали, колонкова хроматографія, атомно-емісійна спектроскопія.

SUMMARY

It was detect the content of copper and zinc, protein, sulfur-containing compounds in the needles of Norway spruce (*Picea abies* (L.) Karst.) in the ecologically clean regions of Ukraine (AR Crimea) and in urban areas with intensive industry (Donetsk, Mariupol, Kramatorsk, Zaporozhye, Donetsk). It is shown that with increasing degree of environmental pollution with heavy metals in the needles of Norway spruce (*Picea abies*(L.) Karst.) intensifies the process of making specific proteins and sulfur-containing compounds.

Kewords: Metallothioneins, the method of Lowry, monitoring, pollution, heavy metals, column chromatography, atomic emission spectroscopy.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Эйхорн Г. Неорганическая биохимия / Г. Эйхорн; пер. с англ. М.Е. Вольпина, К.Б. Яцимирского. – М.: Мир, 1978. – 711 с.
2. Derome, J. Effects of heavy metal contamination on macronutrient availability and acidification parameters in forest soil in the vicinity of the Harjavalta Cu–Ni Smelter, SW Finland / J. Derome, A. J. Lindroos // Environ. Pollut. – 1998. – Vol. 99. – P.141-148.
3. Effect of some chemicals on the accuracy of protein estimation by the Lowry method / S. Niamke, L. P. Kouame, J. P. Kouadio et al. // Biokemistri. – 2005. – № 17(2). – P. 73-81.
4. Маниатис Т. Молекулярное клонирование / Т. Маниатис, Э. Фрич, Дж. Сэмбрук; пер. с англ. А. А. Баева, К. Г. Скрябина. – М.: Мир, 1984. – 479 с.
5. Krohn R. I. The Colorimetric Detection and Quantitation of Total Protein / R. I. Krohn // Current Protocols in Food Analytical Chemistry. – 2001. – P. B1.1.1-B1.1.28.
6. Практикум по биохимии / Под ред. С.Е. Северина, Г. А. Соловьевой. – М.: Изд-во МГУ, 1989. – 509 с.
7. Zhou P. Determination of Total Protein Content in Gelatin Solutions with the Lowry or Biuret Assay / P. Zhou, J. M. Regenstein // Journal of Food Science. – 2006. – Vol. 71, № 8. – P. 474-479.
8. Plant metallothioneins / N. J. Robinson, A. M. Tommey, C. Kuske, P. J. Jackson // Biochem J. – 1993. – Vol. 295. – P. 1-10.

Поступила в редакцию 29.03.2010 г.

УДК 628.35

АНАЛИЗ РАБОТЫ АЭРОТЕНКОВ И ПУТИ ПОВЫШЕНИЯ ИХ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

А. П. Созник, С. А. Горносталь

Национальный университет гражданской защиты Украины, г. Харьков

На основе предложенной математической модели на примере Диканевских очистных сооружений г. Харькова рассмотрены возможности улучшения качества биологической очистки сточных вод в аэротенках. Показано, что при реализации системы очистки в виде аэротенк-вытеснитель можно уменьшить концентрацию загрязнений, сбрасываемых в природные водоемы, приблизительно в 20 раз и повысить экологическую безопасность очистных сооружений.

Ключевые слова: аэротенк, биологическая очистка, математическая модель, экологическая безопасность.

Введение. По данным исследований Института географии НАН Украины (г. Киев) и Украинского государственного НИИ ВОДГЕО (г. Харьков) в Харьковской области более 50% сбросов сточных вод в водные объекты составляют сбросы без очистки. Одной из причин таких сбросов является то, что традиционные технологии биологической очистки сточных вод имеют ряд недостатков. Учитывая масштабы сооружений очистки, наиболее перспективным с экономической точки зрения является путь улучшения качества очистки. Поэтому необходимо иметь адекватные математические модели процессов биологической очистки. Это позволит предложить рекомендации по предотвращению чрезвычайных экологических ситуаций, связанных со сбросом в водоемы очищенных вод, с концентрацией загрязнений превышающей предельно допустимые значения, и улучшить состояние окружающей среды и защиты водоемов от загрязнений.

Метод биологической очистки сточных вод широко используется на очистных сооружениях. Процесс очистки осуществляется в аэротенках различного типа: идеального вытеснения, идеального смешивания и промежуточного типа. Работа аэротенков основана на способности микроорганизмов извлекать органические загрязнения из сточных вод в процессе своей жизнедеятельности. Большое разнообразие микроорганизмов в активном иле, которое меняется с течением времени, и существование различных типов их взаимодействия между собой [1] обуславливает многофакторность и существенную сложность описания процессов биологической очистки в аэротенках. С этой целью используют математическое моделирование явлений взаимодействия микроорганизмов активного ила между собой и с субстратом, поступающим со сточными водами. Основным аппаратом всех детерминированных моделей являются системы дифференциальных уравнений первого порядка различной степени сложности. Основные идеи таких уравнений были предложены для описания биологических популяций и обобщены для системы жертва-хищник А.Н. Колмогоровым [2]. Существенным моментом таких теорий является наличие трофической функции, которая описывает функциональный отклик хищника на жертву. При использовании различных модельных представлений для трофической функции возникает проблема устойчивости биологических сообществ [2, 3].

Такой теоретический подход нашел широкое применение [4-7] для моделирования процессов биологической очистки сточных вод активным илом. Созданные на этом пути модели в той или иной степени удовлетворительно описывают явления очистки в идеальных аэротенках [4].

Постановка задачи и ее решение. На комплексе биологической очистки «Диканевский» (КБOD, г. Харьков) очистка сточных вод осуществляется на аэротенках промежуточного типа (рис. 1).

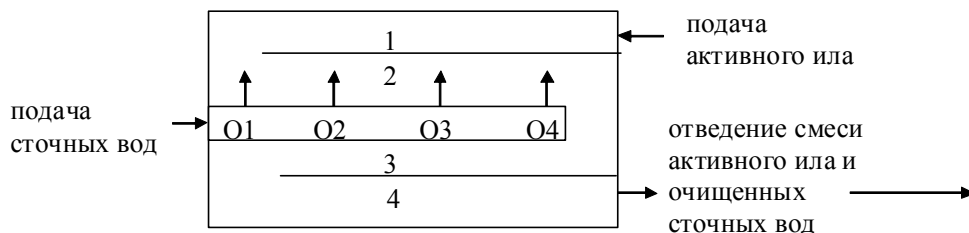


Рис. 1. Схема секции четырехкоридорного аэротенка с расположением окон, через которые подается сточная жидкость в секцию: O1 - первое окно, O2 - второе окно, O3 - третье окно, O4 - четвертое окно; 1 - регенератор (первый коридор), 2 - второй коридор, 3 - третий коридор, 4 - четвертый коридор аэротенка.

Сточные воды подаются рассредоточено по всей длине второго коридора через четыре подающих окна, с возможностью регулирования их подачи с помощью шибберных заслонок, а активный ил подается в первый коридор аэротенка на регенерацию.

В процессе очистки для предотвращения седиментации активного ила и обеспечения микроорганизмов кислородом в достаточном количестве осуществляется интенсивная аэрация по всей длине аэротенка. В 1-м и 2-м коридорах интенсивность аэрации приблизительно в два раза больше, чем в коридорах 3 и 4. Сооружения построены в 70-80-х годах, поэтому в настоящее время при реконструкции отдельных секций возникает вопрос о влиянии расположения и количества точек впуска сточных вод на качество очистки. Чтобы решить этот вопрос необходимо иметь математическую модель, с помощью которой можно описать процессы, происходящие в аэротенках такого типа и изучить влияние отдельных параметров на протекание процесса биологической очистки.

С учетом конструктивных особенностей рассматриваемого аэротенка и различия явлений, происходящих в разных его коридорах, нами для описания процессов очистки для сооружений КБОД предложена физическая модель [8]. Согласно модели [8] весь процесс биологической очистки можно разделить на три фазы. Первая фаза соответствует первому коридору аэротенка – регенератору. Вторая фаза соответствует впуску сточных вод (второй коридор). При расчетах второй фазы учитывалось, что кроме подачи активного ила и его интенсивной аэрации, происходит подача сточных вод рассредоточено по длине коридора в четырех точках. Объем подаваемых сточных вод больше объема активного ила, поэтому происходит изменение концентрации хлопьев и дисперсных бактерий активного ила и сточных вод в местах их ввода за счет взаимного разбавления. Третья фаза соответствует третьему и четвертому коридорам аэротенка. Исходя из физической модели [8] нами предпринята попытка [9] математического описания очистки в таком реальном аэротенке исходя из уравнений типа Моно-Герберта с учетом аэрации [4] и автолиза [6]. Кроме того, в отличие от моделей [4], было учтено, что при регенерации происходит частичное разрушение хлопьев ила и образование дисперсных бактерий. Образование дисперсных бактерий в 1-й фазе является существенным отличительным моментом модели [8], так как такие микроорганизмы окисляют органическое вещество более интенсивно, чем хлопья. Было показано [9], что модели, предназначенные для описания явлений в идеальных аэротенках и обобщенные для реальных аэротенков, приводят к неудовлетворительным результатам. В частности, на выходе из аэротенка активный ил состоит в основном из дисперсных бактерий, которые не способны к седиментации во вторичном отстойнике.

Поэтому, исходя из идей, изложенных в [3], нами была предложена математическая модель в виде следующей системы уравнений:

$$\frac{dX}{dt} = (-a_x + b_x L)X + k_2 GXZ - k_1 G^m X + k_4 SX \quad (1)$$

$$\frac{dZ}{dt} = (-a_z + b_z L)Z - k_2 GXZ + k_1 G^m X + k_4 SZ \quad (2)$$

$$\frac{dL}{dt} = -(g_x X + g_z Z)L \quad (3)$$

$$\frac{dS}{dt} = (k_3 - k_4 S)(X + Z), \quad (4)$$

где X , Z , S , L – концентрации, соответственно, хлопьев, дисперсных бактерий, продуктов автолиза и загрязнений; k_1 – скорость эрозии хлопьев, k_2 – константа скорости агрегации; k_3 и k_4 – константы, характеризующие скорость образования и скорость окисления продуктов автолиза соответственно, G – градиент скорости в турбулентном потоке; m – константа, a_x , a_z – скорости отмирания хлопьев и дисперсных бактерий; b_x , b_z – константы, характеризующие скорости образования хлопьев и дисперсных бактерий за счет размножения, g_x , g_z – скорости потребления субстрата хлопьями и дисперсными бактериями.

Система уравнений (1)-(4) использовалась для описания явлений во всех трех фазах. При этом для каждой фазы система (1)-(4) решалась отдельно, а фаза 2 с учетом распределенной подачи сточных вод разбивалась дополнительно на четыре подфазы. Значения, полученные в результате численного решения системы уравнений для каждой фазы, являются начальными условиями для последующей фазы биологической очистки. В уравнениях (1) и (2) первые слагаемые соответствуют модели [3] для двух хищников, которые потребляют одинаковую пищу. Второе слагаемое в (1) описывает увеличение концентрации хлопьев за счет процесса агрегации дисперсных бактерий в хлопья, а третье слагаемое учитывает убывание хлопьев за счет эрозии, следствием чего является образование дисперсных бактерий. В уравнении (2)

второе слагаемое описывает уменьшение концентрации дисперсных бактерий за счет процесса агрегации, а третье слагаемое учитывает увеличение концентрации дисперсных бактерий за счет эрозии хлопьев [4]. Четвертое слагаемое в уравнениях (1)-(2) учитывает прирост хлопьев и дисперсных бактерий за счет потребления продуктов автолиза. Уравнение (3) описывает изменение концентрации загрязнений в зависимости от скоростей потребления субстрата хлопьями и дисперсными бактериями. Уравнение (4), предложенное в [6], описывает изменение концентрации продуктов автолиза.

Отметим, что уравнения (1)-(3) имеют принципиальные отличия от рассмотренных в [3]. Прежде всего, в связи с конечной длиной 4-х коридоров аэротенка время взаимодействия ограничено и поэтому не возникает проблем устойчивости [2, 3]. Во-вторых, в (1) и (2) присутствуют слагаемые (2-е и 3-е), которые описывают влияние внешних факторов (аэрация) на среду обитания. Поэтому хищники X и Z , имея разные скорости размножения и отмирания, испытывают взаимопревращения, обусловленные фактором аэрации. Кроме того, в каждой фазе, с учетом разбиения 2-й фазы на четыре подфазы, осуществляются свои различные начальные условия.

Используя уравнения (1)-(4), нами были проведены расчеты при условиях, которые соответствуют работе сооружений на КБОД. Расход активного ила, подаваемого в регенератор, $q_u = 25,2$ м³/мин, доза ила $a_u = 6$ г/л, а концентрация остаточных загрязнений на входе в регенератор $L_i = 0,015$ г/л. Предполагаем также, что концентрации дисперсных бактерий $Z_{ex} \approx 0$, продуктов автолиза - $S_{ex} \approx 0,03$ г/л. С учетом разной интенсивности подачи воздуха в фазах 1, 2 и фазе 3 нами были приняты соответствующие значения параметров $G_{1-2} = 1,6 \cdot 10^4$ мин⁻¹ и $G_3 = 2 \cdot 10^3$ мин⁻¹ [4]. На действующих сооружениях КБОД г. Харькова очистка сточных вод происходит при их впуске через четыре подающих окна, расположенных равномерно по длине коридора, концентрация загрязнений в сточных водах равна $L_{св} \approx 0,15$ г/л, а интенсивность подачи сточных вод составляет $q_{св} \approx 45$ м³/мин.

