

# ВЕСТНИК

ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

№ 11 (270)  
2012

ISSN 2075-809X

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА.  
МЕХАНИКА.  
ФИЗИКА»

Выпуск 6

Решением ВАК России включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет)

**Редакционная коллегия серии:**

д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.**

(отв. редактор),

к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.**

(отв. секретарь),

д.т.н., профессор **Гуревич С.Ю.**,

к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.**,

д.ф.-м.н., профессор **Менихес Л.Д.**,

д.т.н., профессор **Садаков О.С.**,

д.т.н., профессор **Сапожников С.Б.**,

д.т.н., профессор **Чернявский А.О.**

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-26455 выдано 13 декабря 2006 г. Федеральной службой по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России».

Периодичность выхода – 2 номера в год.

# СОДЕРЖАНИЕ

## Математика

КОВАЛЕВ Ю.М., КУРОПАТЕНКО В.Ф. Анализ инвариантности некоторых математических моделей многокомпонентных сред .....	4
ТАБАРИНЦЕВА Е.В., МЕНИХЕС Л.Д., ДРОЗИН А.Д. О решении граничной обратной задачи для параболического уравнения методом квазиобращения .....	8
ШТРАУС В.А., ТРУНК К. Некоторые пространства Соболева как пространства Понтрягина .....	14
УХОБОТОВ В.И., ГУЦИН Д.В. Однотипная задача управления с выпуклой целью при наличии помехи .....	24
ШПОНЬКО А.В. Автоморфизмы колец вычетов колец целых круговых полей.....	30
ЮЛДАШЕВ Т.К. Об обратной задаче для системы квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка.....	35

## Механика

БЕРЕЗИН И.Я., ПОРОШИН В.Б. Прогнозирование надежности конструкций с учетом стадии докритического развития усталостных трещин .....	42
РЕБЯКОВ Ю.Н., ЧЕРНЯВСКИЙ О.Ф. Деформационные свойства материалов при сочетании знакопеременного течения и формоизменения .....	47
САДАКОВ О.С., ШУЛЬЖЕНКО С.И. Численный анализ волн напряжений и деформаций в неупругом стержне .....	52

## Физика

БАЙТИНГЕР Е.М., ВЕКЕССЕР Н.А., КОВАЛЕВ И.Н., БЕХТЕРЕВ А.Н., ВИКТОРОВ В.В. Особенности строения многослоевых углеродных нанотрубок .....	56
ГЛАДКОВ В.Е., БЕРЕЗИН В.М., КУПЕРШЛЯК-ЮЗЕФОВИЧ Г.М. Физико-механические свойства электрокорундовых пластин, закристаллизованных в валках-кристаллизаторах .....	60
ДРОЗИН А.Д., ДУДОРОВ М.В., РОЩИН В.Е., ГАМОВ П.А., МЕНИХЕС Л.Д. Математическая модель образования кристаллических зародышей в переохлажденном расплаве эвтектического сплава.....	66
ДУДОРОВ М.В., ДРОЗИН А.Д., РОЩИН В.Е., ГАМОВ П.А., МЕНИХЕС Л.Д. Математическое описание кристаллизации методом виртуальных объемов .....	78
ИВАНОВА А.В., БЕСКАЧКО В.П. Оценка параметров крупнозернистой модели липидов квантово-химическими методами .....	89
МИРЗАЕВ Д.А., МИРЗОЕВ А.А., ОКИШЕВ К.Ю., ШАБУРОВ А.Д., РУЗАНОВА Г.Е., УРСАЕВА А.В. О равновесной концентрации вакансий в сплавах железа с водородом .....	97
МОРОЗОВ С.И., ЖЕРЕБЦОВ Д.А. Начальное распределение компонентов сплавов в эксперименте по температурно-программируемой десорбции .....	105
СВИРСКАЯ Л.М. Состояние высокой проводимости в системах с пониженной размерностью .....	109

---

## CONTENTS

### Mathematics

KOVALEV Yu.M., KUROPATENKO V.F. Analysis of the Invariance Some Mathematical Models of Multicomponent Media.....	4
TABARINTSEVA E.V., MENIKHES L.D., DROZIN A.D. On Solving an Inverse Boundary Problem for a Parabolic Equation by the Quasi-Reversibility Method.....	8
STRAUSS V.A., TRUNK C. Some Sobolev Spaces as Pontryagin Spaces.....	14
UKHOBOTOV V.I., GUSHCHIN D.V. A One-Type Control Problem With a Convex Goal in Case of Disturbance .....	24
SHPONKO A.V. Automorphisms of Residue Rings of Integer Rings of Circular Fields.....	30
YULDASHEV T.K. On an Inverse Problem for a System of Quazilinear Equations in Partial Derivatives of the First Order.....	35

### Mechanics

BEREZIN I.J., POROSHIN V.B. Reliability Prediction Considering the Stage of Subcritical Fatigue Cracks Growth .....	42
REBYAKOV Yu.N., CHERNIAVSKY O.F. Deformation properties of materials in combination of alternating plastic flow and ratcheting.....	47
SADAKOV O.S., SHULZHENKO S.I. Numerical analysis of stress and distortion waves in non-elastic rod.....	52

### Physics

BAITINGER E.M., VEKESSEER N.A., KOVALEV I.N., BECHETEV A.N., VIKTOROV V.V. Structure Features of Multilayer Carbon Nanotubes .....	56
GLADKOV V.E., BERZIN V.M., KUPERSHLYAK-YUZEFOVICH G.M. Physical and Mechanical Properties of Electrocorundum Plates, Crystallized in Roll-Crystallizers.....	60
DROZIN A.D., DUDOROV M.V., ROSHCHIN V.E., GAMOV P.A., MENIKHES L.D. Mathematical Description of the Nucleation in Supercooled Eutectic Melt.....	66
DUDOROV M.V., DROZIN A.D., ROSHCHIN V.E., GAMOV P.A., MENIKHES L.D. Mathematical Description of Crystallization by the Virtual Volume Method.....	78
IVANOVA A.V., BESKACHKO V.P. Estimation of Parameters of the Large-Grained Model of Lipids With Quantum-Chemical Methods.....	89
MIRZAEV D.A., MIRZOEV A.A., OKISHEV K.Yu., SHABUROV A.D., RUZANOVA G.E., URSAEVA A.V. On Equilibrium Vacancy Concentration in Iron-Hydrogen Alloys.....	97
MOROZOV S.I., ZHEREBTSOV D.A. The Initial Distribution of Alloy Components in the Experiment of Temperature Programming Desorption.....	105
SVIRSKAYA L.M. High-Conducting State in Low-Dimensional Systems .....	109

## АНАЛИЗ ИНВАРИАНТНОСТИ НЕКОТОРЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕД<sup>1</sup>

Ю.М. Ковалев<sup>2</sup>, В.Ф. Куропатенко<sup>3</sup>

Проведен анализ инвариантности относительно преобразования Галилея математической модели «замороженной» газозвеси. Показано, что математическая модель «замороженной» газозвеси не является инвариантной относительно преобразования Галилея. Это приводит к появлению фиктивного источникового члена в уравнении энергии.

*Ключевые слова:* математическая модель, инвариантность, многокомпонентная смесь.

В связи с развитием современной вычислительной техники резко возросла роль математического моделирования физических процессов, используемых в науке и технике. Более того, есть такие проблемы, когда математическое моделирование является единственным средством предварительного изучения явлений. Поэтому с особой остротой встает проблема адекватности математических моделей тем физическим процессам, которые они пытаются описывать. В природе практически нет чистых веществ, поэтому активно развиваются математические модели многокомпонентных сред [1, 2]. Для верификации расчетов используют известные экспериментальные данные. Очень важно, чтобы условия проведения расчетов и экспериментов совпадали. В настоящей статье на примере анализа математической модели замороженной газозвеси [3, 4] покажем, к чему может привести ситуация, когда расчеты и эксперимент проведены в разных системах координат.

При решении поставленной задачи предполагалось, что частицы твердой фазы неподвижны и несжимаемы. Это означает, что вместо газозвеси фактически рассматривается заполненная газом недеформируемая решетка. Твердые частицы имитируют ее узлы, а связи между узлами решетки не оказывают влияния на газодинамическое течение, т.е. используется модель «замороженной» газозвеси, представленная в работах [3, 4] при изучении ослабления ударных волн. Поскольку частицы неподвижны и несжимаемы, то их объемная концентрация и, следовательно, объемная концентрация газа постоянны.

С учётом сказанного выше система уравнений из [3, 4], описывающая в одномерном случае течение газа через решётку, имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x} - F, \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u E)}{\partial x} + \frac{\partial(Pu)}{\partial x} = -Q. \quad (3)$$

Здесь  $P$  – давление,  $\rho$  – плотность,  $u$  – скорость,  $t$  – время,  $F$  – силы межфазного взаимодействия,  $E$  и  $\mathcal{E}$  – удельная полная и удельная внутренняя энергии газа;  $Q$  – интенсивность теплообмена между газом и частицами. Функция  $F$  зависит от разности скоростей газа и частиц, функция  $Q$  – от разности температур газа и частиц. Функции  $F$  и  $Q$  не изменяются при переходе в новую систему координат.

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 10-01-00032

<sup>2</sup> Ковалев Юрий Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой вычислительной механики сплошных сред, Южно-Уральский государственный университет  
E-mail yum\_kov@mail.ru

<sup>3</sup> Куропатенко Валентин Федорович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра вычислительной механики сплошных сред, Южно-Уральский государственный университет  
E-mail v.f.kuropatenko@rambler.ru

Проведем анализ инвариантности системы уравнений (1)–(3) относительно преобразования Галилея. С этой целью перейдем в новую систему координат, которая движется с постоянной скоростью  $D$  относительно старой системы координат. Скорость в новой системе координат будет равна

$$u_H = u + D, \quad (4)$$

координата определяется из уравнения

$$x_H = x + Dt. \quad (5)$$

Производные по координате и времени определяются следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_H}, \quad \left( \frac{\partial}{\partial t} \right) = \left( \frac{\partial}{\partial t} \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x_H} \right) D \quad (6)$$

После перехода в движущуюся систему координат значок  $H$  будем опускать. Следовательно, уравнение неразрывности газовой фазы (1) с учетом (4)–(6) принимает следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} D + \frac{\partial (\rho(u - D))}{\partial x} = 0, \quad (7)$$

который после сокращения членов с противоположными знаками совпадает с (1).

Запишем теперь уравнение сохранения импульса газовой фазы (2) в новой системе координат:

$$\frac{\partial \rho(u - D)}{\partial t} + \frac{\partial \rho(u - D)}{\partial x} D + \frac{\partial \rho(uD)^2}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} + F = 0.$$

После несложных преобразований оно принимает вид

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} + F = \omega_1(D), \quad (8)$$

где

$$\omega_1(D) = D \left( -\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} - 2 \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) + D^2 \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial \rho}{\partial x} \right). \quad (9)$$

Подставив (1) в (9) и сократив подобные члены, получим

$$\omega_1(D) = 0 \quad (10)$$

и таким образом уравнение (8) совпадает с уравнением (2).

И, наконец, перейдем в новую систему координат в уравнении для удельной энергии газовой фазы (3). Учитывая, что  $E = \varepsilon + \frac{u^2}{2}$ , запишем уравнение (3) в новой системе координат:

$$\frac{\partial \rho \left( \varepsilon + \frac{1}{2} (u - D)^2 \right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho \left( \varepsilon + \frac{1}{2} (u - D)^2 \right)}{\partial x} D + \frac{\partial \rho (u - D) \left( \varepsilon + \frac{1}{2} (u - D)^2 \right)}{\partial x} + \frac{\partial P (u - D)}{\partial x} + Q = 0.$$

Раскрыв скобки и сгруппировав члены, получим уравнение для удельной полной энергии газовой фазы в новой системе координат, распространяющейся с постоянной скоростью  $D$ ,

$$\frac{\partial \rho \left( \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \left( \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial x} + \frac{\partial P u}{\partial x} + Q = \omega_2, \quad (11)$$

где  $\omega_2 = -DF$ .

Как следует из уравнений (8), (10) и (11), для модели «замороженной» газовой смеси из [3, 4] уравнение неразрывности газовой фазы и уравнение сохранения импульса газовой фазы являются инвариантными относительно преобразования Галилея, а уравнение энергии (3) не является инвариантным.

Оценим последствия неинвариантности уравнения энергии. В уравнении (11) исключим кинетическую энергию с помощью уравнения (2). Для этого умножим (2) на  $u$  и вычтем из (11). Затем умножим (1) на  $\varepsilon$  и вычтем из (11). В результате получим уравнение для внутренней энергии:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} - \frac{P}{\rho^2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{Q}{\rho} = \left( \frac{u - D}{\rho} \right) F. \quad (12)$$

Перейдём к субстанциональным производным, заменим плотность удельным объёмом  $V = 1/\rho$  и сравним полученное уравнение с уравнением для удельной внутренней энергии, как функции энтропии и удельного объёма:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} + \frac{dV}{dt} = T \frac{dS}{dt}. \quad (13)$$

В результате из (12) и (13) получим уравнение производства энтропии газа

$$T \frac{dS}{dt} = \frac{1}{\rho} (F(u - D) - Q).$$

Если разделить энтропию на две части

$$S = S_{pH} + S_G,$$

где  $S_{pH}$  определяется «физикой» модели, а  $S_G$  – Галилеевой неинвариантностью, то мы получим уравнение производства энтропии  $S_G$

$$T \frac{dS_G}{dt} = \frac{F}{\rho} (u - D), \quad (14)$$

возникшее исключительно из-за того, что авторы модели [3, 4] пренебрегли фундаментальным принципом механики.

К сожалению, принцип инвариантности к преобразованию Галилея не выполняется в ряде моделей многокомпонентных сред, публикуемых в журналах. Такие модели не способны прогнозировать результаты тех физических процессов, для моделирования которых они предназначены.

#### Литература

1. Нигматулин, Р.И. Основы механики гетерогенных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1978. – 336 с.
2. Куропатенко, В.Ф. Новые модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко // ИФЖ. – 2011. – Т. 84, № 1. – С. 74–92.
3. Кругликов, Б.С. Ослабление воздушных ударных волн экранирующими решётками / Б.С. Кругликов, А.Г. Кутушев // ФГВ. – 1988. – № 1. – С. 115–117.
4. Кругликов, Б.С. Ослабление воздушных ударных волн слоями запыленного газа и решетками / Б.С. Кругликов, А.Г. Кутушев // ПМТФ. – 1988. – № 1. – С. 51–57.

*Поступила в редакцию 13 марта 2012 г.*

## ANALYSIS OF THE INVARIANCE SOME MATHEMATICAL MODELS OF MULTICOMPONENT MEDIA

Yu.M. Kovalev<sup>1</sup>, V.F. Kuropatenko<sup>2</sup>

The analysis of the invariance under the Galilean transformation of the mathematical model of "frozen" gas suspension is done. It is shown that the mathematical model of the "frozen" gas suspension is not invariant under the Galilean transformations. This leads to appearance of a fictitious source term in the energy equation.

*Keywords: mathematical model, invariance, multi-component mixture.*

### References

1. Nigmatulin R.I. *Osnovy mekhaniki geterogennykh sred* (Fundamentals of mechanics of heterogeneous media). Moscow, Nauka, 1978. 336 p. (in Russ.).
2. Kuropatenko V.F. *Novye modeli mekhaniki sploshnykh sred* (New models of continuum mechanics). *Inzhenerno-Fizicheskii Zhurnal*. 2011. Vol. 84, no 1. pp. 74–92. (in Russ.). [Kuropatenko V.F. New models of continuum mechanics. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2011. Vol. 84, no. 1. pp. 77–99.]
3. Kruglikov B.S., Kutushev A.G. *Fizika gorenija i vzryva*. 1988. no. 1. pp. 115–117. (in Russ.).
4. Kruglikov B.S., Kutushev A.G. *Oslablenie vozdushnykh udarnykh voln slojami zapylennogo gaza i reshetkami* (Attenuation of air shock layers of dust and gas grills). *Prikladnaja mekhanika i tekhnicheskaja fizika*. 1988. no. 1. pp. 51–57. (in Russ.).

---

<sup>1</sup> Kovalev Yury Mikhailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Computational Continuum Mechanics Department, South Ural State University.

E-mail: yum\_kov@mail.ru

<sup>2</sup> Kuropatenko Valentin Fedorovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Computational Continuum Mechanics Department, South Ural State University

E-mail: v.f.kuropatenko@rambler.ru

# О РЕШЕНИИ ГРАНИЧНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ МЕТОДОМ КВАЗИОБРАЩЕНИЯ<sup>1</sup>

Е.В. Табаринцева<sup>2</sup>, Л.Д. Менихес<sup>3</sup>, А.Д. Дрозин<sup>4</sup>

Рассматривается обратная граничная задача для параболического уравнения. Для построения устойчивых приближенных решений данной задачи используется метод квазиобращения, состоящий в замене исходной задачи задачей для гиперболического уравнения с малым параметром. Получена точная по порядку оценка погрешности данного метода на одном из классов равномерной регуляризации.

*Ключевые слова.* обратная задача, метод приближенного решения, оценка погрешности.

## Введение

В работе рассматривается одномерная постановка обратной граничной задачи теплообмена. Приближенное решение строится методом квазиобращения, который состоит в замене неустойчивой исходной задачи устойчивой задачей для гиперболического уравнения с «малым» параметром. Получена точная по порядку оценка погрешности построенного приближенного решения на одном из классов корректности обратной граничной задачи. Доказана оптимальность по порядку метода квазиобращения с выбором параметра регуляризации по схеме М.М. Лаврентьева на рассмотренном классе корректности.

Вопросы теплообмена имеют особое значение в таких областях техники, как авиационная и ракетно-космическая техника, энергетика, металлургия [1]. При этом большое значение имеют экспериментальные исследования, стендовая и натурная отработка тепловых режимов, создание эффективных методов диагностики и идентификации теплообменных процессов по результатам экспериментов и испытаний. В основу этих методов могут быть положены решения обратных задач теплообмена, причем в ряде случаев обратные задачи являются практически единственным средством получения необходимых результатов. Методы обратных задач обладают высокой информативностью и позволяют проводить экспериментальные исследования в условиях, максимально приближенных к натурным.

Диагностика и идентификация процессов теплообмена могут быть связаны с решением обратных задач различных типов, однако граничные обратные задачи – это один из наиболее важных и распространенных в тепловом моделировании классов задач. Граничные обратные задачи представляют и методический интерес, так как задачи данного типа, по сравнению с коэффициентными и геометрическими задачами, как правило, имеют большую склонность к искажению результатов, связанную с некорректностью постановок, априорная информация о точном решении граничных обратных задач бывает ограниченной.

Рассмотренная в данной работе одномерная постановка обратной граничной задачи является основной расчетной моделью, для которой должны быть построены эффективные методы обработки экспериментальных данных.

## 1. Постановка задачи

Рассмотрим обратную граничную задачу, т.е. задачу восстановления функции  $v(t) = u(1, t) \in L_2[0, \infty)$  (граничного условия), где функция  $u(x, t)$  удовлетворяет условиям:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (0 < x < 1, t > 0), \quad (1)$$

<sup>1</sup> Работа проводилась при финансовой поддержке РФФИ, проект 07-01-96001

<sup>2</sup> Табаринцева Елена Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: eltab@rambler.ru

<sup>3</sup> Менихес Леонид Давидович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

<sup>4</sup> Дрозин Александр Дмитриевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой математического анализа, декан механико-математического факультета, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: drozin@mail.ru



$$u(x, 0) = 0; u(0, t) = 0; u_x(0, t) = \varphi(t).$$

Здесь  $u(x, \cdot) \in C^2(0; 1) \cap C[0; 1]$ ;  $u(\cdot, t) \in W_2^1[0; \infty)$ ;  $\varphi(t) \in L_2[0, \infty)$  – заданная функция.

Задача вычисления граничного условия для уравнения (3) поставлена некорректно [1]. Будем предполагать, что для заданной функции  $\varphi(t) \in L_2[0, \infty)$  обратная граничная задача имеет решение  $v(t) \in L_2[0, \infty)$ , принадлежащее множеству

$$M = \{v(t) : \|v(t)\|_{L_2[0, \infty)}^2 + \|v'(t)\|_{L_2[0, \infty)}^2 \leq r^2\},$$

но точные значения функции  $\varphi(t)$  не известны, а известны функция  $\varphi_\delta$  и уровень погрешности  $\delta$  такие, что  $\|\varphi_\delta - \varphi\| \leq \delta$ . Требуется построить приближенное решение обратной граничной задачи и оценить его уклонение от точного решения.

## 2. Точное решение обратной граничной задачи

Рассмотрим следующие линейные нормированные пространства:  $L_2[0, \infty)$  – пространство суммируемых с квадратом функций на  $[0; \infty)$  (принимаяющих действительные значения);  $\Phi$  – пространство комплекснозначных функций, заданных на  $[0; \infty)$ , допускающих аналитическое продолжение в нижнюю полуплоскость и таких, что для всех  $\sigma < 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |v(t + i\sigma)|^2 dt \leq C.$$

Рассмотрим преобразование Фурье функций, суммируемых с квадратом на  $[0; \infty)$ .

**Лемма.** Оператор  $F : L_2[0, \infty) \rightarrow \Phi$ , действующий по правилу

$$Fv = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} v(t)e^{-i\lambda t} dt,$$

является изометрией.

Из априорных оценок решения первой краевой задачи для уравнения теплопроводности следует, что к исходной задаче применимо преобразование Фурье на полупрямой  $t \in (0, \infty)$ . Применяя к исходной обратной задаче преобразование Фурье по  $t$ , получим следующую задачу для обыкновенного линейного уравнения: требуется определить функцию  $\tilde{v}(\lambda) = \tilde{u}(1, \lambda)$ , где  $\tilde{u}(x, \lambda)$  удовлетворяет условиям:

$$\tilde{u}_{xx}(x, \lambda) = i\lambda \tilde{u}(x, \lambda); \quad \tilde{u}(0, \lambda) = 0; \quad \tilde{u}_x(0, \lambda) = \tilde{\varphi}(\lambda).$$

Решая полученную задачу, находим образ точного решения исходной задачи:

$$\tilde{v}(\lambda) = \frac{\mu_0 \sqrt{\lambda}}{\mu_0 \sqrt{\lambda}} \tilde{\varphi}.$$

Здесь  $\mu_0 = \frac{1+i}{\sqrt{2}}$ ;  $\tilde{v}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} v(t)e^{-i\lambda t} dt$  – образ Фурье функции  $v(t)$  ( $\lambda > 0$ ).

## 3. Построение приближенного решения обратной граничной задачи

Для построения устойчивого приближенного решения исходной обратной задачи воспользуемся методом квазиобращения, состоящим в замене неустойчивой исходной задачи устойчивой задачей для уравнения с «малым» параметром. Метод квазиобращения был предложен в [5], применение классических вариантов метода квазиобращения к решению одной из обратных граничных задач рассмотрено в [6]. Мы будем использовать вариант метода квазиобращения, предложенный в [7] и обоснуем результаты, приведенные в [7] без доказательства.

Рассмотрим вспомогательное гиперболическое уравнение с «малым» параметром:

$$\varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2)$$

и следующие начальные и граничные условия:

$$u(x, 0) = 0; u(0, t) = 0; u_x(0, t) = \tilde{\varphi}_\delta(t).$$

Здесь  $u(x, \cdot) \in C^2(0; 1) \cap C[0; 1]$ ;  $u(\cdot, t) \in W_2^2[0; \infty)$ ;  $\varepsilon > 0$  – постоянная времени (время релаксации теплового напряжения) [4]. В качестве приближенного решения задачи будем рассматривать функцию  $u_\delta(t) = u_\delta^\varepsilon(1, t)$ , где  $u_\delta^\varepsilon(x, t)$  удовлетворяет условиям (2) и  $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$ .

Из априорной оценки точного решения первой краевой задачи для гиперболического уравнения следует законность применения к задаче для уравнения (2) преобразования Фурье. Применяя преобразование Фурье, получаем следующую задачу Коши для линейного уравнения:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{xx}(x, \lambda) &= i\lambda \tilde{u}(x, \lambda) - \varepsilon \lambda^2 \tilde{u}(x, \lambda); \\ \tilde{u}(0, \lambda) &= 0; \quad \tilde{u}_x(0, \lambda) = \tilde{\varphi}(\lambda). \end{aligned}$$

Таким образом, в качестве приближенного решения исходной обратной задачи рассматривается функция  $v_\delta^\varepsilon(t) = R_\varepsilon \varphi_\delta$ , образ Фурье которой имеет вид

$$\tilde{v}_\delta^\varepsilon(\lambda) = \frac{\sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}}{\sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}} \tilde{\varphi}_\delta.$$

Здесь  $R_\varepsilon$  – оператор, регуляризующий исходную обратную задачу,  $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$ .

**4. Оценка погрешности приближенного решения**

Рассмотрим оценку погрешности приближенного решения обратной граничной задачи на множестве  $M$ .

В качестве характеристики точности построенного приближенного решения используется величина

$$\Delta(\varepsilon, \delta) = \sup \{ \|v_\delta^\varepsilon - v\| : v \in M; \|\varphi - \varphi_\delta\| \leq \delta \}.$$

Используем очевидную оценку

$$\Delta(\varepsilon, \delta) \leq \Delta_1(\varepsilon) + \Delta_2(\varepsilon, \delta),$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_2(\varepsilon, \delta) &= \sup_{\|\varphi - \varphi_\delta\| \leq \delta} \|R_\varepsilon(\varphi - \varphi_\delta)\|; \\ \Delta_1(\varepsilon) &= \sup_{v \in M} \|R_\varepsilon \varphi - v\|. \end{aligned}$$

Оценим величину  $\Delta_2(\varepsilon, \delta)$ :

$$\Delta_2(\varepsilon, \delta) \leq \delta \sup_{\lambda > 0} \left| \frac{\text{sh} \sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}}{\sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}} \right| \leq \delta \sup_{\lambda > 0} \frac{\text{sh}^2 a + \sin^2 b}{\sqrt{\lambda^2 + \varepsilon^2 \lambda^4}},$$

где

$$a^2 = \frac{1}{2}(\lambda\sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} - \varepsilon\lambda^2); \quad b^2 = \frac{1}{2}(\lambda\sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} + \varepsilon\lambda^2).$$

Оценим сначала величину  $A(\lambda) = a^2(\lambda)$ . Рассмотрим уравнение

$$A'(\lambda) = 0. \tag{3}$$

Из (3) следует

$$(\varepsilon\lambda - \sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2})^2 = 0. \tag{4}$$

Уравнение (4), очевидно, не имеет решений на луче  $\lambda \in [0; \infty)$ , т.е. функция  $A(\lambda)$  не имеет критических точек. Вычислим предел функции  $A(\lambda)$  при  $\lambda \rightarrow \infty$ :

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} A(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{2}(\lambda\sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} - \varepsilon\lambda^2) = \frac{1}{4\varepsilon}.$$

Следовательно,  $a^2(\lambda) \leq \frac{1}{4\varepsilon}$  при  $\lambda \geq 0$ .

Рассмотрим функцию

$$p(\lambda) = \left| \frac{\text{sh} \sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}}{\sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}} \right|.$$

Так как

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} p(\lambda) = \lim_{z \rightarrow 0} \left| \frac{\operatorname{sh} z}{z} \right| = |\operatorname{sh}'(0)| = |\operatorname{ch}(0)| = 1,$$

то существует число  $\lambda_0 > 0$  такое, что для всех  $0 \leq \lambda \leq \lambda_0$  выполняется неравенство  $|p(\lambda)| \leq 2$ . Следовательно,

$$\sup_{\lambda \geq 0} |p(\lambda)| \leq \sup_{0 \leq \lambda \leq \lambda_0} |p(\lambda)| + \sup_{\lambda \geq \lambda_0} |p(\lambda)| \leq C e^{2\sqrt{\varepsilon}}, \quad (5)$$

где  $C$  – постоянная, не зависящая от  $\varepsilon$ . Из (5) следует, что

$$\Delta_2(\varepsilon, \delta) \leq C \delta e^{2\sqrt{\varepsilon}}.$$

Оценим величину  $\Delta_1(\varepsilon)$ . Из определения множества  $M$  и изометричности преобразования Фурье следует, что для образа Фурье функции  $v(t)$  выполняется условие

$$\left\| \sqrt{1 + \lambda^2} \tilde{v}(\lambda) \right\|_{L_2[0, \infty)} \leq r.$$

Следовательно,

$$\Delta_1(\varepsilon) = \sup_{\nu \in M} \left\| \left( \frac{\mu_0 \sqrt{\lambda} \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}}{\sqrt{1 + i\varepsilon\lambda} \mu_0 \sqrt{\lambda}} - 1 \right) \tilde{v}(\lambda) \right\| \leq r \sup_{\lambda \geq 0} \frac{1}{\sqrt{1 + \lambda^2}} \left| \frac{\mu_0 \sqrt{\lambda} \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}}{\sqrt{1 + i\varepsilon\lambda} \mu_0 \sqrt{\lambda}} - 1 \right|. \quad (6)$$

Из неравенства (6) следует

$$\Delta_1(\varepsilon) \leq r \sup_{\lambda \geq 0} \frac{\left| (\mu_0 \sqrt{\lambda} \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}) - \mu_0 \sqrt{\lambda} \right|}{\sqrt{1 + \lambda^2} |\sqrt{1 + i\varepsilon\lambda} \mu_0 \sqrt{\lambda}|} + r \sup_{\lambda \geq 0} \frac{|1 - \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}|}{\sqrt{1 + \lambda^2} |\sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}|}. \quad (7)$$

Оценим второе слагаемое в (7). Рассмотрим равенство

$$\frac{|1 - \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}|}{\sqrt{1 + \lambda^2} |\sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}|} = \frac{\varepsilon\lambda}{\sqrt{1 + \lambda^2} \sqrt[4]{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} |1 + \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}|}. \quad (8)$$

Воспользуемся неравенствами:

$$\sqrt{1 + \lambda^2} > \lambda; \quad \sqrt[4]{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} > 1 \text{ при } \lambda \geq 0; \quad |1 + \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}| > 1,$$

с учетом которых из (8) следует

$$\frac{|1 - \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}|}{\sqrt{1 + \lambda^2} |\sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}|} \leq \varepsilon. \quad (9)$$

Оценим первое слагаемое в (7). Из равенства

$$\operatorname{sh}(\alpha - \beta) = 2 \operatorname{sh} \left( \frac{\alpha - \beta}{2} \right) \operatorname{ch} \left( \frac{\alpha + \beta}{2} \right)$$

дробь в первом слагаемом в (7) принимает вид

$$\frac{|\operatorname{sh}(\mu_0 \sqrt{\lambda} \sqrt{1 + i\varepsilon\lambda}) - \operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\lambda}|}{\sqrt{1 + \lambda^2} |\sqrt{1 + i\varepsilon\lambda} \mu_0 \sqrt{\lambda}|} = \frac{2 |\operatorname{sh} z_1| |\operatorname{ch} z_2|}{\sqrt{1 + \lambda^2} \sqrt[4]{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} |\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\lambda}|},$$

где

$$z_1 = \frac{1}{2}(\mu_0 \sqrt{\lambda} - \sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}); \quad z_2 = \frac{1}{2}(\mu_0 \sqrt{\lambda} + \sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}).$$

Заметим, что

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{2 |\operatorname{sh} z_1| |\operatorname{ch} z_2|}{\sqrt{1 + \lambda^2} \sqrt[4]{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} |\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\lambda}|} = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\varepsilon\lambda^2}{\sqrt{\lambda} |\mu_0 \sqrt{\lambda} + \sqrt{i\lambda - \varepsilon\lambda^2}|} = 0.$$

Следовательно, найдется  $\lambda_1 > 0$  такое, что при  $0 \leq \lambda \leq \lambda_1$  выполняется неравенство

$$\frac{2 |\operatorname{sh} z_1| |\operatorname{ch} z_2|}{\sqrt{1 + \lambda^2} \sqrt[4]{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} |\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\lambda}|} < \varepsilon.$$

Рассмотрим оценку дроби при  $\lambda \geq \lambda_1$ . Заметим, что

$$\operatorname{Re} z_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{2}} (1 - \sqrt{\sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} - \varepsilon \lambda}) = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{2}} - a \right); \quad \operatorname{Re} z_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{2}} (1 + \sqrt{\sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} - \varepsilon \lambda}) = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{2}} + a \right).$$

Следовательно,

$$2 |\operatorname{sh} z_1| |\operatorname{ch} z_2| \leq \frac{1}{2} \operatorname{sh} \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{2}} - a \right) \operatorname{ch} \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{\lambda}{2}} + a \right) \leq e^{\sqrt{\frac{\lambda}{2}}} (1 - e^{-(\sqrt{\frac{\lambda}{2}} - a)}). \quad (10)$$

Оценим величину  $\sqrt{\frac{\lambda}{2}} - a$  сверху. Так как  $\sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} - \varepsilon \lambda \leq 1$ , то

$$\sqrt{\frac{\lambda}{2}} - a \leq \sqrt{\frac{\lambda}{2}} (1 + \varepsilon \lambda - \sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2}) = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \frac{2\varepsilon \lambda}{1 + \varepsilon \lambda + \sqrt{1 + \varepsilon^2 \lambda^2}} \leq \sqrt{2\varepsilon b d a} \lambda^{3/2}. \quad (11)$$

Заметим также, что

$$|\mu_0 \sqrt{\lambda}| \geq \sqrt{\lambda/2} (1 - e^{-2\sqrt{2}\lambda_1}). \quad (12)$$

Из (10)–(12) следует, что при  $\lambda > \lambda_1$

$$\frac{2 |\operatorname{sh} z_1| |\operatorname{ch} z_2|}{\sqrt{1 + \lambda^2} \sqrt[4]{1 + \varepsilon^2 \lambda^2} |\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\lambda}|} \leq C \frac{1 - e^{-\sqrt{2\varepsilon} \lambda^{3/2}}}{\lambda}. \quad (13)$$

Рассмотрим функцию  $F(\lambda) = \frac{1 - e^{-\sqrt{2\varepsilon} \lambda^{3/2}}}{\lambda}$ . Заметим, что  $\lim_{\lambda \rightarrow 0} F(\lambda) = 0$ ;  $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} F(\lambda) = 0$ . Критические точки функции  $F(\lambda)$  удовлетворяют условию

$$e' = 1 + \frac{3}{2} t, \quad (14)$$

где  $t = \sqrt{2\varepsilon} \lambda^{3/2}$ . Из уравнения (14) следует, что функция  $F(\lambda)$  имеет единственную критическую точку  $\lambda_2$ , удовлетворяющую условию  $\frac{1}{2} < \lambda_2 < 1$ . Следовательно,

$$\Delta_1(\varepsilon) \leq CF(\lambda_2) = C \frac{1 - e^{-\sqrt{2\varepsilon} \lambda_2^{3/2}}}{\lambda_2} \leq C_1 \varepsilon.$$

Выберем зависимость  $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$  по схеме М.М. Лаврентьева, т.е. зависимость  $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$  выбирается из условия

$$\delta e^{\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}}} = c_0 r \delta.$$

Имеем  $\varepsilon \leq \frac{c}{\ln^2(r/\delta)}$ . Следовательно, существуют числа  $C > 0$ ,  $\delta_1 > 0$  такие, что для всех  $\delta < \delta_1$  выполняется неравенство

$$\Delta(\varepsilon(\delta), \delta) \leq \frac{C}{\ln^2(r/\delta)}. \quad (15)$$

Из (15) с учетом оценки погрешности оптимального метода решения обратной граничной задачи на множестве  $M$ , полученной в работе [2], доказана следующая теорема.

**Теорема.** Метод квазиобращения с выбором параметра регуляризации по схеме М.М. Лаврентьева оптимален по порядку на множестве  $M$ .

### Литература

1. Алифанов, О.М. Экстремальные методы решения некорректных задач / О.М. Алифанов, Е.А. Артюхин, С.В. Румянцев. – М.: Наука, 1988. – 288 с.
2. Танана, В.П. Об одном подходе к приближению разрывного решения некорректно поставленной задачи / В.П. Танана, Е.В. Табаринцева // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2005. – Т. 8, № 1(21). – С. 130–142.
3. Фридман, А. Уравнения с частными производными параболического типа / А. Фридман. – М.: Мир, 1968. – 428 с.