В [9] было показано, что предложенная модель дает удовлетворительные значения для концентраций ила и субстрата на выходе из аэротенка, которые согласуются с контролируруемыми величинами. Поэтому уравнения (1)-(4) использованы нами для проведения анализа качества очистки сточных вод в различных условиях. В частности, нами исследовано влияние интенсивности подачи сточных вод с разными концентрациями загрязнений на качество очистки с учетом возможностей комбинирования открытия окон 1-4. Результаты расчетов концентраций загрязнений и хлопьев на выходе из аэротенка при параметрах $m = 2$, $k_1 = 5 \cdot 10^{-10}$ мин, $k_2 = 2,4 \cdot 10^{-5}$ л/г, взятых из [4], представлены на рис. 2, 3.

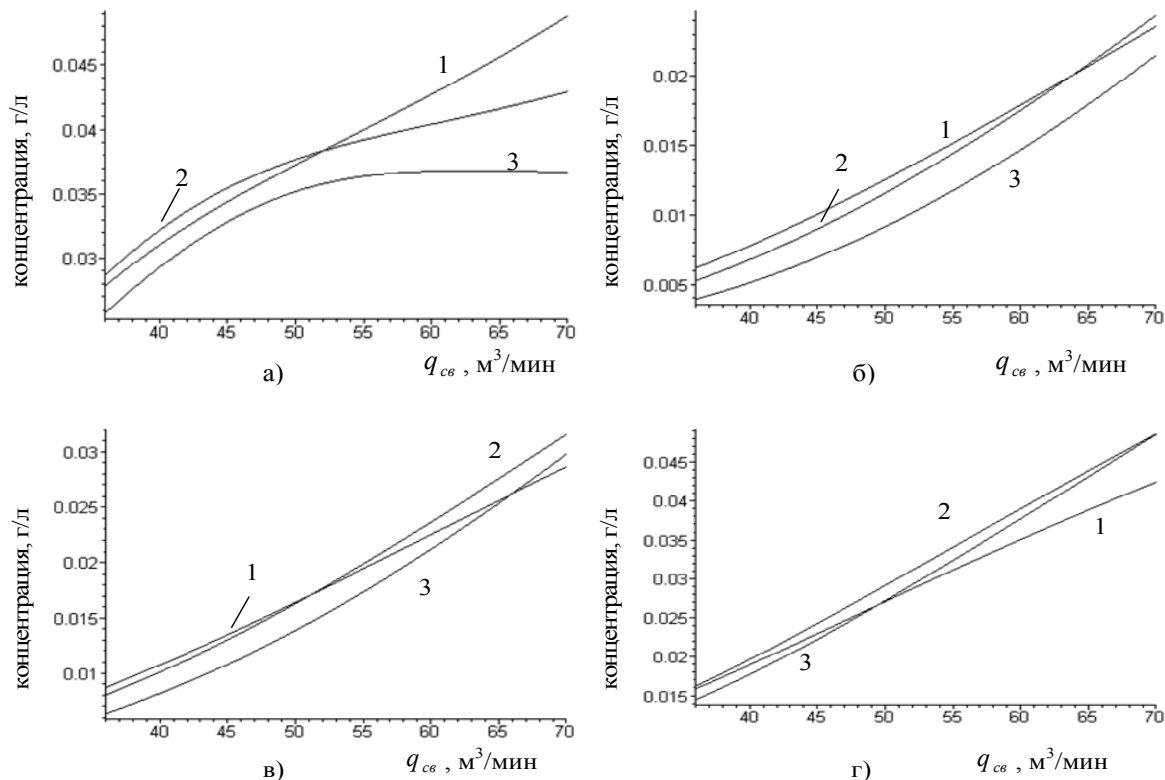


Рис. 2. Зависимость концентрации загрязнений на выходе из аэротенка от расхода сточных вод при подаче: а) через четыре окна, б) через первое окно, в) через второе окно, г) через первое и четвертое окна; концентрация загрязнений в стоках, поступающих на очистку: 1 – 0,1 г/л, 2 – 0,15 г/л, 3 – 0,2 г/л.

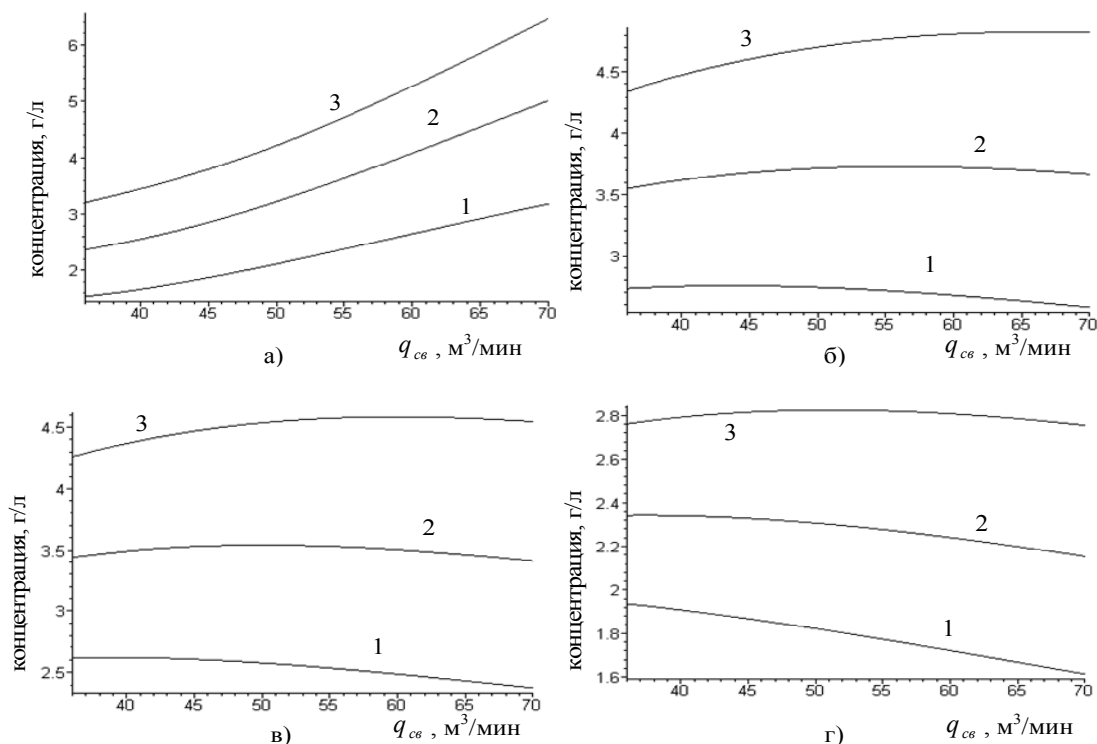


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для концентрации хлопьев

При $L_{св} \approx 0,15$ г/л для варианта подачи сточных вод через четыре окна получаем следующие значения концентраций на выходе из аэротенка: $L_{вых} = 0,035$ г/л, $X_{вых} = 2,8$ г/л. При впуске сточных вод только через первое окно при таких параметрах работы получаем значения: $L_{вых} = 0,009$ г/л, $X_{вых} = 3,65$ г/л. При впуске через второе окно получаем: $L_{вых} = 0,012$ г/л, $X_{вых} = 3,41$ г/л. При впуске через первое и четвертое окна значения $L_{вых} = 0,024$ г/л, $X_{вых} = 2,6$ г/л. Видим, что наименьшее значение концентрации загрязнений в сточных водах получаем для варианта «подача сточных вод через первое окно», наибольшую концентрацию загрязнений – для варианта «подача через четыре окна». Концентрация дисперсных бактерий практически не зависит от количества и места подачи сточных вод. Концентрация хлопьев на выходе из аэротенка принимает максимальное значение для варианта «подача сточных вод через первое окно» и «подача сточных вод через второе окно» и минимальное значение для варианта «подача сточных вод через первое и четвертое окна» и через четыре окна.

При значениях концентраций загрязнений в поступающих сточных водах $L_{св} = 0,1$ г/л и той же интенсивности подачи сточных вод, что и в предыдущем варианте, при впуске через четыре окна получаем значения концентраций: $L_{вых} = 0,034$ г/л, $X_{вых} = 1,8$ г/л. При подаче сточных вод только через первое окно при таких параметрах работы получаем такие значения: $L_{вых} = 0,01$ г/л, $X_{вых} = 2,7$ г/л. При впуске через второе окно получаем: $L_{вых} = 0,012$ г/л, $X_{вых} = 2,6$ г/л. При впуске через первое и четвертое окна значения $L_{вых} = 0,0225$ г/л, $X_{вых} = 1,85$ г/л.

Анализируя полученные результаты, видим, что наименьшее значение концентрации загрязнений в сточных водах получаем для варианта «подача сточных вод через первое окно» и «подача сточных вод через второе окно», наибольшую концентрацию загрязнений – для варианта «подача через четыре окна». Концентрация хлопьев на выходе из аэротенка принимает максимальное значение для варианта «подача сточных вод через первое окно» и варианта «подача сточных вод через второе окно», минимальное значение - для варианта «подача сточных вод через четыре окна» и для варианта «подача сточных вод через первое и четвертое окна».

При концентрации загрязнений в поступающих сточных водах $L_{св} = 0,2$ г/л с той же интенсивностью подачи сточных вод при впуске через четыре окна получены следующие значения концентраций: $L_{вых} = 0,032$ г/л, $X_{вых} = 3,8$ г/л. При впуске сточных вод только через первое окно при таких параметрах работы получаем значения: $L_{вых} = 0,007$ г/л, $X_{вых} = 4,6$ г/л. При впуске через второе окно получаем: $L_{вых} = 0,011$ г/л, $X_{вых} = 4,25$ г/л. При впуске через первое и четвертое окна значения

$L_{\text{вих}} = 0,02$ г/л, $X_{\text{вих}} = 3,3$ г/л. Наименьшее значение концентрации загрязнений в сточных водах получаем для варианта «подача сточных вод через первое окно», наибольшую концентрацию загрязнений – для варианта «подача через четыре окна». Концентрация хлопьев на выходе из аэротенка принимает максимальное значение для варианта «подача сточных вод через первое окно» и варианта «подача сточных вод через второе окно», минимальное значение - для варианта «подача сточных вод через четыре окна» и для варианта «подача сточных вод через первое и четвертое окна».

При увеличении интенсивности подачи сточных вод до $q_{\text{св}} \approx 70$ м³/мин при различных значениях концентраций загрязнений в сточных водах наименьшие значения концентрации загрязнений на выходе получены для варианта подачи сточных вод через первое окно.

Зависимости изменения концентраций хлопьев и остаточных загрязнений на выходе из аэротенка от концентрации субстрата на входе и интенсивности подачи сточных вод показаны на рис.4.

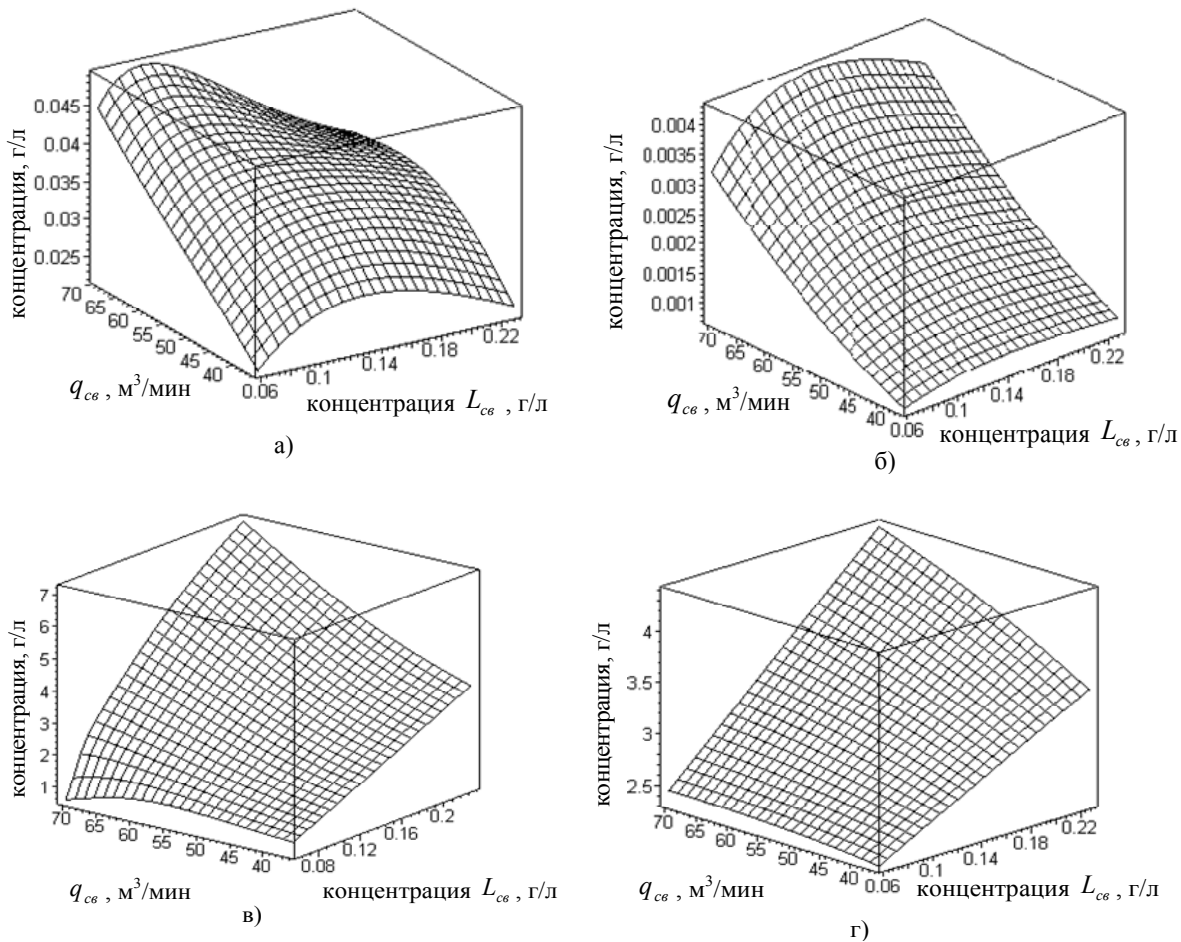


Рис. 4. Зависимость концентрации загрязнений (а)-(б) и концентрации хлопьев (в)-(г) на выходе из аэротенка от расхода сточных вод при подаче соответственно: а), в) через первое окно, б), г) через четыре окна

Из рис.4 видно, что при $L_{\text{вх}} \approx 0,15$ г/л и подаче через четыре окна концентрация загрязнений на выходе является наибольшей при любой интенсивности подачи сточных вод. При увеличении или уменьшении $L_{\text{вх}}$ эта концентрация уменьшается. Следовательно, при подаче сточных вод через четыре окна повысить степень очистки возможно уменьшением концентрации $L_{\text{вх}}$ путем разбавления подаваемых стоков (например, надфиловой водой из илоуплотнителей). Увеличение $L_{\text{вх}}$ достигается подачей избыточного ила в первичный отстойник. Кроме того, на рис. 4 видно, что при подаче сточных вод через первое окно, концентрация загрязнений на выходе из аэротенка при тех же начальных условиях приблизительно в 20 раз меньше. Таким образом, проведенные нами расчеты показывают, что применение аэротенков типа вытеснитель дает более стабильный и качественный результат при очистке сточных вод по БПК_{полн} по сравнению с конструкцией «аэротенк промежуточного типа».

Выводы. Анализируя полученные результаты, видим, что варианты «подача сточных вод через первое окно» и «подача сточных вод через второе окно» (случаи сосредоточенного впуска сточных вод «аэротенк-вытеснитель») показывают достаточно хорошие результаты в широком диапазоне изменения концентрации загрязнений в поступающих стоках и интенсивности подачи сточных вод.

Вариант подачи сточных вод через четыре окна характеризуется стабильностью результатов качества очистки, которые слабо зависят от концентрации загрязнений в сточных водах, поступающих на очистку, и от интенсивности подачи сточных вод. При этом вариант с подачей сточных вод через первое окно дает более высокую степень очистки, а концентрация хлопьев при высоких нагрузках на ил принимает меньшие значения, что будет существенно влиять на дальнейшие процессы уплотнения активного ила и снизит проблемы с утилизацией его избытка. При таком варианте подачи сточных вод существенно повышается экологическая безопасность очистных сооружений и улучшается экологическое состояние водоемов, в которые сбрасываются сточные воды после очистки.

РЕЗЮМЕ

На основі запропонованої математичної моделі на прикладі Диканівських очисних споруд м. Харкова розглянуті можливості покращення якості біологічного очищення стічних вод в аеротенках. Показано, що при реалізації системи очищення у вигляді аеротенк-вітиснювач можна зменшити концентрацію забруднень, що скидаються в природні водоймища, приблизно в 20 разів і підвищити екологічну безпеку очисних споруд.

Ключові слова: аеротенк, біологічне очищення, математична модель, екологічна безпека.

SUMMARY

Based on the proposed mathematical model on the example of Dikanevskykh cleansing buildings of Kharkov the possibilities for the improvement the quality of biological purification of wastewater in aerotank considered. It is shown that during realization of the cleaning system in a kind continuous-flow aeration tank it is possible to decrease concentration of the contaminations thrown down in natural reservoirs, approximately in 20 times and to increase the ecological safety of cleansing buildings.

Keywords: aerotank, biological cleaning, mathematical model, ecological safety.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Жмур Н.С. Технологические и биохимические процессы очистки сточных вод на сооружениях с аэротенками / Н.С. Жмур. – М. Акварос, 2003. – 512 с.
2. Свиричев Ю. М. Устойчивость биологических сообществ / Ю. М. Свиричев, Д. О. Логофет. – М.: Наука, 1978. – 352 с.
3. Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование / В. Вольтерра. – М.: Наука, 1976. – 288 с.
4. Вавилин В. А. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом / В. А. Вавилин, В. Б. Васильев. – М.: Наука, 1979. – 119 с.
5. Кафаров В. В. Математическое моделирование биохимических реакторов / В. В. Кафаров, А. С. Винаров, Л. С. Гордеев. – М.: Лесная промышленность. – 1979. – 343 с.
6. Олійник О. Я. Особливості моделювання очистки стічних вод у системі аеротенк-відстійник-регенератор / О. Я. Олійник, С. М. Зябліков // Проблеми водопостач., водовідвед. та гідравліки. – 2005 – Вип. 4. – С. 46-53.
7. Святенко А. І. Важливість врахування особливостей біологічного очищення в аеротенках для поліпшення показників їх роботи. / А. І. Святенко, Л. М. Корнійко // Екологічна безпека. – 2009. – № 4. – С.93-96.
8. Горносталь С. А. Описание процессов, происходящих в системе аэротенк – вторичный отстойник, и их физическое моделирование / С. А. Горносталь, А. П. Созник // Технічні науки та архітектура. – 2008.– Вип.81. – С. 133-139.
9. Горносталь С. А. Моделирование процессов биологической очистки в идеальных и реальных аэротенках / С. А. Горносталь, Е. А. Петухова, А. П. Созник // Проблеми надзв. ситуацій. – 2009. – Вип.10. – С. 67-77.

Поступила в редакцію 20.05.2010 г.

УДК 004.932/510.22

НЕЧЁТКИЙ МЕТОД СИНТЕЗА ШТРИХОВАННОГО РИСУНКА ПО ЦИФРОВОЙ ФОТОГРАФИИ

А. В. Григорьев

В публикации предложены две модификации метода (чёткая и нечёткая) формирования штрихованного рисунка по цветной фотографии. Суть метода состоит в разбиении изображения на сегменты и заполнении каждого сегмента некоторым видом штриховки. Нечёткая модификация отличается от чёткой мягкими процедурами сегментации и заполнения областей штриховками, и позволяет получить более естественный штрихованный рисунок.

Ключевые слова: нечёткая обработка изображений, художественные эффекты, штрихованный рисунок.

Введение. Одним из наиболее актуальных приложений методов цифровой обработки изображений в настоящий момент является художественная обработка цифровых фотографий или видео. Особое место среди используемых в данном виде обработки эффектов занимают преобразования, позволяющие создавать иллюзию того, что обработанное изображение получено некоторым способом, отличным от использованного в действительности. К их числу можно отнести эффекты, описанные в [1, 2], и создающие впечатление того, что исходное изображение нанесено акварельными красками (акварелирование) или получено выдавливанием на некоторой поверхности (тиснение).

К описанной категории художественных эффектов относится и преобразование, созданию которого посвящена данная статья. Разрабатываемый художественный эффект должен изменять «реальную» цифровую фотографию таким образом, чтобы создавалось впечатление, что её содержимое нанесено простым карандашом или углем при помощи техники штриховки. Данная задача может найти своё применение в таких приложениях, как веб-дизайн, художественное оформление фотоматериалов, при создании мультфильмов и кинематографических спецэффектов, а также в игровой индустрии. В настоящий момент создание эффекта рисунка, нанесенного карандашом, в частности, в такой системе, как AKVIS Sketch [3], и ряде фильтров системы Photoshop, используется выделение границ цифровыми фильтрами Собеля, Превита или Лапласа.

В данной работе предложен метод синтеза рисованного изображения по цифровой фотографии, который, в отличие от существующих, не использует выделение границ, а основан на подходе, объединяющем методы цифровой обработки изображений и теорию нечётких множеств [4, 5]. Описание метода разбито на два этапа. На первом этапе описывается «чёткая» модификация предлагаемого метода, позволяющая продемонстрировать сам принцип построения штрихованных изображений. На втором этапе анализируются недостатки предложенного «чёткого» метода, обусловленные использованием обычных множеств, предлагается устранение выявленных недостатков путём перехода к нечёткой модификации метода.

Чёткий метод построения штрихованных изображений. Основная идея предлагаемого метода заключается в разбиении исходного изображения на однородные по некоторому признаку (или группе признаков) области, каждая из которых будет заполнена соответствующей штриховкой. Заполнение производится заменой выделенных областей фрагментами заранее подготовленных изображений, соответствующих выбранной штриховке. Выделенные области (сегменты), при этом, играют роль маски, задающей пиксели исходного изображения, которые должны быть заменены соответствующей штриховкой. Формально чёткую модификацию предлагаемого метода можно представить следующим образом.

На пиксельной плоскости $P = \{(i, j) \mid i \in \{1, 2, \dots, N\}, j \in \{1, 2, \dots, M\}\}$ задано исходное изображение $f: P \rightarrow [0, 1]$, а также семейство заранее подготовленных изображений-штриховок $g_k: P \rightarrow [0, 1]$, $k \in \{1, 2, \dots, K\}$. Все исходные изображения заданы функциями, принимающими значения от 0 до 1. Отметим, что для удобства последующих вычислений для представления яркости в отдельных точках пиксельной плоскости нами взята не традиционно используемая функция яркости, а её инверсия (назовём её «функцией нажима», поскольку она моделирует силу нажатия на грифель карандаша). Таким образом, в использованном нами представлении яркости отдельных пикселей 1 означает чёрный цвет, а 0 – белый.

На первом этапе обработки при помощи классификаторов F_k , $k \in \{1, 2, \dots, K\}$, каждый из которых преобразует исходное изображение $f: P \rightarrow [0, 1]$ в бинарное изображение $f_k: P \rightarrow \{0, 1\}$:

$$f_k = F_k(f), \quad \forall k \in \{1, 2, \dots, K\}. \quad (1)$$

Как было сказано ранее, семейство полученных изображений f_k задаёт разбиение пиксельной плоскости в том смысле, что набор множеств $A_k = \{x \mid f_k(x) = 1\}$, задающих чёрные пиксели соответствующих бинарных изображений f_k , удовлетворяют следующим условиям:

$$A_i \cap A_j = \emptyset, \forall i, j \in \{1, 2, \dots, K\} : i \neq j; \quad (2)$$

$$\bigcup_{k=1}^K A_k = P. \quad (3)$$

Каждое из множеств A_k представляет собой набор точек пиксельной плоскости, заполненных в обработанном изображении штриховкой g_k . Заполнение выполняется заданием на всех точках $x = (i, j) \in A_k$ обработанного изображения функции нажима $g[i, j] = g_k[i, j]$.

Поскольку набор множеств A_k составляет разбиение пиксельной плоскости, предложенная процедура штриховки позволяет однозначно задать значение функции нажима в каждом пикселе обработанного изображения. При этом несложно заметить, что функции нажима f_k являются характеристическими функциями множеств A_k . Таким образом, функция нажима g итогового штрихованного изображения может быть представлена выражением:

$$g[i, j] = \sum_{k=1}^K f_k[i, j] \cdot g_k[i, j]. \quad (4)$$

Пример применения чёткого метода синтеза штрихованных изображений продемонстрирован на рис. 1. В целом, полученное изображение неплохо передаёт при помощи штриховки образ куба, изображённый на исходном изображении. Выбранные виды штриховки обеспечивают ощущение контраста соседних граней куба.

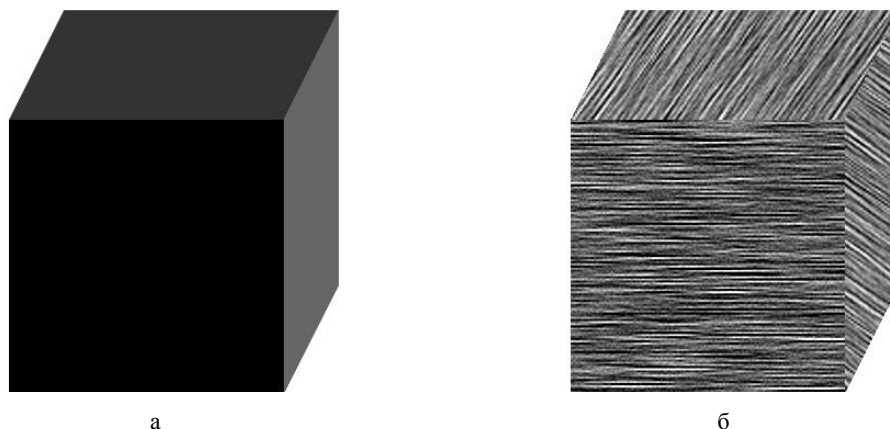


Рис. 1. Демонстрация «чёткого» синтеза штрихованного изображения
а) – исходное изображение; б) – обработанное

Однако при оценке полученного результата следует учитывать, что мы имеем дело не с реальной фотографией, а с образом идеальной геометрической фигуры, сформированным при помощи графического редактора с использованием достаточно узкого набора цветов.

При использовании же описанного метода к реальным изображениям (рис. 2) не создаёт впечатления реального штрихованного рисунка, а результат обработки скорее походит на псевдотонирование полноцветного изображения. Можно выделить следующие причины «не реалистичности» штрихованных изображений, сформированных «чётким» методом при обработке полноцветных фотоизображений.

Описанный метод предполагает разбиение изображения на ряд непересекающихся областей с последующим нанесением соответствующей штриховки на каждую из них. При этом невозможно передать плавный перепад яркости от одной области изображения к другой. В зависимости от того, попадают ли пиксели данных областей в один и тот же или в разные подмножества разбиения, возможно два случая. В первом случае за счёт того, что будет использовано несколько контрастирующих друг с другом штриховок, теряется плавность перепада яркости (плавный переход просто подменяется резким). Во втором случае вообще не будет перехода (обе области и переход между ними будут заполнены одной и той же штриховкой).

Также во многих случаях невозможно передать резкий перепад между близкими по яркости областями изображения, попадающими при разбиении в одно и то же подмножество (при штриховке такие области просто сольются).

Кроме того, отметим, что использование для заполнения отдельных областей одного вида штриховки делает изображение менее реалистичным, поскольку на практике художники используют комбинации из нескольких штриховок, ориентированных под различными углами.