4. Беляев, Н.М. Методы теории теплопроводности: учеб. пособие для вузов: в 2-х ч. / Н.М. Беляев, А.А. Рядно. – М.: Высшая школа, 1982. – Ч. 1. – 327 с.; Ч. 2. – 304 с.
5. Латтес, Р. Метод квазиобращения и его приложения / Р. Латтес, Ж.-Л. Лионс. – М.: Мир, 1970. – 336 с.
6. Самарский, А.А. Вычислительная теплопередача / А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 782 с.
7. Табаринцева, Е.В. Один численный метод решения обратной задачи тепловой диагностики / Е.В. Табаринцева, А.С. Кутузов // Наука ЮУрГУ. – 2009 – Т. 2. – С. 161–164.

Поступила в редакцию 28 февраля 2012 г.

## ON SOLVING AN INVERSE BOUNDARY PROBLEM FOR A PARABOLIC EQUATION BY THE QUASI-REVERSIBILITY METHOD

E.V. Tabarintseva<sup>1</sup>, L.D. Menikhes<sup>2</sup>, A.D. Drozin<sup>3</sup>

An inverse boundary problem for a parabolic equation is analyzed in the article. For the stable approximate solutions of the given problem the quasi-reversibility method is used. It consists in changing the original problem with a problem for hyperbolic equation with a small parameter. A sharp order error estimation of the method at one of the uniform regularization set is obtained.

*Keywords: inverse problem; approximate method; error estimation.*

### References

1. Alifanov O.M., Artjukhin E.A., Rumjancev S.V. *Ehktremal'nye metody reshenija nekorrektnykh zadach* (Extreme methods for solving incorrect problems). Moscow, Nauka, 1988. 288 p. (in Russ.).
2. Tanana V.P., Tabarintseva E.V. Ob odnom podkhode k priblizheniju razryvnogo reshenija nekorrektno postavlennoj zadachi (An approach to the approximation of discontinuous solutions of ill-posed problem) // *Sibirskij zhurnal industrial'noj matematiki*. 2005. Vol. 8, no. 1(21). pp. 130–142. (in Russ.).
3. Fridman A. *Uravnenija s chastnymi proizvodnymi parabolicheskogo tipa* (Partial differential equations of parabolic type). Moscow, Mir, 1968. 428 p. (in Russ.). [Friedman A. Partial Differential Equations of Parabolic Type. Krieger Pub Co. 1983. 347 p.]
4. Beljaev N.M., Rjadno A.A. *Metody teorii teploprovodnosti: ucheb. posobie dlja vuzov: v 2-kh ch.* (Methods of the theory of heat conduction: studies manual for high schools in 2 parts). Moscow, Vysshaja shkola, 1982. Part 1. 327 p.; Part 2. 304 p. (in Russ.).
5. Lattes R., Lions Zh.-L. *Metod kvaziobrashhenija i ego prilozhenija* (The Method of Quasi-reversibility and its applications). Moscow, Mir, 1970. 336 p. [Lattes R., Lions J.-L. The Method of Quasi-reversibility. American Eisevier, New York, 1969. 388 p.]
6. Samarskij A.A., Vabishhevich P.N. *Vychislitel'naja teploperedacha* (Computational Heat Transfer). Moscow, Editorial URSS, 2003. 782 p. (in Russ.).
7. Tabarintseva E.V., Kutuzov A.S. *Odin chislennyj metod reshenija obratnoj zadachi teplovoj diagnostiki* (A numerical method for solving the inverse problem of thermal diagnostics). Nauka JuUrGU. 2009. T. 2. pp. 161–164.

<sup>1</sup> Tabarintseva Elena Vladimirovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Functional Analysis Department, South Ural State University.

E-mail: eltab@rambler.ru

<sup>2</sup> Menikhes Leonid Davidovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of Functional Analysis Department, South Ural State University.

E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

<sup>3</sup> Drozin Aleksandr Dmitrievich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Head of the Mathematical Analysis Department, Head of the Faculty of Mathematics and Mechanics, South Ural State University.

E-mail: drozin@mail.ru

# SOME SOBOLEV SPACES AS PONTRYAGIN SPACES<sup>1</sup>

V.A. Strauss<sup>2</sup>, C. Trunk<sup>3</sup>

We show that well known Sobolev spaces can quite naturally be treated as Pontryagin spaces. This point of view gives a possibility to obtain new properties for some traditional objects such as simplest differential operators.

Keywords: Function spaces, Pontryagin spaces, selfadjoint operators, differential operators

## Introduction

Let  $\mathcal{H}$  be a separable Hilbert space with a scalar product  $(\cdot, \cdot)$ .  $\mathcal{H}$  is said to be an indefinite metric space if it is equipped by a sesquilinear continuous Hermitian form (indefinite inner product)  $[\cdot, \cdot]$  such that the corresponding quadratic form has indefinite sign (i.e.  $[x, x]$  takes positive, negative and zero values). The indefinite inner product can be represented in the form  $[\cdot, \cdot] = [G\cdot, \cdot]$ , where  $G$  is a so-called Gram operator. The operator  $G$  is bounded and self-adjoint. If the Gram operator for an indefinite metric space is boundedly invertible and its invariant subspace corresponding to the negative spectrum of  $G$  is finite-dimensional, let's say  $\kappa$ -dimensional, the space is called a Pontryagin space with  $\kappa$  negative squares. There are a lot of problems in different areas of mathematics, mechanics or physics that can be naturally considered as problems in terms of Operator Theory in Pontryagin spaces. We have no aim to give here an overview on this theory and its application. We refer only to the standard text books [1, 2, 10] and to [14] for a brief introduction.

Our scope is a modest illustration of some singular situations that shows an essential difference between Operator Theory in Hilbert spaces and in Pontryagin spaces. For this goal we use Sobolev spaces that represents a new approach.

## 1. Preliminaries

A Krein space  $(\mathcal{K}, [\cdot, \cdot])$  is a linear space  $\mathcal{K}$  which is equipped with an (indefinite) inner product (i.e., a hermitian sesquilinear form)  $[\cdot, \cdot]$  such that  $\mathcal{K}$  can be written as

$$\mathcal{K} = \mathcal{G}_+ \dot{+} \mathcal{G}_- \quad (1)$$

where  $(\mathcal{G}_\pm, \pm[\cdot, \cdot])$  are Hilbert spaces and  $\dot{+}$  means that the sum of  $\mathcal{G}_+$  and  $\mathcal{G}_-$  is direct and  $[\mathcal{G}_+, \mathcal{G}_-] = 0$ . The norm topology on a Krein space  $\mathcal{K}$  is the norm topology of the orthogonal sum of the Hilbert spaces  $\mathcal{G}_\pm$ . It can be shown that this norm topology is independent of the particular decomposition (1); all topological notions in  $\mathcal{K}$  refer to this norm topology and  $\|\cdot\|$  denotes any of the equivalent norms. Krein spaces often arise as follows: In a given Hilbert space  $(\mathcal{G}, (\cdot, \cdot))$ , every bounded self-adjoint operator  $G$  in  $\mathcal{G}$  with  $0 \in \rho(G)$  induces an inner product

$$[x, y] := (Gx, y), \quad x, y \in \mathcal{G}, \quad (2)$$

such that  $(\mathcal{G}, [\cdot, \cdot])$  becomes a Krein space; here, in the decomposition (1), we can choose  $\mathcal{G}_+$  as the spectral subspace of  $\mathcal{G}$  corresponding to the positive spectrum of  $G$  and  $\mathcal{G}_-$  as the spectral subspace of  $\mathcal{G}$  corresponding to the negative spectrum of  $G$ . A subspace  $\mathcal{L}$  of a linear space  $\mathcal{K}$  with inner product  $[\cdot, \cdot]$  is called non-degenerated if there exists no  $x \in \mathcal{L}, x \neq 0$ , such that  $[x, \mathcal{L}] = 0$ , otherwise  $\mathcal{L}$  is called degenerated; note that a Krein space  $\mathcal{K}$  is always non-degenerated, but it may have degenerated subspaces. An element  $x \in \mathcal{K}$  is called positive (non-negative, negative, non-positive, neutral, respectively) if  $[x, x] > 0$  ( $\geq 0$ ,  $< 0$ ,  $\leq 0$ ,  $= 0$ , respectively); a subspace of  $\mathcal{K}$  is called positive (non-negative, etc.,

<sup>1</sup> V. Strauss gratefully acknowledges support by DFG, Grant No. TR 903/3-1.

<sup>2</sup> Strauss Vladimir Abramovich is Ph. D., Departamento de Matemáticas, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela.  
E-mail: str@usb.ve

<sup>3</sup> Carsten Trunk is Dr. rer. nat., Professor, Analysis and Systems Theory Group, Technische Universität Ilmenau, Institut für Mathematik, Ilmenau, Germany.

E-mail: carsten.trunk@tu-ilmenau.de

respectively), if all its nonzero elements are positive (non-negative, etc., respectively). For the definition and simple properties of Krein spaces and linear operators therein we refer to [2], [13] and [1].

If in some decomposition (1) one of the components  $\mathcal{G}_\pm$  is of finite dimension, it is of the same dimension in all such decompositions, and the Krein space  $(\mathcal{K}, [\cdot, \cdot])$  is called a Pontryagin space. For the Pontryagin spaces  $\mathcal{K}$  occurring in this paper, the negative component  $\mathcal{G}_-$  is of finite dimension, say  $\kappa$ ; in this case,  $\mathcal{K}$  is called a Pontryagin space with  $\kappa$  negative squares. If  $\mathcal{K}$  arises from a Hilbert space  $\mathcal{G}$  by means of a self-adjoint operator  $G$  with inner product (2), then  $\mathcal{K}$  is a Pontryagin space with  $\kappa$  negative squares if and only if the negative spectrum of the invertible operator  $G$  consists of exactly  $\kappa$  eigenvalues, counted according to their multiplicities. In a Pontryagin space  $\mathcal{K}$  with  $\kappa$  negative squares each non-positive subspace is of dimension  $\leq \kappa$ , and a non-positive subspace is maximal non-positive (that is, it is not properly contained in another non-positive subspace) if and only if it is of dimension  $\kappa$ . If  $\mathcal{L}$  is a non-degenerated linear space with inner product  $[\cdot, \cdot]$  such that for a  $\kappa$ -dimensional subspace  $\mathcal{L}_-$  we have

$$[x, x] < 0, \quad x \in \mathcal{L}_-, \quad x \neq 0$$

but there is no  $(\kappa + 1)$ -dimensional subspace with this property, then there exists a Pontryagin space  $\mathcal{K}$  with  $\kappa$  negative squares such that  $\mathcal{L}$  is a dense subset of  $\mathcal{K}$ . This means that  $\mathcal{L}$  can be completed to a Pontryagin space in a similar way as a pre-Hilbert space can be completed to a Hilbert space. The spectrum of a selfadjoint operator  $A$  in a Pontryagin space with  $\kappa$  negative squares is real with the possible exception of at most  $\kappa$  non-real pairs of eigenvalues  $\lambda, \bar{\lambda}$  of finite type. We denote by  $\mathcal{L}_\lambda(A)$  the algebraic eigenspace of  $A$  at  $\lambda$ . Then  $\dim \mathcal{L}_\lambda(A) = \dim \mathcal{L}_{\bar{\lambda}}(A)$  and the Jordan structure of  $A$  in  $\mathcal{L}_\lambda(A)$  and in  $\mathcal{L}_{\bar{\lambda}}(A)$  is the same. Further the relation

$$\kappa = \sum_{\lambda \in \sigma_0(A) \cap \mathbb{R}} \kappa_\lambda^-(A) + \sum_{\lambda \in \sigma(A) \cap \mathbb{C}^+} \dim \mathcal{L}_\lambda(A)$$

holds, where  $\sigma_0$  denotes the set of all eigenvalues of  $A$  with a nonpositive eigenvector and  $\kappa_\lambda^-(A)$  denotes the maximal dimension of a nonpositive subspace of  $\mathcal{L}_\lambda(A)$ .

Moreover, according to a theorem of Pontryagin,  $A$  has a  $\kappa$ -dimensional invariant non-positive subspace  $\mathcal{L}_-^{max}$ . If  $q$  denotes the minimal polynomial of the restriction  $A|_{\mathcal{L}_-^{max}}$ , then the polynomial  $q^* q$ , where  $q^*(z) = \overline{q(\bar{z})}$ , is independent of the particular choice of  $\mathcal{L}_-^{max}$  and one can show that  $[q^*(A)q(A)x, x] \geq 0$  for  $x \in \mathcal{D}(A^\kappa)$ . As a consequence, a selfadjoint operator in a Pontryagin space possesses a spectral function with possible critical points. For details we refer to [11, 13].

The linear space of bounded linear operators defined on a Pontryagin or Krein space  $\mathcal{K}_1$  with values in a Pontryagin or Krein space  $\mathcal{K}_2$  is denoted by  $\mathcal{L}(\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2)$ . If  $\mathcal{K} := \mathcal{K}_1 = \mathcal{K}_2$  we write  $\mathcal{L}(\mathcal{K})$ . We study linear relations in  $\mathcal{K}$ , that is, linear subspaces of  $\mathcal{K}^2$ . The set of all closed linear relations in  $\mathcal{K}$  is denoted by  $\tilde{\mathcal{C}}(\mathcal{K})$ . Linear operators are viewed as linear relations via their graphs. For the usual definitions of the linear operations with relations and the inverse we refer to [7, 8, 9]. We recall only that the multi-valued part  $\text{mul } S$  of a linear relation  $S$  is defined by  $\text{mul } S = \left\{ y \mid \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} \in S \right\}$ .

Let  $S$  be a closed linear relation in  $\mathcal{K}$ . The resolvent set  $\rho(S)$  of  $S$  is defined as the set of all  $\lambda \in \mathbb{C}$  such that  $(S - \lambda)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$ . The spectrum  $\sigma(S)$  of  $S$  is the complement of  $\rho(S)$  in  $\mathbb{C}$ . The extended spectrum  $\tilde{\sigma}(S)$  of  $S$  is defined by  $\tilde{\sigma}(S) = \sigma(S)$  if  $S \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$  and  $\tilde{\sigma}(S) = \sigma(S) \cup \{\infty\}$  otherwise. We set  $\tilde{\rho}(S) := \overline{\mathbb{C}} \setminus \tilde{\sigma}(S)$ . The adjoint  $S^+$  of  $S$  is defined as

$$S^+ := \left\{ \begin{pmatrix} h \\ h' \end{pmatrix} \mid [f', h] = [f, h'] \text{ for all } \begin{pmatrix} f \\ f' \end{pmatrix} \in S \right\}.$$

$S$  is said to be symmetric (selfadjoint) if  $S \subset S^+$  (resp.  $S = S^+$ ).

For the description of the selfadjoint extensions of closed symmetric relations we use the so-called boundary value spaces (for the first time the corresponding approach was applied in fact by A.V. Strauss [15, 16] without employing the term ‘‘boundary value space’’).

**Definition 1.** Let  $A$  be a closed symmetric relation in the Krein space  $(\mathcal{K}, [\cdot, \cdot])$ . We say that  $\{\mathcal{G}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$  is a *boundary value space* for  $A^+$  if  $(\mathcal{G}, (\cdot, \cdot))$  is a Hilbert space and there exist linear mappings  $\Gamma_0, \Gamma_1 : A^+ \rightarrow \mathcal{G}$  such that  $\Gamma := \begin{pmatrix} \Gamma_0 \\ \Gamma_1 \end{pmatrix} : A^+ \rightarrow \mathcal{G} \times \mathcal{G}$  is surjective, and the relation

$$[f', g] - [f, g'] = (\Gamma_1 \hat{f}, \Gamma_0 \hat{g}) - (\Gamma_0 \hat{f}, \Gamma_1 \hat{g}) \tag{3}$$

holds for all  $\hat{f} = \begin{pmatrix} f \\ f' \end{pmatrix}, \hat{g} = \begin{pmatrix} g \\ g' \end{pmatrix} \in A$ .

If a closed symmetric relation  $A$  has a selfadjoint extension  $\hat{A}$  in  $\mathcal{K}$  with  $\rho(\hat{A}) \neq \emptyset$ , then there exists a boundary value space  $\{\mathcal{G}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$  for  $A^+$  such that  $\hat{A}$  coincides with  $\ker \Gamma_0$  (see [4]).

For basic facts on boundary value spaces and further references see e.g. [3, 4, 5] and [6]. We recall only a few important consequences. For the rest of this section let  $A$  be a closed symmetric relation and assume that there exists a boundary value space  $\{\mathcal{G}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$  for  $A^+$ . Then

$$A_0 := \ker \Gamma_0 \text{ and } A_1 := \ker \Gamma_1 \tag{4}$$

are selfadjoint extensions of  $A$ . The mapping  $\Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma_0 \\ \Gamma_1 \end{pmatrix}$  induces, via

$$A_\Theta := \Gamma^{-1} \Theta = \left\{ \hat{f} \in A^+ \mid \Gamma \hat{f} \in \Theta \right\}, \Theta \in \tilde{\mathcal{C}}(\mathcal{G}),$$

a bijective correspondence  $\Theta \mapsto A_\Theta$  between  $\tilde{\mathcal{C}}(\mathcal{G})$  and the set of closed extensions  $A_\Theta \subset A^+$  of  $A$ . In particular (5) gives a one-to-one correspondence between the closed symmetric (selfadjoint) extensions of  $A$  and the closed symmetric (resp. selfadjoint) relations in  $\mathcal{G}$ . Moreover,  $A_\Theta$  is an operator if and only if

$$\Theta \cap \Gamma \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ h \end{pmatrix} \mid h \in \text{mul } A^+ \right\} = \{0\}. \tag{6}$$

If  $\Theta$  is a closed operator in  $\mathcal{G}$ , then the corresponding extension  $A_\Theta$  of  $A$  is determined by

$$A_\Theta = \ker(\Gamma_1 - \Theta \Gamma_0). \tag{7}$$

Let  $\mathcal{N}_\lambda := \ker(A^+ - \lambda) = \text{ran}(A - \bar{\lambda})^{\perp[1]}$  be the defect subspace of  $A$  and set

$$\hat{\mathcal{N}}_\lambda := \left\{ \begin{pmatrix} f \\ \lambda f \end{pmatrix} \mid f \in \mathcal{N}_\lambda \right\}.$$

Now we assume that the selfadjoint relation  $A_0$  in (4) has a nonempty resolvent set. For each  $\lambda \in \rho(A_0)$  the relation  $A^+$  can be written as a direct sum of (the subspaces)  $A_0$  and  $\hat{\mathcal{N}}_\lambda$  (see [4]). Denote by  $\pi_1$  the orthogonal projection onto the first component of  $\mathcal{K}^2$ . The functions

$$\lambda \mapsto \gamma(\lambda) := \pi_1(\Gamma_0 \mid \hat{\mathcal{N}}_\lambda)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{G}, \mathcal{K}), \lambda \in \rho(A_0),$$

and

$$\lambda \mapsto M(\lambda) := \Gamma_1(\Gamma_0 \mid \hat{\mathcal{N}}_\lambda)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{G}), \lambda \in \rho(A_0) \tag{8}$$

are defined and holomorphic on  $\rho(A_0)$  and are called the  $\gamma$ -field and the *Weyl function* corresponding to  $A$  and  $\{\mathcal{G}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$ . For  $\lambda, \zeta \in \rho(A_0)$  the relation (3) implies  $M(\lambda)^i = M(\bar{\lambda})$  and

$$\gamma(\zeta) = \left( 1 + (\zeta - \lambda)(A_0 - \zeta)^{-1} \right) \gamma(\lambda) \tag{9}$$

and

$$M(\lambda) - M(\zeta)^i = (\lambda - \bar{\zeta}) \gamma(\zeta)^+ \gamma(\lambda) \tag{10}$$

hold (see [4]). Moreover, by [4], we have the following connection between the spectra of extensions of  $A$  and the Weyl function.

**Lemma 2.** If  $\Theta \in \tilde{\mathcal{C}}(\mathcal{G})$  and  $A_\Theta$  is the corresponding extension of  $A$  then a point  $\lambda \in \rho(A_0)$  belongs to  $\rho(A_\Theta)$  if and only if 0 belongs to  $\rho(\Theta - M(\lambda))$ . A point  $\lambda \in \rho(A_0)$  belongs to  $\sigma_i(A_\Theta)$  if and only if 0 belongs to  $\sigma_i(\Theta - M(\lambda))$ ,  $i = p, c, r$ .

For  $\lambda \in \rho(A_\Theta) \cap \rho(A_0)$  the well-known resolvent formula



$$(A_\Theta - \lambda)^{-1} = (A_0 - \lambda)^{-1} + \gamma(\lambda)(\Theta - M(\lambda))^{-1}\gamma(\bar{\lambda})^+ \quad (11)$$

holds (for a proof see e.g. [4]).

Recall, that  $\lambda_0 \in \mathbb{C}$  is called the eigenvalue of the operator pencil  $L(\lambda)$ , if there is a vector  $h_0 \in \mathcal{G}$  ( $h_0 \neq 0$ ) such that  $L(\lambda_0)h_0 = 0$ . The vector  $h_0 \in \mathcal{G}$  is called the eigenvector of the operator pencil  $L(\lambda)$ . A system  $h_0, h_1, \dots, h_k$ , is called a Jordan chain for  $L(\lambda)$ , if

$$\sum_{j=0}^m \frac{1}{j!} L^{(j)}(\lambda_0) h_{m-j} = 0, \text{ for } m = 0, 1, \dots, k. \quad (12)$$

## 2. The Underlying Space

Let  $H^{1,2}(0,1)$  be the Sobolev space of all absolutely continuous functions  $f$  with  $f' \in L^2(0,1)$ . Let  $k$  be a positive real number,  $k > 0$ . We define for  $f, g \in H^{1,2}(0,1)$ <sup>1</sup>

$$[f, g]_k := k(f', g')_{L^2(0,1)} - (f, g)_{L^2(0,1)}. \quad (13)$$

If  $\mathcal{L}$  is an arbitrary subset of  $H^{1,2}(0,1)$  we set

$$\mathcal{L}^{\perp k} := \left\{ x \in H^{1,2}(0,1) : [x, y]_k = 0 \text{ for all } y \in \mathcal{L} \right\}.$$

Then we have the following.

**Proposition 3.** For the space  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$  we have the following properties.

(1) If  $k$  equals  $\frac{1}{n^2\pi^2}$  for some  $n \in \mathbb{N}$ , then the function  $g \in H^{1,2}(0,1)$ , defined by  $g(x) = \cos(n\pi x)$

belongs to the isotropic part of  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$ , that is

$$[f, g]_k = 0 \text{ for all } f \in H^{1,2}(0,1).$$

(2) If  $k > \frac{1}{\pi^2}$ , then  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$  is a Pontryagin space with one negative square.

(3) If  $k \leq \frac{1}{\pi^2}$  and  $k \neq \frac{1}{n^2\pi^2}$  for all  $n \in \mathbb{N}$ , then  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$  is a Pontryagin space with a finite number of negative squares. Set

$$\mathcal{H}_- := \text{span} \left\{ f_j \mid k \leq \frac{1}{j^2\pi^2}, j \in \mathbb{N} \right\},$$

where  $f_j \in H^{1,2}(0,1)$  is defined by  $f_j(x) = \sin(j\pi x)$ . Then the number  $\kappa_-$  of negative squares of  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$  satisfies

$$\kappa_- = \dim \mathcal{H}_- + 1.$$

**Proof:** Assertion (1) is an easy calculation. We assume  $k \neq \frac{1}{n^2\pi^2}$  for  $n \in \mathbb{N}$  all. Define the operator  $A_0$  by

$$\mathcal{D}(A_0) := \left\{ g \in H^{1,2}(0,1) \mid g' \in H^{1,2}(0,1) \text{ and } g(0) = g(1) = 0 \right\},$$

$$A_0 g := -g'' \text{ for } g \in \mathcal{D}(A_0).$$

Let us note that the functions  $f_j(x) = \sin(j\pi x)$ ,  $j = 1, 2, \dots$  are eigen functions of  $A_0$ .

For  $g \in \mathcal{D}(A_0) \cap \mathcal{H}_-^\perp$ , where  $\mathcal{H}_-^\perp$  denotes the orthogonal complement with respect to the usual scalar product  $(\cdot, \cdot)_{L^2(0,1)}$  but within the Hilbert space  $H^{1,2}(0,1)$ , we have also that  $(f, g)_{L^2(0,1)} = 0$  for all

$f \in \mathcal{H}_-$ . Thus,  $g$  has the representation  $g = \sum_{j > \frac{1}{\pi\sqrt{k}}}^\infty \alpha_j f_j$ . This implies that there exists an  $\varepsilon > 0$  with

<sup>1</sup> Let us note that the expression  $k(\dot{v}(t))^2 - \gamma(t)^2$  with  $t$  as the time is (up to a constant) the Lagrangian for free small oscillations in one dimension (see [12, p. 58] for details). From this point of view the corresponding integral represents the action

$(A_0g, g)_{L^2(0,1)} > (\frac{1}{k} + \varepsilon)(g, g)_{L^2(0,1)}$  for all  $g \in \mathcal{D}(A_0) \cap \mathcal{H}_\perp^\perp$ . Therefore, there exists constants  $c, \tilde{c} > 0$  with

$$[g, g]_k > c(A_0g, g)_{L^2(0,1)} + \varepsilon(g, g)_{L^2(0,1)} > \tilde{c}(g, g)_{H^{1,2}(0,1)}$$

for  $g \in \mathcal{D}(A_0) \cap \mathcal{H}_\perp^\perp$ , so  $\mathcal{D}(A_0) \cap \mathcal{H}_\perp^\perp$  is a uniformly positive. It is easy to see that for  $f \in \mathcal{H}_\perp$  we have  $[f, f]_k < 0$ . This shows that the closure of  $\mathcal{D}(A_0)$  with respect to the usual scalar product in the Hilbert space  $H^{1,2}(0,1)$  is a Pontryagin space where the number of negative squares equals  $\dim \mathcal{H}_\perp$ . We define  $h_1, h_2 \in H^{1,2}(0,1)$  by

$$h_1 = \sin(\sqrt{k}^{-1}x) + \cos(\sqrt{k}^{-1}x) \text{ and } h_2 = \sin(\sqrt{k}^{-1}x) - \cos(\sqrt{k}^{-1}x).$$

We have

$$[h_1, h_1]_k = -2\sqrt{k}^{-1}(\sin \sqrt{k}^{-1})^2 \text{ and } [h_2, h_2]_k = 2\sqrt{k}^{-1}(\sin \sqrt{k}^{-1})^2.$$

and

$$(\mathcal{D}(A_0))^{\perp k} = \text{sp}\{h_1, h_2\},$$

This proves (3). If  $k > \frac{1}{\pi^2}$ , then  $\mathcal{H}_\perp = \{0\}$  and the above considerations imply (2).  $\square$

### 3. A Symmetric Operator Associated to the Second Derivative of Defect Four

For the rest of this paper, we assume that  $k$  is such, that

$$\sin \sqrt{k}^{-1} \neq 0.$$

Then, according to Proposition 3, the space  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$  is a Pontryagin space. We consider the following operator  $A$ , defined by

$$\mathcal{D}(A) := \{g \in H^{1,2}(0,1) \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1) \text{ with } g(0) = g(1) = g'(0) = g'(1) = g''(0) = g''(1) = 0\}$$

and

$$Ag := -g'' \text{ for } g \in \mathcal{D}(A).$$

**Lemma 4.** Then  $A$  is a closed symmetric operator in  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$ .

**Proof:** Obviously,  $A$  is symmetric. The best way to show the closedness is via the calculation of  $A^{++}$ . We leave it to the reader.  $\square$

As

$$\text{mul } A^+ = (\mathcal{D}(A_0))^{\perp k} = \{x \in H^{1,2}(0,1) \mid [x, y]_k = 0 \text{ for all } y \in \mathcal{D}(A)\},$$

we have  $g \in \text{mul } A^+$  if and only if for all  $f \in \mathcal{D}(A)$

$$0 = [f, g]_k = -(f, kg'' + g)_{L^2(0,1)}.$$

The set  $\mathcal{D}(A)$  is dense in  $L^2(0,1)$  and this implies

$$\text{mul } A^+ = \text{sp}\{f_1, f_2\}, \tag{14}$$

where  $f_1, f_2$  are defined by

$$f_1 = \sin \sqrt{k}^{-1}x \text{ and } f_2 = \cos \sqrt{k}^{-1}x.$$

An easy calculation (*more detailed?*) shows that

$$A^+ = \left\{ \begin{pmatrix} g \\ -g' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha f_1 + \beta f_2 \end{pmatrix} \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1), \alpha, \beta \in \mathbb{C} \right\}.$$

Let  $\begin{pmatrix} f \\ -f' + \alpha_1 f_1 + \beta_1 f_2 \end{pmatrix}$  and  $\begin{pmatrix} g \\ -g' + \alpha_2 f_1 + \beta_2 f_2 \end{pmatrix}$  be elements from  $A^+$  with  $f, g \in \mathcal{D}(A)$  and  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2 \in \mathbb{C}$ .

Then we have

$$[-f'' + \alpha_1 f_1 + \beta_1 f_2, g]_k - [f, -g'' + \alpha_2 f_1 + \beta_2 f_2]_k =$$

$$= -\overline{f g'} \Big|_0^1 + \overline{f' g} \Big|_0^1 - k \overline{f' g'} \Big|_0^1 + k \overline{f g''} \Big|_0^1 + \sqrt{k} (\alpha_1 f_2 - \beta_1 f_1) \overline{g} \Big|_0^1 - \sqrt{k} (\alpha_2 f_2 - \beta_2 f_1) \Big|_0^1.$$

We define mappings  $\Gamma_0, \Gamma_1 : A^+ \rightarrow \mathbb{C}^4$  by

$$\Gamma_0 \left( \begin{matrix} f \\ -f'' + \alpha_1 f_1 + \beta_1 f_2 \end{matrix} \right) = \begin{pmatrix} f(0) + k f''(0) \\ f(1) + k f''(1) \\ f'(0) \\ f'(1) \end{pmatrix} \text{ and}$$

$$\Gamma_1 \left( \begin{matrix} f \\ -f'' + \alpha_1 f_1 + \beta_1 f_2 \end{matrix} \right) = \begin{pmatrix} -f''(0) \\ f''(1) \\ -\alpha_1 \sqrt{k} \\ \sqrt{k} (\alpha_1 \cos \sqrt{k}^{-1} - \beta_1 \sin \sqrt{k}^{-1}) \end{pmatrix} \text{ for } \left( \begin{matrix} f \\ -f'' + \alpha_1 f_1 + \beta_1 f_2 \end{matrix} \right) \in A^+.$$

**Theorem 5.** The triplet  $\{\Gamma_0, \Gamma_1\}$  is a boundary value space for  $A^+$ . In particular  $A_1 := \ker \Gamma_1$  is an operator and a selfadjoint extension of  $A$ , i.e.

$$\mathcal{D}(A_1) := \{g \in H^{1,2}(0,1) \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1) \text{ with } g'(0) = g'(1) = 0\}$$

and

$$A_1 g := -g'', \quad g \in \mathcal{D}(A_1).$$

Moreover, for  $\lambda \in \rho(A_0)$ , the Weyl function is given by

$$M(\lambda) = \begin{bmatrix} \frac{1}{1-k\lambda} \left( \frac{\sqrt{\lambda}}{\tan \sqrt{\lambda}} - \frac{\sqrt{k}^{-1}}{\tan \sqrt{k}^{-1}} \right) & \frac{1}{1-k\lambda} \left( -\frac{\sqrt{\lambda}}{\sin \sqrt{\lambda}} + \frac{\sqrt{k}^{-1}}{\sin \sqrt{k}^{-1}} \right) & \frac{1}{\sqrt{k} \tan \sqrt{k}^{-1}} & \frac{-1}{\sqrt{k} \sin \sqrt{k}^{-1}} \\ \frac{1}{1-k\lambda} \left( -\frac{\sqrt{\lambda}}{\sin \sqrt{\lambda}} + \frac{\sqrt{k}^{-1}}{\sin \sqrt{k}^{-1}} \right) & \frac{1}{1-k\lambda} \left( \frac{\sqrt{\lambda}}{\tan \sqrt{\lambda}} - \frac{\sqrt{k}^{-1}}{\tan \sqrt{k}^{-1}} \right) & \frac{-1}{\sqrt{k} \sin \sqrt{k}^{-1}} & \frac{1}{\sqrt{k} \tan \sqrt{k}^{-1}} \\ \frac{1}{\sqrt{k} \tan \sqrt{k}^{-1}} & \frac{1}{\sqrt{k} \sin \sqrt{k}^{-1}} & -\frac{1-k\lambda}{\sqrt{k} \tan \sqrt{k}^{-1}} & \frac{1-k\lambda}{\sqrt{k} \sin \sqrt{k}^{-1}} \\ \frac{-1}{\sqrt{k} \sin \sqrt{k}^{-1}} & \frac{1}{\sqrt{k} \tan \sqrt{k}^{-1}} & \frac{1-k\lambda}{\sqrt{k} \sin \sqrt{k}^{-1}} & -\frac{1-k\lambda}{\sqrt{k} \tan \sqrt{k}^{-1}} \end{bmatrix}.$$

**Proof:** The above calculations imply that  $\{\Gamma_0, \Gamma_1\}$  is a boundary value space for  $A^+$ . Let  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ . Define  $g_1, g_2 \in H^{1,2}(0,1)$  by

$$g_1 = \cos(\sqrt{\lambda}x) \text{ and } g_2 = \sin(\sqrt{\lambda}x). \tag{15}$$

Then we have

$$\ker(A^+ - \lambda) = \text{sp}\{g_1, g_2, f_1, f_2\}.$$

Let  $f = \alpha g_1 + \beta g_2 + \gamma f_1 + \delta f_2$  for some  $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{C}$ . Then

$$\Gamma_0 \left( \begin{matrix} f \\ \mathcal{A}f \end{matrix} \right) = \Gamma_0 \left( \begin{matrix} f \\ -f'' + \gamma(\lambda - \frac{1}{k})f_1 + \delta(\lambda - \frac{1}{k})f_2 \end{matrix} \right) = \begin{pmatrix} \alpha(1-k\lambda) \\ \alpha(1-k\lambda)\cos\sqrt{\lambda} + \beta(1-k\lambda)\sin\sqrt{\lambda} \\ \alpha + \delta \\ \alpha \cos \sqrt{\lambda} + \beta \sin \sqrt{\lambda} + \gamma \sin \sqrt{k}^{-1} + \delta \cos \sqrt{k}^{-1} \end{pmatrix}$$

and

$$\Gamma_1 \left( \begin{matrix} f \\ \mathcal{A}f \end{matrix} \right) = \begin{pmatrix} -\beta\sqrt{\lambda} - \gamma\sqrt{k}^{-1} \\ -\alpha\sqrt{\lambda} \sin \sqrt{\lambda} + \beta\sqrt{\lambda} \cos \sqrt{\lambda} + \gamma\sqrt{k}^{-1} \cos \sqrt{k}^{-1} - \delta\sqrt{k}^{-1} \sin \sqrt{k}^{-1} \\ -\gamma\sqrt{k}(\lambda - \frac{1}{k}) \\ \gamma\sqrt{k}(\lambda - \frac{1}{k}) \cos \sqrt{k}^{-1} - \delta\sqrt{k}(\lambda - \frac{1}{k}) \sin \sqrt{k}^{-1} \end{pmatrix}$$

Now, by (8), it follows that  $M$  is of the above form.  $\square$

Now, via (5) we can parameterize all selfadjoint extensions of  $A$  via all selfadjoint relations  $\Theta$  in  $\mathbb{C}^4$ .