Рис. 2. Применение «чёткого» синтеза штрихованного изображения к реальному фотоизображению
а) – исходное изображение; б) – обработанное

Нечёткий метод построения штрихованного изображения. Выявленные недостатки могут быть преодолены переходом к нечёткой модификации предложенного метода. Для этого воспользуемся стандартным для данной ситуации приёмом [6], суть которого состоит в расширении понятия характеристической функции обычного множества до функции принадлежности нечёткого множества.

В представленном выше «четком» методе было расширено понятие разбиения пиксельной плоскости на ряд обычных подмножеств, каждое из которых задавало область изображения, заполняемую в синтезированном изображении определённым видом штриховки. В нечёткой модификации данные множества A_k были заменены нечёткими множествами A_k . Функция принадлежности $\mu_{A_k}(i, j)$, заданная на элементе (пикселе) $(i, j) \in P$, выражает субъективную уверенность в том, что выбранный элемент множества (пиксель изображения) должен быть заполнен штриховкой g_k .

Использование нечётких множеств позволяет, с одной стороны, при нанесении штриховки варьировать степень нажима в зависимости от функции принадлежности (максимальное значение функции принадлежности соответствует максимальной степени нажима, минимальное – минимальной). С другой стороны, использование нечёткого подхода позволяет сделать «плавным» переход от одной штриховки к другой с изменением яркости пикселей исходного изображения. Так, при «чётком» подходе в области значений яркости, соответствующей переходу от одной штриховки к другой, до некоторого порогового значения чётко используется одна штриховка, после порогового значения – чётко другая. При нечётком подходе – на всей области перехода используется обе штриховки, меняется лишь их степень нажима. Здесь в «пороговой» точке применяются обе штриховки с равной степенью нажима, а при удалении от неё – наблюдаем ослабление нажима для одной из двух штриховок, и усиление – для другой. Таким образом, в нечётком случае, в результате сегментации получим набор областей, представленных нечёткими множествами $S = \langle A_1, \dots, A_K \rangle$ и заполняемых различными штриховками.

Строго говоря, набор S нечётких подмножеств не является разбиением P , поскольку пересечение «соседних» множеств в общем случае не пусто, и объединение всех множеств не даёт P . В связи с этим, необходимо дать альтернативное определение разбиения, позволяющее обобщить его на случай разбиения множества нечёткими подмножествами. Введенное в данной публикации нечёткое разбиение названо *нечётким γ -разбиением*. При определении данного объекта использовались следующие соображения. С одной стороны, γ -разбиение должно быть обобщением обычного разбиения, т.е. в случае использования в качестве нечётких множеств в γ -разбиении только обычных множеств (как частного случая нечётких), описанный объект должен являться обычным разбиением. С другой стороны, при использовании обобщения выражения (4) должна получаться «мягкая» зарисовка каждого пикселя изображения,

при этом, полученное преобразование должно быть замкнутым относительно используемого диапазона функции нажима, и повсеместным – т.е. применяться ко всей пиксельной плоскости P .

Как видно из выражения (4), значение функции нажима в обработанном изображении представляет собой линейную комбинацию значений функций нажима эталонов-штриховок в этой же точке. В качестве коэффициентов выбираются значения характеристических функций множеств A_k на элементе, соответствующем обрабатываемому пикселю. При переходе к нечёткому виду, характеристические функции расширены до функций принадлежности. Для того, чтобы полученное значение нажима для каждого пикселя изображения осталось в исходном диапазоне значений, необходимо, чтобы сумма коэффициентов линейной комбинации (функций принадлежности из γ -разбиения) равнялась единице.

Отметим, что при равенстве единице суммы функций принадлежности множеств γ -разбиения на всей пиксельной плоскости (на всех элементах универсального множества) будет выполнено и первое условие. В случае использования в разбиении только обычных множеств, очевидно, для каждого пикселя плоскости P , с одной стороны, обязательно будет существовать такое множество разбиения, которое этот пиксель включает в себя. С другой стороны – такое множество будет единственным, поскольку в противном случае сумма характеристических функций множеств, включающих в себя заданный пиксель, будет больше единицы.

Таким образом, определение γ -разбиения можно представить в следующем виде.

Определение 1. Нечётким γ -разбиением обычного множества P называется набор $S = \langle A_1, \dots, A_K \rangle$ нечётких подмножеств P , для которого выполнено:

$$\sum_{k=1}^K \mu_{A_k}(i, j) = 1, \forall (i, j) \in P.$$

Тогда выражение (4) можно переписать в виде:

$$g[i, j] = \sum_{i=1}^K \mu_{A_i}(i, j) \cdot g_k[i, j] = 1, \tag{5}$$

а процедура формирования штрихованного изображения по цифровой фотографии выглядит так:

1. Переход от цветного изображения к функции нажима. Для этого используется негатив канала Y исходного цветного изображения, представленного в цветовой схеме YCrCb.

2. Получение нечёткого γ -разбиения $S = \langle A_1, \dots, A_K \rangle$ пиксельной плоскости P (нечеткая сегментация). При проведении экспериментов, результаты которых представлены на рис. 3 на этой стадии использована цветовая сегментация (в нечёткой интерпретации – фаззификация функции нажима по каждому пикселю изображения). Для фаззификации использовались функции треугольного вида, подчиняющиеся в совокупности определению γ -разбиения. В общем случае на данном этапе может быть использована более сложная процедура, включающая также текстурную сегментацию, сегментацию с учётом связности выделяемых областей и анализ контекста.

3. К полученному γ -разбиению и заранее подготовленным эталонам-штриховкам применено выражение (5).

4. Полученная на этапе 3 функция нажима переводится при помощи преобразования негатива к функции яркости серого изображения.

Результаты применения нечёткого метода представлены на рис. 3. Как видно из рисунка, изображения, обработанные нечётким методом, имеют более естественный вид и визуально более похожи на изображения, нарисованные простым карандашом методом нанесения штриховки.



а



б



в



г

Рис. 3. Результат применения нечёткого метода формирования штрихованного изображения
а), в) – исходные изображения; б), г) – результаты обработки

Выводы. В публикации предложен метод построения штрихованного изображения на основе цифровой фотографии, а также его нечёткая модификация. Обосновано и практически установлено, что нечёткая модификация позволяет получать более естественные штрихованные изображения. Дальнейшие исследования в данной области могут быть связаны с совершенствованием построения нечёткого разбиения исходного изображения за счёт добавления новых признаков – таких как анализ ориентации областей, полученных при сегментации, и текстурного анализа, а также добавления поддержки различных видов штриховки для различных видов текстур, например, барашковой штриховки для обозначения воды или неба.

РЕЗЮМЕ

В публікації запропоновані дві модифікації методу (чітка і нечітка) формування штрихованого малюнка за кольоровою фотографією. Суть методу полягає у розбитті зображення на сегменти і заповнення кожного сегмента деяким видом штрихування. Нечітка модифікація відрізняється від чіткої м'якими процедурами сегментації та заповнення областей штриховками, й дозволяє отримати більш природній штрихований малюнок.

Ключові слова: нечітка обробка зображень, художні ефекти, штрихований рисунок.

SUMMARY

In the publication two modifications of the approved method (crisp and fuzzy) of digital photo to a hatched picture transform offered. Approved method consists of segmenting a source image with followed filling of every segment by some hatch pattern. Fuzzy modification differs from crisp by use of soft segmentation and filling procedures, and allows getting more natural hatched picture.

Keywords: fuzzy images processing, artistic effects, hatchet images.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Гонсалес Р. Цифровая обработка изображений / Р. Гонсалес, Р. Вудс. – М.: Техносфера, 2005. – 1072 с.
2. Лукин А. Введение в цифровую обработку сигналов. (Математические основы) / А. Лукин. – М.: МГУ, 2007. – 54 с.
3. Устин В. Б. Композиция в дизайне. Методические основы композиционно-художественного формообразования в дизайнерском творчестве / В. Б. Устин. – М.: Астрель, 2007. – 239 с.
4. Nachttegael M. Fuzzy Filters for Image Processing / M. Nachttegael, D. van der Weken, D. Ville. – Berlin: Springer-Verlag, 2003. – 386 p.
5. Kerre E. Fuzzy techniques in image processing / E. Kerre, M. Nachttegael. – New-York: Springer Verlag, 2000. – 422 p.
6. Wang X. Mathematics of fuzziness – basic issues / X. Wang, D. Ruang, E. Kerre. – Berlin: Springer Verlag, 2009. – 219 p.

Поступила в редакцию 26.05.2010 г.

УДК 004.942:534.7

EFFECTS OF DIFFERENT STRUCTURING ELEMENTS IN 3D SEGMENTATION OF LEFT-CORONARY ARTERIES USING CT IMAGES

Motiur Rahman*, Shorif Uddin**, Mossadik Hasan*, Ahmed Kamal***

*Dept. of CSE, Mawalana Bhashani science and Technology University, Tangail, Bangladesh.

**Dept. Of CSE, Jahangirnagar University, Savar, Dhaka, Bangladesh .

***Dept. of Applied Physics & Electronic Engineering, Rajshahi University, Rajshah, Bangladesh.

Coronary heart diseases are one of the most prevalent causes of deaths not only in Bangladesh but also all over the world. 3D segmentation of arteries of heart plays an important role for the analysis of coronary heart diseases. It also helps the physicians to take perfect decision for treatment and surgery procedure. Morphological operators play an important role for segmentation of the object shape in medical image processing. Morphological operators use the structuring elements for image processing. In this paper we have implemented the effects of six structuring elements for segmentation of CT images of coronary arteries of heart. It shows that different structuring elements have significant effects for segmenting the arteries and processing time.

Keywords: Structuring element, Morphology operators, Segmentation, Coronary artery, CT.

Introduction. Coronary heart diseases (CHD) are the most prevalent causes of death not only in Bangladesh but also all over the world [1]. It is also called silent killer. Narrowing (stenosis) or complete occlusion of the arteries of the heart causes serious condition such as heart attacks and strokes. Noninvasive imaging technique such as computed tomography (CT) has greatly assisted the diagnosis of coronary heart diseases of the patients. It is laborious to analyses these images manually [2]. Vessels are indeed 3D anatomical structures. So the accurate segmentation and visualization of 3D anatomical structure is also very important so that physicians can take accurate decision for treatment.

Morphology relates to the study of object forms or shapes. It facilitates the segmentation and search for object of interest by filing holes and eliminating unwanted segments [3]. Morphological image processing is based on the idea of probing an image with a small shape or template known as a structuring element. The structuring element is positioned at all possible locations in the image and certain operation is performed according to the relation between image content and the structuring element [4, 5]. It is possible to use structuring element of different shapes to perform a specific task. This paper investigates structural element of different shapes in the 3D segmentation of left coronary artery using CT Images.

The structuring element can be represented in the form of matrix with elements either 0 or 1. The size of the structuring element is basically defined by the dimensions of the matrix, and the shape of the structuring element is determined by the pattern of zeros and ones. Fig. 1 shows for example square, triangle, diamond, cross, circular and anti-circular shaped 5x5 structuring elements.

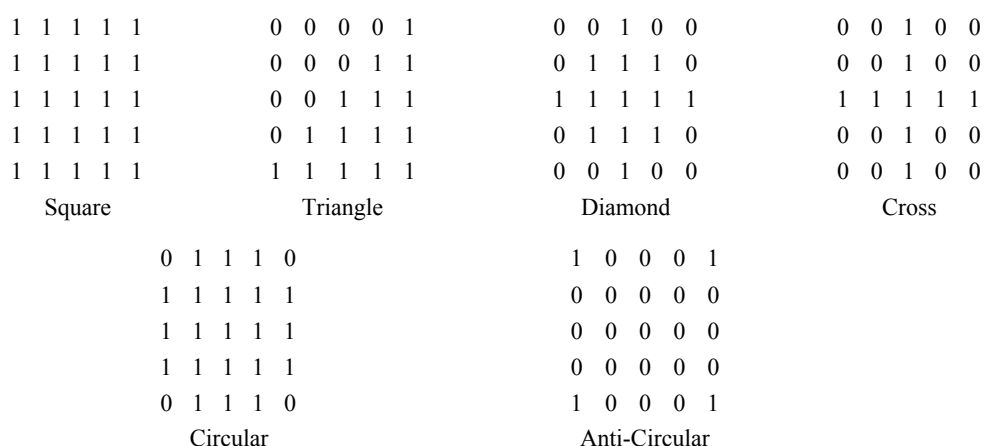


Fig. 1. Structuring elements of size (5x5) pixels

Structuring elements need to have an origin. Alike the convolution process, the morphological operation will produce a certain result depending on the shape and the relation between structural element and the image content. The proposed work investigates the effect of different structuring elements.

Etho and Quan [6] proposed a method based on pure morphological operators for the detection of coronary artery tree. In [7] Yang Yang used morphological operations to segment blood vessels of heart using a circular disk type structuring element.

Methodology. The developed method (in brief) consists of the following steps shown in fig. 2

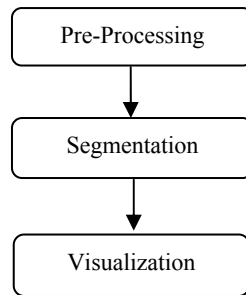


Fig. 2. Developed method.

In preprocessing step we applied several basic image processing operations and extracted the 3D heart shape. Among the basic image processing operations we applied “Thresholding” and “Dilation”. Fig. 3, *a* shows the volume rendered original image. Fig. 3, *b* shows the output image after applying “Thresholding” on fig. 3, *a*. Fig. 3, *c* shows the output image after applying “Dilation” on fig. 3, *b*. To extract 3D heart shape we used region extraction algorithm [5]. Fig-3.d shows the result after applying region extraction algorithm (using structural element of square Shape) on fig. 3, *c*. Although we have made a comparison using structural element of different shape, we are not showing the effects at this stage because the effects of different structuring element can’t be understood from the output of region extraction algorithm. Rather the difference would be clear from the final output. The comparison is shown in Experimental Results section.