**Theorem 6.** Let  $\Theta$  be a selfadjoint relation in  $\mathbb{C}^4$ . Then  $A_\Theta$  is a selfadjoint extension of  $A$ . If for all  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

$$\left( \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \alpha \\ \beta \sin \sqrt{k}^{-1} - \alpha \cos \sqrt{k}^{-1} \end{array} \right) \notin \text{mul } \Theta \setminus \{0\} \quad (16)$$

holds, then  $A_\Theta$  is an operator. If, in particular,  $\Theta$  is a selfadjoint matrix, then  $A_\Theta$  is a selfadjoint operator and an extension of  $A$  with domain

$$\mathcal{D}(A_\Theta) := \left\{ g \in H^{1,2}(0,1) \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1), \begin{pmatrix} -g'(0) \\ g'(1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \Theta \begin{pmatrix} g(0)+kg''(0) \\ g(1)+kg''(1) \\ g(0) \\ g(1) \end{pmatrix} \right\}.$$

**Proof:** Relation (16) follows from (6), (14) and the definitions of  $\Gamma_0$  and  $\Gamma_1$ . If  $\Theta$  is a matrix, (16) is satisfied and the description of  $\mathcal{D}(A_\Theta)$  follows from (7).  $\square$

#### 4. A Symmetric Operator Associated to the Second Derivative of Defect Two

We start this Section opposite to Section 3. For this we put

$$\mathcal{D}(\tilde{A}) := \{ g \in H^{1,2}(0,1) \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1) \} \quad (17)$$

and

$$\tilde{A}g := -g'', \quad g \in \mathcal{D}(\tilde{A}).$$

Thus, the operator  $\tilde{A}$  corresponds to the same formal differential expression as the operator considered in the previous section, but with a different domain which is in some sense maximal. Let us calculate  $\tilde{A}^+$ . For  $f, g \in \mathcal{D}(\tilde{A})$  we have

$$\begin{aligned} [\tilde{A}f, g]_k &= -k \int_0^1 f'''(t) \overline{g'(t)} dt + \int_0^1 f''(t) \overline{g(t)} dt = \\ &= -k \left( f''(t) \overline{g'(t)} - f'(t) \overline{g''(t)} \right) \Big|_0^1 + \left( f'(t) \overline{g(t)} - f(t) \overline{g'(t)} \right) \Big|_0^1 - k \int_0^1 f'(t) \overline{g''(t)} dt + \int_0^1 f(t) \overline{g''(t)} dt = \\ &= -(kf''(1) + f(1)) \overline{g'(1)} + f'(1) (k \overline{g''(1)} + \overline{g(1)}) - f'(0) (k \overline{g''(0)} + \overline{g(0)}) + (kf''(0) + f(0)) \overline{g'(0)} + [f, \tilde{A}g]_k. \end{aligned}$$

Note that the maps  $f(t) \mapsto (kf''(1) + f(1))$ ,  $f(t) \mapsto f'(1)$ ,  $f(t) \mapsto (kf''(0) + f(0))$  and  $f(0) \mapsto f'(0)$  represent unbounded linear functionals on  $H^{1,2}(0,1)$ . Thus, the expression  $[f, \tilde{A}g]_k$  gives a continuous linear functional (with respect to  $f$ ) on  $H^{1,2}(0,1)$  if and only if  $g'(1) = (kg''(1) + g(1)) = (kg''(0) + g(0)) = g'(0) = 0$  and by the definition of the adjoint operator the latter conditions restrict the domain of  $\tilde{A}^+$ . For brevity below we set  $A := \tilde{A}^+$ . Thus, we have the following operator  $A$ , defined by

$$\mathcal{D}(A) := \{ g \in H^{1,2}(0,1) \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1) \text{ with } g'(0) = g'(1) = 0, g(0) + kg''(0) = 0 \text{ and } g(1) + kg''(1) = 0 \}$$

and

$$Ag := -g'', \quad g \in \mathcal{D}(A).$$

Then  $A$  is a closed symmetric operator in  $(H^{1,2}(0,1), [\cdot, \cdot]_k)$ , which is, in contrast to Section 3, densely defined. In particular

$$A^+ = \tilde{A} = \left\{ \begin{pmatrix} g \\ -g'' \end{pmatrix} \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1) \right\}$$

is an operator and therefore all selfadjoint extensions of  $A$  are operators.

We define mappings  $\Gamma_0, \Gamma_1 : A^+ \rightarrow \mathbb{C}^2$  by

$$\Gamma_0 \begin{pmatrix} f \\ -f'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(0)+kf''(0) \\ f(1)+kf''(1) \end{pmatrix} \text{ and } \Gamma_1 \begin{pmatrix} f \\ -f'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f'(0) \\ f'(1) \end{pmatrix} \text{ for } \begin{pmatrix} f \\ -f'' \end{pmatrix} \in A^+.$$

**Theorem 7.** The triplet  $\{\Gamma_0, \Gamma_1\}$  is a boundary value space for  $A^+$ . The Weyl function is given by

$$M(\lambda) = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{\lambda}}{(1-k\lambda)\tan\sqrt{\lambda}} & \frac{-\sqrt{\lambda}}{(1-k\lambda)\sin\sqrt{\lambda}} \\ \frac{-\sqrt{\lambda}}{(1-k\lambda)\sin\sqrt{\lambda}} & \frac{\sqrt{\lambda}}{(1-k\lambda)\tan\sqrt{\lambda}} \end{bmatrix}, \lambda \in \rho(A_0).$$

**Proof:** The above calculations imply that  $\{\Gamma_0, \Gamma_1\}$  is a boundary value space for  $A^+$ . Let  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$  and  $g_1, g_2 \in H^{1,2}(0,1)$  as in (15). Then we have

$$\ker(A^+ - \lambda) = \text{sp}\{g_1, g_2\}.$$

Let  $f = \alpha g_1 + \beta g_2$  for some  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ . Then

$$\Gamma_0 \begin{pmatrix} f \\ \sqrt{f} \end{pmatrix} = \Gamma_0 \begin{pmatrix} f \\ f' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(1-k\lambda) \\ \alpha(1-k\lambda)\cos\sqrt{\lambda} + \beta(1-k\lambda)\sin\sqrt{\lambda} \end{pmatrix}$$

and

$$\Gamma_1 \begin{pmatrix} f \\ \sqrt{f} \end{pmatrix} = \Gamma_1 \begin{pmatrix} f \\ -f' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta\lambda \\ \alpha\sqrt{\lambda}\sin\sqrt{\lambda} + \beta\sqrt{\lambda}\cos\sqrt{\lambda} \end{pmatrix}$$

Now, by (8), it follows that  $M$  is of the above form.  $\square$

**Lemma 8.** The operator  $A_0 = \ker \Gamma_0$  is a selfadjoint extension of  $A$  with a compact resolvent and

$$\sigma(A_0) = \sigma_p(A_0) = \{k^{-1}, \pi^2, 4\pi^2, 9\pi^2, \dots\}.$$

**Proof:** The operator  $A_1 = \ker \Gamma_1$  is selfadjoint in the Hilbert space  $H^{1,2}(0,1)$ . We have for  $f \in \mathcal{D}(A)$

$$((A_1 + I)f, f)_{H^{1,2}(0,1)} = \|f'\|_{L^2(0,1)}^2 + \|f\|_{H^{2,2}(0,1)}^2,$$

where  $H^{2,2}(0,1)$  is the Sobolev space of all functions  $f \in H^{1,2}(0,1)$  with  $f' \in H^{1,2}(0,1)$ . This gives

$$\|f\|_{H^{2,2}(0,1)}^2 \leq \|(A_1 + I)f\|_{H^{1,2}(0,1)} \|f\|_{H^{2,2}(0,1)}.$$

Therefore, as the embedding of  $H^{2,2}(0,1)$  into  $H^{1,2}(0,1)$  is compact, the selfadjoint operator  $A_1$  has a compact resolvent. By (11) the difference between the resolvents of  $A_0$  and  $A_1$  is of finite rank, hence  $A_0$  has a compact resolvent. We have  $\sigma(A_0) = \sigma_p(A_0)$ . Now (18) follows from a simple calculation.  $\square$

**QUESTION.** Is  $A$  simple? That is  $H^{1,2}(0,1) = \text{clsp}\{\ker(A^+ - \lambda) : \lambda \in \rho(A_0)\}$  Give a simple proof for it

**Proposition 9.** Let  $\alpha \in \mathbb{R}$ ,  $\alpha \neq 0$  and

$$|\alpha| < 2\sqrt{k}. \tag{19}$$

Then the operator  $A_\alpha$  defined by

$$\mathcal{D}(A_\alpha) := \left\{ g \in H^{1,2}(0,1) \mid g', g'' \in H^{1,2}(0,1) \text{ with } \alpha g'(0) = g(0) + kg''(0) \text{ and } \alpha g'(1) = g(1) + kg''(1) = 0 \right\}$$

and

$$A_\alpha g := -g'', \quad g \in \mathcal{D}(A_\alpha).$$

is a selfadjoint extension of  $A$  with non-real eigenvalues.

In the case  $\alpha = 2\sqrt{k}$  we have that the selfadjoint extension  $A_{2\sqrt{k}}$  of  $A$  has a Jordan chain of length two corresponding to the eigenvalue  $-\frac{1}{k}$ .

**Proof:** Set

$$\Theta = \begin{bmatrix} -\alpha^{-1} & 0 \\ 0 & \alpha^{-1} \end{bmatrix}.$$

Then  $A_\Theta = A_\alpha$ , hence, by Lemma 2 and the fact that  $\sigma(A_0) \in \mathbb{R}$  (see Lemma 8), we have for all non-real  $\lambda$  that  $\lambda \in \sigma_p(A_\alpha)$  if and only if

$$0 = \det(M(\lambda) - \Theta) = \frac{k^2}{\alpha^2(1-k\lambda)^2} \left( \lambda^2 + \frac{\lambda\alpha^2}{k^2} - 2\frac{\lambda}{k} + \frac{1}{k^2} \right). \tag{20}$$

Hence,

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{k} - \frac{\alpha^2}{2k^2} \pm \frac{\alpha}{k^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - k}$$

are the solutions of Equation (20). Assertion (19) implies now the existence of two non-real eigenvalues of  $A_\alpha$ .

In the case  $\alpha = 2\sqrt{k}$  we have that the functions  $h_0, h_1 \in \mathcal{D}(A_{2\sqrt{k}})$  given by

$$h_0(x) = e^{x\sqrt{k}^{-1}} \quad \text{and} \quad h_1(x) = -\frac{x}{2} e^{x\sqrt{k}^{-1}}$$

satisfy

$$\left( A_{2\sqrt{k}} + \frac{1}{k} \right) h_1 = h_0 \quad \text{and} \quad \left( A_{2\sqrt{k}} + \frac{1}{k} \right) h_0 = 0,$$

i.e.  $\{h_0, h_1\}$  is a Jordan chain of  $A_{2\sqrt{k}}$  corresponding to the eigenvalue  $-\frac{1}{k}$ .  $\square$

### References

1. Azizov T.Ya., Iokhvidov I.S. *Linear Operators in Spaces with an Indefinite Metric*. Chichester, John Wiley & Sons, Ltd., 1989. 304 p.
2. Bognár J. *Indefinite Inner Product Spaces*. New York-Heidelberg: Springer Verlag, 1974. 224 p.
3. Derkach V.A. On Weyl Function and Generalized Resolvents of a Hermitian Operator in a Krein Space. *Integral Equations Operator Theory*. 1995. Vol. 23. pp. 387–415.
4. Derkach, V.A. On Generalized Resolvents of Hermitian Relations in Krein Spaces. *J. Math. Sci. (New York)*. 1999. Vol. 97. pp. 4420–4460.
5. Derkach V.A., Malamud M.M. Generalized Resolvents and the Boundary Value Problems for Hermitian Operators with Gaps. *J. Funct. Anal.* 1991. Vol. 95. pp. 1–95.
6. Derkach V.A., Malamud M.M. The Extension Theory of Hermitian Operators and the Moment Problem. *J. Math. Sci. (New York)*. 1995. Vol. 73. pp. 141–242.
7. Dijksma A., de Snoo H.S.V. Symmetric and Selfadjoint Relations in Krein Spaces I. *Operator Theory: Advances and Applications (Birkhäuser Verlag Basel)*. 1987. Vol. 24. pp. 145–166.
8. Dijksma A., de Snoo H.S.V. Symmetric and Selfadjoint Relations in Krein Spaces II. *Ann. Acad. Sci. Fenn. Math.* 1987. Vol. 12. pp. 199–216.
9. Haase M. *The Functional Calculus for Sectorial Operators*. Basel, Boston, Berlin, Birkhäuser Verlag, 2006. 392 p.
10. Iokhvidov I.S., Krein M.G., Langer H. Introduction to the Spectral Theory of Operators in Spaces with an Indefinite Metric. Berlin: Akademie-Verlag, Mathematical Research, 1982. Vol. 9. 120 p.
11. Krein M.G., Langer H. On the Spectral Functions of a Self-Adjoint Operator in a Space with Indefinite Metric. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*. 1963. Vol. 152, no. 1. pp. 39–42.
12. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Course Of Theoretical Physics. Vol 1: Mechanics (3rd ed.)*. Oxford, UK, Butterworth-Heinemann, 2007. 170 p.
13. Langer H. *Spectral Functions of Definitizable Operators in Krein Spaces. Lecture Notes in Mathematics*. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1982. Vol. 948. pp. 1–46.
14. Langer H., Najman B., Tretter C. Spectral theory of the Klein-Gordon equation in Pontryagin spaces. *Comm. Math. Phys.* 2006. Vol. 267, no. 1. pp. 159–180.
15. Strauss A.V. On Selfadjoint Extensions in an Orthogonal Sum of Hilbert Spaces. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*. 1962. Vol. 144, no. 5. pp. 512–515.
16. Strauss A.V. Characteristic Functions of Linear Operators. *Izv. AN SSSR, Serija matematicheskaja*. 1960. Vol. 24, no. 1. pp. 43–74.

Received 22 march 2011.

## НЕКОТОРЫЕ ПРОСТРАНСТВА СОБОЛЕВА КАК ПРОСТРАНСТВА ПОНТЯГИНА

В.А. Штраус<sup>1</sup>, К. Трунк<sup>2</sup>

Показано, что известные пространства Соболева могут быть естественно снабжены структурой пространства Понтягина. Такой подход позволяет получить новые свойства у таких традиционных объектов как, например, простейшие дифференциальные операторы.

*Ключевые слова:* функциональные пространства, пространства Понтягина, самосопряжённые операторы, дифференциальные операторы.

### Литература

1. Azizov, T.Ya. Linear Operators in Spaces with an Indefinite Metric / T.Ya. Azizov, I.S. Iokhvidov. – Chichester: John Wiley & Sons, Ltd. – 1989. – 304 с.
2. Bognár, J. Indefinite Inner Product Spaces / J. Bognár. – New York-Heidelberg: Springer Verlag, 1974. – 224 с.
3. Derkach, V.A. On Weyl Function and Generalized Resolvents of a Hermitian Operator in a Krein Space / V.A. Derkach // Integral Equations Operator Theory. – 1995. – Т. 23. – С. 387–415.
4. Derkach, V.A. On Generalized Resolvents of Hermitian Relations in Krein Spaces / V.A. Derkach // J. Math. Sci. (New York) – 1999. – Т. 97. – С. 4420–4460.
5. Derkach, V.A. Generalized Resolvents and the Boundary Value Problems for Hermitian Operators with Gaps / V.A. Derkach, M.M. Malamud // J. Funct. Anal. – 1991. – Т. 95. – С. 1–95.
6. Derkach, V.A. The Extension Theory of Hermitian Operators and the Moment Problem / V.A. Derkach, M.M. Malamud // J. Math. Sci. (New York). – 1995. – Т. 73. – С. 141–242.
7. Dijksma, A. Symmetric and Selfadjoint Relations in Krein Spaces I / A. Dijksma, H.S.V. de Snoo // Operator Theory: Advances and Applications (Birkhäuser Verlag Basel). – 1987. – Т. 24. – С. 145–166.
8. Dijksma, A. Symmetric and Selfadjoint Relations in Krein Spaces II // A. Dijksma, H.S.V. de Snoo // Ann. Acad. Sci. Fenn. Math. – 1987. – Т. 12. – С. 199–216.
9. Haase, M. The Functional Calculus for Sectorial Operators / M. Haase. – Basel: Birkhäuser Verlag, 2006. – 392 с.
10. Iokhvidov, I.S. Introduction to the Spectral Theory of Operators in Spaces with an Indefinite Metric / I.S. Iokhvidov, M.G. Krein, H. Langer. – Berlin: Akademie-Verlag, Mathematical Research, 1982. – Т. 9. – 120 с.
11. Krein, M.G. On the Spectral Functions of a Self-Adjoint Operator in a Space with Indefinite Metric / M.G. Krein, H. Langer // Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 152, № 1. – С. 39–42.
12. Landau, L.D. Mechanics (3rd ed.) / L.D. Landau, E.M. Lifshitz. – Oxford, UK: Butterworth-Heinemann, 2007. – 170 с.
13. Langer, H. Spectral Functions of Definitizable Operators in Krein Spaces / H. Langer // Lecture Notes in Mathematics (Springer Verlag: Berlin-Heidelberg-New York). – 1982. – Т. 948. – С. 1–46.
14. Langer, H. Spectral theory of the Klein-Gordon equation in Pontryagin spaces / H. Langer, B. Najman, C. Tretter // Comm. Math. Phys. – 2006. – Т. 267, № 1. – С. 159–180.
15. Штраус, А.В. On Selfadjoint Extensions in an Orthogonal Sum of Hilbert Spaces / А.В. Штраус // Докл. АН СССР. – 1962. – Т. 144, № 5. – С. 512–515.
16. Штраус, А.В. Characteristic Functions of Linear Operators / А.В. Штраус // Изв. АН СССР, Серия математическая – 1960. – Т. 24, № 1. – С. 43–74.

*Поступила в редакцию 22 марта 2011 г.*

<sup>1</sup> Штраус Владимир Абрамович – Ph. D., кафедра математики, Университет Симона Боливар, г. Каракас, Венесуэла  
E-mail str@usb.ve

<sup>2</sup> Трунк Карстен – Dr. rer. nat., профессор, институт математики, Технический Университет Ильменау, г. Ильменау, Германия  
E-mail carsten.trunk@tu-ilmenau.de

# ОДНОТИПНАЯ ЗАДАЧА УПРАВЛЕНИЯ С ВЫПУКЛОЙ ЦЕЛЬЮ ПРИ НАЛИЧИИ ПОМЕХИ

В.И. Ухоботов<sup>1</sup>, Д.В. Гущин<sup>2</sup>

Рассмотрена однотипная задача о выводе в заданный момент времени фазовой точки на выпуклое замкнутое множество с минимизацией интеграла от выпуклой по норме управления функции. В уравнениях движения присутствует помеха, о которой известно, что величина ее нормы не превосходит заданного числа. Задача рассматривается в рамках теории дифференциальных игр. Доказано существование оптимального управления и изложен алгоритм его построения.

*Ключевые слова* дифференциальная игра управление альтернированными интеграл

## 1. Введение

В дифференциальной игре «изотропные ракеты» [1], в ее варианте при отсутствии трения «мальчик и крокодил» [2] и в контрольном примере Л.С. Понтрягина [2] уравнения движения с помощью линейной замены переменных [3, с. 160] можно привести к виду, когда в правой части новых уравнений стоит сумма управлений первого и второго игроков. Вектограммы этих управлений являются шарами, радиусы которых зависят от времени. Для таких игр, в случае если терминальное множество является выпуклым и замкнутым, в [4] построен альтернированный интеграл, с помощью которого вычисляется множество тех начальных состояний, откуда первый игрок сможет в заданный момент времени вывести фазовую точку на терминальное множество. Построено соответствующее управление первого игрока.

В статье в рамках теории дифференциальных игр рассматривается задача управления при наличии помех о выводе фазовой точки в заданный момент времени на выпуклое замкнутое множество, минимизируя при этом интеграл от выпуклой функции, зависящей от нормы управления. Такие задачи возникают при управлениях системами переменного состава, в которых критерием является количество израсходованной реактивной массы [5].

## 2. Постановка задачи

В пространстве  $R^n$  с нормой  $\| \cdot \|$  движение вектора  $z$  происходит по правилу

$$\dot{z} = -a(t)u + b(t)v, \quad t \leq p. \quad (1)$$

Здесь функции  $a(t) \geq 0$  и  $b(t) \geq 0$  являются интегрируемыми на любом отрезке из полуоси  $(-\infty, p]$ . На выбор управления  $u$  накладывается ограничение  $\|u\| \leq 1$ . Расходы ресурсов, потра-

ченные на формирование управления  $u$  на отрезке  $[t_0, p]$ , задаются интегралом  $\int_{t_0}^p g(r, \|u(r)\|) dr$ .

**Предположение 1.** Функция  $g(t, \varphi) \geq 0$  определена при всех  $t \leq p, 0 \leq \varphi \leq 1$  и при любом  $t \leq p$  выпукла и непрерывна по  $\varphi \in [0, 1]$ . При каждом  $\varphi \in [0, 1]$  она измерима и ограничена сверху суммируемой на каждом отрезке из полуоси  $(-\infty, p]$  функцией  $G(t)$ .

Считаем, что помеха  $v \in S = \{z \in R^n : \|z\| \leq 1\}$ .

Допустимые управления ищутся в классе функций

$$u(t, z) = \varphi(t)w(t, z). \quad (2)$$

Здесь  $w : (-\infty, p] \times R^n \rightarrow R^n$  – произвольная функция, удовлетворяющая равенству

<sup>1</sup> Ухоботов Виктор Иванович – доктор физико-математических наук профессор завствующий кафедрой теории управления и оптимизации Челябинский государственный университет

E-mail ukh@csu.ru

<sup>2</sup> Гущин Денис Васильевич – математик учебно-научной лаборатории методов оптимизации и моделирования игровых ситуаций, кафедра теории управления и оптимизации Челябинский государственный университет

E-mail offtside@mail.ru



$$\|w(t, z)\| = 1, \quad (3)$$

а измеримая функция  $\varphi: [t_0, p] \rightarrow [0, 1]$  строится в зависимости от начального состояния  $z(t_0) = z_0$ . Для такого допустимого управления расход ресурсов задается интегралом

$$\int_{t_0}^p g(r, \varphi(r)) dr. \quad (4)$$

Зафиксируем начальное состояние. Возьмем разбиение

$$\omega: t_0 < t_1 < \dots < t_{k+1} = p, d(\omega) = \max_{0 \leq i < k} (t_{i+1} - t_i). \quad (5)$$

Построим ломаную

$$z_\omega(t) = z_\omega(t_i) - \left( \int_{t_i}^t a(r) \varphi(r) dr \right) w(t_i, z_\omega(t_i)) + \left( \int_{t_i}^t b(r) dr \right) v_i. \quad (6)$$

Здесь  $t_i \leq t \leq t_{i+1}$ ,  $i = \overline{0, k}$ ,  $z_\omega(t_0) = z_0$  и любое  $v_i \in S$ .

Семейство ломаных (6) на отрезке  $[t_0, p]$  является равномерно ограниченным и равномерно непрерывным. По теореме Арцела [6, с. 236] из любой последовательности ломаных (6) можно выделить подпоследовательность, равномерно сходящуюся на отрезке  $[t_0, p]$ .

Под движением  $z(t)$ , порожденным управлением (2), с заданным начальным условием  $z(t_0) = z_0$  понимаем равномерный предел последовательности ломаных (6), у которых диаметр разбиения  $d(\omega)$  стремится к нулю.

Задано замкнутое выпуклое множество  $Z \subset R^n$  и начальное состояние  $z(t_0) \in R^n$ ,  $t_0 < p$ . Нужно построить допустимое управление (3) такое, чтобы для любого движения  $z(t)$ , порожденного этим управлением с заданным начальным условием  $z(t_0)$ , выполнялось включение

$$z(p) \in Z. \quad (7)$$

Среди таких допустимых управлений требуется выбрать такое, для которого интеграл (4) принимает минимальное значение.

### 3. Построение управления, гарантирующего включение

Зафиксируем измеримую функцию  $\varphi: (-\infty, p] \rightarrow [0, 1]$  и рассмотрим дифференциальную игру

$$\dot{z} = -a(t)\varphi(t)w + b(t)v, \quad (8)$$

в которой первый игрок выбирает управление  $w \in S$ , а второй –  $v \in S$ . Цель первого игрока заключается в осуществлении включения (7). Цель второго игрока – противоположна.

Для этой игры в работе [4] построен альтернированный интеграл Л.С. Понтрягина [2] и предложен алгоритм построения управления первого игрока, обеспечивающего включение (7). Обозначим

$$\beta(t; \varphi(\cdot)) = \max_{t \leq \tau \leq p} \int_{\tau}^p (b(r) - a(r)\varphi(r)) dr, \quad (9)$$

$$\alpha(t; \varphi(\cdot)) = \beta(t; \varphi(\cdot)) - \int_t^p (a(r)\varphi(r) - b(r)) dr \quad (10)$$

и введем в рассмотрение геометрическую разность двух множеств  $X$  и  $Y$  в пространстве  $R^n$  [2]

$$X \# Y = \{z \in R^n : z + Y \subset X\}.$$

Альтернированный интеграл равен [4]

$$W(t; \varphi(\cdot)) = Z \# \beta(t; \varphi(\cdot))S + \alpha(t; \varphi(\cdot))S. \quad (11)$$

В [4] показано, что, если начальное состояние  $z(t_0) \notin W(t_0; \varphi(\cdot))$ , то для любого управления  $w: (-\infty, p] \times R^n \rightarrow S$  найдется движение  $z(t)$  такое, что включение (7) не выполнено.

Пусть начальное состояние  $z(t_0) \in W(t_0; \varphi(\cdot))$ . Обозначим при  $t \leq p$  и  $z \in R^n$

$$\varepsilon(t, z) = \inf\{\varepsilon \geq 0 : z \in W(t; \varphi(\cdot)) + 2\varepsilon S\}.$$

Из замкнутости множества  $W(t; \varphi(\cdot))$  следует, что при некотором  $w \in S$  выполнено включение

$$z - \varepsilon(t, z)w \in W(t; \varphi(\cdot)) + \varepsilon S.$$

Можно показать, что это включение выполнено на некотором векторе  $w = w(t, z)$ , у которого  $\|w(t, z)\| = 1$ .

**Теорема 1.** Управление (2) с функцией  $w(t, z)$  обеспечивает в задаче (1) включение (7) для любого движения  $z(t)$  из любого начального состояния  $z(t_0) \in W(t_0; \varphi(\cdot))$ .

Доказательство непосредственно следует из теоремы 2 в работе [4].

**4. Построение оптимального управления**

Возьмем точку  $z_0 \in R^n$  и число  $t_0 < p$  и рассмотрим следующую оптимизационную задачу:

$$\int_{t_0}^p g(r, \varphi(r)) dr \rightarrow \min, \varphi: [t_0, p] \rightarrow [0, 1], \tag{12}$$

$$z_0 \in Z^* \beta(t_0; \varphi(\cdot)) S + \alpha(t_0; \varphi(\cdot)) S. \tag{13}$$

**Теорема 2.** Пусть функция  $g(t, \varphi)$  удовлетворяет условиям предположения 1, а включение (13) выполнено на некоторой измеримой функции  $\varphi: [t_0, p] \rightarrow [0, 1]$ . Тогда решение  $\varphi_0: [t_0, p] \rightarrow [0, 1]$  в задаче (12), (13) существует.

**Доказательство.** Обозначим через  $g_0$  нижнюю грань функционала (12) на измеримых функциях  $\varphi: [t_0, p] \rightarrow [0, 1]$ , удовлетворяющих включению (13). Из неравенства  $g(t, \varphi) \geq 0$  следует, что  $g_0 \geq 0$ . Существует последовательность измеримых функций  $\varphi_m: [t_0, p] \rightarrow [0, 1]$ , удовлетворяющих включению (13), такая, что

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \int_{t_0}^p g(r, \varphi_m(r)) dr = g_0. \tag{14}$$

Каждая из функций

$$f_m(t) = \int_t^p (b(r) - a(r)\varphi_m(r)) dr, l_m(t) = \int_t^p g(r, \varphi_m(r)) dr \tag{15}$$

при любых  $t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq p$  удовлетворяет неравенству

$$|f_m(t_1) - f_m(t_2)| \leq \int_{t_1}^{t_2} b(r) dr, |l_m(t_1) - l_m(t_2)| \leq \int_{t_1}^{t_2} G(r) dr, \tag{16}$$

из которого получим, что каждая из последовательностей функций (15) является равномерно непрерывной и равномерно ограниченной. По теореме Арцела из них можно выделить подпоследовательности, которые на отрезке  $[t_0, p]$  сходятся равномерно. Не вводя новых обозначений, считаем, что сами последовательности сходятся равномерно:  $f_m(t) \rightarrow f(t), l_m(t) \rightarrow l(t)$ .

Предельные функции  $f(t)$  и  $g(t)$  удовлетворяют неравенствам (16). Из теоремы об абсолютной непрерывности интеграла Лебега [7, с. 282] следует, что функции  $f(t)$  и  $l(t)$  являются абсолютно непрерывными на отрезке  $[t_0, p]$ .

Допустим, что существует измеримая функция  $\varphi_0: [t_0, p] \rightarrow [0, 1]$  такая, что

$$\dot{f}(t) = a(t)\varphi_0(t) - b(t), \dot{l}(t) \leq -g(t, \varphi_0(t)) \tag{17}$$

для почти всех  $t \in [t_0, p]$ . Из формул (15) следует, что  $f_m(p) = 0$ . Поэтому  $f(p) = 0$ . Интегрируя первое равенство в (17), получаем

$$f(t) = \int_t^p (-a(r)\varphi_0(r) + b(r)) dr. \tag{18}$$

Из второй формулы (15) получим, что  $l_m(p) = 0$  и согласно (14)  $l_m(t_0) \rightarrow g_0$ . Поэтому  $l(p) = 0$  и  $l(t_0) = g_0$ . Отсюда и из второго неравенства (17) следует, что

$$\int_{t_0}^p g(r, \varphi_0(r)) dr \leq g_0. \quad (19)$$

Покажем, что функция  $\varphi_0(r)$  удовлетворяет включению (13). В самом деле, каждая из функций  $\varphi_m(r)$  удовлетворяет включению (13). Это значит, что существует последовательность векторов  $s_m \in S$  такая, что

$$z_0 - \alpha(t_0; \varphi_m(\cdot))s_m + \beta(t_0; \varphi_m(\cdot))s \in Z \quad (20)$$

для любого вектора  $s \in S$ . Можем считать, что  $s_m \rightarrow s_* \in S$  (иначе перейдем к подпоследовательности). Далее, из равномерной сходимости  $f_m(t) \rightarrow f(t)$  и из формул (9), (10), (15) и (18) следует, что  $\beta(t_0; \varphi_m(\cdot)) \rightarrow \beta(t_0; \varphi_0(\cdot))$ ,  $\alpha(t_0; \varphi_m(\cdot)) \rightarrow \alpha(t_0; \varphi_0(\cdot))$ . Отсюда и из включения (20), используя замкнутость множества  $Z$ , получим, что включение (13) выполнено и для функции  $\varphi_0(r)$ .

Чтобы доказать существование измеримой функции  $\varphi_0: [t_0, p] \rightarrow [0, 1]$ , удовлетворяющей формулам (17), введем в рассмотрение многозначную функцию

$$Q(t) = \{(q_1, q_2) \in R^2 : q_1 = a(t)\varphi - b(t), q_2 = -g(t, \varphi), \forall \varphi \in [0, 1]\}. \quad (21)$$

Из непрерывности по  $\varphi \in [0, 1]$  функции  $g(t, \varphi)$  следует, что при каждом  $t \in [t_0, p]$  множество  $Q(t)$  является замкнутым. Далее, множество  $Q(t)$  содержится в шаре радиуса  $a(t) + b(t) + G(t)$ . Из измеримости по  $t \in [t_0, p]$  функций  $a(t)$ ,  $b(t)$  и  $g(t, \varphi)$  следует, что многозначная функция (21)

измерима по  $t \in [t_0, p]$  [8]. Следовательно, для любых чисел  $t_0 \leq t < \tau \leq p$  интеграл  $\int_t^\tau Q(r) dr$  является выпуклым компактом [8].

Из формул (15) следует, что для любых чисел  $t_0 \leq t < \tau \leq p$  выполнено включение  $(f_m(\tau) - f(t), l_m(\tau) - l(t)) \in \int_t^\tau Q(r) dr$ . Переходя в этом включении к пределу при  $m \rightarrow \infty$ , получаем, что предельные функции  $f(t)$  и  $l(t)$  удовлетворяют этому включению. Следовательно,

$$0 \in \int_t^\tau ((-\dot{f}(r), -\dot{l}(r)) + Q(r)) dr. \quad (22)$$

Зафиксируем вектор  $(\psi_1, \psi_2) \in R^2$  и обозначим через  $c(\psi_1, \psi_2; Q(r))$  опорную функцию множества  $Q(r)$ . Функция  $\alpha(r) = -\dot{f}(r)\psi_1 - \dot{l}(r)\psi_2 + c(\psi_1, \psi_2; Q(r))$  является суммируемой на отрезке  $[t_0, p]$ . Из включения (22) следует неравенство  $\int_t^\tau \alpha(r) dr \geq 0$ . У интеграла с переменным верхним

пределом  $\gamma(t) = \int_{t_0}^t \alpha(r) dr$  почти всюду существует производная и выполнено равенство

$$\dot{\gamma}(t) = \alpha(t). \text{ Поэтому } \alpha(t) = \dot{\gamma}(t) = \lim_{\tau \rightarrow t+0} \frac{1}{\tau - t} \int_t^\tau \alpha(r) dr \geq 0 \text{ для почти всех } t \in [t_0, p].$$

Таким образом, для каждого вектора  $(\psi_1, \psi_2) \in R^2$  существует множество полной меры  $I \subset [t_0, p]$  такое, что для любого  $t \in I$  выполнено неравенство

$$\dot{f}(t)\psi_1 + \dot{l}(t)\psi_2 \leq c(\psi_1, \psi_2; Q(r)). \quad (23)$$

Множество векторов  $(\psi_1, \psi_2)$  с рациональными координатами образуют счетное множество. Занумеруем их  $(\psi_1^{(i)}, \psi_2^{(i)})$ . Каждому из них соответствует множество полной меры  $I_i$ . Их пересечение

числение  $I_*$  является множеством полной меры. Для каждого  $t \in I_*$  и для каждого вектора  $(\psi_1^{(t)}, \psi_2^{(t)})$  выполнено неравенство (23). Из непрерывности опорной функции по переменным  $\psi_1$  и  $\psi_2$  следует, что неравенство (23) будет выполняться при  $t \in I_*$  для любого вектора  $(\psi_1, \psi_2) \in R^2$ .

Из неравенства (23) следует выполнение  $(\dot{f}(t), \dot{i}(t)) \in \text{co} Q(t)$  при  $t \in I_*$ . Отсюда, используя теорему Каратеодори [9, с. 9], получим, что существуют числа  $\lambda_i \geq 0, \varphi_i \in [0, 1], i = 1, 2, 3, \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1$  такие, что

$$\dot{f}(t) = a(t) \sum_{i=1}^3 \lambda_i \varphi_i - b(t), \dot{i}(t) = - \sum_{i=1}^3 \lambda_i g(t, \varphi_i). \quad (24)$$

Из этих формул, применяя лемму о выборе А.Ф. Филиппова [10] получим, что существуют измеримые на отрезке  $[t_0, p]$  функции  $\lambda_i(t) \geq 0, \varphi_i(t) \in [0, 1], i = 1, 2, 3, \lambda_1(t) + \lambda_2(t) + \lambda_3(t) = 1$  такие, что они удовлетворяют равенствам (24) для почти всех  $t \in [t_0, p]$ . Следовательно, функция

$$\varphi_0(t) = \sum_{i=1}^3 \lambda_i(t) \varphi_i(t) \in [0, 1]$$

удовлетворяет первому равенству (17). Из выпуклости по  $\varphi$  функции  $g(t, \varphi)$  следует, что

$$\dot{i}(t) = - \sum_{i=1}^3 \lambda_i(t) g(t, \varphi_i(t)) \leq -g\left(t, \sum_{i=1}^3 \lambda_i(t) \varphi_i(t)\right) = -g(t, \varphi_0(t)).$$

Таким образом, построенная функция  $\varphi_0(t)$  удовлетворяет требуемым соотношениям (17).

## Литература

1. Айзекс, Р. Дифференциальные игры / Р. Айзекс. – М.: Мир, 1967. – 479 с.
2. Понтрягин, Л.С. Линейные дифференциальные игры преследования / Л.С. Понтрягин // Математический сборник. Новая серия. – 1980. – Т. 112. Вып. 3. – С. 307–330.
3. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 456 с.
4. Ухоботов, В.И. Однотипные дифференциальные игры с выпуклой целью / В.И. Ухоботов // Труды ин-та математики и механики УрО РАН. – 2010. – Т. 16, № 5. – С. 196–204.
5. Ухоботов, В.И. Однотипные дифференциальные игры с выпуклой интегральной платой / В.И. Ухоботов, Д.В. Гушин // Труды ин-та математики и механики УрО РАН. – 2011. – Т. 17, № 1. – С. 251–258.
6. Люстерник, Л.А. Элементы функционального анализа / Л.А. Люстерник, В.И. Соболев. – М.: Наука, 1965. – 520 с.
7. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функций и функционального анализа / А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – М.: Наука, 1972. – 496 с.
8. Hermes, H. The Generalized Differential Equation  $\dot{x} \in R(t, x)$  / H. Hermes // Advances in Math. – 1970. – Т. 4, № 29. – С. 149–169.
9. Пшеничный, Б.Н. Выпуклый анализ и экстремальные задачи / Б.Н. Пшеничный. – М.: Наука, 1980. – 319 с.
10. Филиппов, А.Ф. О некоторых вопросах теории оптимального регулирования / А.Ф. Филиппов // Вестник МГУ. Серия «Математика, механика». – 1959. – Вып. 2. – С. 25–32.

*Поступила в редакцию 19 декабря 2011 г.*

## A ONE-TYPE CONTROL PROBLEM WITH A CONVEX GOAL IN CASE OF DISTURBANCE

V.I. Ukhobotov<sup>1</sup>, D.V. Gushchin<sup>2</sup>

The authors analyze a one-type problem of positioning of a phase point at a preset time on the convex closed set with minimization of an integral of the convex by standards of control function. There is a disturbance in motion equations; the quantity of its norm is less than the predetermined number. The problem is analyzed within the theory of differential games. The authors prove the existence of an optimal control and give the algorithm of its plotting.

*Keywords: differential game, control, alternating integral.*

### References

1. Ajzeks R. *Differencial'nye igry* (Differential Games). Moscow, Mir, 1967. 479 p. (in Russ.). [Isaacs R. *Differential Games*. John Wiley and Sons, 1965.]
2. Pontrjagin L.S. *Linejnye differencial'nye igry presledovaniya* (Linear differential games of pursuit). *Matematicheskij sbornik. Novaja serija*. 1980. Vol. 112. Issue 3. pp. 307–330. (in Russ.).
3. Krasovskij N.N., Subbotin A.I. *Pozicionnye differencial'nye igry* (Positional Differential Games). Moscow, Nauka, 1974. 456 p. (in Russ.).
4. Ukhobotov V.I. *Odnotipnye differencial'nye igry s vypukloj cel'ju* (The same type of differential games with convex purpose). *Trudy Instituta Matematiki I Mekhaniki UrO RAN*. 2010. Vol. 16, no. 5. pp. 196–204. (in Russ.).
5. Ukhobotov V.I., Gushchin D.V. *Odnotipnye differencial'nye igry s vypukloj integral'noj platoj* (The same type of differential games with convex integral payoff). *Trudy Instituta Matematiki I Mekhaniki UrO RAN*. 2011. Vol. 17, no. 1. pp. 251–258. (in Russ.). [Ukhobotov V.I., Gushchin D.V. *Single-Type Differential Games with Convex Integral Payoff*. Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. 2011. Vol. 275, Suppl. 1. p. 178. DOI: 10.1134/S0081543811090136].
6. Ljusternik L.A., Sobolev V.I. *Jelementy funkcional'nogo analiza* (Elements of functional analysis). Moscow, Nauka, 1965. 520 p. (in Russ.).
7. Kolmogorov A.N., Fomin S.V. *Jelementy teorii funkcij i funkcional'nogo analiza* (Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis). Moscow, Nauka, 1972. 496 p. (in Russ.).
8. Hermes H. *The Generalized Differential Equation  $\dot{x} \in R(t, x)$* . *Advances in Math*. 1970. Vol. 4, no. 29. pp. 149–169.
9. Pshenichnyj B.N. *Vypuklyj analiz i jekstremal'nye zadachi* (Convex analysis and extremal problems). Moscow, Nauka, 1980. 319 p. (in Russ.).
10. Filippov A.F. *O nekotoryh voprosah teorii optimal'nogo regulirovaniya* (On some questions in the theory of optimal control). *Vestnik MGU. Serija "Matematika, mehanika"*. 1959. Issue 2. pp. 25–32. (in Russ.).

<sup>1</sup> Ukhobotov Viktor Ivanovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Theory of Control and Optimization Department, Chelyabinsk State University.

E-mail: ukh@csu.ru

<sup>2</sup> Gushchin Denis Vasilevich is a mathematician of a university research laboratory of methods of optimization and modeling game situations, Theory of Control and Optimization Department, Chelyabinsk State University.

E-mail: off\_side@mail.ru

# АВТОМОРФИЗМЫ КОЛЕЦ ВЫЧЕТОВ КОЛЕЦ ЦЕЛЫХ КРУГОВЫХ ПОЛЕЙ

А.В. Шпонько<sup>1</sup>

Изучается структура колец вычетов колец целых круговых полей путем рассмотрения их кольцевых автоморфизмов. Выявлены связи особой подгруппы группы автоморфизмов с системой вложенных подколец кольца вычетов. Среди возникающих подколец выделено особо перспективное для изучения, и найдено множество его необратимых элементов для некоторых нетривиальных случаев.

*Ключевые слова:* абелевы поля, круговые поля, кольца целых, кольца вычетов, подкольца, автоморфизмы.

Пусть  $m$  – натуральное число. Обозначим через  $\zeta_m = e^{\frac{2\pi i}{m}}$  – первообразный корень степени  $m$  из единицы. Тогда  $Q(\zeta_m)$  называется  $m$ -круговым полем. Согласно теореме Кронекера–Вебера всякое абелево поле может быть вложено в круговое, что и обуславливает их важное значение в теории абелевых полей.

Пусть  $I(Q(\zeta_m))$  – его кольцо целых. Известно, что оно состоит из элементов вида  $\sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i \zeta_m^i$ , где  $\alpha_i \in \mathbb{Z} \forall i \in \{1, \dots, m-1\}$ , то есть  $I(Q(\zeta_m)) = \mathbb{Z}[\zeta_m]$ . В частности, при  $m=4$  имеем кольцо гауссовых целых. Мультипликативная структура этих колец известна лишь частично. В общем случае известны только подгруппы единиц конечного индекса. Поэтому нами изучается  $I_m^p = I(Q(\zeta_m)) / pI(Q(\zeta_m))$  – кольцо вычетов по модулю  $p$  кольца целых кругового поля. В дальнейшем значения  $p$  и  $m$  полагаются простыми и различными. В отличие от  $I(Q(\zeta_m))$  эти кольца конечны, ввиду чего более удобны для изучения.

В [1] была также показана важность исследования колец вычетов абелевых полей (в особенности, круговых полей) для изучения центральных единиц целочисленных групповых колец конечных групп.

В [1, 2] начато исследование мультипликативной структуры колец вычетов кольца целых круговых полей. В частности известно, что

$$U(I_m^p) \cong \prod_{i=1}^g \mathbb{Z}_{p^{f_i-1}},$$

где  $f = \min\{j \geq 1 \mid p^j \equiv 1 \pmod{m}\}$  и  $fg = m-1$ . Однако, сам изоморфизм не установлен, ввиду чего мы, в общем случае, не знаем порождающих элементов.

Пусть  $\varphi$  – произвольный кольцевой автоморфизм  $I_m^p$ . Тогда образ произвольного элемента  $I_m^p$  относительно  $\varphi$  можно представить в виде

$$\varphi\left(\sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i \zeta^i\right) = \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i \varphi(\zeta)^i.$$

Тем самым автоморфизм однозначно определяется его образом  $\varphi(\zeta)$ .

Вообще говоря, отображение  $\varphi: I_m^p \rightarrow I_m^p$  будет автоморфизмом  $I_m^p$  в том, и только в том случае, когда  $\varphi$  согласовано с кольцевыми операциями,  $\text{ord}(\varphi(\zeta)) = m$  и  $\varphi(\zeta), \varphi(\zeta)^2, \dots, \varphi(\zeta)^{m-1}$  линейно независимы.

Аutomорфизмы вида  $\varphi(\zeta) = \zeta^k$ , где  $k = \{1, \dots, m-1\}$ , обозначим как  $\varphi_k$ . Такие автоморфизмы назовем *цельми*. Они образуют в  $\text{Aut}(I_m^p)$  подгруппу. Обозначим её  $\text{MAut}(I_m^p)$ .

<sup>1</sup> Шпонько Андрей Викторович – аспирант, кафедра алгебры, Южно-Уральский государственный университет  
E-mail: ashponko@gmail.com

Легко показать, что если отображение  $\psi: x \mapsto x^r$ , где  $x \in I_m^p, r \in N^+$  является автоморфизмом, то  $\psi \in \langle \varphi_p \rangle \subseteq MAut(I_m^p)$ . Поэтому подгруппа  $\langle \varphi_p \rangle$  играет особую роль в  $MAut(I_m^p)$ , обозначим её через  $PAut(I_m^p)$ , а лежащие в ней автоморфизмы назовем  $p$ -автоморфизмами.

В [3] было доказано, что для произвольной подгруппы  $A \subseteq PAut(I_m^p)$  множество устойчивых, относительно её действия, элементов

$$R(A) = \langle x \in I_m^p \mid \forall \sigma \in A \sigma(x) = x \rangle$$

является подкольцом в  $I_m^p$ . Более того, различным подгруппам соответствует различные подкольца и если выполнено  $A \subseteq B \subseteq PAut(I_m^p)$ , то  $R(PAut(I_m^p)) \subseteq R(B) \subseteq R(A)$ . Ввиду обозначенных свойств получаем множество подколец, структура вложенности которых в точности соответствует структуре вложенности подгрупп  $PAut(I_m^p)$  (можно говорить об аналоге соответствия Галуа).

Обозначим для удобства  $R(PAut(I_m^p))$  через  $RP_m^p$  и перейдем к его более детальному рассмотрению. Сперва заметим, что  $RP_m^p = \langle x \in I_m^p \mid x^p = x \rangle$ . Далее, найдем общий вид его элементов, характеризующим свойством которых является устойчивость к возведению в  $p$ -ю степень. Заметим, что

$$\left( \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i \zeta^i \right)^p = \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i^p \zeta^{ip} = \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i \zeta^{ip},$$

что доказывается идентично аналогичному свойству полей характеристики  $p$ . Отсюда следует

$$x = \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i \zeta^i \quad x \in RP_m^p \Leftrightarrow \forall i, k \in Z_m^1: j \equiv kp \pmod{m} \rightarrow \alpha_j = \alpha_k,$$

это означает попарное равенство коэффициентов  $\alpha_i$  для значений  $i$ , соответствующих одному смежному классу  $Z_m^*$  по  $\langle p \rangle$ . Теперь видно, что  $RP_m^p$  по сложению есть линейное пространство над  $Z_p$  размерности

$$g = |\langle p \rangle: Z_m^*|.$$

Его базис образован элементами

$$\theta_i = \sum_{j \in P_i} \zeta^j, \quad (1)$$

где  $i \in \{1, \dots, g\}$ , а  $P_i$  – смежные классы  $Z_m^1$  по  $\langle p \rangle$ . Стоит отметить идентичность данных базисов для значений  $p$  сравнимых по модулю  $m$ , что обуславливает схожесть строения соответствующих колец вычетов, выявленную ранее в ходе численного эксперимента [2].

Обозначим через  $f$  – мощность  $|PAut(I_m^p)|$ . Очевидно  $f = |\langle p \rangle|$  в  $Z_m^1$ . Отсюда видно, что для произвольного  $a \in I_m^p$  справедливо  $a^{p^f} = a$ . Откуда, в частности, вытекает отсутствие в  $I_m^p$  нильпотентных элементов.

Рассмотрим функцию

$$P(x) = \prod_{\sigma \in PAut(I_m^p)} \sigma(x) = x^{1+p+\dots+p^{f-1}} = x^{\frac{p^f-1}{p-1}},$$

ставящую в соответствие всякому элементу из  $I_m^p$  произведение всех его образов относительно  $p$ -автоморфизмов. Легко убедиться, что  $P(x) \in RP_m^p$  для любого  $x \in I_m^p$ . Также легко показывается, что для любого  $x \in RP_m^p$  имеем  $P(x) = x$ . Откуда следует, что  $P: I_m^p \rightarrow RP_m^p$  является инъективным гомоморфизмом.

Поскольку  $P$  может быть сведено к возведению в степень, данное отображение сохраняет обратимость элемента. Обратимому элементу ставится в соответствие обратимый же, а необра-

тиному – необратимый. Это обуславливает интерес изучения  $U(RP_m^p)$ . Ввиду, как правило меньшей размерности  $RP_m^p$ , нежели  $I_m^p$ , его изучение может оказаться проще. Из результатов [1] следует

$$U(RP_m^p) \cong \prod_{i=1}^s Z_{p^{i-1}}, \quad (2)$$

однако сам изоморфизм пока, в общем случае, неизвестен, поскольку нет метода нахождения порождающих этих циклических групп.

Рассмотрим тривиальные случаи. При  $g=1$  имеем кольцо  $RP_m^p$ , изоморфное (обычному) кольцу вычетов  $Z_p$ , строение которого хорошо известно. Если  $g=m-1$ , то  $RP_m^p$  совпадает со всем кольцом  $I_m^p$ .

Для простейшего нетривиального случая  $g=2$  удалось получить следующие результаты.

**Теорема 1.** Пусть  $g=2$ .  $\theta_1, \theta_2$  – базис  $RP_m^p$  вида (1). Тогда таблица умножения базисных элементов имеет вид:

$$\begin{aligned} \theta_1 * \theta_1 &= -(a+1)\theta_1 - a\theta_2 \\ \theta_1 * \theta_2 &= \theta_2 * \theta_1 = a\theta_1 + a\theta_2, \\ \theta_2 * \theta_2 &= a\theta_1 - (a+1)\theta_2, \end{aligned}$$

$$\text{где } a \in Z_p = \begin{cases} -\frac{m+1}{4}, & \text{если } m \equiv 3 \pmod{4} \\ \frac{m-1}{4}, & \text{если } m \equiv 1 \pmod{4} \end{cases}.$$

*Доказательство.* Заметим, что  $\theta_1 + \theta_2 = \sum_{i=1}^{m-1} \zeta^i = -1$ . Также найдется  $\psi \in MAut(I_m^p)$  такое, что  $\psi(\theta_1) = \theta_2$  и  $\psi(\theta_2) = \theta_1$ .

Пусть  $\theta_1 * \theta_2 = a\theta_1 + b\theta_2$ . Однако  $\theta_1 * \theta_2 = \theta_2 * \theta_1 = \psi(\theta_1 * \theta_2) = b\theta_1 + a\theta_2$ . Откуда  $b=a$  и, следовательно,  $\theta_1 * \theta_2 = a\theta_1 + a\theta_2$ .

В свою очередь  $\theta_1 * \theta_1 + \theta_1 * \theta_2 = \theta_1(\theta_1 + \theta_2) = -\theta_1$ . Откуда  $\theta_1 * \theta_1 = -\theta_1 - \theta_1 * \theta_2 = -(a+1)\theta_1 - a\theta_2$ .

В заключение имеем  $\theta_2 * \theta_2 = \psi(\theta_1 * \theta_1) = -a\theta_1 - (a+1)\theta_2$ .

Теперь найдем значение  $a$ , для чего определим сумму коэффициентов разложения  $\theta_1 * \theta_1$  на базисные элементы, из предшествующих соображений равную  $-(2a+1)$ .

Поскольку  $\theta_1 = \sum_{i=0}^{f-1} \zeta^{p^i}$ , то

$$\theta_1 * \theta_1 = \sum_{i=0}^{f-1} \zeta^{p^i} \sum_{j=0}^{f-1} \zeta^{p^j} = \sum_{i=0}^{f-1} \sum_{j=0}^{f-1} \zeta^{p^i+p^j}.$$

Отметим, что каждое  $\zeta^{p^i+p^j}$  либо входит в качестве одного из  $f$  слагаемых в  $\theta_1$  или  $\theta_2$  (см. формулу (1)), либо в случае  $p^i + p^j \equiv 0 \pmod{m}$  дает нам  $1 = -(\theta_1 + \theta_2)$ .

В первом случае имеем  $f^2$  слагаемых вида  $\zeta^{p^i+p^j}$ , каждое из которых входит в разложение вида (1) для  $\theta_1$  либо  $\theta_2$ . Поскольку  $\theta_1$  и  $\theta_2$  состоят каждое из  $f$  таких слагаемых, то искомая сумма есть  $\frac{f^2}{f} = f$ , откуда находим  $a$ .

Второй случай возможен лишь при условии разрешимости уравнения  $p^x \equiv -1 \pmod{m}$ , что равносильно четности  $\frac{m-1}{2}$  и соответственно условию  $m \equiv 1 \pmod{4}$ . Причем для заданного  $i$  су-



существует единственное значение  $j$ , такое что  $p^j + p^j \equiv 0 \pmod{m}$ . Искомая сумма равна

$$-2f + \frac{f^2 - f}{f} = -f - 1, \text{ откуда выразим } a. \text{ Теорема доказана.}$$

**Теорема 2.** Пусть  $g = 2$ . Тогда любой элемент  $x \in RP_m^p$  представим в виде  $x = \alpha_1\theta_1 + \alpha_2\theta_2$ , где  $\alpha_1, \alpha_2 \in Z_p$ .

$$x \notin U(RP_m^p) \Leftrightarrow \alpha_2 = c\alpha_1,$$

где  $c \in Z_p$  – один из корней уравнения

$$\begin{cases} c + c^{-1} = \frac{2m-1}{m+1}, \text{ если } m \equiv 3 \pmod{4}, \\ c + c^{-1} = 2\frac{m-3}{m+1}, \text{ если } m \equiv 1 \pmod{4}, \end{cases}$$

обязанного в этом случае иметь два различных корня.

*Доказательство.*

Для  $c \in Z_p$  справедливо  $(\theta_1 + c\theta_2)(\theta_1 + c^{-1}\theta_2) = \theta_1\theta_1 + (c + c^{-1})\theta_1\theta_2 + \theta_2\theta_2 = 2a + 1 - (c + c^{-1})a$ , где  $a$  – из теоремы 1.

Значит  $\theta_1 + c\theta_2 \in U(RP_m^p)$  тогда, и только тогда, когда  $2a + 1 - (c + c^{-1})a \neq 0$ , что даст нам утверждение теоремы для элементов данного вида. Элементы вида  $d\theta_1 + k\theta_2$ , где  $k \neq 0 \wedge d \neq 0$ , можно свести к рассмотренному случаю домножением на  $d^{-1}$ , что никак не влияет на обратимость.

Обратимость остальных ненулевых элементов  $RP_m^p$  легко получить из теоремы 1. Из (2) следует наличие  $RP_m^p$  ровно  $2p - 1$  необратимых элемента, откуда получаем необходимость существования корней у уравнения  $2a + 1 - (c + c^{-1})a = 0$ . Теорема доказана.

Таким образом, довольно подробно исследован случай, когда размерность  $g = 2$ . В настоящее время исследуются случаи большего значения  $g$ . Однако в силу того, что будут возникать уравнения более высоких степеней весьма проблематично найти такие же подробные описания колец  $RP_m^p$  для больших значений размерности  $g$ .

Теперь рассмотрим в качестве иллюстрации подкольца элементов устойчивых к  $p$ -автоморфизмам кольца вычетов 13-кругового поля по модулю  $p = 41$ . Заметим, что  $41 \equiv 2 \pmod{13}$ , а 2 – есть первообразный корень по модулю 13. Соответственно  $g = 1$  даст нам  $RP_{13}^{41} \cong Z_{41}$  и  $PAut(I_{13}^{41}) = MAut(I_{13}^{41})$ .

Перейдем к подгруппе  $\langle \varphi_{41^2} \rangle = \langle \varphi_4 \rangle \subset PAut(I_m^p)$ . Имеем  $|\varphi_4 : PAut(I_m^p)| = 2$ , а, значит, соответствующее подкольцо  $R(\langle \varphi_4 \rangle)$  по сложению будет линейным пространством размерности 2 над  $Z_{41}$ . Его базисными элементами являются  $\theta_1 = \zeta_{13}^4 + \zeta_{13}^3 + \zeta_{13}^{12} + \zeta_{13}^9 + \zeta_{13}^{10} + \zeta_{13}$  и  $\theta_2 = \zeta_{13}^2 + \zeta_{13}^8 + \zeta_{13}^6 + \zeta_{13}^{11} + \zeta_{13}^5 + \zeta_{13}^7$ .

Единственным подкольцом размерности 3, которое можно получить при помощи приведенных выше методов, будет  $R(\langle \varphi_8 \rangle) = \langle x \in I_{13}^{41} \mid x^8 = x \rangle$ . Его базисными элементами вида (1) будут  $\theta_1 = \zeta_{13}^8 + \zeta_{13}^{12} + \zeta_{13}^5 + \zeta_{13}$ ,  $\theta_2 = \zeta_{13}^2 + \zeta_{13}^3 + \zeta_{13}^{11} + \zeta_{13}^{10}$  и  $\theta_3 = \zeta_{13}^4 + \zeta_{13}^6 + \zeta_{13}^9 + \zeta_{13}^7$ . Попарно их перемножая, построим таблицу умножения:

$$\begin{aligned} \theta_1 * \theta_1 &= -4\theta_1 - 3\theta_2 - 2\theta_3, \\ \theta_1 * \theta_2 &= \theta_1 + 2\theta_2 + \theta_3, \\ \theta_1 * \theta_3 &= 2\theta_1 + \theta_2 + \theta_3, \\ \theta_2 * \theta_2 &= -2\theta_1 - 4\theta_2 - 3\theta_3, \\ \theta_2 * \theta_3 &= \theta_1 + \theta_2 + 2\theta_3, \end{aligned}$$

$$\theta_3 * \theta_3 = -3\theta_1 - 2\theta_2 - 4\theta_3,$$

откуда видно наличие автоморфизмов подкольца  $\psi_1 : \theta_1 \rightarrow \theta_2 \rightarrow \theta_3 \rightarrow \theta_1$  и  $\psi_2 : \theta_1 \rightarrow \theta_3 \rightarrow \theta_2 \rightarrow \theta_1$ .

Нерассмотренными остались еще два собственных подкольца  $R(\langle \varphi_{41^4} \rangle) = R(\langle \varphi_3 \rangle)$  и  $R(\langle \varphi_{41^6} \rangle) = R(\langle \varphi_{12} \rangle)$  размерностей 4 и 6 соответственно. Найденные подкольца образуют следующую структуру вложенности:

$$RP_{13}^{41} \subset R(\langle \varphi_4 \rangle) \subset R(\langle \varphi_3 \rangle) \subset I_{13}^{41},$$

$$RP_{13}^{41} \subset R(\langle \varphi_4 \rangle) \subset R(\langle \varphi_{12} \rangle) \subset I_{13}^{41},$$

$$RP_{13}^{41} \subset R(\langle \varphi_8 \rangle) \subset R(\langle \varphi_{12} \rangle) \subset I_{13}^{41},$$

что находится в полном соответствии с вложенностью соответствующих подгрупп  $PAut(I_{13}^{41})$ .

## Литература

1. Алесв, Р.Ж. Центральные единицы целочисленных групповых колец конечных групп: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / Р.Ж. Алесв. – Челябинск, 2002. – 354 с.
2. Шпонько, А.В. Порядки элемента в группах вычетов колец целых абелевых полей / А.В. Шпонько // Проблемы теоретической и прикладной математики: труды 40-й Всероссийской молодежной конференции. – Екатеринбург, 2009. – С. 72–75.
3. Шпонько, А.В. Подкольца колец вычетов целых круговых полей / А.В. Шпонько // Проблемы теоретической и прикладной математики: труды 42-й Всероссийской молодежной конференции. – Екатеринбург, 2011. – С. 256.

*Поступила в редакцию 13 июля 2011 г.*

## AUTOMORPHISMS OF RESIDUE RINGS OF INTEGER RINGS OF CIRCULAR FIELDS

**A.V. Shponko<sup>1</sup>**

The authors research the structure of residue rings of integer rings of circular fields by analyzing their ring automorphisms. The connections between a special subgroup of the automorphism group and the system of the inserted subrings of the residue rings are found. Among the occurring subrings the authors found a very prospective one for further research as well as a multitude of its noninvertible elements for some nontrivial cases.

*Keywords: Abelian fields, circular fields, integer rings, residue rings, subrings, automorphisms.*

## References

1. Aleev R.Zh. *Central'nye edinicy celochislennykh gruppovykh kolec konechnykh grupp: dis. d-ra. fiz.-mat. nauk* (The central units of integral group rings of finite groups: Thesis of Doctor of Physical and Mathematical Sciences). Cheljabinsk, 2002. 354 p.
2. Shponko A.V. Porjadki ehlementa v gruppakh vychetov kolec celykh abelevykh polejj (The orders of elements in groups of residue rings of Abelian fields). *Problemy teoreticheskoy i prikladnojj matematiki: Trudy 40-jj Vserossijskojj molodezhnojj konferencii* (Proc. of the 40th All-Russian Youth Conference “Problems of Theoretical and Applied Mathematics”). Ekaterinburg, 2009. pp. 72–75. (in Russ.).
3. Shponko A.V. Podkol'ca kolec vychetov celykh krugovykh polejj (Subring of residue rings of integers of cyclotomic fields) // *Problemy teoreticheskoy i prikladnojj matematiki: Trudy 42-jj Vserossijskojj molodezhnojj konferencii* (Proc. of the 42th All-Russian Youth Conference “Problems of Theoretical and Applied Mathematics”). Ekaterinburg, 2011. p. 256. (in Russ.).

<sup>1</sup> Shponko Andrey Victorovich is Post-graduate Student, Algebra Department, South Ural State University  
E-mail: ashponko@gmail.com

# ОБ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ СИСТЕМЫ КВАЗИЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

Т.К. Юлдашев<sup>1</sup>

Предлагается методика изучения разрешимости обратной задачи для системы квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка. С помощью нелинейного метода характеристик, основанного на введении дополнительного параметра, задача Коши сводится к изучению системы для нелинейных интегральных уравнений. Для решения обратной задачи восстанавливаемые функции находятся из системы нелинейных интегральных уравнений Вольтерра первого рода с помощью нелинейного интегрального преобразования.

*Ключевые слова:* обратная задача, система квазилинейных уравнений, дополнительный параметр, нелинейное интегральное преобразование, метод сжимающих отображений.

**1. Постановка задачи.** В области  $D$  рассматривается система квазилинейных дифференциальных уравнений вида

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + A_1(t, x, u, \vartheta) \frac{\partial u}{\partial x} = f_1(t, x, u, \vartheta, \sigma(t)), & u = u(t, x), \\ \frac{\partial \vartheta}{\partial t} + A_2(t, x, u, \vartheta) \frac{\partial \vartheta}{\partial x} = f_2(t, x, u, \vartheta, \eta(t)), & \vartheta = \vartheta(t, x) \end{cases} \quad (1)$$

с начальными

$$u(t, x)|_{t=t_0} = \varphi_1(x), \quad (2)$$

$$\vartheta(t, x)|_{t=t_0} = \varphi_2(x) \quad (3)$$

и дополнительными условиями

$$u(t, x)|_{x=x_0} = \psi_1(t), \quad (4)$$

$$\vartheta(t, x)|_{x=x_0} = \psi_2(t), \quad (5)$$

где  $A_i(t, x, u, \vartheta) \in C(D \times R^2)$ ,  $f_i(t, x, u, \vartheta, \omega(t)) \in C(D \times R^2 \times [t_0; T])$ ,  $\omega(t) = (\sigma(t), \eta(t))$ ,

$\frac{dt}{d\tau} = 1, \frac{dx}{d\tau} = A_1(t, x, u, \vartheta), \frac{dt}{d\tau} = 1, \frac{dx}{d\tau} = A_2(t, x, u, \vartheta), \tau \quad i=1, 2, \quad \sigma(t), \eta(t) \in C[t_0; T]$ ,

$D \equiv [t_0; T] \times R, \quad 0 < t_0 < T < \infty, \quad x_0 \in R, \quad R \equiv (-\infty; \infty)$ .

Системы уравнений вида (1) встречаются при решении многих задач механики. Стандартные методы позволяют найти точные (частные) решения квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка при конкретных случаях нелинейных функций, входящих в данное уравнение [1]. Для нахождения общих решений квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных с общими нелинейными функциями эффективным является метод, который позволяет заменить поставленную задачу эквивалентным ей нелинейным интегральным уравнением Вольтерра второго рода.

В данной работе изучается обратная задача для системы нелинейных дифференциальных уравнений, где восстанавливаемые функции  $\sigma(t), \eta(t)$  находятся в нелинейной правой части данной системы уравнений. При решении обратной задачи (1)–(5) относительно восстанавливаемых функций получаем систему нелинейных интегральных уравнений Вольтерра первого рода, которую с помощью нелинейного интегрального преобразования сводим к специальному виду системы нелинейных интегральных уравнений Вольтерра второго рода.

<sup>1</sup> Юлдашев Турсун Камалдинович – кандидат физико-математических наук, доцент, докторант, кафедра высшей математики, Сибирский государственный аэрокосмический университет, г. Красноярск  
E-mail: tursunbay@rambler.ru

Отметим, что изучению разрешимости обратных задач для линейных дифференциальных уравнений в частных производных посвящено большое количество работ. Библиография основных публикаций, посвященных теории линейных обратных задач, приведена в [2, 3].

**Определение.** Решением обратной задачи (1)–(5) называется четверка непрерывных функций  $\{u(t, x), \vartheta(t, x); \sigma(t), \eta(t)\}$ , удовлетворяющая систему уравнений (1) и условиям (2)–(5).

**2. Сведение задачи Коши (1)–(3) к системе нелинейных интегральных уравнений**

Рассмотрим параметрическое задание характеристик как решения систем:

$$\frac{dt}{d\tau} = 1, \frac{dx}{d\tau} = A_1(t, x, u, \vartheta), \tag{6}$$

$$\frac{dt}{d\tau} = 1, \frac{dx}{d\tau} = A_2(t, x, u, \vartheta). \tag{7}$$

Изменение переменной  $\tau$  перемещает точку с координатами  $t, x$  по характеристике. Интегрируя уравнения в (6) и (7) по  $\tau$ , получаем:

$$x = p_1(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta}), \quad x = p_2(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta}),$$

где  $p_i (i=1,2)$  определяются из следующих систем:

$$p_1(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta}) = x - \int_{\tau}^t A_1(s, p_1, \bar{u}, \bar{\vartheta}) ds, \quad p_2(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta}) = x - \int_{\tau}^t A_2(s, p_2, \bar{u}, \bar{\vartheta}) ds;$$

$$\bar{u} = \bar{u}(\tau, t, x) = \bar{u}(\tau, t, p_1(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})), \quad \bar{\vartheta} = \bar{\vartheta}(\tau, t, x) = \bar{\vartheta}(\tau, t, p_2(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})).$$

Отсюда очевидно, что 
$$\begin{cases} \bar{u}(\tau, t, x)|_{t=\tau=t_0} = \varphi_1(x), \\ \bar{\vartheta}(\tau, t, x)|_{t=\tau=t_0} = \varphi_2(x). \end{cases} \quad \bar{\vartheta}(t, t, x) = \vartheta(t, x).$$

Положим

$$f_i(t, x, u, \vartheta, \omega(t))|_{x=p_i(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})} = f_i(\tau, t, p_i, \bar{u}, \bar{\vartheta}, \omega(t)), \quad i=1,2.$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{u}}{d\tau} &= \frac{du}{d\tau} \Big|_{x=p_1(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})} = \left( \frac{\partial u}{\partial t} \frac{dt}{d\tau} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{d\tau} \right) \Big|_{x=p_1(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})} = \\ &= \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A_1(t, x, u, \vartheta) \right) \Big|_{x=p_1(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})} = f_1(\tau, t, p_1, \bar{u}, \bar{\vartheta}, \sigma(t)), \\ \frac{d\bar{\vartheta}}{d\tau} &= \frac{d\vartheta}{d\tau} \Big|_{x=p_2(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})} = \left( \frac{\partial \vartheta}{\partial t} \frac{dt}{d\tau} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{dx}{d\tau} \right) \Big|_{x=p_2(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})} = \\ &= \left( \frac{\partial \vartheta}{\partial t} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} A_2(t, x, u, \vartheta) \right) \Big|_{x=p_2(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})} = f_2(\tau, t, p_2, \bar{u}, \bar{\vartheta}, \eta(t)), \end{aligned}$$

т.е. мы получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d\bar{u}}{d\tau} = f_1(\tau, t, p_1(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta}), \bar{u}, \bar{\vartheta}, \sigma(t)) \\ \frac{d\bar{\vartheta}}{d\tau} = f_2(\tau, t, p_2(\tau, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta}), \bar{u}, \bar{\vartheta}, \eta(t)) \end{cases}, \tag{8}$$

с начальными условиями

$$\begin{cases} \bar{u}(\tau, t, x)|_{t=\tau=t_0} = \varphi_1(x), \\ \bar{\vartheta}(\tau, t, x)|_{t=\tau=t_0} = \varphi_2(x). \end{cases} \tag{9}$$

Интегрируя (8) по  $\tau$  и используя начальные условия (9), получаем:

$$\begin{cases} \bar{u}(\tau, t, x) = \bar{\Theta}_1(\tau, t, x; \bar{u}, \bar{\vartheta}), \\ \bar{\vartheta}(\tau, t, x) = \bar{\Theta}_2(\tau, t, x; \bar{u}, \bar{\vartheta}), \end{cases} \quad (10)$$

где

$$\bar{\Theta}_i(\tau, t, x; \bar{u}, \bar{\vartheta}) \equiv \varphi_i(p_i(t_0, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})) + \int_{t_0}^{\tau} f_i(\theta, t, p_i(\theta, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta}), \bar{u}, \bar{\vartheta}, \omega(\theta)) d\theta, \quad i=1, 2.$$

При  $\tau = t$  из (10) получаем следующую систему нелинейных интегральных уравнений (СНИУ):

$$\begin{cases} u(t, x) = \Theta_1(t, x; u, \vartheta), \\ \vartheta(t, x) = \Theta_2(t, x; u, \vartheta), \end{cases} \quad (11)$$

где

$$\Theta_i(t, x; u, \vartheta) \equiv \varphi_i(p_i(t_0, t, x, u, \vartheta)) + \int_{t_0}^t f_i(s, x, u(s, x), \vartheta(s, x), \omega(s)) ds, \quad i=1, 2.$$

Теперь покажем, что СНИУ (11) удовлетворяет системе дифференциальных уравнений (1) и начальным условиям (2)–(3).

Действительно, функции

$$\varphi_i(p_i(0, t, x, \bar{u}, \bar{\vartheta})), \quad i=1, 2 \quad (12)$$

являются первыми интегралами системы

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + A_1(t, x, u, \vartheta) \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \vartheta}{\partial t} + A_2(t, x, u, \vartheta) \frac{\partial \vartheta}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (13)$$

и они постоянны вдоль решений системы (13). Производные решений системы (13) вдоль характеристик равны нулю и функции (12) удовлетворяют системе (13). В самом деле, любые достаточно гладкие функции  $\Phi_i(x)$ ,  $i=1, 2$ , постоянные вдоль характеристик системы (13), удовлетворяют ей.

СНИУ (11) удовлетворяет начальным условиям (2) и (3). Из этой СНИУ (11) получаем

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f_1(t, x, u, \vartheta, \sigma(t)), \\ \frac{d\vartheta}{dt} = f_2(t, x, u, \vartheta, \eta(t)). \end{cases}$$

С другой стороны, справедливо соотношение

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{dt} \quad \text{и} \quad \frac{d\vartheta}{dt} = \frac{\partial \vartheta}{\partial t} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{dx}{dt}.$$

Так как

$$\frac{dx}{dt} = A_1(t, x, u, \vartheta), \quad \frac{dx}{dt} = A_2(t, x, u, \vartheta),$$

то из последних четырех соотношений следует, что система уравнений (11) удовлетворяет системе уравнений (1).

Итак, мы доказали, что задача Коши (1)–(3) и система нелинейных интегральных уравнений (11) эквивалентны.