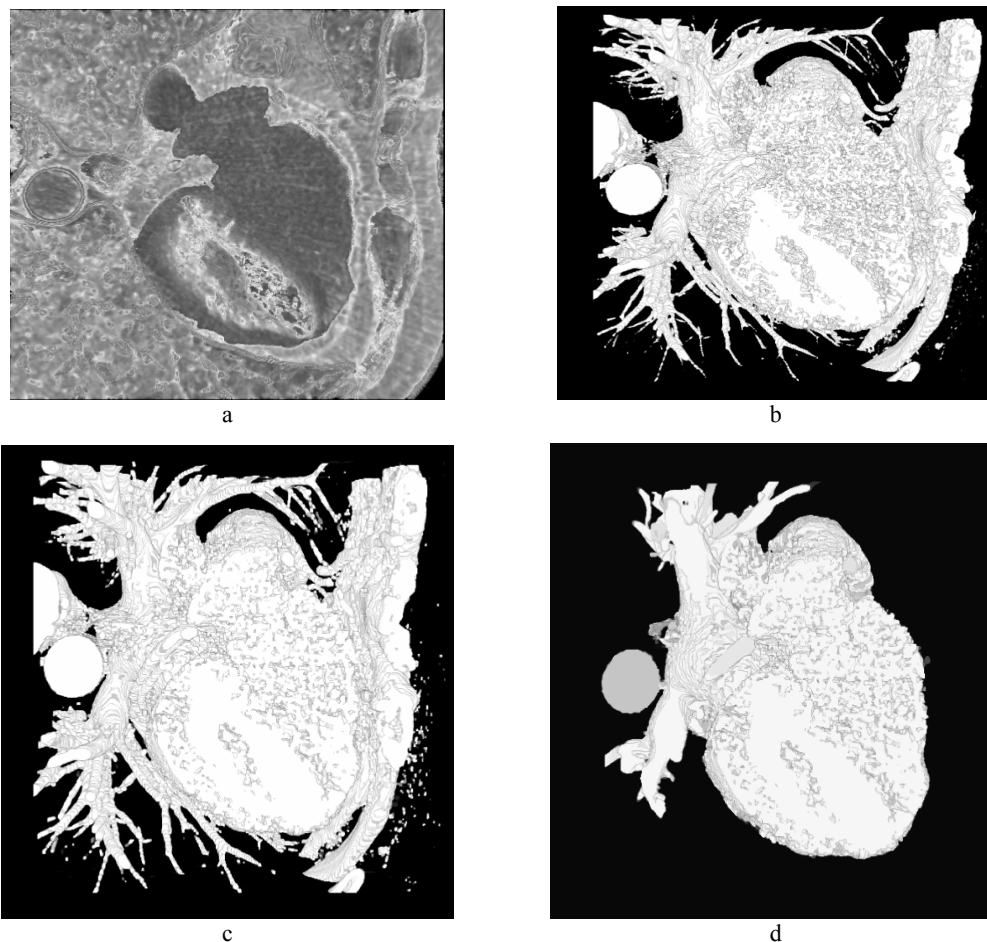


Fig. 3. Output of different steps of preprocessing

In segmentation step we have clustered the heart into three regions (as did Yan Yang, Allen R. Tannenbaum and Don P.Giddensin in [8]) (blood, myocardium and background) using Gaussian functions (eqn-1), Bayes’ theorem (eqn-2) & K-means clustering (fig. 4 shows the result) and then active contour to get the coronary artery (fig. 5 shows the result of applying active contour on fig. 4 and the effects of applying different structural element).

$$\Pr(V(x) = v | x \in c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_c} \exp\left(-\frac{(v - \mu_c)^2}{2\sigma_c^2}\right) \quad (1)$$

$$\Pr(x \in c | V(x) = v) = \frac{\Pr(v(x) = v | x \in c) \Pr(x \in c)}{\sum_{\gamma} \Pr(V(X) = v | x \in \gamma) \Pr(x \in \gamma)} \quad (2)$$

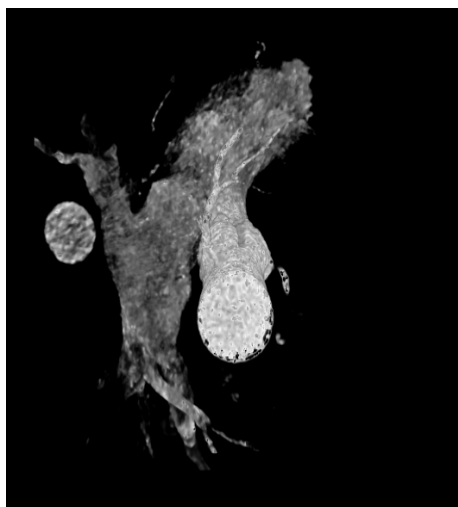


Fig. 4. Output of clustering into three regions (blood region is shown as it contains arteries)

Finally, we developed a Visualization Toolkit (VTK) pipeline to 3D visualization of the segmented branches.

Results. Runtime and the number of branch using different structural elements are given in fig. 5. (*a* – using structural element of square shape; *b* – using structural element of triangle shape; *c* – using structural element of diamond shape; *d* – using structural element of cross shape; *e* – using circular disk structural element; *f* – using anti-circular disk structural element).

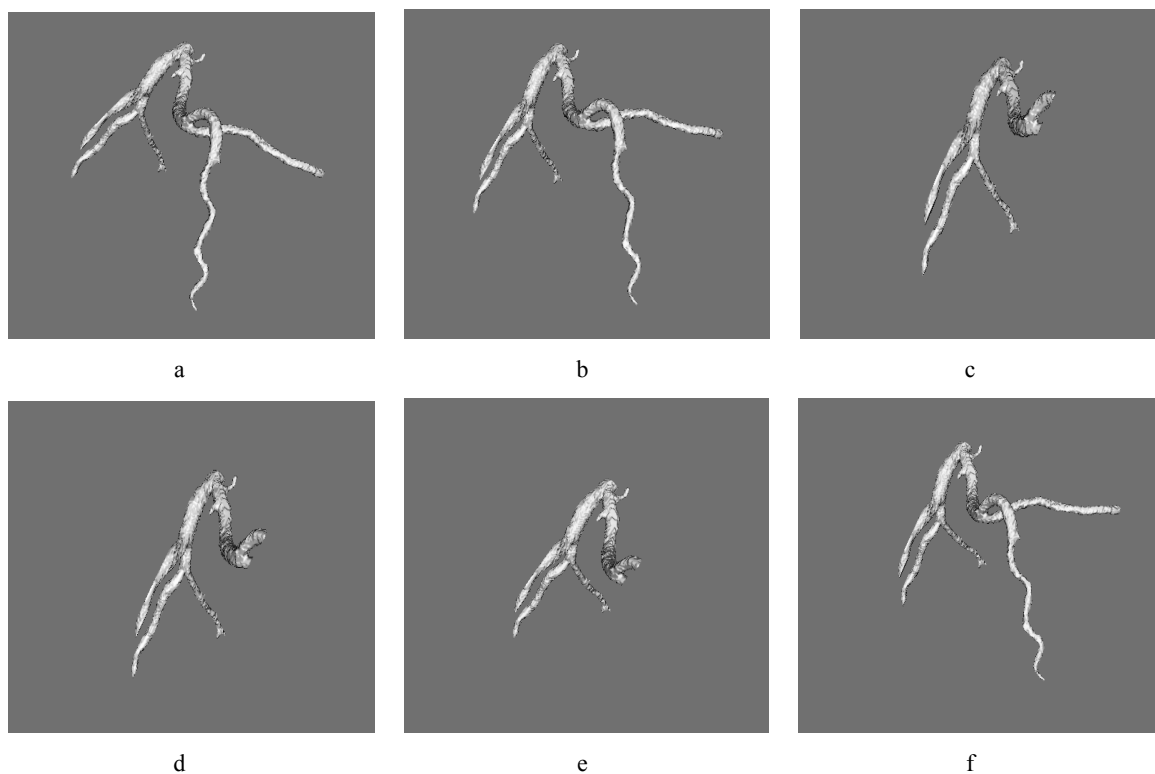


Fig. 5. Effect of different structuring elements

Comparison. Comparison of Runtime of 3D heart shape extraction and number of branches of left coronary artery using structural element of size 13×13 of different shapes is given in table 1.

Table 1

Run time and segmented branches

Structural element	Runtime(ms)	No. of branches
Square	214273	5
Triangle	249043	5
Diamond	200330	4
Cross	174345	4
Circular Disk	230097	4
Anti Circular Disk	208825	5

Tested computer configuration is 1GB memory, 1.8 GHz processor and the proposed method is implemented using VTK and C++. The dataset volume is $225 \times 512 \times 512$ voxels.

Conclusion. From the above fact findings it is proved that structural elements for morphological operations play a vital role in arteries segmentation. The anatomical structural of heart is complex and robust so the improper selection of structuring element leads to insufficient branch segmentation. At the same time structuring elements have impact on segmentation time.

Acknowledgement. We are grateful to Orjan Semdbly Linkoping University Hospital, CMIV, Linkoping, Sweden for providing us with the CT Images for this work.

РЕЗЮМЕ

Ишемические болезни сердца – одна из самых распространенных причин смертельных случаев не только в Бангладеше, но также и во всем мире. Трехмерная сегментация артерий сердца играет важную роль для анализа ишемических болезней сердца. Она также помогает врачам принимать безупречное решение для процедуры лечения и хирургии. Морфологические операторы играют важную роль при сегментации формы объекта в обработке медицинских изображения. Морфологические операторы используют структурные элементы для обработки изображения. В этой работе мы осуществили работу шести структурных элементов для сегментации изображений компьютерной томографии коронарных артерий сердца. Она показывает, что различные структурные элементы имеют существенное влияние на сегментацию артерии и продолжительность обработки.

Ключевые слова: структурированный элемент, морфологические операторы, сегментация, коронарная артерия, СТ.

РЕЗЮМЕ

Коронарна хвороба серця є однією з найбільш поширених причин смертності не тільки в Бангладеші, а й у всьому світі. 3D сегментація артерій серця відіграє важливу роль для аналізу коронарної хвороби серця. Вона також допомагає лікарям приймати досконалі рішення для процедур лікування та хірургії. Морфологічні оператори відіграють важливу роль у сегментації форми об'єктів у обробці медичних зображень. Морфологічні оператори використовують структурні елементи для обробки зображень. У даній роботі ми реалізували роботу шести структурних елементів для сегментації зображень комп'ютерної томографії коронарних артерій серця. Вона показує, що різні структурні елементи мають значний вплив на сегментацію артерій і час обробки.

Ключові слова: структурований елемент, морфологічні оператори, сегментація, коронарна артерія, СТ.

REFERENCES

1. Abhinav Goyal. The burden of cardiovascular disease in the Indian subcontinent / Abhinav Goyal, Salim Yusuf // Population Health Research Institute, McMaster University & Hamilton Health Sciences Hamilton, Ontario, Canada, September 2006. – P. 235-244.
2. Karthikeyan D. Step by Step CT Scan / D. Karthikeyan, Deepa Chegu - New Delhi: Jaypee Brothers, medical Publishers(P) ltd, 2005. – 222 p.
3. Kirbas C. A Review of vessel extraction techniques and algorithms / C. Kirbas, F. Quek // ACM Computing Surveys (CSUR) – New York: ACM, 2004. – Volume 36, Issue 2. – P. 81-121.
4. Dougherty E. R. An introduction to morphological image processing / Edward R. Dougherty – New York: SPIE, 1992. – 161 p.
5. Gonzalez R. C. Digital Image Processing, Second Edition / Rafael C. Gonzalez, Richard E. Woods – New Jersey: Prentice-Hall, 2002. – 793 p.
6. Eiho S. Detection of coronary artery tree using morphological operator / S. Eiho, Y. Qian // IEEE Computers in Cardiology 1997 – Lund, Sweden, 1997. – Vol. 24. – P. 525-528.
7. Yang Y. Image segmentation and shape analysis of blood vessels with applications to coronary atherosclerosis: PhD Thesis / Yan Yang. – Georgia Institute of Technology, 2007. – 127 p.
8. Yang Y. Multiscale vessel filtering in assisting the generation of patient specific CFD models for coronary arteries / Yan Yang, Allen R.Tannenbaum, Don P.Giddens. // Proceedings of ASME BIO2006, 2006 Summer Bioengineering Conference - Amelia Island, Florida, USA, 2006. – P. 1-2.

Received March 24, 2010 p.

UDC 519.832.4

SUPEROPTIMAL MIXED STRATEGIES IN ANTAGONISTIC GAMES AS THE ADVANTAGED SUBSET OF THE OPTIMAL MIXED STRATEGIES SET

V. V. Romanuke
Khmelnytsky National University

There has been defined the set of the most advantaged optimal mixed strategies, named the superoptimal mixed strategies, for applying them and obtaining the potential profit in the relevant antagonistic games. The stated principle of the superoptimality is based on the Bayes-Laplace criterion.

Keywords: antagonistic game, optimal mixed strategy, Bayes-Laplace criterion.

Problem description. There are the widespread conflict systems, which are modeled with the antagonistic games theory. When the antagonistic game is solved in pure strategies, then it is simple for both players to make the optimal and logically founded decision. When the solution is in the mixed strategies, then for making the optimal decision every player should practice its optimal mixed strategy [1, 2]. Though the known optimality principle gives the set of optimal game solutions, some of those optimal solutions may have an advantage above the rest [3, 4]. Questions of selecting one of those optimal solutions were discussed in [3, 5]. The head principle of discriminating the solutions, satisfying the optimality principle, is in aggregating the post-affects of their application [6, 7]. A post-affect is an actual value of the game issue in some situation [6]. However, the known aggregation of the post-affects of optimal solutions application refers to only finite number of pure strategies of the player, and it is just the simple summation of actual values of the game issue [7].

Setting the paper task. Going into particulars, the paper [4] were devoted to the definition of suchlike advantaged optimal solutions, but only in pure strategies. They had been divided into two sets – the set of non-strictly rational pure strategies \tilde{S}_r and the set of strictly rational pure strategies S_r , where $S_r \subseteq \tilde{S}_r$ and the set \tilde{S}_r is a subset of the optimal pure strategies set S_{opt} . And there had been shown, what profit the player gains, if it uses the set of the strictly or the nonstrictly rational strategies by the other player receding from its set of optimal pure strategies. This profit on average is greater than the game value V_{opt} for the first player, and lesser than the game value V_{opt} for the second. The current paper will resolve the problem of defining the most advantaged optimal pure strategies from the set \tilde{S}_r by $\tilde{S}_r \neq \emptyset$ and $|S_{opt}| > 1$, and also will define the most advantaged optimal mixed strategies from the set of all the optimal mixed strategies. The last declared definition will generalize the concept of applying the advantaged optimal solutions from the set of all the optimal solutions.

Defining the advantaged subset of the optimal mixed strategies set. May a surface $K(x, y)$ be the kernel of an antagonistic game, where $x \in X$ is a pure strategy of the first player, $y \in Y$ is a pure strategy of the second player, and this surface is defined on the Cartesian product $X \times Y$ of the pure strategies sets of those players. If $X_{opt} \subset X$ is the nonempty set of the first player optimal pure strategies, and $Y_{opt} \subset Y$ is the nonempty set of the second player optimal pure strategies, then there are four definitions, stated in the paper [4].

Definition 1. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ an optimal pure strategy $x_r \in X_r \subset X_{opt}$ of the first player is called the strictly rational pure strategy, if $\forall x_0 \in X_{opt} \setminus X_r, \forall y \notin Y_{opt}$ and $\forall x_r \in X_r$ there is the identity $V_{opt} = K(x_0, y)$ and the inequality $V_{opt} < K(x_r, y)$, where $X_r \subseteq \tilde{X}_r \subseteq X_{opt}$ is the set of all the strictly rational pure strategies of the first player.

Definition 2. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ an optimal pure strategy $y_r \in Y_r \subset Y_{opt}$ of the second player is called the strictly rational pure strategy, if $\forall y_0 \in Y_{opt} \setminus Y_r, \forall x \notin X_{opt}$ and $\forall y_r \in Y_r$ there is the identity $K(x, y_0) = V_{opt}$ and the inequality $K(x, y_r) < V_{opt}$, where $Y_r \subseteq \tilde{Y}_r \subseteq Y_{opt}$ is the set of all the strictly rational pure strategies of the second player.

Definition 3. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ an optimal pure strategy $\tilde{x}_r \in \tilde{X}_r \subset X_{opt}$ of the first player is called the nonstrictly rational pure strategy, if $\forall x_0 \in X_{opt} \setminus \tilde{X}_r, \forall y \notin Y_{opt}$ and $\forall \tilde{x}_r \in \tilde{X}_r$ there is the identity $V_{opt} = K(x_0, y)$ and the nonstrict inequality $V_{opt} \leq K(\tilde{x}_r, y)$,

but $\forall \tilde{x}_r \in \tilde{X}_r \exists y \in Y \setminus Y_{\text{opt}}$ that $V_{\text{opt}} < K(\tilde{x}_r, y)$, where $\tilde{X}_r \subseteq X_{\text{opt}}$ is the set of all the nonstrictly rational pure strategies of the first player.

Definition 4. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ an optimal pure strategy $\tilde{y}_r \in \tilde{Y}_r \subset Y_{\text{opt}}$ of the second player is called the nonstrictly rational pure strategy, if $\forall y_0 \in Y_{\text{opt}} \setminus \tilde{Y}_r, \forall x \notin X_{\text{opt}}$ and $\forall \tilde{y}_r \in \tilde{Y}_r$ there is the identity $K(x, y_0) = V_{\text{opt}}$ and the nonstrict inequality $K(x, \tilde{y}_r) \leq V_{\text{opt}}$, but $\forall \tilde{y}_r \in \tilde{Y}_r \exists x \in X \setminus X_{\text{opt}}$ that $K(x, \tilde{y}_r) < V_{\text{opt}}$, where $\tilde{Y}_r \subseteq Y_{\text{opt}}$ is the set of all the nonstrictly rational pure strategies of the second player.

If $\tilde{S}_r \neq \emptyset$ and $|S_{\text{opt}}| > 1$, then a player must select a nonstrictly rational pure strategy $\tilde{s}_r \in \tilde{S}_r$, which would provide some advantage in comparison with another optimal pure strategy $s_{\text{opt}} \in S_{\text{opt}}$. On this ground there may be defined the most advantaged optimal pure strategies from the set \tilde{S}_r or, generally, from the set S_{opt} . Those optimal strategies may be named as absolutely optimal or superoptimal.

Definition 5. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ by $X_{\text{opt}} \neq \emptyset, Y_{\text{opt}} \neq \emptyset$, and $|Y \setminus Y_{\text{opt}}| \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$, an optimal pure strategy $\hat{x}_{\text{opt}} \in X_{\text{opt}}$ of the first player is called the superoptimal pure strategy, if there are at least two pure strategies $x_{\text{opt}}^{(1)} \in X_{\text{opt}}$ and $x_{\text{opt}}^{(2)} \in X_{\text{opt}}$ that

$$\sum_{y \notin Y_{\text{opt}}} K(x_{\text{opt}}^{(1)}, y) \neq \sum_{y \notin Y_{\text{opt}}} K(x_{\text{opt}}^{(2)}, y), \quad (1)$$

and by the Bayes-Laplace criterion [8]

$$\hat{x}_{\text{opt}} \in \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \sum_{y \notin Y_{\text{opt}}} K(x, y) \quad (2)$$

or by the multiplication criterion [8]

$$\hat{x}_{\text{opt}} \in \left\{ \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \prod_{y \notin Y_{\text{opt}}} \left(K(x, y) + \left[c - \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \cdot \text{sign} \left[1 - \text{sign} \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \right) \right\}, \quad (3)$$

where $c > 0$. The set of all the superoptimal pure strategies of the first player is

$$\hat{X}_{\text{opt}} = \left\{ \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \sum_{y \notin Y_{\text{opt}}} K(x, y) \right\} \subset \tilde{X}_r \subset X_{\text{opt}} \quad (4)$$

by the Bayes-Laplace criterion, or

$$\hat{X}_{\text{opt}}(c) = \left\{ \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \prod_{y \notin Y_{\text{opt}}} \left(K(x, y) + \left[c - \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \cdot \text{sign} \left[1 - \text{sign} \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \right) \right\} \subset \tilde{X}_r \subset X_{\text{opt}} \quad (5)$$

by the multiplication criterion.

Definition 6. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ by $X_{\text{opt}} \neq \emptyset, Y_{\text{opt}} \neq \emptyset$, and $|Y \setminus Y_{\text{opt}}| = \infty$, an optimal pure strategy $\hat{x}_{\text{opt}} \in X_{\text{opt}}$ of the first player is called the superoptimal pure strategy, if there are at least two pure strategies $x_{\text{opt}}^{(1)} \in X_{\text{opt}}$ and $x_{\text{opt}}^{(2)} \in X_{\text{opt}}$ that

$$\int_{y \notin Y_{\text{opt}}} K(x_{\text{opt}}^{(1)}, y) dy \neq \int_{y \notin Y_{\text{opt}}} K(x_{\text{opt}}^{(2)}, y) dy, \quad (6)$$

and by the Bayes-Laplace criterion

$$\hat{x}_{\text{opt}} \in \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \int_{y \notin Y_{\text{opt}}} K(x, y) dy. \quad (7)$$

The set of all the superoptimal pure strategies of the first player is

$$\widehat{X}_{\text{opt}} = \left\{ \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \int_{y \in Y_{\text{opt}}} K(x, y) dy \right\} \subset \widetilde{X}_r \subset X_{\text{opt}} \quad (8)$$

by the Bayes-Laplace criterion.

Definition 7. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ by $X_{\text{opt}} \neq \emptyset$, $Y_{\text{opt}} \neq \emptyset$, and $|X \setminus X_{\text{opt}}| \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$, an optimal pure strategy $\check{y}_{\text{opt}} \in Y_{\text{opt}}$ of the second player is called the superoptimal pure strategy, if there are at least two pure strategies $y_{\text{opt}}^{(1)} \in Y_{\text{opt}}$ and $y_{\text{opt}}^{(2)} \in Y_{\text{opt}}$ that

$$\sum_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y_{\text{opt}}^{(1)}) \neq \sum_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y_{\text{opt}}^{(2)}), \quad (9)$$

and by the Bayes-Laplace criterion

$$\check{y}_{\text{opt}} \in \arg \min_{y \in Y_{\text{opt}}} \sum_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y) \quad (10)$$

or by the multiplication criterion

$$\check{y}_{\text{opt}} \in \left\{ \arg \min_{y \in Y_{\text{opt}}} \prod_{x \in X_{\text{opt}}} \left(K(x, y) + \left[c - \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \cdot \text{sign} \left[1 - \text{sign} \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \right) \right\}, \quad (11)$$

where $c > 0$. The set of all the superoptimal pure strategies of the second player is

$$\widetilde{Y}_{\text{opt}} = \left\{ \arg \min_{y \in Y_{\text{opt}}} \sum_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y) \right\} \subset \widetilde{Y}_r \subset Y_{\text{opt}} \quad (12)$$

by the Bayes-Laplace criterion, or

$$\widetilde{Y}_{\text{opt}}(c) = \left\{ \arg \min_{y \in Y_{\text{opt}}} \prod_{x \in X_{\text{opt}}} \left(K(x, y) + \left[c - \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \cdot \text{sign} \left[1 - \text{sign} \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \right) \right\} \subset \widetilde{Y}_r \subset Y_{\text{opt}} \quad (13)$$

by the multiplication criterion.

Definition 8. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ by $X_{\text{opt}} \neq \emptyset$, $Y_{\text{opt}} \neq \emptyset$, and $|X \setminus X_{\text{opt}}| = \infty$, an optimal pure strategy $\check{y}_{\text{opt}} \in Y_{\text{opt}}$ of the second player is called the superoptimal pure strategy, if there are at least two pure strategies $y_{\text{opt}}^{(1)} \in Y_{\text{opt}}$ and $y_{\text{opt}}^{(2)} \in Y_{\text{opt}}$ that

$$\int_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y_{\text{opt}}^{(1)}) dx \neq \int_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y_{\text{opt}}^{(2)}) dx, \quad (14)$$

and by the Bayes-Laplace criterion

$$\check{y}_{\text{opt}} \in \arg \min_{y \in Y_{\text{opt}}} \int_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y) dx. \quad (15)$$

The set of all the superoptimal pure strategies of the second player is

$$\widetilde{Y}_{\text{opt}} = \left\{ \arg \min_{y \in Y_{\text{opt}}} \int_{x \in X_{\text{opt}}} K(x, y) dx \right\} \subset \widetilde{Y}_r \subset Y_{\text{opt}} \quad (16)$$

by the Bayes-Laplace criterion.

For understanding the last four definitions consider an example. Let the matrix

$$K(x, y) = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & -2 & -1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -1 & -3 & 0 & -2 & -2 & 0 & 2 & -6 & -9 \end{bmatrix} \quad (17)$$

be the kernel of the antagonistic game, where the row number k corresponds to the pure strategy x_k of the first player $\forall k = \overline{1, 6}$, and the column number l corresponds to the pure strategy y_l of the second player $\forall l = \overline{1, 10}$. Consequently, here the pure strategies sets of the players are $X = \{x_k\}_{k=1}^6$ and $Y = \{y_l\}_{l=1}^{10}$. Clearly, that this game is solved in pure strategies with the game value $V_{\text{opt}} = 0$, and the set

$$X_{\text{opt}} = \{x_1, x_2, x_4, x_5\}, \quad (18)$$

the set

$$Y_{\text{opt}} = \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}. \quad (19)$$

By the four first definitions in the exemplified game there are the following primarily advantaged subsets of the sets (18) and (19). The set of the nonstrictly rational pure strategies of the first player is

$$\tilde{X}_r = \{x_1, x_4, x_5\} = \{X_{\text{opt}} \setminus \{x_2\}\} \subset X_{\text{opt}} = \{x_1, x_2, x_4, x_5\}, \quad (20)$$

and the set of the nonstrictly rational pure strategies of the second player is

$$\tilde{Y}_r = \{y_6, y_9, y_{10}\} = \{Y_{\text{opt}} \setminus \{y_4, y_7\}\} \subset Y_{\text{opt}} = \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}. \quad (21)$$

Deeper, the set of the strictly rational pure strategies of the first player is

$$X_r = \{x_4\} = \{\tilde{X}_r \setminus \{x_1, x_5\}\} \subset \tilde{X}_r = \{x_1, x_4, x_5\} = \{X_{\text{opt}} \setminus \{x_2\}\} \subset X_{\text{opt}} = \{x_1, x_2, x_4, x_5\}, \quad (22)$$

and the set of the strictly rational pure strategies of the second player is

$$Y_r = \{y_6, y_9\} = \{\tilde{Y}_r \setminus \{y_{10}\}\} \subset \tilde{Y}_r = \{y_6, y_9, y_{10}\} = \{Y_{\text{opt}} \setminus \{y_4, y_7\}\} \subset Y_{\text{opt}} = \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}. \quad (23)$$