### 3. Сведение обратной задачи (1)–(5) к нелинейным интегральным уравнениям Вольтерра второго рода

Используя условия (4) и (5) из системы (11) получаем два нелинейных интегральных уравнений Вольтерра первого рода относительно неизвестных функций  $\sigma(t)$ ,  $\eta(t)$ :

$$\int_{t_0}^t h_1(s, \sigma(s)) ds = g_1(t), \quad (14)$$

$$\int_{t_0}^t h_2(s, \eta(s)) ds = g_2(t), \quad (15)$$

где  $h_i(s, \omega(s)) = f_i(s, x_0, \psi_1(s), \psi_2(s), \omega(s))$ ,  $g_i(t) = \psi_i(t) - \varphi_i \left( x_0 - \int_{t_0}^t A_i(s, x_0, \psi_1(s), \psi_2(s)) ds \right)$ .

Кроме того,  $g_i(t_0) = 0$ , так как  $\psi_i(t_0) = \varphi_i(x_0)$ ,  $i = 1, 2$ .

Уравнения (14) и (15) с помощью классических методов невозможно свести к интегральному уравнению Вольтерра второго рода, к которому мы могли бы применять метод последовательных приближений и метод сжимающих отображений. Поэтому здесь применяем другую методику. Уравнение (14) запишем в виде

$$0 < M_{01} = \text{const}, \quad (16)$$

где  $0 < L_{01}(t) \in C[t_0; T]$ ; произвольная функция такая, что  $\rho_{01} = \max_t \{ P_1(t) \cdot Q(t) \} < 1$ .

Применяя к (16) интегральное преобразование из [4, гл. 1], получаем

$$\begin{aligned} \sigma(t) = I_1(t; \sigma) \equiv & \left\{ \sigma(t) + \int_{t_0}^t [K(s)\sigma(s) - h_1(s, \sigma(s))] ds + g_1(t) \right\} \times \\ & \times \exp(-\mu(t)) + \int_{t_0}^t K(s) \cdot \exp(-\mu(t, s)) \cdot \{ \sigma(t) - \sigma(s) + g_1(t) - g_1(s) + \\ & + \int_{t_0}^s [K(s)\sigma(s) - h_1(s, \sigma(s))] ds - \int_{t_0}^s [K(\theta)\sigma(\theta) - h_1(\theta, \sigma(\theta))] d\theta \} ds, \end{aligned} \quad (17)$$

где  $\mu(t, s) = \int_s^t K(\theta) d\theta$ ,  $\mu(t, t_0) = \mu(t)$ .

Аналогичным путем из (15) приходим к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} \eta(t) = I_2(t; \eta) \equiv & \left\{ \eta(t) + \int_{t_0}^t [K(s)\eta(s) - h_2(s, \eta(s))] ds + g_2(t) \right\} \times \\ & \times \exp(-\mu(t)) + \int_{t_0}^t K(s) \cdot \exp(-\mu(t, s)) \cdot \{ \eta(t) - \eta(s) + g_2(t) - g_2(s) + \\ & + \int_{t_0}^s [K(s)\eta(s) - h_2(s, \eta(s))] ds - \int_{t_0}^s [K(\theta)\eta(\theta) - h_2(\theta, \eta(\theta))] d\theta \} ds. \end{aligned} \quad (18)$$

Уравнения (14) и (17) являются эквивалентными. Аналогично уравнения (15) и (18) также являются эквивалентными.

#### 4. Разрешимость нелинейных интегральных уравнений (14) и (15)

Сначала изучаем разрешимости уравнения (14). Рассмотрим следующий итерационный процесс:

$$\begin{cases} \sigma_0(t) = \left( \int_{t_0}^t h_1(s, 0) ds + g_1(t) \right) \cdot \exp(-\mu(t)), \\ \sigma_{k+1}(t) = I_1(t; \sigma_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (19)$$

**Теорема 1.** Пусть выполняются следующие условия:

1.  $h_1(t, \sigma(t)) \in \text{Bnd}(M_{01}) \cap \text{Lip}(L_{01}(t)|_\sigma)$ , где  $0 < M_{01} = \text{const}$ ,  $0 < L_{01}(t) \in C[t_0; T]$ ;
2.  $\rho_{01} = \max_t \{ P_1(t) \cdot Q(t) \} < 1$ , где

$$P_1(t) = 1 + \mu(t) + \int_{t_0}^t L_{01}(s) ds, \quad Q(t) = \exp(-\mu(t)) \cdot \left\{ 1 + 2 \int_{t_0}^t K(s) \cdot \exp(\mu(s)) ds \right\}.$$

Тогда нелинейное интегральное уравнение Вольтерра первого рода (14) имеет единственное решение на отрезке  $[t_0; T]$ .

**Доказательство.** Для произвольной непрерывной на отрезке  $[t_0; T]$  функции  $a(t)$  примем норму следующим образом:  $\|a(t)\| = \max_{t_0 \leq t} |a(t)|$ .

Пусть

$$\|\sigma_0(t)\| \leq (M_{01}T + \|g_1(t)\|) \cdot \exp(-\mu(t)) < 1. \quad (20)$$

Тогда для разности

$$\begin{aligned} \sigma_1(t) - \sigma_0(t) = & \left\{ \sigma_0(t) + \int_{t_0}^t [K(s)\sigma_0(s) + h_1(s, 0) - h_1(s, \sigma_0(s))] ds \right\} \exp(-\mu(t)) + \\ & + \int_{t_0}^t K(s) \exp(-\mu(t, s)) \left\{ \sigma_0(t) - \sigma_0(s) + \int_{t_0}^s [K(s)\sigma_0(s) + h_1(s, 0) - h_1(s, \sigma_0(s))] ds - \right. \\ & \left. - \int_{t_0}^s [K(\theta)\sigma_0(\theta) + h_1(\theta, 0) - h_1(\theta, \sigma_0(\theta))] d\theta \right\} ds, \end{aligned}$$

в силу первого условия теоремы и оценки (20), получаем оценку

$$\|\sigma_1(t) - \sigma_0(t)\| \leq \|\sigma_0(t)\| P_1(t) Q(t) \leq \max_t \{ P_1(t) \cdot Q(t) \} = \rho_{01} < 1, \quad (21)$$

где  $P_1(t) = 1 + \mu(t) + \int_{t_0}^t L_{01}(s) ds$ ,  $Q(t) = \exp(-\mu(t)) \cdot \left\{ 1 + 2 \int_{t_0}^t K(s) \cdot \exp(\mu(s)) ds \right\}$ .

Аналогично для произвольной разности приближения (19) имеем оценку

$$\|\sigma_{k+1}(t) - \sigma_k(t)\| \leq \rho_{01} \|\sigma_k(t) - \sigma_{k-1}(t)\| < \|\sigma_k(t) - \sigma_{k-1}(t)\|.$$

Отсюда и из (21) следует, что оператор в правой части (17) является сжимающим и, следовательно, уравнение (14) имеет единственное решение на отрезке  $[t_0; T]$ .

Из интегрального уравнения (18) аналогично можно доказать, что справедлива и следующая

**Теорема 2.** Пусть выполняются следующие условия:

1.  $h_2(t, \eta(t)) \in \text{Bnd}(M_{02}) \cap \text{Lip}(L_{02}(t)|_\eta)$ , где  $0 < M_{02} = \text{const}$ ,  $0 < L_{02}(t) \in C[t_0; T]$ ;
2.  $\rho_{02} = \max_t \{ P_2(t) \cdot Q(t) \} < 1$ , где  $P_2(t) = 1 + \mu(t) + \int_{t_0}^t L_{02}(s) ds$ .

Тогда нелинейное интегральное уравнение Вольтерра первого рода (15) имеет единственное решение на отрезке  $[t_0; T]$ .

Таким образом, мы определили функции  $\sigma(t)$ ,  $\eta(t)$  в правой части системы уравнений (1) из нелинейных интегральных уравнений Вольтерра первого рода (14) и (15) соответственно.

## 5. Однозначная разрешимость системы нелинейных интегральных уравнений (11)

Так как уже определены функции  $\sigma(t)$ ,  $\eta(t)$ , то теперь мы можем приступить к изучению разрешимости системы уравнений (11).

**Теорема 3.** Пусть выполняются следующие условия:

1)  $\varphi_i(x) \in \text{Bnd}(\varphi_{0i}) \cap \text{Lip}(L_{1i|u,\vartheta})$ , где  $0 < \varphi_{0i}$ ,  $L_{1i} = \text{const}$ ,  $i = 1, 2$ ;

2)  $f_i(x, u, \vartheta, \omega) \in \text{Bnd}(f_{0i}) \cap \text{Lip}(L_{2i|u,\vartheta})$ , где  $0 < f_{0i}$ ,  $L_{2i} = \text{const}$ ,  $i = 1, 2$ ;

3)  $A_i(x, u, \vartheta) \in \text{Lip}(L_{3i|u,\vartheta})$ , где  $0 < L_{3i} = \text{const}$ ,  $i = 1, 2$ ;

4)  $\rho_1 < 1$ , где  $\rho_1 = \max_t \left\{ L_{11} \cdot \int_{t_0}^t L_{31}(s) ds + \int_{t_0}^t L_{21}(s) ds \right\} + \max_t \left\{ L_{12} \cdot \int_{t_0}^t L_{32}(s) ds + \int_{t_0}^t L_{22}(s) ds \right\}$ .

Тогда система нелинейных интегральных уравнений (11) имеет единственное решение в области  $D$ .

**Доказательство.** Итерационный процесс Пикара для системы уравнений (14) определим следующим образом:

$$\begin{cases} u_0(t, x) = 0, & u_{k+1}(t, x) = \Theta_1(t, x; u_k, \vartheta_k), \\ \vartheta_0(t, x) = 0, & \vartheta_{k+1}(t, x) = \Theta_2(t, x; u_k, \vartheta_k), \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

Для произвольной функции  $w(t, x)$  в пространстве непрерывных функций норму определим следующим образом:

$$\|w(t, x)\|_t = \max_{t_0 \leq t \leq T} |w(t, x)|,$$

где  $x$  играет роль параметра.

В силу первого условия теоремы для первого приближения из (22) имеем оценку

$$\|u_1 - u_0\|_t \leq \varphi_{01} + f_{01} \cdot T, \quad (23)$$

$$\|\vartheta_1 - \vartheta_0\|_t \leq \varphi_{02} + f_{02} \cdot T. \quad (24)$$

С учетом (23) и (24), в силу условий теоремы, для второго приближения из (22) получаем оценку

$$\begin{aligned} \|u_2 - u_1\|_t &\leq L_{11} \cdot \int_{t_0}^t L_{31}(s) \cdot (\|u_1 - u_0\|_t + \|\vartheta_1 - \vartheta_0\|_t) ds + \int_{t_0}^t L_{21}(s) \cdot (\|u_1 - u_0\|_t + \|\vartheta_1 - \vartheta_0\|_t) ds \leq \\ &\leq (\varphi_{01} + \varphi_{02} + (f_{01} + f_{02}) \cdot T) \cdot \left( L_{11} \cdot \int_{t_0}^t L_{31}(s) ds + \int_{t_0}^t L_{21}(s) ds \right) < (\varphi_{01} + \varphi_{02} + (f_{01} + f_{02}) \cdot T), \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \|\vartheta_2 - \vartheta_1\|_t &\leq L_{12} \cdot \int_{t_0}^t L_{32}(s) \cdot (\|u_1 - u_0\|_t + \|\vartheta_1 - \vartheta_0\|_t) ds + \int_{t_0}^t L_{22}(s) \cdot (\|u_1 - u_0\|_t + \|\vartheta_1 - \vartheta_0\|_t) ds \leq \\ &\leq (\varphi_{01} + \varphi_{02} + (f_{01} + f_{02}) \cdot T) \cdot \left( L_{12} \cdot \int_{t_0}^t L_{32}(s) ds + \int_{t_0}^t L_{22}(s) ds \right) < (\varphi_{01} + \varphi_{02} + (f_{01} + f_{02}) \cdot T). \end{aligned} \quad (26)$$

В силу условий теоремы для произвольного натурального числа  $k > 1$  из (15) получим оценку

$$\begin{aligned} \|u_{k+1} - u_k\|_t &\leq L_{11} \int_{t_0}^t L_{31}(s) (\|u_k - u_{k-1}\|_t + \|\vartheta_k - \vartheta_{k-1}\|_t) ds + \int_{t_0}^t L_{21}(s) (\|u_k - u_{k-1}\|_t + \|\vartheta_k - \vartheta_{k-1}\|_t) ds, \\ \|\vartheta_{k+1} - \vartheta_k\|_t &\leq L_{12} \int_{t_0}^t L_{32}(s) (\|u_k - u_{k-1}\|_t + \|\vartheta_k - \vartheta_{k-1}\|_t) ds + \int_{t_0}^t L_{22}(s) (\|u_k - u_{k-1}\|_t + \|\vartheta_k - \vartheta_{k-1}\|_t) ds, \end{aligned}$$

Отсюда получаем, что



$$\|W_{k+1}(t, x) - W_k(t, x)\|_I \leq \rho_1 \|W_k(t, x) - W_{k-1}(t, x)\|_I < \|W_k(t, x) - W_{k-1}(t, x)\|_I, \quad (27)$$

где  $\|W_k - W_{k-1}\|_X = \max \left\{ \|u_k - u_{k-1}\|_X; \|\vartheta_k - \vartheta_{k-1}\|_X \right\}$ ,

$$\rho_1 = \max_I \left\{ L_{11} \cdot \int_{t_0}^t L_{31}(s) ds + \int_{t_0}^t L_{21}(s) ds \right\} + \max_I \left\{ L_{12} \cdot \int_{t_0}^t L_{32}(s) ds + \int_{t_0}^t L_{22}(s) ds \right\}.$$

В силу оценок (25)–(27) следует, что согласно принципу Шаудера оператор в правой части (11) имеет единственную неподвижную точку. Следовательно, система нелинейных интегральных уравнений (11) имеет единственное решение в области  $D$ .

### Литература

1. Зайцев, В.Ф. Справочник по дифференциальным уравнениям с частными производными первого порядка // В.Ф. Зайцев, А.Д. Полянин. – М.: Физматлит, 2003. – 416 с.
2. Денисов, А.М. Введение в теорию обратных задач // А.М. Денисов. – М.: МГУ, 1994. – 285 с.
3. Романов, В.Г. Обратные задачи для математической физики // В.Г. Романов. – М.: Наука, 1984. – 264 с.
4. Юлдашев, Т.К. Нелинейные интегральные и интегро-дифференциальные уравнения // Т.К. Юлдашев. – Ош: ОшГЮИ, 2010. – 107 с.

Поступила в редакцию 28 октября 2011 г.

## ON AN INVERSE PROBLEM FOR A SYSTEM OF QUAZILINEAR EQUATIONS IN PARTIAL DERIVATIVES OF THE FIRST ORDER

T.K. Yuldashev<sup>1</sup>

A method of studying solubility of an inverse problem for the system of quasilinear differential equations in partial derivatives of the first order is offered. With the help of a nonlinear method of characteristics based on introduction of an additional parameter, a Cauchy problem is reduced to study the system of non-linear integral equations. For solution the inverse problem the restored functions are found from the system of Volterra non-linear integral equations of the first kind with the help of non-linear integral transformation.

*Keywords:* inverse problem, system of quasilinear equations, additional parameter, nonlinear integral transformation, method of contracting mapping.

### References

1. Zajjcev V.F., Poljanin A.D. *Spravochnik po differencial'nym uravnenijam s chastnymi proizvodnymi pervogo porjadka* (Handbook of differential equations with first-order partial). Moscow, Fizmatlit, 2003. 416 p. (in Russ.).
2. Denisov A.M. *Vvedenie v teoriju obratnykh zadach* (Introduction to the theory of inverse problems). Moscow, MGU, 1994. 285 p. (in Russ.).
3. Romanov V.G. *Obratnye zadachi dlja matematicheskoy fiziki* (Inverse problems in mathematical physics). Moscow, Nauka, 1984. 264 p. (in Russ.).
4. Juldashv T.K. *Nelinejnye integral'nye i integro-differencial'nye uravnenija* (Non-linear integral and integro-differential equations). Osh: OshGJuI, 2010. 107 p. (in Russ.).

<sup>1</sup> Yuldashev Tursun Kamaldinovich is Cand Sc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Doctoral Candidate, Department of Higher Mathematics, Siberian state aerospace university, Krasnoyarsk  
E-mail tursunbay@rambler.ru

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ НАДЕЖНОСТИ КОНСТРУКЦИЙ С УЧЕТОМ СТАДИИ ДОКРИТИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ УСТАЛОСТНЫХ ТРЕЩИН

И.Я. Березин<sup>1</sup>, В.Б. Порошин<sup>2</sup>

Усталостное разрушение рассматривается как двухстадийный процесс, включающий наработку до момента зарождения поверхностного дефекта и стадию докритического развития магистральной трещины. Учёт стадии живучести открывает возможность решения ряда важных практических задач, в частности: определение допустимых границ развития дефекта, установление периодичности контроля, оценка остаточного ресурса, аргументированное повышение нормативных сроков эксплуатации и др.

*Ключевые слова:* вероятностный подход к оценке долговечности, случайная повторно-переменная нагрузка, функция надежности, усталостное разрушение, живучесть, остаточный ресурс, формула Париса, предел трещиностойкости, метод конечных элементов, метод Монте-Карло.

Проблема обеспечения надежности машиностроительных конструкций во многом обусловлена ограниченностью ресурса ответственных деталей, испытывающих в процессе работы интенсивное повторно-переменное нагружение. В применяемых в настоящее время инженерных методах расчета ресурс деталей оценивается коэффициентом запаса по долговечности, который вычисляется с применением средних значений нагрузок и характеристик усталостной прочности материала. При этом в качестве критерия разрушения принимается наработка, соответствующая моменту зарождения усталостной микротрещины.

Вместе с тем практика показывает, что в ряде случаев целесообразным является продолжение эксплуатации конструкции в обычном режиме при наличии стабильно и контролируемо развивающихся в них усталостных трещин. Учет стадии живучести позволяет на этапе проектирования обоснованно определять допустимые границы развития дефектов, устанавливать периодичность контрольных мероприятий и аргументированно повышать нормативные сроки эксплуатации изделий.

Настоящая работа демонстрирует возможность прогнозирования процесса формирования отказов по критерию усталостного разрушения путем последовательного описания стадий зарождения и докритического развития трещин.

Рассматривается задача прогнозирования надежности гусениц быстроходных транспортных машин. Траки гусеницы имеют сложную конфигурацию в виде системы тонкостенных элементов

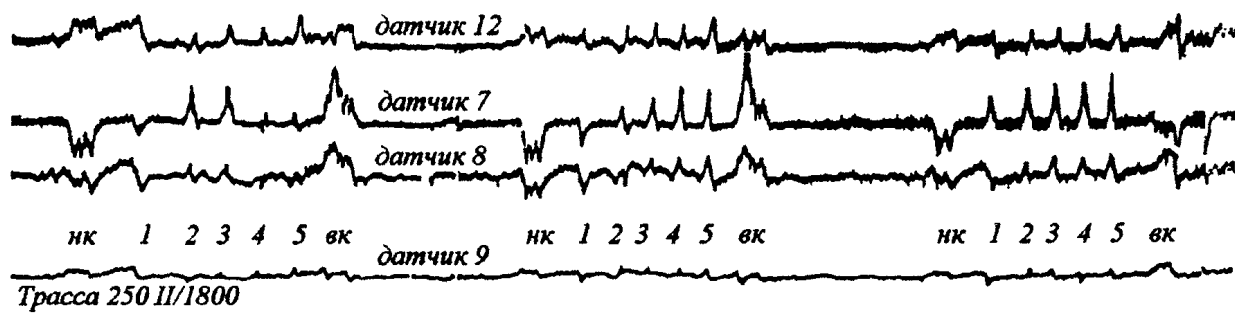


Рис. 1. Фрагмент характерных оциллограмм процессов изменения напряжений в зонах образования усталостных трещин

<sup>1</sup> Березин Игорь Яковлевич – доктор технических наук, профессор, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Физический факультет, Южно-Уральский государственный университет

<sup>2</sup> Порошин Вадим Борисович – кандидат технических наук, доцент, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Физический факультет, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: poroshin2816@mail.ru

с нерегулярным оребрением. В условиях эксплуатации быстроходных машин траки гусениц испытывают случайное внешнее воздействие со стороны грунта и сопряженных деталей: опорных катков, ведущего и направляющего колес.

На рис. 1 представлен фрагмент типичной осциллограммы процессов изменения напряжений в опасных зонах траков, полученной путем тензометрирования в условиях реальной эксплуатации машины.

При статистической обработке осциллограмм была выполнена схематизация процессов по методу случайных импульсных потоков и получены законы распределения напряжений, соответствующие различным сочетаниям природно-климатических условий и режимов эксплуатации гусеничных машин. На рис. 2 в качестве иллюстрации показаны плотности распределений приведенных к симметричному циклу амплитуд напряжений в опасных зонах. Закон распределения напряжений для обобщенных условий эксплуатации в заданном регионе определяется выражением

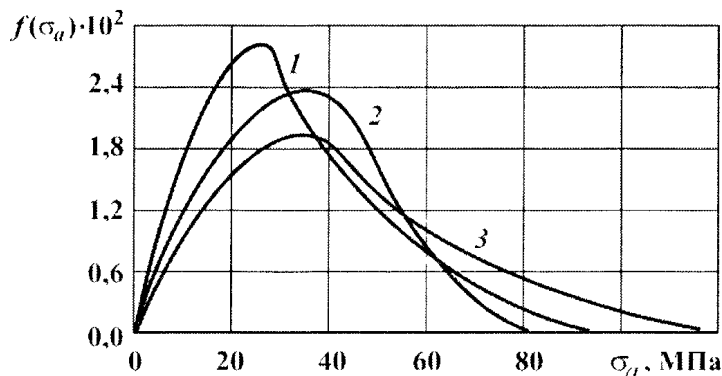


Рис. 2. Плотности распределений амплитуд напряжений: 1 – летняя проселочная дорога; 2 – зимняя проселочная дорога; 3 – зимняя проселочная дорога, бесснежная, мерзлый грунт

$$f_c(\sigma_a) = \sum_{j=1}^n k_j f_j(\sigma_a),$$

где  $n$  – число сочетаний условий и режимов эксплуатации;  $k_j$  – весовые коэффициенты.

Усталостное разрушение рассматривается как двухстадийный процесс формирования отказа. На стадии зарождения трещин расчет долговечности выполняется по общепринятой методике [1], базирующейся на скорректированной гипотезе линейного суммирования повреждений и предположении о логарифмически нормальном законе распределения наработки. Математическое ожидание и среднеквадратическое отклонение логарифма долговечности определяются выражениями:

$$M[\lg L] = \lg \left\{ \frac{a_p N_0 M[\sigma_{-1д}]^m}{\sum_{i=1}^k v_i \sigma_{ai}^m} \right\}; \quad \sigma[\lg L] = 0,43m \frac{\sigma[\sigma_{-1д}]}{M[\sigma_{-1д}]},$$

где  $L$  – долговечность траков до момента зарождения усталостных трещин, выраженная в километрах пробега;  $N_0$ ,  $m$ ,  $M[\sigma_{-1д}]$ ,  $\sigma[\sigma_{-1д}]$  – параметры вероятностной диаграммы выносливости детали;  $a_p$  – коэффициент корректировки гипотезы линейного суммирования повреждений;  $v_i$ ,  $\sigma_{ai}$  – параметры блока случайного нагружения.

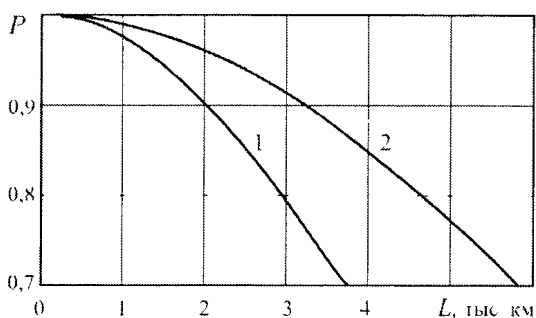


Рис. 3. Функция надежности траков гусеницы: 1 – функция надежности по критерию зарождения усталостной трещины; 2 – функция надежности по критерию хрупкого разрушения

Необходимые для расчета характеристики выносливости были определены путем усталостных испытаний представительных партий натуральных деталей при различных уровнях напряжений. Статистической обработкой результатов получены следующие значения параметров вероятностной диаграммы: математическое ожидание и среднеквадратическое отклонение предела выносливости на базе  $N_0 = 10^7$  циклов, а также показатель, определяющий наклон квантильных кривых выносливости, соответственно равны  $M[\sigma_{-1д}] = 115$  МПа,  $\sigma[\sigma_{-1д}] = 20,5$  МПа,  $m = 6,1$ . На рис. 3 (кривая 1)

приведена функция вероятностей безотказной работы (функция надежности) траков по критерию зарождения усталостной трещины, соответствующая одному из наиболее тяжелых условий эксплуатации гусеничных машин на дорогах с жестким покрытием (кривая 3 на рис. 2). Расчет показывает, что гамма-процентный ресурс траков  $L_{\gamma=0,9}$  в этих условиях составляет 2000 км пробега. Этот результат вполне удовлетворительно согласуется с данными контрольных осмотров.

Вторая стадия усталостного разрушения представляет процесс стабильного развития одной (реже нескольких) из ранее образовавшихся микротрещин. Работоспособность конструкции при этом сохраняется, она будет исчерпана лишь при достижении критического сочетания длины трещины и уровня нагрузки, когда стабильный рост трещины сменяется лавинообразным. Для анализа кинетики развития усталостной трещины используют обычно силовой подход механики разрушения, в соответствии с которым скорость роста трещины в цикле определяется, например, формулой Париса

$$\frac{dl}{dN} = C(\Delta K)^n$$

( $\Delta K$  – размах коэффициента интенсивности напряжений (КИН) в цикле;  $C, n$  – константы материала в данных условиях).

Отличаясь простотой, данное соотношение не отражает, например, влияния среднего напряжения цикла, в связи с чем его идентификация должна производиться в условиях, соответствующих эксплуатационным.

Как показал анализ, для определения КИН в траке не могут быть непосредственно использованы приводимые в справочной литературе (например, [2]) аналитические выражения: рассматриваемый объект значительно сложнее. Самостоятельное же решение этой задачи с использованием, например, функции комплексной переменной затруднительно даже с учетом упрощения расчетной схемы (рис. 4). Таким образом, наиболее приемлемым оказался численный метод – метод конечных элементов расчета КИН в терминах энергетического подхода.

В соответствии со сказанным трак с учетом симметрии дискретизировали трехмерной сеткой конечных элементов, сгущенной в зоне возникновения и роста трещин в ребре и в окрестности вершины трещины. Для ряда длин трещины при единичной нагрузке подсчитывали интенсивность выделения упругой энергии

$$G = \frac{d(A-U)}{dl},$$

где  $A$  – работа внешней нагрузки;  $U$  – потенциальная энергия, связанная с упругой составляющей деформации. С использованием однозначной в рамках линейной механики разрушения связи между параметрами  $G$  и  $K$  определяли зависимость  $K_I(l)$  в виде

$$K_I = \sigma_1 \sqrt{\pi l} f(l/H).$$

Здесь  $\sigma_1$  – номинальное напряжение от единичной нагрузки;  $l$  – длина трещины в ребре;  $f(l/H)$  – поправочная функция, определяемая относительной длиной трещины;  $H$  – высота ребра.

Условие разрушения имеет традиционный вид

$$K_I(\sigma, l) = K_{Ic},$$

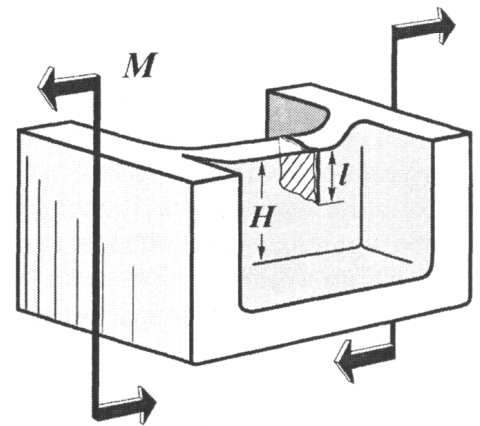


Рис. 4. Элемент конструкции с трещиной в ребре

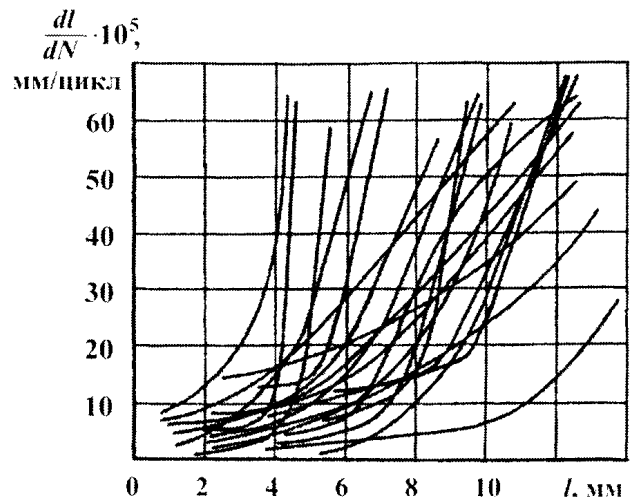


Рис. 5. Кинетика развития усталостных трещин в траке (по данным испытаний)

где  $K_1(\sigma, l)$  – текущее значение КИН;  $\sigma = p\sigma_1$  – номинальное напряжение от действующей нагрузки ( $p$  – параметр нагрузки);  $K_{1c}$  – предел трещиностойкости, представляющий характеристику сопротивления росту трещин в конструкции из данного материала.

Определение параметров уравнения Пэриса и характеристики трещиностойкости траков из стали Г13ЛА было выполнено по данным усталостных испытаний представительных партий натуральных деталей. В ходе испытаний варьировали уровень амплитуды номинальных напряжений; в процессе наработки регистрировалась также длина развивающихся трещин. На рис. 5 в качестве иллюстрации показаны отдельные результаты исследования. Соответствующей статистической обработкой экспериментальных данных идентифицированы коэффициенты уравнения Пэриса и значения предела трещиностойкости  $K_{1c}$ . Установлено, что рассеяние коэффициентов можно описать нормальным законом с параметрами:

$$M[n]=2,5; \sigma[n]=0,83; M[C]=5,1 \cdot 10^{-11} \text{ МПа}^{-n} \text{ м}^{(1-n_2)}; \sigma[C]=1,5 \cdot 10^{-11} \text{ МПа}^{-n} \text{ м}^{(1-n_2)}.$$

Зависимость предела трещиностойкости, ставшая в соответствие длине трещины предельное в данных условиях значение коэффициента интенсивности напряжений, представлена на рис. 6.

Расчет долговечности траков по критерию хрупкого разрушения сводится к решению связанной нелинейной задачи, в которой необходимо учесть случайный характер нагружения и рассеяние характеристик, определяющих рост трещин  $(C, n)$ , а также предела трещиностойкости.

Для реализации этой задачи применен численный метод Монте-Карло. Генераторами случайных чисел каждой детали из представительной выборки присваиваются случайные значения начальной длины трещины, параметров кинетического уравнения (формулы Пэриса) и характеристики трещиностойкости. Случайное нагружение моделирует один из генераторов, воспроизводящий закон распределения амплитуд напряжений. Выполняется пошаговый расчет отдельных деталей, при котором в каждом шаге нагружения вычисляются текущее значение коэффициента интенсивности напряжений  $K_1$ , его размах, а затем приращение усталостной трещины и ее длина. По характеристике трещиностойкости с учетом рассеяния определяется величина критического значения коэффициента интенсивности напряжений  $K_{1c}$ . Если для рассматриваемого нагружения данной детали выполняется условие

$$K_1 < K_{1c}(l),$$

то производится следующий цикл пошагового расчета, иначе

$$K_1 \geq K_{1c}(l),$$

полученная для этой детали в данном шаге длина трещины признается критической, а соответствующий номер цикла определяет долговечность объекта.

Описанная процедура воспроизводится для каждой детали выборки. Получаемые при этом значения долговечности образуют выборку случайной наработки до отказа, статистической обработкой которой могут быть получены функция повреждаемости и функция вероятностей безотказной работы гусеницы на стадии живучести. На рис. 3 функция надежности по критерию зарождения трещин (кривая 1) дополнена функцией надежности по критерию хрупкого разрушения (кривая 2). Напомним, что приведенные результаты соответствуют наиболее тяжелым условиям эксплуатации гусеничных машин. Из их сопоставления следует, что даже в этих условиях обоснованный переход к эксплуатации по нормам, допускающим контролируемый процесс стабильного развития усталостных трещин в траках, позволяет примерно в полтора раза увеличить продолжительность эксплуатации гусениц.

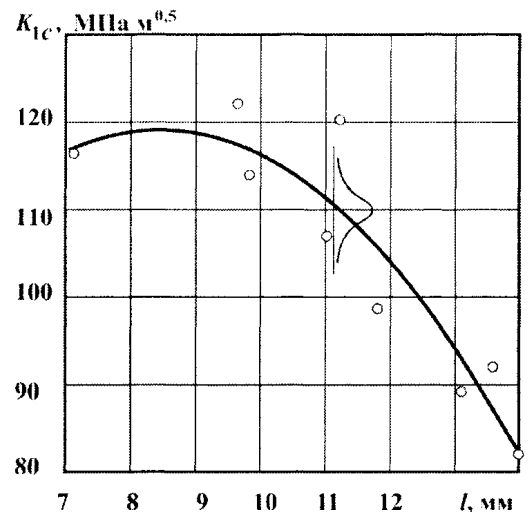


Рис. 6. Экспериментальные данные и аппроксимация зависимости предела трещиностойкости от длины трещины

Отметим в заключение, что представление результатов расчета в виде функций вероятностей безотказной работы позволяет расширить круг практических задач надежности, решаемых на этапах проектирования и эксплуатации, в частности:

- значительное увеличение срока службы изделий за счет обоснованного перехода от предельного состояния по критерию зарождения усталостных трещин к предельному состоянию по критерию начала неустойчивого их развития;
- возможность оценки остаточного ресурса ответственных деталей по данным контрольных осмотров и назначение продолжительности межосмотровых интервалов;
- обоснование периодичности контрольных мероприятий;
- рациональный выбор материала на основе сравнительной оценки характеристик усталостной прочности и трещиностойкости;
- разработка методов и средств технической диагностики.

### Литература

1. Когаев, В.П. Расчеты на прочность при напряжениях, переменных во времени / В.П. Когаев. – М.: Машиностроение, 1993. – 364 с.
2. Справочник по коэффициентам интенсивности напряжений: в 2 т. / Ю. Ито, Ю. Мураками, Н. Хасебэ и др.; ред.: Р.В. Гольдштейн, Н.А. Махутов. – М.: Мир, 1990. – Т. 1. – 448 с.; Т. 2. – 560 с.

*Поступила в редакцию 13 марта 2012 г.*

## RELIABILITY PREDICTION CONSIDERING THE STAGE OF SUBCRITICAL FATIGUE CRACKS GROWTH

*I.J. Berezin<sup>1</sup>, V.B. Poroshin<sup>2</sup>*

Fatigue failure is considered as a two-stage process that includes operating time up to the beginning of the surface damage and the stage of subcritical crack propagation. Taking into consideration of the second stage provides an opportunity to address a number of important practical problems, in particular: the definition of allowable defect size, the appointment of monitoring periods, evaluation of residual life, raising a reasoned normative terms of operation and more.

*Keywords: durability prediction, probabilistic approach, reliability function, fatigue failure, crack propagation analysis, Paris equation, stress intensity factor, crack-resistance limit, finite elements method, Monte Carlo method.*

### References

1. Kogaev V.P. Raschety na prochnost' pri naprjazhenijakh, peremennykh vo vremeni (Strength calculations for voltages at time). Moscow, Mashinostroenie, 1993. 364 p. (in Russ.).
2. Ito Yu., Murakami Yu., Khasebeh N. *et al.* Spravochnik po koehfficientam intensivnosti naprjazhenijj: v 2 t. (Stress Intensity Factors Handbook. In 2 Volumes.) Moscow, Mir, 1990. Vol. 1. 448 p.; Vol. 2. 560 p. (in Russ.). [Murakami Y. (ed.), *Stress Intensity Factors Handbook*. In 2 Volumes. Oxford etc., Pergamon press, 1987. 1456 p.]

<sup>1</sup> Berezin Igor Jakovlevich is Dr Sc (Engineering), Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural State University

<sup>2</sup> Poroshin Vadim Borisovich is Cand Sc (Engineering), Associate Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural State University

E-mail poroshin2816@mail.ru

# ДЕФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ ПРИ СОЧЕТАНИИ ЗНАКОПЕРЕМЕННОГО ТЕЧЕНИЯ И ФОРМОИЗМЕНЕНИЯ

Ю.Н. Ребяков<sup>1</sup>, О.Ф. Чернявский<sup>2</sup>

Предложена новая методика испытаний для определения механических характеристик материалов при малоцикловом деформировании с ненулевыми размахами и приращениями неупругих деформаций за цикл. На примере нескольких типичных сталей установлены основные закономерности изменения деформационных свойств вследствие взаимного влияния циклического упрочнения и квазистатического наклепа.

*Ключевые слова:* циклическое неупругое деформирование, накопление деформаций, деформационное упрочнение

Деформационные свойства материалов подробно изучены для двух видов малоциклового нагружения – знакопеременного течения с ненулевыми размахами неупругих деформаций за цикл [1–6 и др.] и прогрессирующего накопления приращений деформаций за цикл [6, 7]. Рост нагрузок и температур в новых конструкциях и, с другой стороны, переход от обеспечения прочности к связанным задачам техногенной безопасности [8] все чаще приводят к необходимости анализа процессов, в которых одновременно отличны от нуля как размахи, так и приращения неупругих деформаций. Свойства материалов в таких условиях не изучены: неизвестны основные закономерности взаимного влияния циклических и квазистатических деформаций, отсутствуют методы проведения испытаний, нет соответствующих стандартов и справочных данных. Среди причин такого состояния одной из главных является, по-видимому, проблема измерений. В процессе испытаний должны фиксироваться размахи полных и пластических деформаций за цикл, приращения деформаций за цикл и полная накопленная деформация вплоть до разрушения. При одинаковых циклических и статических повреждениях за цикл эти величины могут различаться в тысячи и даже десятки тысяч раз, а их измерение проводится чаще всего одним деформометром.

Для преодоления этой основной трудности предлагается использовать блочное нагружение стандартных образцов, в котором каждый блок включает два этапа: вначале жесткое циклическое нагружение с заданным размахом деформаций и числом циклов, а затем увеличение накопленной деформации. При этом приращение деформации в каждом таком блоке задается так, чтобы расчетное отношение накопленного статического повреждения к циклическому равнялось заданной величине (например, единице). Блоки нагружения повторяются вплоть до разрушения образца. Приближенность такого подхода очевидна, но при достаточно большом числе циклов в каждом блоке приращения деформации становятся соизмеримы с шириной петли пластического гистерезиса. Выбор величин размахов деформаций за цикл, числа циклов и приращения деформации в блоке определяется, в частности, возможностями деформометра. Крайними случаями при этом являются долом образца после некоторого числа жестких циклов и такое нагружение, при котором блок содержит один цикл знакопеременного деформирования с последующим приращением деформации.

В качестве примеров, иллюстрирующих, прежде всего, качественные особенности деформационных свойств сталей с учетом взаимного влияния эффектов циклического и статического деформирования, ниже приводятся результаты испытаний сталей 03X21H32M3Б (ЭП 864), ЭИ 612 и сплава ХН55МВЦ при различных температурах без длительных выдержек. Для этих сталей в жестких циклах характерно типичное поведение: циклическое упрочнение (или разупрочнение – в зависимости от предшествующей истории) на стадии приработки сменяется стабилизацией с последующим разупрочнением на стадии предразрушения. Испытания проводились при растяжении-сжатии корсетных образцов с фиксацией поперечной деформации  $\epsilon'$ .

<sup>1</sup> Ребяков Юрий Николаевич – кандидат технических наук, доцент кафедры прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет

<sup>2</sup> Чернявский Олег Федорович – доктор технических наук, профессор кафедры прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет

E-mail: cher@sopro.susu.ac.ru

Деформирование образцов производилось по двум программам. В первой из них вначале производилось жесткое циклическое деформирование с постоянным заданным размахом пластической деформации за цикл  $\delta\varepsilon'_p$ . Затем следовал статический долом, т.е. монотонное увеличение деформации вплоть до разрушения. Испытания проводились при различных размахах деформации и различных числах циклов  $N$ . Полученная диаграмма деформирования сопоставлялась с диаграммой однократного (без циклических нагружений) деформирования.

В испытаниях по второй программе проводилось блочное нагружение образца: выполнялось  $N$  жестких циклов с заданным постоянным размахом пластической деформации за цикл  $\delta\varepsilon'_p$ , после этого давалось приращение деформации  $\Delta\varepsilon'_p$ , величина которого обеспечивала равенство расчетных статического и циклического повреждений в каждом блоке. Такие блоки из двух этапов с примерно равными повреждениями повторялись вплоть до разрушения образца. Статическое повреждение в блоке определялось как отношение приращения деформации за цикл  $\delta\varepsilon'_p$  к разрушающей деформации при статическом нагружении  $\varepsilon'_f$ . Циклическое повреждение определялось как отношение числа циклов в блоке  $N$  к разрушающему  $N_f$  при том же размахе деформации за цикл. Величины  $\varepsilon'_f$  и  $N_f$  вычислялись с использованием справочных данных [6], полученных ранее при испытаниях на той же установке.

Типичные результаты испытаний с доломом после одного блока жестких циклов иллюстрирует рис. 1. Положение и форма диаграмм долома зависят от циклического упрочнения (разупрочнения), накопленного на предыдущем этапе. Только для циклически стабильных материалов диаграмма долома может совпадать с диаграммой статического однократного деформирования.

При достаточно заметной ширине петли пластического гистерезиса переход от этой петли к диаграмме статического деформирования (долома) происходил плавно, без сколько-нибудь заметных изломов. В точке реверса при выходе из петли гистерезиса касательная к диаграмме долома являлась касательной к продолжению петли гистерезиса. Этот факт, по-видимому, объясняется «памятью» материала. Носителями «памяти» являются остаточные микронапряжения и изменения структуры, которые в момент выхода из петли гистерезиса соответствуют предшествующему процессу циклического деформирования. Можно отметить, что при упругой разгрузке и повторном нагружении (т.е. при исчезающе малой ширине петли гистерезиса) остаточные микронапряжения и изменения структуры также весьма малы, но, как известно, даже их сравнительно небольшое влияние обычно отчетливо проявляется при испытаниях.

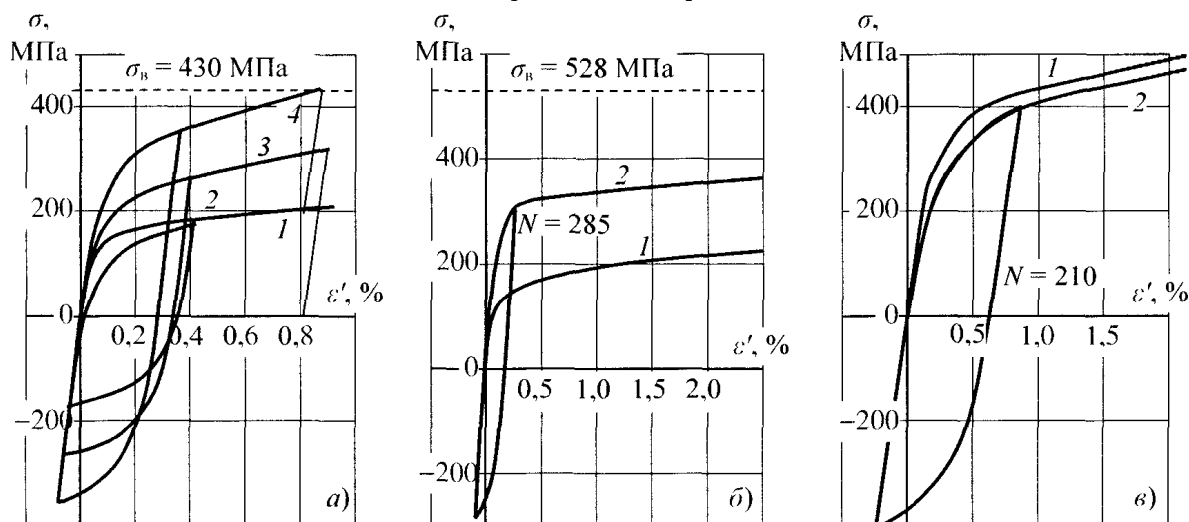


Рис. 1. Кривые деформирования ( $\varepsilon' = \Delta d/d_0$ ). Кривая 1 соответствует статическому нагружению.

а) ЭП864, 600 °С. 2,3,4 – долома после циклического упрочнения на базе 1, 25 и 450 циклов;

б) ХН55МВЦ, 400 °С. 2 – долом после 285 циклов при  $\delta\varepsilon' = 0,187\%$ ; в) ЭИ-612, 650 °С. 2 – долом после 210 циклов

Следующей важной особенностью диаграммы долома для всех испытанных материалов является весьма медленное «забывание» циклического упрочнения (или разупрочнения) при увеличении накопленной деформации (статического повреждения). В соответствии с полученным на этапе циклического деформирования циклическим упрочнением диаграмма долома проходит



выше (при разупрочнении – ниже) кривой однократного монотонного деформирования. С увеличением накопленной деформации расстояние между этими кривыми постепенно уменьшается, но к моменту разрушения образца может оставаться значительной частью той величины, которая имела место в момент выхода из петли гистерезиса даже в случае, когда циклическое повреждение является небольшим. При этом положение кривой долома, определяемое величиной циклического упрочнения или разупрочнения, зависит от размаха пластической деформации и числа циклов.

Результаты испытаний по второй программе (блок жестких циклов и последующее приращение деформации с примерно таким же расчетным повреждением, какос было накоплено в блоке жестких циклов) иллюстрирует рис. 2. Штриховые линии здесь соответствуют первому полциклу каждого блока, сплошные – последнему циклу. Числа под петлями гистерезиса показывают общее число циклов от начала нагружения до конца данного блока. Последним был блок, в котором образовывалась макротрещина. Начальный участок кривой статического однократного деформирования обозначен 0, предел прочности  $\sigma_B$ .

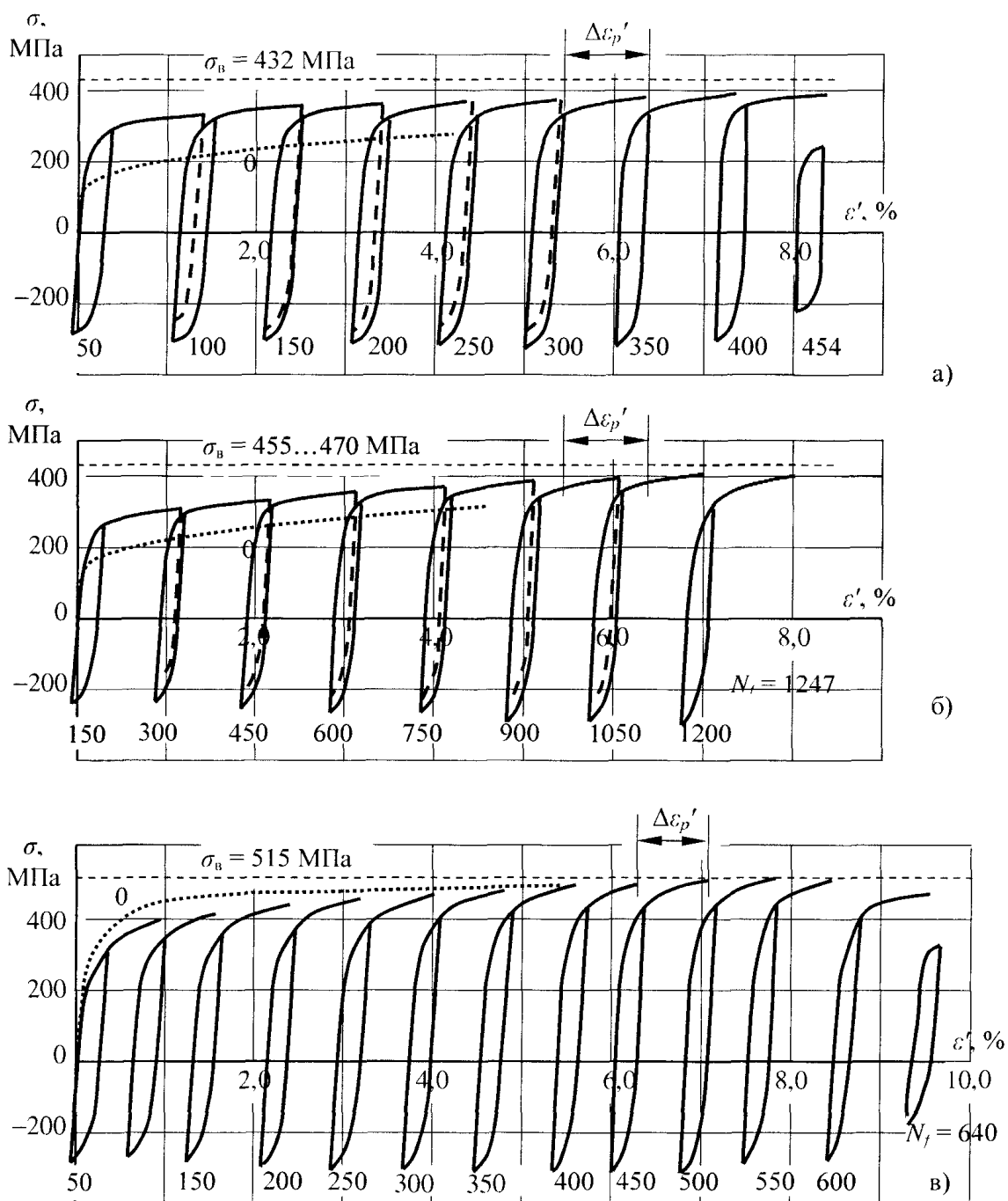


Рис. 2. Блочное нагружение (кривая 0 – статическое нагружение): а) сплав ЭП864, 600 °С:  $\Delta\varepsilon_p'' = 1,06\%$ ,  $\Delta\varepsilon_p'' = 0,27\%$ ; б) ЭП864, 400 °С; в) ЭИ612 при 650 °С;  $\Delta\varepsilon_p' = 0,726\%$ ,  $\Delta\varepsilon_p' = 0,2\%$

Рис. 2 показывает, что все отмеченные выше характерные особенности диаграмм деформирования, обнаруженные при долоте после жестких циклов, полностью сохраняются при блочном нагружении: кривая однократного деформирования не характеризует процесс накопления деформаций; выход из пели гистерезиса соответствует обобщенной кривой; циклическое упрочнение (разупрочнение) существенно влияет на накопленные деформации, но форма петель слабо зависит от статических повреждений в широком диапазоне последних. Очевидно, что эти особенности сохраняются и в том случае, когда блок будет содержать один цикл с последующим приращением деформации.

Вместе с тем необходимо отметить, что стабильное накопление остаточных перемещений было обусловлено чередованием в каждом блоке циклического разупрочнения и наклепа, вызванного увеличением статического повреждения. Этот механизм деформирования отличается от общепринятых представлений о том, что стабильное прогрессирующее формоизменение возможно лишь при отсутствии деформационного упрочнения [7].

### Литература

1. Прочность при малоцикловом нагружении: Основы методов расчетов и испытаний / С.В. Серенсен, Р.М. Шнейдерович, Н.А. Махутов и др. – М.: Наука, 1975. – 288 с.
2. Махутов, Н.А. Конструкционная прочность, ресурс и техногенная безопасность: в 2 ч. / Н.А. Махутов. – Новосибирск: Наука, 2005. – Ч. 1. Критерии прочности и ресурса. – 493 с. – Ч. 2. Обоснование ресурса и безопасности. – 610 с.
3. Мэнсон, С. Температурные напряжения и малоцикловая усталость / С. Мэнсон. – М.: Машиностроение, 1974. – 344 с.
4. Москвитин, В.В. Циклические нагружения элементов конструкций / В.В. Москвитин. – М., Наука, 1981. – 344 с.
5. Гохфельд, Д.А. Пластичность и ползучесть элементов конструкций при повторных нагружениях / Д.А. Гохфельд, О.С. Саадаков. – М.: Машиностроение, 1984. – 256 с.
6. Механические свойства сталей и сплавов при нестационарном нагружении: справочник / Д.А. Гохфельд, Л.Б. Гецов, К.М. Кононов и др. – Екатеринбург: УрО РАН, 1996. – 408 с.
7. Гохфельд, Д.А. Несущая способность конструкций при повторных нагружениях / Д.А. Гохфельд, О.Ф. Чернявский. – М.: Машиностроение, 1979. – 263 с.
8. Безопасность России: правовые, социально-экономические и научно-технические аспекты: анализ риска и проблем безопасности: в 4 ч. / Н.В. Абросимов, А.И. Агеев, В.В. Аладинский и др. – М.: Знание, 2006. – Ч.1. Основы анализа и регулирования безопасности. – 639 с.

*Поступила в редакцию 1 марта 2012 г.*

## DEFORMATION PROPERTIES OF MATERIALS IN COMBINATION OF ALTERNATING PLASTIC FLOW AND RATCHETING

Yu.N. Rebyakov<sup>1</sup>, O.F. Cherniavsky<sup>2</sup>

A new test method for determining the mechanical properties of materials under low-cycle deformation with non-zero plastic strain range and strain increments per cycle. Basic laws for deformation properties and their changes due to the mutual influence of cyclic hardening and quasi-static strain hardening are established for several typical steels.

*Keywords: cyclic inelastic deformation, strain accumulation, ratcheting, strain hardening.*

### References

1. Serensen S.V., Shnejjderovich R.M., Makhutov N.A. *et al. Prochnost' pri malociklovom nagruzenii: Osnovy metodov raschetov i ispytaniij* (Strength low-cycle loading: Basic methods of calculations and tests.). Moscow, Nauka, 1975. 288 p. (in Russ.).
2. Makhutov N.A. *Konstrukcionnaja prochnost', resurs i tekhnogennaja bezopasnost'. Ch. 1. Kriterii prochnosti i resursa* (Structural strength, resource and technogenic safety. Part 1. The criteria of strength and resource). Novosibirsk, Nauka, 2005. 493 p.; *Ch. 2. Obosnovanie resursa i bezopasnosti* (Part 2. Justification of resources and security). Novosibirsk, Nauka, 2005. 610 p. (in Russ.).
3. Mehnson S. *Temperaturnye naprjazhenija i malociklovaja ustalost'* (Thermal stress and low cycle fatigue). Moscow, Mashinostroenie, 1974. 344 p. (in Russ.).
4. Moskvitin V.V. *Ciklicheskie nagruzenija ehlementov konstrukcijj* (Cyclic loading of structural elements). Moscow, Nauka, 1981. 344 p. (in Russ.).
5. Gokhfel'd D.A., Saadakov O.C. *Plastichnost' i polzuchest' ehlementov konstrukcijj pri povtornykh nagruzenijakh* (Plasticity and creep of structural elements under repeated loadings). Moscow, Mashinostroenie, 1984. 256 p. (in Russ.).
6. Gokhfel'd D.A., Gecov L.B., Kononov K.M. *et al. Mekhanicheskie svojstva stalejj i splavov pri nestacionarnom nagruzenii. Spravochnik* (The mechanical properties of steels and alloys under unsteady loading. Directory). Ekaterinburg, UrO RAN, 1996. 408 p. (in Russ.).
7. Gokhfel'd D.A., Chernjavskijj O.F. *Nesushhaja sposobnost' konstrukcijj pri povtornykh nagruzenijakh* (Bearing capacity of structures under repeated loadings.). Moscow, Mashinostroenie, 1979. 263 p. (in Russ.).
8. Abrosimov N.V., Ageev A.I., Aladinskijj V.V. *et al. Bezopasnost' Rossii: pravovye, soci-al'no-ehkonomicheskie i nauchno-tekhicheskie aspekty: analiz riska i problem bezopasnosti. Ch.1. Osnovy analiza i regulirovanija bezopasnosti* (Russia's security: legal, social, economic, scientific and technical aspects: risk analysis and security problems. Part 1. Fundamentals of Safety and Regulation). Moscow: Znanie, 2006. 639 p. (in Russ.).

<sup>1</sup> Rebyakov Yuri Nicolaevich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South-Ural State University.

<sup>2</sup> Cherniavsky Oleg Fedorovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South-Ural State University.

E-mail: cher@sopro.susu.ac.ru

# ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ВОЛН НАПРЯЖЕНИЙ И ДЕФОРМАЦИЙ В НЕУПРУГОМ СТЕРЖНЕ

О.С. Садаков<sup>1</sup>, С.И. Шульженко<sup>2</sup>

Свойства неупругой среды существенно зависят от скорости деформирования, однако прямая идентификация соответствующих реологических функций при скоростях движения ударных волн представляет сложную экспериментальную проблему. Один из путей ее решения – удар по торцу образца материала (стержня) с замером истории деформаций в нескольких сечениях. При этом кроме соответствующей экспериментальной установки необходимо иметь вычислительную программу с варьируемыми характеристиками материала, чтобы подобрать нужные параметры среды. В статье предлагается такая программа, использующая структурную модель материала. Приведены результаты расчетов для случаев упругой, упруго-пластической и упруговязкой среды.

*Ключевые слова:* скорость волны, неупругое деформирование, динамический расчет.

**1. Постановка задачи.** Известно, что после удара по телу из изотропного линейно-упругого материала в нем образуются две волны сжатия и сдвига, идущие с разной скоростью. Если удар произведен по торцу стержня, то через короткое время они вырождаются [1] в одну продольную волну, движущуюся со скоростью  $\sqrt{E/\rho}$  ( $E$  – модуль Юнга,  $\rho$  – плотность материала). Полагая, что и в случае неупругого тела можно ограничиться анализом продольной волны, считая напряженное состояние одноосным. История напряжений в поперечных сечениях  $\sigma(x,t)$ , где  $x$  – расстояние от свободного торца стержня до рассматриваемого сечения,  $t$  – время, отсчитываемое от момента нанесения удара. Площадь сечения  $S$  будем считать постоянной. Смещение сечения описывается законом  $u(x,t)$ ; продольная деформация –

$$\varepsilon(x,t) = \frac{du(x,t)}{dx} = \frac{\sigma(x,t)}{E} + p(x,t), \quad (1)$$

где  $p(x,t)$  – нелинейная составляющая деформации, определяемая моделью реологических свойств.

**2. Матричная модель деформирования стержня.** Численное решение основывается на дискретизации задачи. В стержне выбираются  $N+1$  представительных поперечных сечений  $x_i = (i-1)\Delta$ ,  $\Delta = L/N$ ,  $L$  – длина стержня (рис. 1). Полагая, что в любой момент времени поле  $u(x)$  кусочно-линейно; соответственно поля  $\varepsilon(x)$ ,  $\sigma(x)$ ,  $p(x)$  – кусочно-постоянны (рис. 2) и определяются матрицами  $\varepsilon, \sigma, p$  размерности  $N \times 1$ . Смещения границ участков представляют  $N$  обобщенных координат  $q_i$  (матрица-столбец  $q$ ); дифференцирование в выражении (1) приводит к матричному  $\varepsilon = Aq$ , где  $A$

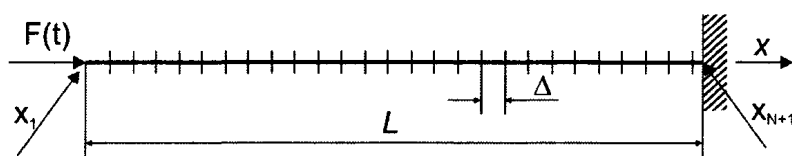


Рис. 1. Схема разбиения стержня

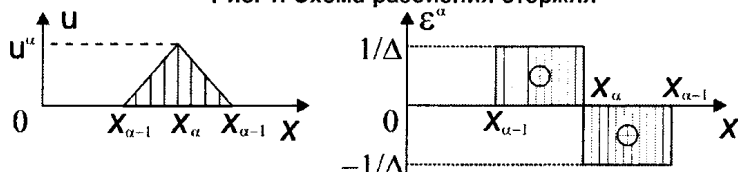


Рис. 2. Поля смещений и деформаций

– квадратная матрица с двумя ненулевыми диагоналями:  $A_{ii} = 1$ ,  $A_{i(i+1)} = 2$ ,  $i = 1..N$ . Физическое уравнение имеет вид

$$\sigma = C(\varepsilon - p), \quad (2)$$

где  $C = IE$ ,  $I$  – единичная матрица.

**3. Метод смещений.** Чтобы свести ошибку от дискретизации задачи к минимуму, условия равновесия

<sup>1</sup> Садаков Олег Сергеевич – доктор технических наук, профессор, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: os38@mail.ru

<sup>2</sup> Шульженко Сергей Иванович – доцент, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: shusi@inbox.ru

запишем, используя принцип возможных перемещений:

$$A^* = W^*, \quad (3)$$

где  $A^*$  – работа внешних сил на возможных смещениях,  $W^*$  – работа внутренних сил (напряжений), на соответствующих деформациях. Возможные смещения, согласно принятым допущениям, кусочно-линейны и определяются выражением

$$u^*(x, t) = U^\alpha(x) q_\alpha^*(t), \quad \alpha = 1..N, \quad (4)$$

где  $q_\alpha^*(t)$  – произвольные функции,  $U^\alpha(x)$  – базисные функции, вид которых показан на рис. 2.

Соответствующие базисные деформации  $\varepsilon^\alpha$  показаны там же.

Виртуальная работа внешних сил (включая силы инерции) определяется выражением

$$A^* = Fq_1^* + \int_L F_j(x) S u^*(x) dx, \quad (5)$$

где

$$F_j = \rho \ddot{u}(x), \quad \ddot{u}(x) = U^\beta(x) \ddot{q}_\beta(t)$$

(точками над функциями обозначены вторые производные по времени). Отсюда находится второе слагаемое в выражении (5):

$$\int_L F_j(x) S u^*(x) dx = -I_{\alpha\beta} q_\beta^* \ddot{q}_\alpha, \quad I_{\alpha\beta} = \int_L U^\alpha U^\beta \rho S dx. \quad (6)$$

Интеграл  $I_{\alpha\beta}$  от кусочно-линейной функции составляет квадратную трехдиагональную матрицу с коэффициентами 1, 2, 4 при общем множителе  $\Delta \rho S / 6$ .

Виртуальная работа внутренних сил  $W^*$  при кусочно-постоянных функциях напряжений  $\sigma = \sigma(x)$  и деформаций  $\varepsilon = \varepsilon(x)$  представляет интеграл по объему стержня

$$W^* = \int_L \sigma \varepsilon^* S dx = [\sigma]^T [A][q^*] S \Delta. \quad (7)$$

Приравняв значения  $A^*$  и  $W^*$  (в выражении (3)), получим условие «равновесия»:

$$B\sigma = Q, \quad B = A^T S \Delta, \quad Q = kF - I\ddot{q}, \quad (8)$$

где столбец  $N$  обобщенных сил  $Q$  находится из обобщенных ускорений  $\ddot{q}$ , причем к первому элементу столбца  $Q$  добавляется сила  $F$  на торце ( $k = [1; 0; 0; \dots; 0]^T$ ).

Для нахождения неупругой деформации  $p$  используются соответствующие модели пластичности и/или ползучести. Время разбивается на расчетные интервалы  $dt$ , на каждом из которых (возможно после серии итераций) находятся приращения неупругой деформации  $dp$ , которые суммируются и определяют значения нового слагаемого  $p$  в уравнении (2).

**4. Расчет ускорений.** Для замыкания системы уравнений необходимо вычислять ускорения обобщенных координат  $\ddot{q}$  в выражениях (6) и (8). Для этой цели мы запоминаем три последних значения всех обобщенных координат  $q^{(0)} = q(t - 3dt)$ ,  $q^{(1)} = q(t - 2dt)$ ,  $q^{(2)} = q(t - dt)$ ,  $q^{(3)} = q(t)$  ( $t$  – актуальный момент времени). Предполагая, что закон движения описывается кубической параболой, находим

$$\ddot{q} = \lambda(2q + a); \quad a = 4q^{(1)} - 5q^{(2)} - q^{(0)}, \quad (9)$$

где  $\lambda = (dt)^{-2}$ .

**5. Разрешающее выражение.** Собирая матричную систему, получаем

$$Kq = kF - Ia\lambda + BCp, \quad (10)$$

где  $K = BSA + 2I\lambda$ ,  $B = A^T S \Delta$ .

**6. Организация итераций.** Запись условий равновесия и совместности деформаций в конечном виде (не в приращениях за шаг  $dt$ ) обладает устойчивостью к расчетным неточностям, поскольку нет накопления ошибок от суммирования значений  $d\sigma$ ,  $dq$ ,  $d\varepsilon$  при определении  $\sigma$ ,  $q$ ,  $\varepsilon$ . Однако, с другой стороны, в итерациях мы вынуждены суммировать величины  $p$  и  $dp$ ,

последние малы по сравнению со значениями  $p$ . Для повышения точности мы использовали следующий прием:

$$q = K^{-1}(kF - Ia\lambda) + BC(p + dp)E = q' + K^{-1}BCdpE.$$

Вначале находится матрица  $q' = K^{-1}(kF - Ia\lambda + BCpE)$ , не изменяющаяся в итерациях ( $p$  – значение, накопленное к началу шага), далее находится  $\varepsilon' = Aq'$ , а затем в итерациях отыскиваются  $dp$  и добавка  $dq' = K^{-1}BCdpE$ , имеющие примерно один порядок.

**7. Тестовые расчеты.** Для проверки правильности работы алгоритма была создана вычислительная программа и проведены расчеты для двух случаев распространения ударной волны в модельном материале. Первый расчет – это распространение упругой волны напряжений в материале, обладающем следующими свойствами: модуль упругости материала  $E = 2500$  Па, плотность  $\rho = 1$  кг/м<sup>3</sup>. Удар произведен по стержню длиной  $L = 75$  м, площадью поперечного сечения  $S = 1$  м<sup>2</sup> разбитом на 500 участков. Импульс представлял собой сжатие со скоростью 8,33 м/с до  $-2,5$  Н и разгрузку до нулевой силы с такой же скоростью. Численный расчет производился по

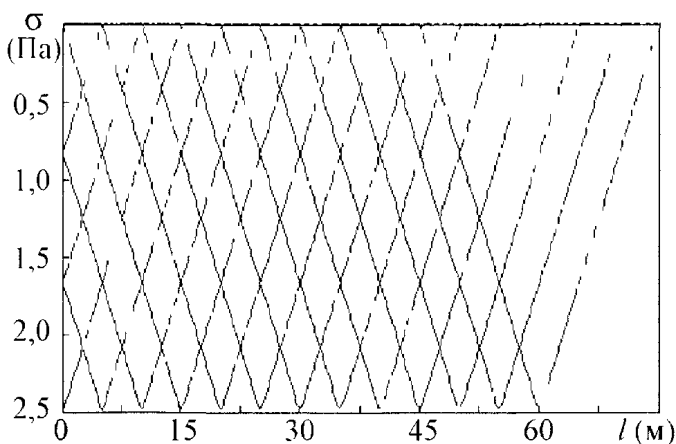


Рис. 3. Волна напряжений в упругом стержне

приведенной выше методике с шагом по времени равным 0,001 с. Поскольку сохранять все данные расчета не рационально ввиду их большого объема, запоминалось положение упругой волны через 200 шагов по времени. Остановка расчета производилась при достижении упругой волны конца стержня, при этом запоминалось время окончания счета. В данном примере время окончания счета  $t_z = 1,5$  с. Скорости распространения упругой волны в стержне в численном расчете и по известному теоретическому решению [1] совпадают ( $v = L/t_z = \sqrt{E/\rho} = 50$  м/с). На рис. 3 представлены результаты

расчета положения волны напряжений через 0,2 с; видно, что движение волны происходит с постоянной скоростью, форма импульса сохраняется, накопление ошибок от дискретизации невелико.

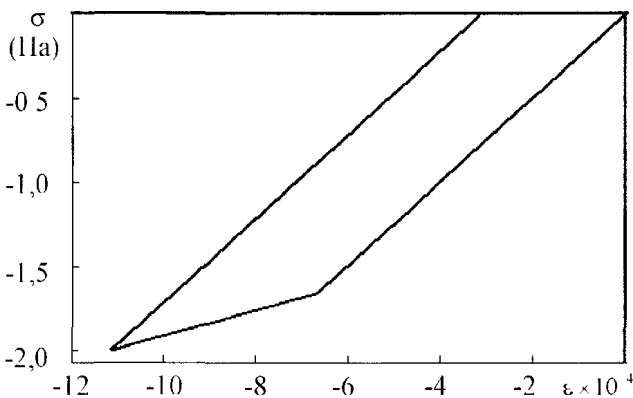


Рис. 4. Диаграмма деформирования упрочняющегося материала

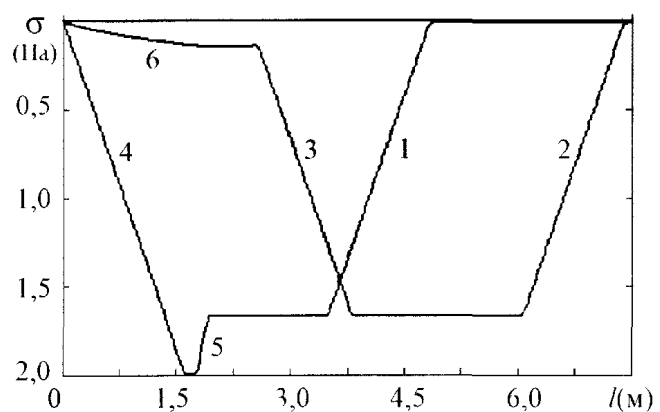


Рис. 5. Волна напряжений в упругопластическом материале

Второй тестовый расчет представлял собой распространение волны напряжения в упрочняющемся материале, обладающем следующими свойствами: модуль упругости материала  $E = 2500$  Па, плотность  $\rho = 1$  кг/м<sup>3</sup>, предельная упругая деформация  $\varepsilon_T = 0,001$ . Модуль упрочнения материала  $E_1$  в четыре раза меньше модуля упругости. Нагружающий импульс представлял собой сжатие со скоростью 6,67 м/с до усилия 2 Н, выдержку с постоянным усилием 0,3 с и разгрузку с такой же скоростью. Диаграмма деформирования материала представлена на рис. 4. Два положения волны напряжений представлены на рис. 5. Кривая 1–5–4 (рис. 5) иллюстрирует положение волны напряжений в момент времени 0,7 с, а кривая 2–3–6 – в момент времени 1,2 с.

Результаты расчета по разработанной модели совпадают с известными теоретическими решениями. Так на этапе выдержки существует волна пластической деформации (участок 5), скорость которой  $v_{pl} = \sqrt{E_p / \rho}$  по решениям, представленным в [2] и [3]. Для модельного материала, у которого  $E/E_p = 4$ , скорость пластической волны в два раза меньше скорости упругой волны. Решение, полученное по нашей модели, дает такое же соотношение скоростей. Пластическая волна (участок 5 на рис. 5) распространяется со скоростью, в два раза меньшей скорости упругой волны. После окончания этапа выдержки пластическая волна исчезает и пропущенный образцом импульс соответствует кривой 2–3–6. Кривая 3 – импульс, связанный с движением свободного конца стержня после разгрузки. Скорость движения свободного конца равна скорости распространения упругой волны ( $v = \sqrt{E/\rho}$ ) и, таким образом свободный конец «догоняет» фронт пластической волны и вызывает напряжения сжатия. Подобный результат был получен в работе [3].

Таким образом, разработанная модель корректно отражает процесс распространения волн напряжений в упругих и неупругих стержнях и может быть использована для идентификации свойств материала при динамическом воздействии.

### Литература

1. Тимошенко, С.П. Теория упругости / С.П. Тимошенко, Дж. Гудьер; пер. с англ.; под ред. Г.С. Шапиро. – 2-е изд. – М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 560 с.
2. Рахматуллин, Х.А. О распространении плоских упругопластических волн / Х.А. Рахматуллин, Г.С. Шапиро // ПММ. – 1948. – Т. 12, Вып. 4. – С. 369–374.
3. Кольский, Г. Волны напряжения в твердых телах / Г. Кольский; пер. с англ. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1955. – 192 с.

Поступила в редакцию 6 марта 2012 г.