The set of the superoptimal pure strategies of the first player is

$$\begin{aligned} \hat{X}_{\text{opt}} &= \left\{ \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \sum_{y \in Y_{\text{opt}}} K(x, y) \right\} = \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \sum_{y \notin \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} K(x, y) \right\} = \\ &= \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \{(1+2+0+0+5), (0+0+0+0+0), (2+1+1+1+1), (0+0+1+0+0)\} \right\} = \\ &= \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \{8, 0, 6, 1\} \right\} = \{x_1\} = \{\tilde{X}_r \setminus \{x_4, x_5\}\} \end{aligned} \quad (24)$$

by the Bayes-Laplace criterion with the formula (4). By the multiplication criterion this set is

$$\begin{aligned} \hat{X}_{\text{opt}}(1) &= \left\{ \arg \max_{x \in X_{\text{opt}}} \prod_{y \in Y_{\text{opt}}} \left(K(x, y) + \left[1 - \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \cdot \text{sign} \left[1 - \text{sign} \min_{x \in X} \min_{y \in Y} K(x, y) \right] \right) \right\} = \\ &= \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \prod_{y \notin \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \left(K(x, y) + [1 - (-9)] \cdot \text{sign} [1 - \text{sign}(-9)] \right) \right\} = \\ &= \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \prod_{y \notin \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} [K(x, y) + 10 \cdot \text{sign}(2)] \right\} = \\ &= \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \prod_{y \notin \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} [K(x, y) + 10] \right\} = \\ &= \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \{(11 \cdot 12 \cdot 10 \cdot 10 \cdot 15), (10 \cdot 10 \cdot 10 \cdot 10 \cdot 10), (12 \cdot 11 \cdot 11 \cdot 11 \cdot 11), (10 \cdot 10 \cdot 11 \cdot 10 \cdot 10)\} \right\} = \end{aligned}$$

$$= \left\{ \arg \max_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \{198000, 100000, 175692, 110000\} \right\} = \{x_1\} = \{\tilde{X}_r \setminus \{x_4, x_5\}\} \quad (25)$$

with the formula (5) for $c = 1$. It is situational that the needed set, been found by two criterions, is the same. But generally, there exist such antagonistic games, where $\exists c > 0$ there is the statement

$$\hat{X}_{opt} \cap \tilde{X}_{opt}(c) = \emptyset. \quad (26)$$

The set of the superoptimal pure strategies of the second player is

$$\begin{aligned} \check{Y}_{opt} &= \left\{ \arg \min_{y \in \check{Y}_{opt}} \sum_{x \in \hat{X}_{opt}} K(x, y) \right\} = \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \sum_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} K(x, y) \right\} = \\ &= \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \{(0+0), (-4-2), (0+0), (-1-6), (0-9)\} \right\} = \\ &= \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \{0, -6, 0, -7, -9\} \right\} = \{y_{10}\} = \{\tilde{Y}_r \setminus \{y_6, y_9\}\} \end{aligned} \quad (27)$$

by the Bayes-Laplace criterion with the formula (12). By the multiplication criterion this set is

$$\begin{aligned} \check{Y}_{opt}(1) &= \left\{ \arg \min_{y \in \check{Y}_{opt}} \prod_{x \in \hat{X}_{opt}} \left(K(x, y) + \left[1 - \min_{x \in \hat{X}} \min_{y \in \check{Y}} K(x, y) \right] \cdot \text{sign} \left[1 - \text{sign} \min_{x \in \hat{X}} \min_{y \in \check{Y}} K(x, y) \right] \right) \right\} = \\ &= \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \prod_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} \left(K(x, y) + [1 - (-9)] \cdot \text{sign} [1 - \text{sign}(-9)] \right) \right\} = \\ &= \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \prod_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} [K(x, y) + 10 \cdot \text{sign}(2)] \right\} = \\ &= \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \prod_{x \in \{x_1, x_2, x_4, x_5\}} [K(x, y) + 10] \right\} = \\ &= \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \{(10 \cdot 10), (6 \cdot 8), (10 \cdot 10), (9 \cdot 4), (10 \cdot 1)\} \right\} = \\ &= \left\{ \arg \min_{y \in \{y_4, y_6, y_7, y_9, y_{10}\}} \{100, 48, 100, 36, 10\} \right\} = \{y_{10}\} = \{\tilde{Y}_r \setminus \{y_6, y_9\}\} \end{aligned} \quad (28)$$

with the formula (13) for $c = 1$. And once again the needed set, been found by two criterions, is the same. But generally, there exist such antagonistic games, where $\exists c > 0$ there is the statement

$$\check{Y}_{opt} \cap \tilde{Y}_{opt}(c) = \emptyset. \quad (29)$$

Hence, if in the exemplified game the first player applies the superoptimal pure strategy x_1 then in average it obtains the greatest advantage when the second player swerves from applying the set Y_{opt} . The same could be said about the situation when the first player swerves from applying the set X_{opt} . In that case if the second player applies the superoptimal pure strategy y_{10} then in average it obtains the greatest advantage. Nevertheless, applying the sets \hat{X}_{opt} and \check{Y}_{opt} ensures both players in obtaining the mathematically expected greatest advantage, rather than the greatest advantage in the single play. Say, if the second player swerves from applying the set Y_{opt} and selects the pure strategy y_3 then the first player payoff is V_{opt} , though if it selected a non-superoptimal pure strategy x_4 or x_5 , it would obtain the payoff $V_{opt} + 1$. Besides, holding at the strictly rational pure strategy x_4 would ensure the first player in obtaining the payoff, which is greater than V_{opt} , for every time when the second player swerves from applying the set Y_{opt} . So, the stated above superoptimality concept for pure strategies is acceptable for the cases, when the applied superoptimal pure strategy is a strictly rational pure strategy or there is the sufficiently great number of the game plays, that will allow to obtain the mathematically expected greatest advantage.

Henceforward will consider antagonistic games, which generally are solved in mixed strategies. May

$p_{\text{opt}}(x)$ be an optimal mixed strategy of the first player, and $q_{\text{opt}}(y)$ be an optimal mixed strategy of the second player, which satisfy the double inequality

$$\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p(x) q_{\text{opt}}(y) dx dy \leq V_{\text{opt}} = \int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}(x) q(y) dx dy \leq \int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}(x) q_{\text{opt}}(y) dx dy \quad (30)$$

by the conditions

$$p(x) \in \left\{ p(x) : p(x) \geq 0 \forall x \in X, \int_{x \in X} p(x) dx = 1 \right\} = \mathcal{X}, \quad (31)$$

$$q(y) \in \left\{ q(y) : q(y) \geq 0 \forall y \in Y, \int_{y \in Y} q(y) dy = 1 \right\} = \mathcal{Y}, \quad (32)$$

where $p_{\text{opt}}(x) \in \mathcal{X}_{\text{opt}} \subset \mathcal{X}$ and $q_{\text{opt}}(y) \in \mathcal{Y}_{\text{opt}} \subset \mathcal{Y}$. Subsequently, \mathcal{X} is the set of all the mixed strategies of the first player, \mathcal{Y} is the set of all the mixed strategies of the second player, \mathcal{X}_{opt} is the set of all the optimal mixed strategies of the first player, \mathcal{Y}_{opt} is the set of all the optimal mixed strategies of the second player. Of course, a mixed strategy (31) of the first player and a mixed strategy (32) of the second player may be implied for matrix games or games with the enumerable set of the pure strategies with the nonzero optimal probabilities. On this ground there are the following definitions for the superoptimality concept in the mixed strategies.

Definition 9. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ an optimal mixed strategy $\hat{p}_{\text{opt}}(x) \in \mathcal{X}_{\text{opt}}$ of the first player is called the superoptimal mixed strategy, if there are at least two mixed strategies $p_{\text{opt}}^{(1)}(x) \in \mathcal{X}_{\text{opt}}$ and $p_{\text{opt}}^{(2)}(x) \in \mathcal{X}_{\text{opt}}$ that

$$\int_{q(y) \notin \mathcal{Y}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}^{(1)}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)] \neq \int_{q(y) \notin \mathcal{Y}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}^{(2)}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)], \quad (33)$$

and by the Bayes-Laplace criterion

$$\hat{p}_{\text{opt}}(x) \in \arg \max_{p_{\text{opt}}(x) \in \mathcal{X}_{\text{opt}}} \int_{q(y) \notin \mathcal{Y}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)]. \quad (34)$$

The set of all the superoptimal mixed strategies of the first player is

$$\tilde{\mathcal{X}}_{\text{opt}} = \left\{ \arg \max_{p_{\text{opt}}(x) \in \mathcal{X}_{\text{opt}}} \int_{q(y) \notin \mathcal{Y}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)] \right\} \subset \mathcal{X}_{\text{opt}} \quad (35)$$

by the Bayes-Laplace criterion. The exterior integrals in the formulas (33)-(35) are the generalized Riemann integrals [9-12] of the variable $q(y)$ over the subset of the set \mathcal{Y} , where the function $q(y) \notin \mathcal{Y}_{\text{opt}}$.

Definition 10. In the antagonistic game with the kernel $K(x, y)$ an optimal mixed strategy $\tilde{q}_{\text{opt}}(y) \in \mathcal{Y}_{\text{opt}}$ of the second player is called the superoptimal mixed strategy, if there are at least two mixed strategies $q_{\text{opt}}^{(1)}(y) \in \mathcal{Y}_{\text{opt}}$ and $q_{\text{opt}}^{(2)}(y) \in \mathcal{Y}_{\text{opt}}$ that

$$\int_{p(x) \notin \mathcal{X}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p(x) q_{\text{opt}}^{(1)}(y) dx dy \right) d[p(x)] \neq \int_{p(x) \notin \mathcal{X}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p(x) q_{\text{opt}}^{(2)}(y) dx dy \right) d[p(x)]$$

$$\neq \int_{p(x) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p(x) q_{\text{opt}}^{(2)}(y) dx dy \right) d[p(x)], \quad (36)$$

and by the Bayes-Laplace criterion

$$\tilde{q}_{\text{opt}}(y) \in \arg \min_{q_{\text{opt}}(y) \in \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \int_{p(x) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p(x) q_{\text{opt}}(y) dx dy \right) d[p(x)]. \quad (37)$$

The set of all the superoptimal mixed strategies of the second player is

$$\tilde{\mathcal{Y}}_{\text{opt}} = \left\{ \arg \min_{q_{\text{opt}}(y) \in \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \int_{p(x) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p(x) q_{\text{opt}}(y) dx dy \right) d[p(x)] \right\} \subset \mathcal{Y}_{\text{opt}} \quad (38)$$

by the Bayes-Laplace criterion. The exterior integrals in the formulas (36)-(38) are the generalized Riemann integrals of the variable $p(x)$ over the subset of the set \mathcal{Z} , where the function $p(x) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}$.

For comprehending the last two dual definitions consider an example on the nonstrictly convex game with the kernel [13]

$$K(x, y) = ax^2 + bxy + cy + k, \quad (39)$$

that is defined on the unit square

$$S_K = X \times Y = [0; 1] \times [0; 1] \quad (40)$$

with the nonzero coefficients a, b, c and the constant $k \in \mathbb{R}$, where $x \in X = [0; 1]$ and $y \in Y = [0; 1]$ are the pure strategies of the first player and second player correspondingly, and $\forall x \in X, \forall y \in Y$ there is the

nonstrict inequality $\frac{\partial^2 K(x, y)}{\partial y^2} \geq 0$. In the case when $a > 0, b < 0, c < 0, a + b = 0$ [13, p. 187], the maxi-

imum of the kernel (39) by the variable x on the unit segment $X = [0; 1]$ is [13]

$$\begin{aligned} \max_{x \in X} K(x, y) &= \max_{x \in [0; 1]} K(x, y) = \max_{x \in [0; 1]} (ax^2 + bxy + cy + k) = \max_{x \in [0; 1]} (ax^2 - axy + cy + k) = \\ &= \max \{K(0, y), K(1, y)\} = \max \{cy + k, a - ay + cy + k\} = a - ay + cy + k = K(1, y). \end{aligned} \quad (41)$$

The result in the statement (41) is pretty clear, as on the unit segment $X = [0; 1]$ the maximum of the parabola (39) as the function of the variable x may be reached either in the point $x=0$ or $x=1$, and inasmuch as $a - ay \geq 0 \forall y \in [0; 1]$, then this maximum is reached in the point $x=1$. Subsequently, the minimum of the line (41) on the unit segment $Y = [0; 1]$ is [13]

$$\begin{aligned} \min_{y \in Y} \max_{x \in X} K(x, y) &= \min_{y \in [0; 1]} \max_{x \in [0; 1]} K(x, y) = \min_{y \in [0; 1]} K(1, y) = \min_{y \in [0; 1]} (a - ay + cy + k) = \\ &= \min \{K(1, 0), K(1, 1)\} = \min \{a + k, a - a + c + k\} = \min \{a + k, c + k\} = c + k = K(1, 1) = V_{\text{opt}}. \end{aligned} \quad (42)$$

The minimum (42) is reached in the point $y_{\text{opt}} = 1$, that is by the definition

$$Y_{\text{opt}} = \arg \min_{y \in Y} \max_{x \in X} K(x, y) = \arg \min_{y \in [0; 1]} K(1, y) = \arg \min_{y \in [0; 1]} (a - ay + cy + k) = \{1\} = \{y_{\text{opt}}\}. \quad (43)$$