## NUMERICAL ANALYSIS OF STRESS AND DISTORTION WAVES IN NON-ELASTIC ROD

O.S. Sadakov<sup>1</sup>, S.I. Shulzhenko<sup>2</sup>

The properties of non-elastic media depend on the deformation rate, though the direct identification of relevant rheological functions at rates of the shock waves is a challenging experimental problem. One of the ways of its solution is a blow on the butt end of the material sample (a rod) and measuring the history of its deformation in several sections. Besides the appropriate experimental arrangement, there should be a calculating program with variable characteristics of the material to choose suitable media parameters. Such program using the structural model of the material is offered in the article. The calculated results for the cases of elastic, elastoplastic and elastoviscous media are given.

*Keywords: wave speed, non-elastic deformation, numerical dynamic analysis.*

### References

1. Timoshenko S.P., Gud'er Dzh. *Teorija uprugosti* (Theory of Elasticity). Moscow, Nauka, Glavnaja redakcija fiziko-matematicheskoy literatury, 1979. 560 p. (in Russ.).
2. Rakhmatullin Kh.A., Shapiro G.S. O rasprostranenii ploskikh uprugoplasticheskikh voln (On the propagation of elastic waves of plane). *Prikladnaya matematika i mekhanika*. 1948. Vol. 12, no. 4. pp. 369–374. (in Russ.).
3. Kol'skiij G. *Volny napryazhenija v tverdykh telakh* (Stress Waves in Solids). Moscow, Izd.-vo inostrannoy literatury, 1955. 190 p. (in Russ.). [Kolsky H. *Stress Waves in Solids*. Oxford, Clarendon Press, 1953. 211 p.]

<sup>1</sup> Sadakov Oleg Sergeevich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South-Ural State University.

E-mail: os38@mail.ru

<sup>2</sup> Shulzhenko Sergey Ivanovich is Associate Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South-Ural State University.

E-mail: shust@mail.ru

## ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ МНОГОСЛОЕВЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Е.М. Байтингер<sup>1</sup>, Н.А. Векесер<sup>2</sup>, И.Н. Ковалев<sup>3</sup>, А.Н. Бехтерев<sup>4</sup>, В.В. Викторев<sup>5</sup>

Методом рамановской спектроскопии исследованы образцы углеродных нанотрубок различной степени дефектности. Обнаружено влияние дефектности образцов на интенсивность спектральных линий дефектной зоны. Предложена методика, позволяющая оценить степень дефектности образцов на основании статистического анализа совокупности рамановских спектров в области волновых чисел 1000–4000 см<sup>-1</sup>.

*Ключевые слова:* углеродные нанотрубки, рамановская спектроскопия, дефекты структуры.

**Введение.** Многослойные углеродные нанотрубки (МСНТ) находят применение в различных отраслях техники, химии, медицины [1]. Основными методами исследования МСНТ и текущего контроля физико-химического состояния в настоящее время являются: трансмиссионная и растровая электронная микроскопия, рентгеноструктурный анализ, рамановская спектроскопия, термогравиметрический анализ [2]. Электронная микроскопия дает важную информацию о морфологическом устройстве как внутреннего строения трубок, так и их переплетений. В работе [3] показано, что в современном варианте она может быть легко дополнена также спектроскопией характеристических потерь энергии электронами на прострел, а также микродифракционным анализом.

Наиболее информативным и в то же время простым методом исследования и контроля дефектной структуры МСНТ является рамановская спектроскопия [4]. В статье представлены результаты исследования дефектной структуры МСНТ методом рамановской спектроскопии. Развивается статистический подход к интерпретации результатов исследований.

**Методы исследования.** Для исследования использован конфокальный рамановский спектрометр - микроскоп марки «SENTERRA Raman Mikroskop», измеряющий стоковую компоненту рамановского смещения в интервале волновых чисел 80–4000 см<sup>-1</sup>. Основные характеристики прибора: длина волны лазера 532 нм, спектральное разрешение < 3 см<sup>-1</sup>, пространственное разрешение 1 мкм (средний диаметр пятна лазерного источника на образце), конфокальное разрешение по глубине 2 мкм. Мощность лазерного излучения изменялась от 2 до 20 мВт. Для измерений порошок, содержащий нанотрубки, в небольшом количестве насыпали на лабораторное стекло, а затем проба помещалась в прибор.

Порошкообразные образцы МСНТ представляли совокупность агломератов, размер которых колеблется от 10 до 100 мкм [3]. По данным ТЕМ внутренняя структура агломератов представляет спутанные пучки многостенных трубок и нановолокон. Присутствует также в небольшом количестве аморфный углерод. Образцы неоднородны как по структуре, так и по содержанию дефектов. Каждая из структурных единиц обладает собственной дефектностью.

Один из типичных рамановских спектров порошка МСНТ приведен на рис. 1 в интервале волновых чисел 1000–4500 см<sup>-1</sup>. В спектре наблюдаются следующие максимумы (называемые еще зонами): *D* – дефектная зона, *G* – графитоподобная, *D\** и *D\*\** – обертоны дефектной зоны с

<sup>1</sup> Байтингер Евгений Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, физический факультет, Челябинский государственный педагогический университет.

<sup>2</sup> Векесер Наталья Александровна – кандидат физико-математических наук, преподаватель, кафедра общей и теоретической физики, физический факультет, Челябинский государственный педагогический университет. E-mail: vekesser@tambler.ru

<sup>3</sup> Ковалев Игорь Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра химии твердого тела, химический факультет, Челябинский государственный университет.

<sup>4</sup> Бехтерев Александр Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей физики, Магнитогорский государственный университет.

<sup>5</sup> Викторев Валерий Викторович – доктор химических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, физический факультет, Челябинский государственный педагогический университет.



удвоенной и учетверенной частотой соответственно,  $D+G$ -зона, которая соответствует сумме частот двух зон:  $D$  и  $G$  [5].

Рамановское рассеяние в МСНТ можно представить следующим образом [5]. Под действием света  $\pi$ -электрон возбуждается в зону проводимости, а затем рекомбинирует с дыркой, предварительно рассеявшись на одном из характеристических оптических фононов: тангенциальном ( $\sim 1580 \text{ см}^{-1}$ ) или продольном ( $\sim 1340\text{--}1350 \text{ см}^{-1}$ ). В первом случае возникает рамановское смещение, называемое графитоподобной зоной ( $G$ ), поскольку указанная частота  $1580 \text{ см}^{-1}$  соответствует колебаниям двойных углерод-углеродных связей [6].

Тангенциальные оптические фононы имеют малый импульс и рассеяние легко осуществляется в центре зоны Бриллюэна МСНТ. Продольные фононы имеют достаточно большой импульс  $\sim 15 \text{ нм}^{-1}$ . Вследствие этого, взаимодействие с ними возбужденных  $\pi$ -электронов носит более сложный характер [5]. Если  $\pi$ -электрон рассеялся на продольном фононе, то должен быть механизм, который «забирает» избыточный импульс перед процессом рекомбинации. Только в этом случае возможна рекомбинация электрон-дырочной пары, суммарный импульс которой близок к нулю. Дефекты слоя являются центрами рассеяния с «уносом» импульса. Именно поэтому зона, возникающая при рассеянии  $\pi$ -электронов на продольных фононах, называется «дефектной» ( $D$ ). Если дефекта нет, то «унос» импульса можно осуществить повторным рассеянием на продольных фононах. Соответствующая зона обозначена  $D^*$ . Из описания следует, что процессы  $D$ ,  $D^*$  и  $D^{**}$  являются конкурирующими. Количественной мерой дефектности образцов МСНТ может выступить величина

$$X = I_D / I_G, \quad (1)$$

где  $I_D$  – площадь под кривой, соответствующей зоне  $D$ ,  $I_G$  – площадь под кривой, соответствующей зоне  $G$ .

Однако средние значения  $\langle X \rangle$  для многослойных нанотрубок не столь информативны. Кратко суть метода заключается в проведении  $N$  измерений в произвольных точках каждой проб [4]. Полученный числовой массив  $X$ , после ранжировки по возрастающей разбивается на равные интервалы с шагом, например,  $\Delta X = 0,1$ . Относительное количество экспериментальных данных  $\Delta N/N$ , попавших в каждый интервал, определяет относительную вероятность  $W$  существования в пробе участков с данной величиной  $X$ . Для быстрых оценок качества проб достаточно выбрать  $N = 30\text{--}40$ , т.е. произвести измерение рамановских спектров на 30–40 различных участках исследуемой пробы или нескольких идентичных проб.

**Результаты.** На рис. 2 представлена зависимость вероятности  $W$  обнаружить в пробе МСНТ участки с данной конкретной дефектностью от величины  $X = I_D/I_G$ , которая характеризует количественно эту дефектность (кривая 1).

Среднее значение параметра  $\langle X \rangle$  для кривой 1 составляют 1,3 (количество измерений 150). Кривая распределения 1 имеет явно выраженные два максимума при  $X_1 = 1,25$  и  $X_2 = 1,45$ .

Часть образцов МСНТ была деагломерирована по специально разработанной методике. Процесс деагломерирования сопровождается освобождением МСНТ от аморфной составляющей. Данные для образцов МСНТ после деагломерирования также приведены на рис. 2 (кривая 2, количество измерений  $N_2 = 30$ ). Кривая распределения 3 на этом рисунке (затенена) соответствует деагломерированной пробе с дополнительной термической обработкой в течение часа при температуре  $500 \text{ }^\circ\text{C}$  (количество измерений  $N_3 = 58$ ).

Данные, которые приведены на рис. 2, фактически демонстрируют чувствительность предлагаемой методики для контроля дефектного состояния многослойных нанотрубок. Так средняя величина  $X = 1,11$  характерна для кривой распределения 2. Видно, что в деагломерированной пробе сохранился максимум при  $X = 1,25$ , характерный для исходной структуры МСНТ. Однако доми-

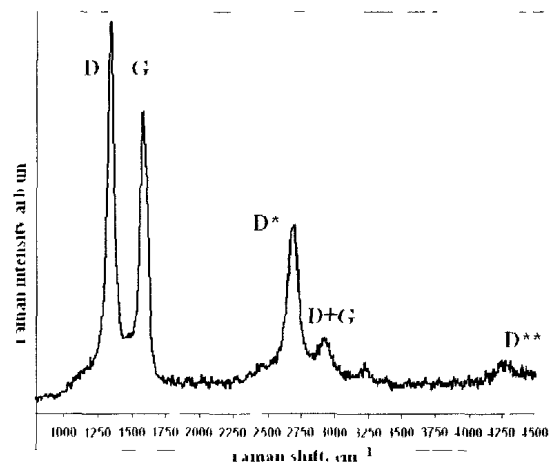


Рис. 1. Типичный рамановский спектр порошка многослойных нанотрубок:  $D$  – дефектная зона,  $G$  – графитоподобная,  $D^*$  и  $D^{**}$  – обертоны дефектной зоны с удвоенной и учетверенной частотой соответственно,  $D+G$ -зона, которая соответствует сумме частот двух зон:  $D$  и  $G$

нирующим является другой максимум при меньшем значении:  $X = 1,05$ . Получение именно этой компоненты с  $X = 1,05$  и было задачей деагломерирования исходной пробы. Дополнительная термообработка (кривая 3) способствует очистке проб и некоторому улучшению созданной при деагломерировании компоненты. Максимум для кривой 3 сместился к  $X = 1$  и само распределение 3 является симметричным. Это свидетельствует об однородности структуры материала 3 после двух последовательных процессов воздействия на нанотрубки: деагломерирования и термообработки.

**Обсуждение.** Дефектность большинства графитоподобных (слоистых) материалов может быть разделена на точечные и протяженные. Оба типа дефектов между собой взаимосвязаны. Основные виды точечных дефектов это вакансии (или дивакансии) в слое и встроены между слоями атомы углерода или, возможно, других элементов (например, остатки катализатора или очищающих веществ). Протяженными дефектами являются изгибы слоев во всех направлениях и их обрывы (границы или торцы). В нанотрубках изгибы слоев обычно модельно связывают с образованием точечных «5-7» дефектов [7]. Это означает, что в местах изгибов формируются деформированные бензолные кольца, содержащие либо 5, либо 7 атомов углерода. Деформированные (дефектные) места стенок нанотрубок являются эффективными центрами неупругого рассеяния  $\pi$ -электронов. Чем больше дефектных участков, тем эффективнее это рассеяние и короче длина свободного пробега  $\pi$ -электронов. Существует метод оценки длины  $L$  по величине  $X = I_D/I_G$  с использованием эмпирической формулы:

$$L \approx 4,4 \cdot I_G / I_D . \quad (2)$$

Под  $L$  в (2) чаще понимают размер нанокристаллов [8]. В этом случае основными типами дефектов предположительно являются границы этих нанокристаллов. Коэффициент в (2) может отличаться от 4,4, поскольку интенсивность и положение  $D$ -зоны зависят от энергии несущего пучка.

**Заключение.** Разработан простой метод контроля дефектного состояния многослойных нанотрубок методом рамановской спектроскопии. Суть метода заключается в статистическом анализе экспериментально полученной совокупности рамановских спектров МСНТ в интервале волновых чисел  $1000-4000 \text{ см}^{-1}$ . Именно этот спектральный интервал содержит рамановские полосы, характеризующие как графитоподобный слой ( $G$ -зона), так его дефектность ( $D$ -зона). Отношение соответствующих интенсивностей  $X = I_D/I_G$  является локальной характеристикой дефектного состояния. Концентрация и распределение дефектности являются основными характеристиками нанотрубок и необходимы для их модификации. В частности установлено, что при модификации МСНТ (метод деагломерирования) происходит существенное изменение дефектной структуры.

### Литература

1. Carbon, The future Material for Advanced Technology Applications / под ред. G. Messina, S. Santagello. – Springer, Berlin–Heidelberg, 2006. – 625 с.
2. Ткачев, А.Г. Аппаратура и методы синтеза твердотельных наноструктур / А.Г. Ткачев, И.В. Золотухин. – М.: Машиностроение, 2007. – 314 с.
3. Байтингер, Е.М. Исследование многослойных углеродных нанотрубок методом комплексной просвечивающей электронной микроскопии / Е.М. Байтингер, Н.А. Вексесер, И.Н. Ковалев // Неорганические материалы. – 2011. – Т. 47, № 6. – С. 614–617.
4. Байтингер, Е.М. Изучение дефектной структуры многослойных углеродных нанотрубок методом рамановской спектроскопии / Е.М. Байтингер, Н.А. Вексесер, И.Н. Ковалев // Неорганические материалы. – 2011. – Т. 47, № 5. – С. 471–474.

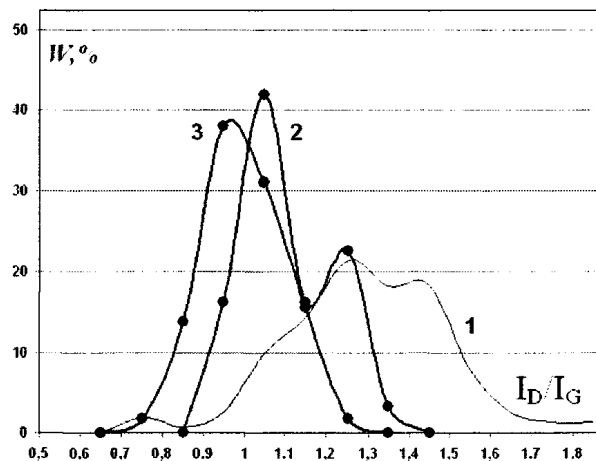


Рис. 2. Зависимость вероятности  $W$  существования в пробе фрагментов с разной дефектностью от величины  $X = I_D/I_G$ : 1 – исходные МСНТ; 2 – после деагломерирования; 3 – после дополнительной термообработки при  $500 \text{ }^\circ\text{C}$

5. Reich G.S. Carbon Nanotubes / G.S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch // Viley-VCH Verlag, Weinheim. – 2004. – 215 с.
6. Шулпов, С.В. Физика углеграфитовых материалов / С.В. Шулпов. – М.: Металлургия, 1990. – 336 с.
7. Беленков, Е.А. Топологические дефекты графеновых слоев / Е.А. Беленков, Ю.А. Зинатулина // Вестник ЧелГУ. Серия «Физика». – 2008. – № 25(126). – С. 32–38.
8. Carbon, The future Material for Advanced Technology Applications: сб. науч. тр. / М. Коос, М. Верес, С. Тóth, М. Фүле; под ред. G. Messina, S. Santagello. – Springer, Berlin-Heidelberg, 2006. – С. 423–445.

Поступила в редакцию 15 декабря 2011 г.

## STRUCTURE FEATURES OF MULTILAYER CARBON NANOTUBES

**E.M. Baitinger<sup>1</sup>, N.A. Vekesser<sup>2</sup>, I.N. Kovalev<sup>3</sup>, A.N. Bechetev<sup>4</sup>, V.V. Viktorov<sup>5</sup>**

The samples of carbon nanotubes were investigated by Raman spectroscopy method. It was found, defects of nanotubes have an influence on intensity of defect zone spectrum lines. The technique of structure defects degree estimation was proposed. One based on statistical analysis of Raman spectra totality in range wave numbers 1000–4000 cm<sup>-1</sup>.

*Keywords: Carbon nanotubes, Raman spectroscopy, structure defects.*

### References

1. Messina G. (Editor), Santagello S. (Editor) *Carbon: The future Material for Advanced Technology Applications*. Springer, Berlin–Heidelberg, 2006. 551 p.
2. Tkachev A.G., Zolotukhin I.V. *Apparatura i metody sinteza tverdotel'nykh nanostruktur* (Apparatus and methods for the synthesis of solid-state nanostructures). Moscow, Mashinostroenie, 2007. 314 p. (in Russ.).
3. Bajjtinger E.M., Vekesser N.A., Kovalev I.N. Issledovanie mnogoslóevykh uglerodnykh nanotrubok metodom kompleksnojj prosvechivajushhejj ehlektronnojj mikroskopii (Investigation of Multilayered carbon nanotubes by transmission electron microscopy of the complex). *Neorganicheskie materialy*. 2011. Vol. 47, no. 6. pp. 614–617. (in Russ.).
4. Bajjtinger E.M., Vekesser N.A., Kovalev I.N. Izuchenie defektnojj struktury mnogoslóevykh uglerodnykh nanotrubok metodom ramanovskojj spektroskopii (The study of defect structure Multilayered carbon nanotubes by Raman spectroscopy). *Neorganicheskie materialy*. 2011. Vol. 47, no. 5. pp. 471–474. (in Russ.).
5. Reich G.S., Thomsen C., Maultzsch J. Carbon Nanotubes. Viley-VCH Verlag, Weinheim. 2004. 215 p.
6. Shulepov S.V. *Fizika uglegrafitovykh materialov* (Physics of carbon-graphite materials). Moscow, Metallurgija, 1990. 336 p.
7. Belenkov E.A., Zinatulina Ju.A. Topologicheskie defekty grafenovykh sloev (Topological defects of graphene layers). *Vestnik ChelGU. Serija «Fizika»*. 2008. no. 25(126). pp. 32–38. (in Russ.).
8. Koos M., Veres M., Tóth S., Füle M. in: Carbon: The future Material for Advanced Technology Applications. – Springer, Berlin-Heidelberg, 2006. pp. 423–445.

<sup>1</sup> Baitinger Evgeny Mikhailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

<sup>2</sup> Vekesser Natalya Alexandrovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Lecturer, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University. E-mail: vekesser@rambler.ru

<sup>3</sup> Kovalev Igor Nikolaevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Solid State Chemistry Department, Chelyabinsk State University.

<sup>4</sup> Bechetev Alexandr Nikolaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General Physics Department, Magnitogorsk State University

<sup>5</sup> Viktorov Valery Viktorovich is Dr. Sc. (Chemistry), Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

# ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОКОРУНДОВЫХ ПЛАСТИН, ЗАКРИСТАЛЛИЗОВАННЫХ В ВАЛКАХ-КРИСТАЛЛИЗАТОРАХ

В.Е. Гладков<sup>1</sup>, В.М. Березин<sup>2</sup>, Г.М. Купершляк-Юзефович<sup>3</sup>

Представлены результаты исследования статических характеристик физико-механических свойств, полученных из диаграмм  $\sigma = \phi(\epsilon)$  при испытании пластин белого ( $\approx 98$  мас.%  $\alpha$ - $Al_2O_3$ ) и циркониевого (75 мас.%  $Al_2O_3$  – 25 мас.%  $ZrO_2$ ) электрокорунда, закристаллизованных в валках-кристаллизаторах. Проведено обсуждение по влиянию пористости, химического и фазового состава  $ZrO_2$  на физико-механические свойства материала пластин и шлифовального зерна, получаемого при их дроблении.

*Ключевые слова:* электрокорунд, валки-кристаллизаторы, абразивные материалы, силовое обдирочное шлифование, тензометрия, диаграмма  $\sigma$ - $\epsilon$ , показатели механических свойств.

## Введение

Основным материалом при получении шлифовального зерна для абразивных кругов силового обдирочного шлифования является цирконисвый электрокорунд – сплавы  $Al_2O_3$  с 10–40 мас.%  $ZrO_2$ . Процесс силового обдирочного шлифования характеризуется высокими скоростями резания 60–80 м/с, большими усилиями прижатия абразивного круга к обрабатываемой поверхности 5–10 кН, что обеспечивает съём металла до 250 кг/ч при зачистке стальных слитков и до 400 кг/ч – чугуновых. Температура в зоне резания достигает температуры обрабатываемого материала. Отношение массы снятого металла  $m_{mc}$  к массе израсходованного рабочего слоя абразивного круга  $m_k$  при силовом шлифовании  $m_{mc}/m_k \geq 60$ .

Отходы шлифования (рис. 1, а) при использовании кругов с зерном нормального электрокорунда представляют собой металлическую пыль, загрязненную материалом от абразивного круга, практически не пригодную для переплава и, как правило, идущую в отвал, что приводит к значительной потере дорогостоящих легирующих металлов (Ni, Co, W, Mo и др.) при обработке высоколегированных сталей. Отходы шлифования при обработке кругами на базе зерна из циркониевого электрокорунда (рис. 1, б) позволяют их использовать в качестве вторичного сырья.

Исходя из условий работы в качестве требования, предъявляемого к физико-механическим свойствам абразивного зерна для силового шлифования, можно отметить следующее. При работе абразивное зерно испытывает в основном два вида нагружения. Первое – радиальные силы инерции, вызывающие нормальные напряжения растяжения, допустимый предел которых ограничен пределом прочности на растяжение композиционного материала из зерна и связки. Второй вид нагружения – связан непосредственно с процессом шлифования, при котором зерно, расположенное на рабочей поверхности круга, можно рассматривать как резец, производящий стружку (рис. 1, б), за-

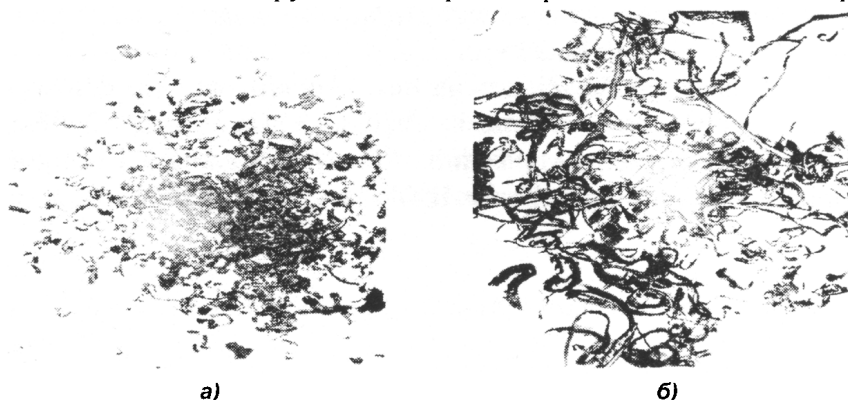


Рис. 1. Отходы шлифования при абразивной обработке слитков из стали 12Х18Н10Т шлифовальными кругами, изготовленными на базе абразивного зерна из нормального (а) и циркониевого электрокорунда (б)

<sup>1</sup> Гладков Владимир Евгеньевич – кандидат химических наук, доцент, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

<sup>2</sup> Березин Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: bvm@susu.ac.ru

<sup>3</sup> Купершляк-Юзефович Георгий Марьянович – кандидат технических наук, старший научный сотрудник, кафедра сопротивления материалов, Южно-Уральский государственный университет.

крепленный консольно в связке и работающий в условиях совместного действия изгибающих и сжимающих сил. С учетом того, что у твердых материалов прочность на сжатие значительно выше, чем на растяжение и изгиб, то существенный интерес при аттестации материала по его физико-механическим свойствам представляет определение прочности на изгиб и растяжение.

В ряде работ отмечено [1–3], что технологические показатели (разрушаемость абразивного зерна по ГОСТ 28924-91 и суммарный выход крупных номеров после дробления), характеризующие прочность пластин закристаллизованных в валках-кристаллизаторах, зависят от фазового состава  $ZrO_2$ .

Задача настоящей работы – разработка методики и определение физико-механических свойств электрокорундовых материалов, закристаллизованных в валках-кристаллизаторах в виде пластин в зависимости от их химического состава, фазового состава  $ZrO_2$  в объеме эвтектики и состояния макро и микроструктуры.

### Аттестация образцов и методика исследований

Объектом исследования были пластины белого ( $\approx 99$  мас.%  $\alpha-Al_2O_3$ ) и сплава (75 мас.%  $Al_2O_3$  – 25 мас.%  $ZrO_2$ ) циркониевого электрокорунда закристаллизованные в валках-кристаллизаторах. Состав шихты: технический глинозем ( $\gamma-Al_2O_3$ ) и технический диоксид циркония. Степень превращения ( $\beta-ZrO_2 \rightarrow \alpha-ZrO_2$ ) изменяли добавками порошка металлического алюминия в расплав при его сливе на валки-кристаллизаторы [1–4]. Фазовый анализ полученных материалов проводили на установке ДРОН-2.

Физико-механические свойства пластин определяли по методике испытаний хрупких материалов при консольном изгибе. Геометрическая форма образца для статических испытаний на изгиб представлена на (рис. 2, а). Зону (ширину образца  $b(x)$ ), в которой происходило разрушение, делали меньше, чем у соответствующей балки равного сопротивления изгибу, контур которой показан штриховой линией (рис. 2, а). Фактическая длина пластинки  $L_n \geq 2C$ . Длину образца  $L$  получали путем соответствующего удлинителя, с которым пластинку соединяли через резиновые прокладки. Относительные напряжения в рабочей части образца  $\sigma/\sigma_1$  (при  $\sigma_1 = \sigma(x/L = 1)$ ) с размерами ( $b_{min}(x) = 14$ ,  $L = 150$ ,  $C = 40$ ) мм показаны на (рис. 2, б). Данный тип образцов применяли при испытаниях электрокорундовых пластин толщиной  $h = 1,5–4,5$  мм. Поверхность разрушения образцов была локализована в пределах зоны ( $0,87 \leq x/L \leq 0,9$ , рис. 2, а, б). Изменения напряжений в этой зоне составляло не более 2 %.

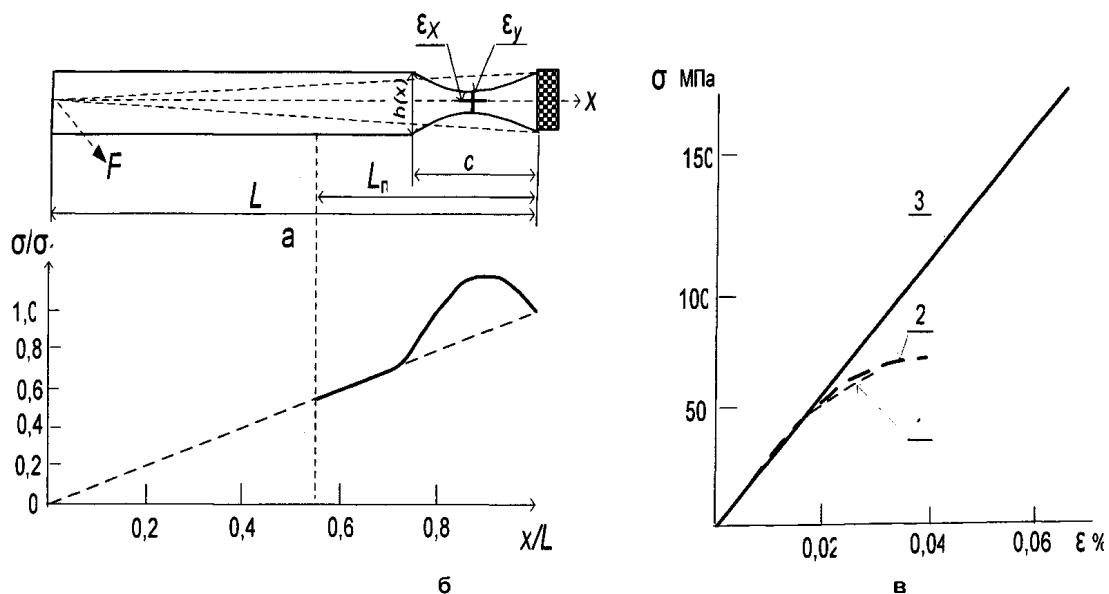


Рис. 2. Геометрическая форма образца для статических испытаний при консольном изгибе (а). Распределение относительных напряжений  $\sigma$  в рабочей части образца (б). Типичный вид диаграмм «напряжение–относительная деформация» при консольном изгибе (в) для образцов: 1, 2 – белого и 3 – циркониевого электрокорундов

Консоль нагружали путем наполнения водой емкости, подвешенной к тензодинамометру (для измерения силы  $F$ ) в точке  $x = 0$  (рис. 2, а). Такая система обеспечивала медленное, «статическое» нагружение с постоянной скоростью. Напряжения разрушения определяли из равенства

$$\sigma_p = 6Fx/b_p h_p^2 \quad (1)$$

где  $h_p$  – толщина и  $b_p$  – ширина образца в разрушенном сечении.

Для определения зависимости напряжение – деформация в контрольной точке (рис. 2, а) наклеивали тензорезистор  $\varepsilon_i$  с активной длиной (базой) 2 мм. Показания тензодинамометра и тензорезистора записывали двухкоординатным потенциометром для регистрации зависимости ( $\varepsilon_i - \varepsilon_j$ ). Полученные при испытании пластин типичные зависимости  $\sigma = \varphi(\varepsilon)$  представлены на (рис. 3, в).

Механические показатели электрокорундовых пластин, закристаллизованных в валках-кристаллизаторах

Материал	№ образцов	Размер образцов, мм		Механические показатели, МПа			Коэффициенты	
		$h_p$	$b_p$	$\sigma_p$	$\sigma_{min}$	$E \times 10^5$	$\mu$	$\sigma_p/\sigma_{max}$
Пластина 1, белый электрокорунд	11	4,1	14,7	55	36	2,17	0,23	0,79
	5	4,3	14,1	56	40	2,54	0,21	0,8
	8	5,2	15,0	57	42	2,52	0,21	0,81
	6	4,7	13,5	60	43	2,64	0,18	0,86
	12	3,8	15,7	64	42	2,46	0,22	0,91
	4	4,0	14,1	65	46	2,74	0,22	<b>0,93</b>
	7	4,2	13,6	66	38	2,50	0,23	<b>0,94</b>
	2	3,4	14,2	70	48	2,70	0,21	<b>1,0</b>
	Среднее	–	–	<b>62</b>	<b>42</b>	<b>2,53</b>	<b>0,21</b>	–
Пластина 3, 10 мас. % $\beta$ -ZrO <sub>2</sub>	4	3,1	15,1	106	–	2,51	0,25	0,82
	3	2,6	15,4	123	–	2,78	0,26	<b>0,95</b>
	5	3,6	14,8	129	–	2,72	0,26	<b>1,0</b>
	Среднее	–	–	<b>119</b>	–	<b>2,67</b>	<b>0,26</b>	–
Пластина 4, 20 мас. % $\beta$ -ZrO <sub>2</sub>	4,а	1,7	14,4	152	–	2,64	0,26	0,79
	1	1,6	15,0	156	–	2,42	0,25	0,81
	4	1,8	14,0	160	–	2,45	–	0,83
	3*	1,9	17,0	169	–	2,52	–	0,88
	5,а	1,9	15,6	183	–	2,64	0,25	<b>0,95</b>
	2	2,0	14,0	186	–	2,55	0,26	<b>0,96</b>
	5	1,8	14,8	193	–	2,52	0,25	<b>1,0</b>
	Среднее	–	–	<b>171</b>	–	<b>2,53</b>	<b>0,25</b>	–

Механические характеристики, определенные по этим зависимостям для пластин (1, 3, 4) с фиксированным химическим и фазовым составом ZrO<sub>2</sub>, представлены в таблице. Для образцов такого же химического состава, но изготовленных из других пластин с различной толщиной и фазовым составом, определяли только напряжение разрушения  $\sigma_p$  в зависимости от содержания  $\beta$ -ZrO<sub>2</sub> в их составе (рис. 3).

### Обсуждение результатов

Механические характеристики ( $\sigma = \varphi(\varepsilon)$ , см. рис. 2, таблицу) позволяют отметить следующее. Вне зависимости от химического и фазового состава все анализируемые электрокорундовые материалы имеют сопоставимые средние значения модуля упругости и коэффициента Пуассона.

Зависимости  $\sigma = \varphi(\varepsilon)$  для образцов белого электрокорунда перед разрушением характеризуются наличием нелинейного участка деформирования (рис. 2, в), подобного участку упрочнения пластичных материалов. Физико-химическая природа такой зависимости неоднозначна и может быть связана с состоянием структуры границ между кристаллами корунда ( $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) и природой межкристаллитной фазы. При замене межкристаллитной фазы в белом электрокорунде на эвтектику (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub>) секущий модуль упругости увеличивается, а среднее значение напряжения разрушения  $\sigma_p$  возрастает с увеличением содержания  $\beta$ -ZrO<sub>2</sub> в ее составе (см. таблицу и рис. 3).

Разрушение всех образцов происходило хрупко. При этом широкий диапазон значений напряжений разрушения ( $\sigma_p$  в таблице) образцов из различных пластин с фиксированным фазовым составом связан не со свойствами материала, а с состоянием макроструктуры пластин в разрушенном сечении. Локальные раковины, пористость и другие макроскопические дефекты струк-

туры [2, 4], особенно вблизи поверхности, существенно уменьшают момент сопротивления сечения. Поэтому напряжения разрушения с учетом данного фактора должны определяться из равенства

$$\sigma_p = \sigma_n \left[ 1 - (12/bh^3) \sum y^2 S_i \right], \quad (2)$$

где  $S_i$  – площадь дефекта,  $0 \leq y \leq h/2$  – расстояние от нейтральной оси до центра тяжести площади дефекта.

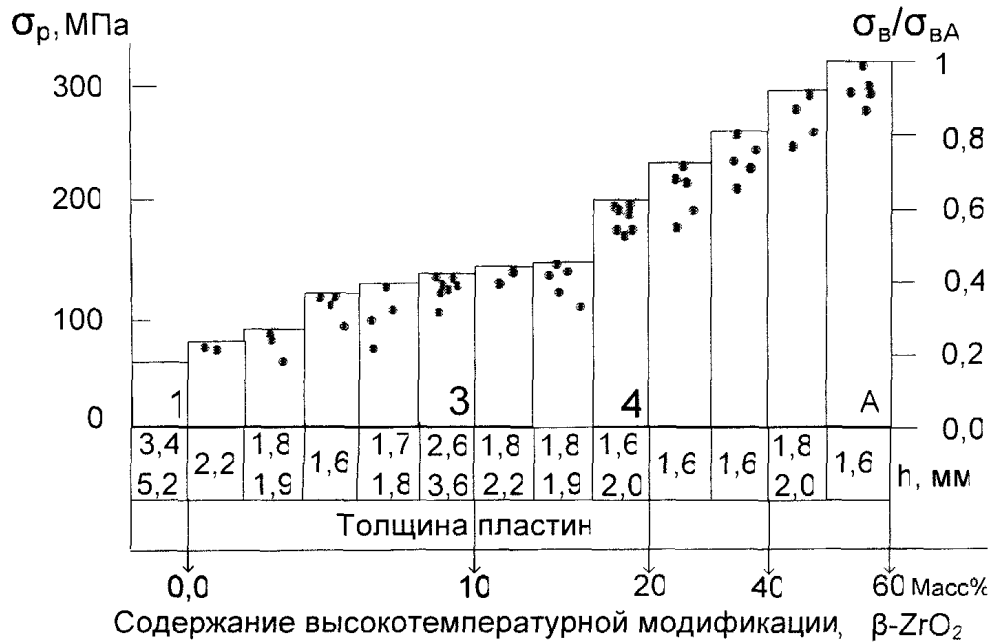


Рис. 3. Зависимость напряжения разрушения электрокорундовых пластин различной толщины с фиксированным фазовым составом  $\beta\text{-ZrO}_2$ . Пластина 1 – белый электрокорунд (а)

В связи с этим за прочность материала  $\sigma_n$ , с фиксированным химическим и фазовым составом, можно принять максимальные значения напряжений разрушения в серии испытания образцов ( $\sigma_n = \sigma_{p \max}$ , см. таблицу, рис. 3), вырезанных из одной пластины. В этом случае величину  $(1 - \sigma_p/\sigma_n)$  можно рассматривать как параметр, характеризующий дефектность материала в области сечения поверхностью разрушения. Влияние содержания ( $\beta\text{-ZrO}_2$ ) в составе эвтектики на относительную прочность материала можно оценить по величине соотношения  $\sigma_v/\sigma_{vA}$  (рис. 3); где  $\sigma_n = \sigma_{p \max}$  для пластин с фиксированным фазовым составом, а  $\sigma_{vA} = \sigma_{p \max}$  для пластины, обозначенной буквой А (рис. 3), с максимальным содержанием 60 мас. %  $\beta\text{-ZrO}_2$ .