The solutions of the corresponding equation [13]

$$V_{\text{opt}} = c + k = K(1, 1) = ax^2 + bx + c + k = ax^2 - ax + c + k = K(x, 1) = K(x, y_{\text{opt}}) \quad (44)$$

are $x_1 = 0$ and $x_2 = 1$. However, here are the negative values [13]

$$\left. \frac{dK(x_1, y)}{dy} \right|_{y=y_{\text{opt}}} = \left. \frac{d(ax_1^2 + bx_1 y + cy + k)}{dy} \right|_{y=y_{\text{opt}}} = bx_1 + c = r_1 = -ax_1 + c = c, \quad (45)$$

$$\left. \frac{dK(x_2, y)}{dy} \right|_{y=y_{\text{opt}}} = \left. \frac{d(ax_2^2 + bx_2 y + cy + k)}{dy} \right|_{y=y_{\text{opt}}} = bx_2 + c = r_2 = -ax_2 + c = c - a, \quad (46)$$

and, properly, the equation [13]

$$P(x_1)r_1 + P(x_2)r_2 = P(x_1)r_1 + [1 - P(x_1)]r_2 = 0 \tag{47}$$

for the probabilities $P(x_1)$ and $P(x_2)$ of selecting the pure strategies $x_1 = 0$ and $x_2 = 1$, where $P(x_1) + P(x_2) = 1$, has no sense. Then, including the set $X_{opt} = \{x_1, x_2\} = \{0, 1\}$, the optimal mixed strategy of the first player is

$$p_{opt}(x) \in \mathcal{E}_{opt} = \left\{ p_{opt}(x) : p_{opt}(x) \geq 0 \ \forall x \in [0; 1], p_{opt}(x) = 0 \ \forall x \in (0; 1), \int_0^1 p_{opt}(x) dx = 1 \right\}. \tag{48}$$

Actually, the set (48) may be stated in the optimal probabilities of selecting the pure strategies $x_1 = 0$ and $x_2 = 1$, that is

$$P_{opt}(0) \in [0; 1], P_{opt}(1) \in [0; 1], P_{opt}(0) + P_{opt}(1) = 1. \tag{49}$$

Then by Definition 9 firstly will state for $u \in \{1, 2\}$ the expected payoff of the first player:

$$\begin{aligned} \int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{opt}^{(u)}(x) q(y) dx dy &= P_{opt}^{(u)}(0) \int_{y \in [0; 1]} K(0, y) q(y) dy + P_{opt}^{(u)}(1) \int_{y \in [0; 1]} K(1, y) q(y) dy = \\ &= P_{opt}^{(u)}(0) \int_0^1 K(0, y) q(y) dy + [1 - P_{opt}^{(u)}(0)] \int_0^1 K(1, y) q(y) dy = \\ &= \int_0^1 K(1, y) q(y) dy + P_{opt}^{(u)}(0) \left(\int_0^1 K(0, y) q(y) dy - \int_0^1 K(1, y) q(y) dy \right) = \\ &= \int_0^1 [K(1, y) + K(0, y) P_{opt}^{(u)}(0) - K(1, y) P_{opt}^{(u)}(0)] q(y) dy = \\ &= \int_0^1 [(a - ay + cy + k) + (cy + k) \cdot P_{opt}^{(u)}(0) - (a - ay + cy + k) \cdot P_{opt}^{(u)}(0)] q(y) dy = \\ &= \int_0^1 [a - ay + cy + k + cy P_{opt}^{(u)}(0) + k P_{opt}^{(u)}(0) - a P_{opt}^{(u)}(0) + ay P_{opt}^{(u)}(0) - cy P_{opt}^{(u)}(0) - k P_{opt}^{(u)}(0)] q(y) dy = \\ &= \int_0^1 [a - ay + cy + k - a P_{opt}^{(u)}(0) + ay P_{opt}^{(u)}(0)] q(y) dy = \\ &= \int_0^1 [y(a P_{opt}^{(u)}(0) + c - a) - a P_{opt}^{(u)}(0) + a + k] q(y) dy. \end{aligned} \tag{50}$$

The integration in the formula (33) over the set of the mixed strategies of the second player (32), where each element of this set $q(y) \notin \mathcal{E}_{opt}$, is represented as the generalized Riemann integral with the subintegral function (50). If some optimal mixed strategy of the first player $p_{opt}^{(1)}(x)$ is $P_{opt}^{(1)}(0) = 0$ then in the left side of the inequality (33) have

$$\begin{aligned} \int_{q(y) \notin \mathcal{E}_{opt}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{opt}^{(1)}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)] &= \\ &= \int_{q(y) \notin \mathcal{E}_{opt}} \left(\int_0^1 [y(c - a) + a + k] q(y) dy \right) d[q(y)]. \end{aligned} \tag{51}$$

And if some optimal mixed strategy of the first player $p_{opt}^{(2)}(x)$ is $P_{opt}^{(2)}(0) = 1$ then in the right side of the inequality (33) have

$$\int_{q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}^{(2)}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)] = \int_{q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_0^1 [cy + k] q(y) dy \right) d[q(y)]. \quad (52)$$

Inasmuch as $\forall y \in [0; 1]$ within the subintegral functions of (51) and (52) there is the statement

$$y(c - a) + a + k - (cy + k) = a - ay \geq 0, \quad (53)$$

which turns into the equality by $y = 1$ and every mixed strategy of the second player $q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}$ belongs to the set

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} \setminus \mathcal{Z}_{\text{opt}} = & \left\{ q(y) : q(y) \geq 0 \forall y \in [0; 1], \int_0^1 q(y) dy = 1 \right\} \setminus \\ & \left\{ q(y) : q(y) = 0 \forall y \in [0; 1), q(1) > 0, \int_0^1 q(y) dy = 1 \right\}, \end{aligned} \quad (54)$$

then it is clear that the generalized Riemann integrals (51) and (52) have different values:

$$\begin{aligned} & \int_{q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}^{(1)}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)] = \\ = & \int_{q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_0^1 [y(c - a) + a + k] q(y) dy \right) d[q(y)] \neq \int_{q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_0^1 [cy + k] q(y) dy \right) d[q(y)] = \\ = & \int_{q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}^{(2)}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)]. \end{aligned} \quad (55)$$

Accordingly, the inequality (33) in Definition 9 is true, and there is the nonempty set of the superoptimal mixed strategies of the first player in the being exemplified game. Here, actually, for determining the set (35) it is sufficient to determine the maximum of the statement

$$\varphi[P_{\text{opt}}(0)] = y(aP_{\text{opt}}^{(u)}(0) + c - a) - aP_{\text{opt}}^{(u)}(0) + a + k = (ay - a)P_{\text{opt}}(0) + a + (c - a)y + k \quad (56)$$

within the subintegral function (50) by the variable $P_{\text{opt}}(0)$ on the segment $[0; 1]$. With the inequality (53) it is obvious, that the line (56) on the segment $[0; 1]$ has its maximum in the point $P_{\text{opt}}(0) = 0$. Subsequently, this point designates the set

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{Z}}_{\text{opt}} = & \left\{ \arg \max_{P_{\text{opt}}(x) \in \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \int_{q(y) \notin \mathcal{Z}_{\text{opt}}} \left(\int_{x \in X} \int_{y \in Y} K(x, y) p_{\text{opt}}(x) q(y) dx dy \right) d[q(y)] \right\} = \\ = & \left\{ p(x) : p(x) = 0 \forall x \in [0; 1), p(1) > 0, \int_0^1 p(x) dx = 1 \right\} \subset \mathcal{Z}_{\text{opt}} \end{aligned} \quad (57)$$

of the single superoptimal mixed strategy of the first player. Applying the single element of this set, that is $P_{\text{opt}}(1) = 1$ or, more clearly, applying the pure strategy $x = x_{\text{opt}} = 1$, the first player gets the maximized advantage as soon as the second player swerves from applying the single pure strategy $y_{\text{opt}} = 1$. For instance, if the second player selects $y = 0.9$ owing to some unknown motives, then by applying the set (57) the first player gets the payoff, equal to the value

$$K(1, 0.9) = a - a \cdot 0.9 + c \cdot 0.9 + k = 0.1a + 0.9c + k. \quad (58)$$

In the same situation, if the first player had selected the strategy, that is not the superoptimal mixed strategy from the set (57), say, if $P_{\text{opt}}(0) = 0.3$ then the expected payoff would have been equal to the value

$$\begin{aligned} & K(0, 0.9) \cdot P_{\text{opt}}(0) + K(1, 0.9) \cdot P_{\text{opt}}(1) = K(0, 0.9) \cdot P_{\text{opt}}(0) + K(1, 0.9) \cdot [1 - P_{\text{opt}}(0)] = \\ & = 0.3K(0, 0.9) + 0.7K(1, 0.9) = 0.3(c \cdot 0.9 + k) + 0.7(a - a \cdot 0.9 + c \cdot 0.9 + k) = \\ & = 0.27c + 0.3k + 0.07a + 0.63c + 0.7k = 0.07a + 0.9c + k. \end{aligned} \quad (59)$$

And here apparently, that the value (58) is greater than the value (59) for the positive number $0.03a$.

As for the second player, then in this example game $\tilde{Y}_{\text{opt}} = \emptyset$ or, more generally, $\tilde{Y}_{\text{opt}} = \emptyset$. It flows outright from that the inequality (14) or more general inequality (36) cannot be true.

Conclusion and further investigation prospect. There exist such antagonistic games, where may be determined and applied as the most advantaged optimal pure strategies, as well as the most advantaged optimal mixed strategies of a player. Application of these advantaged subsets of the optimal mixed strategies set gives the most great potential profit. For the player, which is applying the most advantaged optimal mixed strategies, named the superoptimal mixed strategies, this potential is implemented every time, when the other player swerves from applying its optimal mixed strategies. The defined sets of the superoptimal mixed strategies, which are found by (35) and (38), may be considered as the generalization of the pure strategies superoptimality, stated in the paper [4]. Therefore, the players are recommended instead of their optimal mixed strategies sets \mathcal{X}_{opt} and \mathcal{Y}_{opt} to apply their superoptimal mixed strategies sets $\tilde{\mathcal{X}}_{\text{opt}}$ and $\tilde{\mathcal{Y}}_{\text{opt}}$. The investigated above superoptimality is based on the Bayes-Laplace criterion. However, there remain some questions of the analytical calculation of the generalized Riemann integral [14], been figured in the formulas (33)-(38). Though for some convex games, like the example game with the kernel (39), it is easy to evaluate the emergent generalized Riemann integrals, the further investigation prospect should be viewed at peculiarities of that integration.

РЕЗЮМЕ

Означено множину оптимальних змішаних стратегій з найбільшою перевагою, названих супероптимальними змішаними стратегіями, для їх застосування та отримання потенційної корисності у відповідних антагоністичних іграх. Викладений принцип супероптимальності заснований на критерії Байєса-Лапласа.

Ключові слова: антагоністична гра, оптимальна змішана стратегія, критерій Байєса-Лапласа.

РЕЗЮМЕ

Определено множество оптимальных смешанных стратегий с наибольшим преимуществом, названных супероптимальными смешанными стратегиями, для их применения и получения потенциальной полезности в подпадающих антагонистических играх. Изложенный принцип супероптимальности основан на критерии Байеса-Лапласа.

Ключевые слова: антагонистическая игра, оптимальная смешанная стратегия, критерий Байеса-Лапласа.

REFERENCES

1. Романюк В. В. Метод реалізації оптимальних змішаних стратегій у матричній грі з порожньою множиною сідлових точок у чистих стратегіях з відомою кількістю партій гри / В. В. Романюк // Наукові вісті НТУУ КПІ. – 2009. – № 2. – С. 45-52.
2. Romanuke V. V. Method of practicing the optimal mixed strategy with innumerable set in its spectrum by unknown number of plays / V. V. Romanuke // Measuring and Computing Devices in Technological Processes. – 2008. – № 2. – P. 196-203.
3. Romanuke V. V. Determination of the optimal pure strategies subset as the latent predominance set in some matrix games / V. V. Romanuke // Scientific Papers of Donetsk National Technical University. Informatics, Cybernetics and Computer Science. – 2009. – Vol. 10. – P. 46-53.
4. Романюк В. В. Питання виокремлення підмножини раціональних чистих стратегій гравців у деяких антагоністичних іграх / В. В. Романюк // Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія. – 2009. – № 3. – С. 47-52.
5. Машенко С. О. Локальні умови слабкої індивідуальної оптимальності рівноваг / С. О. Машенко // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2008. – № 1. – С. 127-136.
6. Kumkov S. I. Optimal strategies in a differential game with incomplete information / S. I. Kumkov, V. S. Patsko // Tr. Inst. Mat. Mekh. – N. 3. – 1995. – P. 104-131.
7. Александров В. В. Мягкое тестирование точности стабилизации и седловые точки в геометрических играх / В. В. Александров, Л. Ю. Блаженнова-Микулич, И. М. Гутиеррес-Ариас, С. С. Лемак // Вестник Московского университета. Серия 1. Математика, механика. – 2005. – № 1. – С. 43-50.
8. Мушик Э. Методы принятия технических решений / Мушик Э., Мюллер П. – М.: Мир, 1990. – 208 с.
9. Попов В. Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике / Попов В. Н. – М.: Атомиздат, 1976. – 256 с.
10. Березин Ф. А. Континуальный интеграл по траекториям в фазовом пространстве / Ф. А. Березин // Успехи математических наук. – 1980. – Т. 132, вып. 3. – С. 497-548.
11. Gregus M. On the deterministic computation of functional integrals in application to quantum mechanical problems / M. Gregus, Yu. Yu. Lobanov, O. V. Sidorova, E. P. Zhidkov // J. Comp. Appl. Math. – 1987. – V. 20. – P. 247-256.
12. Жидков Е. П. Приближённое вычисление кратных континуальных интегралов в многомерных задачах квантовой физики / Е.П.Жидков, Ю.Ю.Лобанов, Р.П.Шахбагян // Матем. моделирование. – 1990. – Т. 2, № 10. – С. 110-119.
13. Романюк В. В. Представлення одинадцяти випадків загального розв'язку однієї нестрогої вогнутої гри / В. В. Романюк // Вісник Хмельницького національного університету. Технічні науки. – 2008. – № 4. – С. 184-191.
14. Иванов В. В. Методы вычислений на ЭВМ / В. В. Иванов. – К.: Наук. думка, 1986. – 584 с.

Received May 7, 2010