Влияние степени развития полиморфного превращения  $\beta\text{-ZrO}_2 \rightarrow \alpha\text{-ZrO}_2$  в составе эвтектики циркониевого электрокорунда, проходящего (при охлаждении после кристаллизации слитка) с увеличением объема (на  $\leq 7\%$ ), существенно сказывается на технологических показателях, характеризующих разрушение материала в процессах его переработки на шлифовальное зерно. В работе [1] пластины циркониевого электрокорунда, закристаллизованные в валках-кристаллизаторах, с различным содержанием тетрагональной модификации ( $\beta\text{-ZrO}_2$ ) подвергали измельчению и последующему рассеву для определения суммарного выхода фракций (2000, 1600, 1250) мкм. При содержании  $\beta\text{-ZrO}_2 \leq 20$  мас. % после измельчения суммарное содержание фракции 1000–2000 мкм составляло 33–38 мас. %. С увеличением содержания  $\beta\text{-ZrO}_2 \geq 20$ –50 мас. % суммарное содержание фракции 1000–2000 мкм возрастало до 46–60 мас. %. При этом показатель разрушаемости (технологическая проба по ГОСТ 28924-91) уменьшался с  $\approx 21\%$  при 10 мас. %  $\beta\text{-ZrO}_2$  до  $\approx 11\%$  при 30 мас. %  $\beta\text{-ZrO}_2$ . Дальнейшее увеличение  $\beta\text{-ZrO}_2$  до  $\leq 70$  мас. % не влияло на показатель разрушаемости.

Таким образом, установленная зависимость прочности на изгиб (см. таблицу, рис. 3) от содержания  $\beta\text{-ZrO}_2$  хорошо коррелирует с технологическими показателями: суммарным выходом крупных номеров шлифовального зерна и его разрушаемостью в зависимости от содержания  $\beta\text{-ZrO}_2$ .

Пластины при их дроблении на шлифовальное зерно в основном разрушаются по дефектным сечениям с минимальной прочностью, а в шлифовальное зерно переходят участки объемов с вы-

сокой прочностью. При этом пористость и её распределение оказывают существенное влияние на получение качественного абразивного зерна. Усадочные и газовые поры, размер которых и расстояние между ними сравнимы с размером зерна 1250–2500 мкм, при дроблении материала выходят на поверхность. Поэтому их присутствие на физико-механических свойствах шлифовального зерна практически не сказывается. С учетом наличия пор размером  $\leq 100$  мкм прочность на изгиб абразивного зерна, получаемого из пластин с фиксированным химическим и фазовым составом, можно оценить средними напряжениями разрушения  $\sigma_{p\ c}$  из диапазона  $(0,95...1)\sigma_p/\sigma_{max}$  представленного в таблице и на рис. 3.

Высокотемпературная модификация  $\beta\text{-ZrO}_2$  в составе эвтектических колоний метастабильна. В связи с этим установленные показатели механических свойств (таблица и рис. 2) будут характеризовать свойства материала только в том случае, если он не подвергался термической обработке. В [3, 5] показано, что после нагрева до температуры  $T \geq 1100$  °С интервал полиморфного превращения  $\beta\text{-ZrO}_2 \rightarrow \alpha\text{-ZrO}_2$  зависит от времени выдержки, и существенно ниже температурного интервала пластичности корунда. При этом пластины и абразивное зерно с исходным содержанием  $\beta\text{-ZrO}_2 \geq 50$  % при охлаждении самопроизвольно растрескиваются, а показатель разрушаемости возрастает тем больше, чем больше было метастабильной модификации в исходном фазовом составе.

### Выводы

Полиморфное превращение  $\beta\text{-ZrO}_2 \Rightarrow \alpha\text{-ZrO}_2$  в составе эвтектических колоний сплава 75 мас.%  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – 25 мас. %  $\text{ZrO}_2$  проходящее с увеличением объёма на ~ 7 %, существенно сказывается на прочностных свойствах материала. При подавлении превращения в интервале 0–60 % прочность материала на изгиб возрастает от 100 до 300 МПа.

### Литература

1. Гладков, В.Е. Влияние различных модификаций  $\text{ZrO}_2$  на физико-механические свойства циркониевого электрокорунда / В.Е. Гладков, А.А. Фотиев, А.С. Зубов // Неорганические материалы. – 1985. – Т. 21, № 4. – С. 616–619.
2. Гладков, В.Е. Влияние условий охлаждения расплава на формирование структуры и фазового состава в слитках сплавов  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$  / В.Е. Гладков, В.М. Березин, Н.Б. Жеханова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып. 2. – № 9(185). – С. 27–31.
3. Гладков, В.Е. Полиморфное превращение  $\text{ZrO}_2$  в сплаве 75 мас.%  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – 25 мас. %  $\text{ZrO}_2$ , закристаллизованном в неравновесных условиях / В.Е. Гладков, В.М. Березин, Н.Б. Жеханова // Неорганические материалы. – 2010. – Т. 46, № 7. – С. 838–842.
4. Гладков, В.Е. Условия формирования плотной макроструктуры электрокорундовых пластин в валках-кристаллизаторах / В.Е. Гладков, В.М. Березин, Н.Б. Жеханова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 67–71.
5. Влияние скорости охлаждения эвтектики системы  $\text{Al}_2\text{O}_3$  –  $\text{ZrO}_2$  на стабильность фазовых составляющих / И.Ю. Волкова, С.С. Семенов, А.Е. Кравчик и др. // Неорганические материалы. – 1987. – Т. 23, № 3. – С. 448–451.

*Поступила в редакцию 20 декабря 2011 г.*



## PHYSICAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF ELECTROCORUNDUM PLATES, CRYSTALLIZED IN ROLL-CRYSTALLIZERS

V.E. Gladkov<sup>1</sup>, V.M. Berezin<sup>2</sup>, G.M. Kupershlyak-Yuzefovich<sup>3</sup>

The results of research of static characteristics of physical and mechanical properties obtained from the diagrams  $\sigma = \sigma(\epsilon)$  during tests of the crystallized in rolls-crystallizers plates of white ( $\approx 98$  wt.%  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) and zirconium (75 wt.% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 25 wt.% ZrO<sub>2</sub>) electrocorundum. A discussion on the influence of porosity, chemical and phase composition of ZrO<sub>2</sub> on physical and mechanical properties of the plates and grinding of grain received during their shattering.

*Keywords: electrocorundum, roll-crystallizers, abrasive, heavy rough-grinding, tensometry,  $\sigma$ - $\epsilon$  diagram, mechanical properties.*

### References

1. Gladkov V.E., Fotiev A.A., Zubov A.S. Vliyanie razlichnykh modifikacij ZrO<sub>2</sub> na fiziko-mekhanicheskie svojjstva cirkonievogo ehlektrokورونا (Influence of different modifications of ZrO<sub>2</sub> on the physico-mechanical properties of electrocorundum). *Neorganicheskie materialy*. 1985. Vol. 21, no. 4. pp. 616–619. (in Russ.).
2. Gladkov V.E., Berezin V.M., Zhekhanova N.B. Vliyanie uslovijj okhlazhdenija rasplava na formirovanie struktury i fazovogo sostava v slitkakh splavov Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> (Influence of conditions of melt cooling upon structure formation and phase composition in ingots of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> alloys). *Vestnik JuUrGU. Serija «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2010. Issue 2. no. 9(185). pp. 27–31. (in Russ.).
3. Gladkov V.E., Berezin V.M., Zhekhanova N.B. Polimorfnoe prevrashhenie ZrO<sub>2</sub> v splave 75 mas. % Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 25 mas. % ZrO<sub>2</sub> zakristallizovannom v neravnovesnykh uslovijakh (Polymorphic transformation of ZrO<sub>2</sub> in the alloy is 75 wt. % Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 25 wt. % ZrO<sub>2</sub> crystallized under nonequilibrium conditions). *Neorganicheskie materialy*. 2010. Vol. 46, no. 7. pp. 838–842. (in Russ.).
4. Gladkov V.E., Berezin V.M., Zhekhanova N.B. Usloviya formirovaniya plotnoj makrostruktury ehlektrokوروناovykh plastin v valkakh kristallizatorakh (Conditions of formation of dense macrostructure of electrocorundum plates in rollers of crystallizers). *Vestnik JuUrGU. Serija «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2011. Issue 4. no. 10(227). pp. 67–71. (in Russ.).
5. Volkova I.Ju., Semenov S.S., Kravchik A.E. *et al.* Vliyanie skorosti okhlazhdenija ehvtektiki sistemy Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> na stabil'nost' fazovykh sostavljajushhikh (Effect of cooling rate of the eutectic Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> phase on the stability of the components). *Neorganicheskie materialy*. 1987. Vol. 23, no. 3. pp. 448–451. (in Russ.).

<sup>1</sup> Gladkov Vladimir Evgenievich is Cand. Sc. (Chemistry), Associate Professor, Instrument Production Technique department, South Ural State University.

<sup>2</sup> Berezin Vladimir Mikhailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Instrument Production Technique department, South Ural State University.

E-mail. bvm@susu.ac.ru

<sup>3</sup> Kupershlyak-Yuzefovich George Maryanovich is Cand. Sc. (Engineering), a senior research assistant, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural State University

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЗАРОДЫШЕЙ В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ ЭВТЕКТИЧЕСКОГО СПЛАВА

А.Д. Дрозин<sup>1</sup>, М.В. Дудоров<sup>2</sup>, В.Е. Роцин<sup>3</sup>, П.А. Гамов<sup>4</sup>, Л.Д. Менихес<sup>5</sup>

Проведено теоретическое исследование и дано математическое описание кристаллизации переохлажденного эвтектического расплава с учетом взаимного влияния динамически изменяющихся параметров – концентрации компонентов и температуры расплава – на процессы образования и роста зародышей различных кристаллических фаз в переохлажденном расплаве. По уравнениям математической модели произведены расчеты зарождения и роста кристаллических зародышей в расплаве системы Fe–В при различных исходных концентрациях компонентов и разных переохлаждениях. Выявлены закономерности кристаллизации переохлажденного эвтектического расплава.

*Ключевые слова:* зарождение кристаллов, эвтектические сплавы, переохлаждение, модель образования зародышей, модель роста зародышей.

**Введение.** При теоретическом анализе кристаллизации многокомпонентного расплава необходимо учитывать совокупность процессов тепло- и массопереноса, образования зародышей кристаллов различного состава, их роста. Основная трудность теоретического описания кристаллизации заключается в том, что все определяющие её процессы взаимно связаны и изменение каждого из них влияет на изменение остальных. Так образование зародышей новой фазы при кристаллизации расплава зависит от температуры и концентрации компонентов в данном микрообъеме, а также от количества и распределения уже имеющихся кристаллов. В свою очередь, рост кристаллов вызывает изменение концентрации компонентов расплава вблизи их поверхностей и, следовательно, влияет на процессы массопереноса во всем объеме расплава, на процесс образования новых зародышей. Выделение теплоты кристаллизации на поверхности растущего кристалла влияет на распределение температуры, которая, в свою очередь, влияет на все остальные процессы.

Ввиду сложности явления исследователи обычно выделяют один из процессов, например, рост частиц новой фазы, а протекание остальных процессов постулируют какими-нибудь простыми соотношениями. При этом учитывается влияние этих процессов на выделенный процесс, но не учитывается влияние выделенного процесса на остальные процессы (что изменило бы их течение и, в свою очередь, течение выделенного процесса).

Наиболее распространены теоретические методы математического моделирования процессов кристаллизации в расплаве, разработанные М. Авраами [1–3] и А.Н. Колмогоровым [4]. Эти методы позволяют получить уравнение зависимости доли кристаллов в расплаве от скорости их роста, интенсивности образования и от времени протекания процесса, что даст возможность рассчитать скорость и время протекания процессов кристаллизации в переохлажденном расплаве. При этом уравнения интенсивности зародышеобразования и скорость роста кристаллов задаются

<sup>1</sup> Дрозин Александр Дмитриевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой математического анализа, декан механико-математического факультета, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: drozin@mail.ru

<sup>2</sup> Дудоров Максим Владимирович – кандидат технических наук, кафедра пиromеталлургических процессов, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>3</sup> Роцин Василий Ефимович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой пиromеталлургических процессов, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: vero@met.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Гамов Павел Александрович – аспирант, кафедра пиromеталлургических процессов, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>5</sup> Менихес Леонид Давидович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

произвольными простыми зависимостями от температуры расплава, времени протекания процесса и различных физико-химических характеристик расплава.

Применение методов Авраами и Колмогорова ограничено рядом допущений. В частности, они не позволяют учитывать динамическое изменение характеристик расплава (к примеру, изменение концентрации компонентов или температуры), обусловленное процессами образования и роста в расплаве кристаллов различного состава. Это не позволяет применять методы Авраами и Колмогорова для описания эвтектической кристаллизации многокомпонентного расплава, когда возможно одновременное образование кристаллов фаз разного состава.

Таким образом, требуется разработка методов, которые комплексно описывали бы протекание процессов кристаллизации при затвердевании переохлажденного эвтектического расплава, учитывая динамически изменяющиеся факторы. Трудность их разработки заключается в сложности получаемых зависимостей. Однако в связи с развитием вычислительной техники появилась возможность решения таких сложных уравнений численными методами. Подходы к построению и решению таких уравнений создает теория зарождения новой фазы при протекании гетерофазных химических реакций [5, 21–38], которая позволяет учитывать и особенности процессов кристаллизации в многокомпонентных расплавах.

**Цель работ.** Создание математической модели процессов кристаллизации при затвердевании переохлажденного эвтектического расплава, учитывающей динамическое изменение характеристик расплава. Теоретическое описание таких процессов приобрело большое значение в связи с развитием производства металлов в аморфном состоянии методом закалки расплавов [6].

**Методика.** Имея в виду применение изучаемых закономерностей к процессам аморфизации эвтектических сплавов типа  $Fe_x B_{1-x}$ , рассмотрим двухкомпонентный расплав компонентов А и В. При охлаждении такого расплава возможно выделение кристаллов чистого компонента А и химического соединения  $A_{n_A} B_{n_B}$  ( $n_A$  и  $n_B$  – соответствующие стехиометрические коэффициенты),

которое мы для краткости будем обозначать символом Z. Пусть система обладает простейшей эвтектической диаграммой (рис. 1, а) с эвтектической точкой E. Линии  $A_L E$  и  $Z_L E$  определяют равновесие между расплавом и чистыми веществами А и Z соответственно.

Рассмотрим случай, когда расплав с долей  $c_0$  компонента В (меньшей  $c_E$ ) медленно охлаждается до температуры  $T^*$ . В результате равновесного охлаждения мы получили бы твердую фазу А и раствор состава  $c^*$ . При кристаллизации расплава со значительной скоростью общее равновесие не соблюдается. Но так как скорость перескока частиц из расплава на поверхность кристаллического зародыша значительно превосходит скорость диффузии компонентов в расплаве, можно говорить о локальном равновесии у поверхности зародыша. Поэтому в случае моментального переохлаждения расплава и появления в растворе зародышей компонента А можно считать, что на их поверхностях будет реализовано локальное равновесие, т.е. у поверхности расплав будет иметь (без учета поверхностных эффектов) состав  $c^*$ . Полное равновесие установится лишь позднее, когда зародыши компонента А вырастут в макрофазу.

Таким образом, равновесные диаграммы состояния могут быть использованы и при неравновесном охлаждении. При этом линии на диаграммах показывают состав расплава в непосредственной близости к зародышам новых фаз.

Продолжая подобные рассуждения, можно рассмотреть случай моментального охлаждения расплава и ниже температуры  $T_S$ . И в этом случае у поверхности кристаллических зародышей установится локальное равновесие с расплавом. Как видно из рис. 1, а, в соответствии с линией  $A_L E$  чем больше переохлаждение, тем более расплав у поверхности зародыша обеднен компонен-

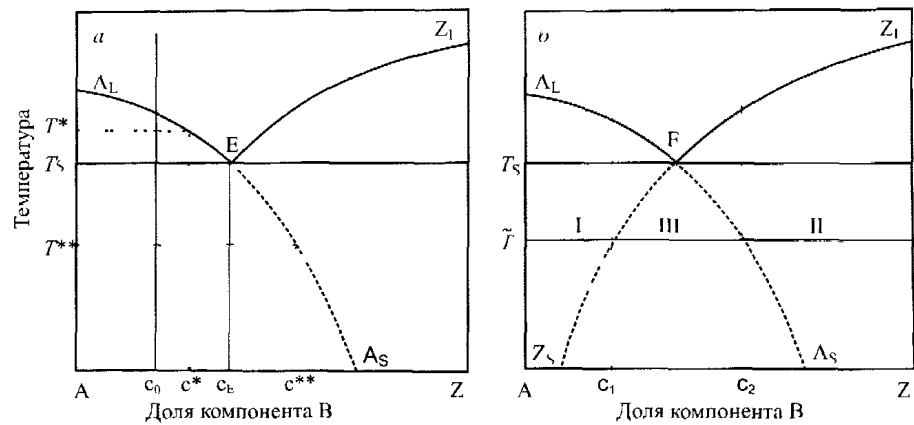


Рис. 1. Модельная диаграмма состояния двухкомпонентной системы:  
а – неполная диаграмма; б – полная диаграмма

том А и обогащен компонентом В. Следует ожидать, что при моментальном переохлаждении расплава до температуры ниже  $T_S$  это изменение будет продолжаться в соответствии с некоторым гладким продолжением линии  $A_1E$  в область низких значений температуры. Так при температуре  $T^{**}$  образующиеся зародыши компонента А будут находиться в динамическом равновесии с расплавом некоторого состава  $c^{**}$ .

Аналогичные рассуждения могут быть проведены и для заэвтектических расплавов, только выделяться здесь будут зародыши фазы Z.

Используя эту методику, продолжим линии  $A_1E$  и  $Z_1E$  в область низких значений температуры и получим диаграмму состояния, изображенную на рис. 1, б. Диаграмма отражает локальное равновесие выделяющихся кристаллических фаз А и Z с окружающим их пока еще незакристаллизовавшимся раствором.

При мгновенном переохлаждении расплава до температуры  $\tilde{T}$  в расплаве, в котором валовая доля компонента В меньше  $c_2$ , будут выделяться зародыши фазы А, окруженные раствором состава  $c_2$ . В растворе, в котором валовая доля компонента В больше  $c_1$ , будут выделяться зародыши фазы Z, окруженные раствором состава  $c_1$ . Таким образом, в соответствии с диаграммой на рис. 1, б для температуры  $\tilde{T}$  все растворы можно разделить на три группы:

- 1) растворы с валовой долей компонента В меньшей  $c_1$ . Здесь при температуре  $\tilde{T}$  могут выделяться лишь зародыши фазы А, окруженные раствором состава  $c_2$ ;
- 2) растворы с валовой долей компонента В большей  $c_2$ . Здесь при температуре  $\tilde{T}$  могут выделяться лишь зародыши фазы Z, окруженные раствором состава  $c_1$ ;
- 3) растворы с валовой долей компонента В большей  $c_1$  и меньшей  $c_2$ . Здесь при температуре  $\tilde{T}$  могут образовываться и зародыши фазы А и зародыши фазы Z. Реальная картина процесса будет определяться кинетикой зарождения и роста зародышей.

Рассмотрим теперь процессы, происходящие в переохлажденном расплаве с течением времени. Предположим, что расплав состава  $c$  большего  $c_1$ , но меньшего  $c_2$  переохлажден до температуры  $\tilde{T}$ . В расплаве могут образовываться зародыши фаз А и Z, причем в зависимости от кинетических характеристик системы будут образовываться либо зародыши одной из фаз, либо обеих. Пусть в расплаве образуется больше зародышей фазы А. Тогда по мере образования и роста зародышей фазы А расплав вблизи них будет обедняться компонентом А, его состав будет смещаться в сторону  $c_2$ . В конце концов, система перейдет в состояние, при котором образование зародышей фазы А может прекратиться. При этом возможно два случая:

- а) зародыши второй фазы Z к этому моменту так и не начнут выделяться – процесс зародышеобразования при данной температуре остановится;
- б) еще до этого момента начнут выделяться зародыши второй фазы. В этом случае будет образовываться эвтектика.

В случае быстрого непрерывного охлаждения расплава картина процесса усложняется. В зависимости от преимущественного выделения зародышей каждой из фаз при соответствующей температуре возможно колебательное изменение состава охлаждаемого раствора, например, выделение вначале зародышей фазы А, затем фазы Z, потом опять А и так далее.

Используемая математическая модель [5, 7], модифицированная применительно к рассматриваемому случаю, учитывает следующие факторы:

- а) образование зародышей новой фазы;
- б) их дальнейший рост;
- в) связанное с этим изменение концентрации компонентов расплава.

### Математическая модель

Уравнения интенсивности образования зародышей А:

$$q_{Ac} = \left( \frac{2\kappa_A}{3 \ln \varepsilon_A} \right)^3, \quad \kappa_A = (36\pi)^{1/3} (v_A^\Phi)^{2/3} \gamma_A / kT, \quad \varepsilon_A = \frac{a_A}{K_A}, \quad (1)$$

$$\Delta G(q_A) = kT \left( -q_A \ln \varepsilon_A + \kappa_A q_A^3 \right), \quad (2)$$

$$p_A = 4\pi R_{Ac} D \rho^\Psi N_a \frac{1-c}{M_A c}, \quad (3)$$

$$G_2^A = \frac{2}{9} \kappa_A q_{Ac}^{-4}, \quad (4)$$

$$J_A = N_0 p_A \sqrt{\frac{G_2^A}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\Delta G(q_{Ac})}{kT}\right). \quad (5)$$

Уравнения интенсивности образования зародышей Z:

$$q_{Zc} = \left(\frac{2\kappa_Z}{3 \ln \varepsilon_Z}\right)^3, \quad \kappa_Z = (36\pi)^{1/3} (v_Z)^{2/3} \gamma_Z / kT, \quad \varepsilon_Z = \frac{\alpha_1^{n_A} \alpha_2^{n_B}}{K_Z}, \quad (6)$$

$$\Delta G(q_Z) = kT \left(-q_Z \ln \varepsilon_Z + \kappa_Z q_Z^3\right), \quad (7)$$

$$p_Z = 4\pi R_{Zc} D \rho^\Psi N_a \left( (1-c) M_Z - M_A n_A \right) / \left( \frac{n_A}{1-c} - \frac{n_B}{c} \right), \quad (8)$$

$$G_2^Z = \frac{2}{9} \kappa_Z q_{Zc}^{-4}, \quad (9)$$

$$J_Z = N_0 p_Z \sqrt{\frac{G_2^Z}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\Delta G(q_{Zc})}{kT}\right), \quad (10)$$

где  $q$  – число молекул в зародыше,  $q_c$  – число молекул в критическом зародыше,  $\kappa$  – коэффициент поверхностной энергии,  $v$  – удельный объем зародыша,  $\gamma$  – межфазное натяжение на границе зародыш – расплав,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $a$  – активность соответствующего компонента,  $\varepsilon$  – пересыщение раствора по соответствующему зародышу,  $K$  – константа равновесия химической реакции образования зародыша,  $\Delta G(q)$  – изменение энергии Гиббса при образовании зародыша из  $q$  молекул,  $p$  – вероятность присоединения частицы реагента к поверхности критического зародыша,  $R_c$  – радиус критического зародыша,  $D$  – коэффициент диффузии компонента В в растворе,  $\rho$  – плотность,  $N_a$  – число Авогадро,  $c$  – массовая доля компонента В в растворе,  $M$  – молекулярная масса компонента,  $J$  – интенсивность образования зародышей,  $N_0$  – исходное число молекул в растворе,  $G_2$  – вторая производная от  $\Delta G(q)$ .

Уравнения, определяющие скорость роста частиц A:

$$1 - c_s = K_A \exp\left(\frac{2\kappa_A}{3q_A^{1/3}}\right), \quad (11)$$

$$b_A = 4\pi R_A D N_a \rho^\Psi \frac{c - c_s}{M_A c}. \quad (12)$$

Уравнения, определяющие скорость роста частиц Z:

$$(1 - c_s)^{n_A} c_s^{n_B} = K_Z \exp\left(\frac{2\kappa_Z}{3q_Z^{1/3}}\right), \quad (13)$$

$$b_Z = 4\pi R_Z D N_a \rho^\Psi \frac{c - c_s}{M_Z (1 - c_s) - M_A}, \quad (14)$$

где  $c_s$  – массовая доля компонента В у поверхности растущей частицы,  $b$  – скорость встраивания одной молекулы реагента к растущей частице.

Уравнения распределения частиц по размерам:

$$\frac{\partial N_A}{\partial t} + \frac{\partial (N_A b_A)}{\partial q} = 0, \quad q \in (q_{bA}, \infty), \quad (15)$$

$$\frac{\partial N_Z}{\partial t} + \frac{\partial (N_Z b_Z)}{\partial q} = 0, \quad q \in (q_{bZ}, \infty), \quad (16)$$

$$N_{bA} = -\frac{kT I_A}{p_A G'(q_{bA})}, \quad N_{bZ} = -\frac{kT I_Z}{p_Z G'(q_{bZ})}, \quad (17)$$

где  $q_b$  – граничный размер частицы, начиная с которого она подчиняется уже не микро-, а макрозаконам,  $N(t, q)$  – количество зародышей в системе,  $N_b = N(t, q_b)$  – количество зародышей граничного размера,  $G'$  – производная  $\Delta G(q)$ .

Уравнения баланса компонентов системы:

$$N_A^y(t) = N_0(1 - c_0^y) - \int_{q_{bA}}^{\infty} N_A(t, q) q dq - n_A \int_{q_{bB}}^{\infty} N_Z(t, q) q dq, \quad (18)$$

$$N_B^y(t) = N_0 c_0^y - n_B \int_{q_{bZ}}^{\infty} N_Z(t, q) q dq, \quad (19)$$

$$c = N_A^y M_A / (N_A^y M_A + N_B^y M_B), \quad (20)$$

где  $c_0^y$  – исходная мольная доля компонента В в расплаве.

Начальные условия:

$$N_A(0, q_A) = 0, N_Z(0, q_Z) = 0 \quad (q_{bA} \leq q_A < \infty, q_{bZ} \leq q_Z < \infty). \quad (21)$$

Для определения констант равновесия химических реакций при образовании зародышей, фиксируя значения  $\Delta h_{Fe}^0 = 12,35$  кДж/моль и  $\Delta h_{Fe_3B}^0 = 67,9$  кДж/моль [8] в эвтектической точке  $c_e = 0,17$ (ат.),  $T_e = 1447$  К, на основе выведенной полуэмпирической формулы

$$K = K(T_e) \exp\left(\frac{\Delta h^0}{R} \frac{T_e - T}{T T_e}\right) \quad (22)$$

рассчитывали значения констант равновесия для пересохлажденного расплава:

$$K_{Fe_3B} = 0,0972 \exp\left(-5,364 \frac{1447 - T}{T}\right), \quad K_{Fe} = 0,83 \exp\left(-1,03 \frac{1447 - T}{T}\right) \quad (23)$$

По уравнениям математической модели была построена соответствующая разностная задача, которая решалась на компьютере.

### Расчеты

Изложенная модель предполагает моментальное охлаждение расплава до заданной температуры, что практически недостижимо. Поэтому целью изложенных далее расчетов был анализ общих закономерностей кристаллизации в пересохлажденном расплаве. С другой стороны, при задании функции изменения температуры в выбранном микрообъеме расплава разработанная методика может быть применена для широкого круга технологических процессов. Так в работе [9] проводился расчет для изучения процесса получения аморфной ленты методом спиннингования расплава на медный барабан.

Использованные значения параметров приведены в таблице. Методика выбора физико-химических параметров системы обсуждалась в [7, 10].

Принятые в расчётах физические характеристики системы

Физико-химические характеристики для расплава	
1. Предэкспоненциальный множитель в уравнении для коэффициента диффузии $D_0$ , м <sup>2</sup> /с	6,297·10 <sup>-7</sup> (на основе [11])
2. Энергия активации диффузии бора в расплаве Fe–B, Дж/моль	80 000 (на основе [11])
Для зародышей железа в расплаве Fe–B	
3. Межфазное натяжение, Дж/м <sup>2</sup>	0,204 [12]
4. Удельный объем твердого железа, м <sup>3</sup> /кг	1,376462·10 <sup>-4</sup> [13]

5. Молярная масса железа, кг/моль	$55,85 \cdot 10^{-3}$ [14]
6. Теплопроводность твердого железа при температуре 1400 К, Вт/(м·К)	31,5 [15]
7. Температуропроводность твердого железа при температуре 1400 К, м <sup>2</sup> /с	$6,6 \cdot 10^{-6}$ [15]
8. Энтальпия кристаллизации железа, Дж/моль	-12 350 [16]
Для зародышей Fe <sub>3</sub> B в расплаве Fe–B	
9. Межфазное натяжение, Дж/м <sup>2</sup>	0,3 [17]
10. Удельный объем твердого бора [м <sup>3</sup> /кг]	$4,248 \cdot 10^{-4}$ [18]
11. Молярная масса бора [кг/моль]	$10,82 \cdot 10^{-3}$ [14]
12. Удельный объем твердого Fe <sub>3</sub> B, м <sup>3</sup> /кг	$1,398601 \cdot 10^{-4}$ [19]
13. Теплопроводность твердого Fe <sub>3</sub> B при температуре 1400 К, Вт/(м·К)	34 [20]
14. Температуропроводность твердого Fe <sub>3</sub> B при температуре 1400 К, м <sup>2</sup> /с	$2,02 \cdot 10^{-5}$ [20]
15. Энтальпия плавления, Дж/моль	-67 900 [8]

Расчеты выполнены для значительных переохлаждений расплава эвтектических ( $c_0^M = 0,17$ ) и околоэвтектических составов системы Fe–B. Расчет выполняли до момента 90 %-ной кристаллизации расплава. Для каждого момента времени рассчитывали количество образующихся в выбранной массе расплава (1 кг) зародышей каждой из фаз и определяли среднее расстояние между зародышами.

Результаты расчетов отражены на рис. 2. С первого момента начинается интенсивное образование зародышей кристаллов Fe и Fe<sub>3</sub>B. Образующиеся зародыши растут и к моменту времени  $10^{-3}$  с масса их становится ощутимой – доля закристаллизовавшегося расплава начинает расти. Интенсивность образования зародышей Fe вначале больше, чем интенсивность образования зародышей Fe<sub>3</sub>B. Выведение железа из жидкой фазы превышает выведение бора и, начиная с момента  $10^{-3}$  с, доля бора начинает ощутимо увеличиваться. В расплаве формируются более благоприятные условия для зарождения кристаллов Fe<sub>3</sub>B – интенсивность его образования начинает превышать интенсивность образования кристаллов Fe. Величина среднего расстояния между зародышами ( $\delta$ ) может дать информацию о расстояниях между слоями фаз в эвтектике.

С увеличением переохлаждения расплава увеличивается вязкость расплава, и, следовательно, уменьшаются коэффициенты диффузии компонентов. Условия для роста кристаллических зародышей существенно ухудшаются. При весьма больших переохлаждениях (до 750 К) образуется большое число ( $\sim 10^{17}$  кг<sup>-1</sup>) зародышей, которые не могут вырасти до размеров более 0,01 мкм. Такие зародыши сложно называть кристаллами, можно утверждать, что расплав затвердевает в аморфном (нанокристаллическом) состоянии.

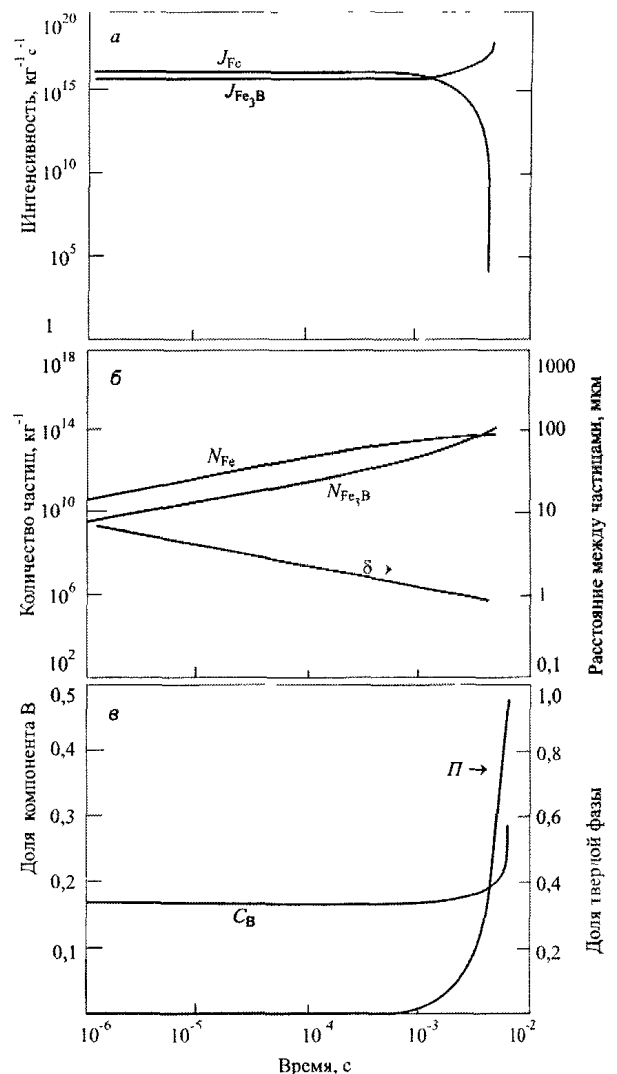


Рис. 2. Кинетика кристаллизации переохлажденного до температуры 1000 К расплава системы Fe–B с содержанием бора 17 % (моль):  $N$  – количество зародышей,  $J$  – интенсивность их образования,  $\delta$  – среднее расстояние между ними,  $\Pi$  – доля закристаллизовавшегося расплава,  $C_B$  – концентрация бора в расплаве

Проведенный расчет позволил определить среднее расстояние  $\delta$  между растущими зародышами, что, в принципе, можно сопоставить с размером эвтектической структуры.

## Выводы

1. Выполнено математическое описание процессов зарождения и роста зародышей в переохлажденном эвтектическом металлическом расплаве. Разработанная математическая модель позволяет учитывать влияние изменяющихся параметров системы на процессы образования и роста кристаллических зародышей в переохлажденном расплаве.

2. По уравнениям математической модели проведены расчеты затвердевания переохлажденного эвтектического расплава Fe–В для различных переохлаждений и концентраций бора. Выявлены закономерности кристаллизации при затвердевании переохлажденного эвтектического расплава.

## Литература

1. Avrami, M. Kinetics of Phase Change. I. General Theory / M. Avrami // Journal of Chemical Physics. – 1939. – Т. 7, № 12. – С. 1103–1113.

2. Avrami, M. Kinetics of Phase Change. II. Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei / M. Avrami // Journal of Chemical Physics. – 1940. – Т. 8, № 2. – С. 212–225.

3. Avrami, M. Kinetics of Phase Change. III. Granulation, Phase Change, and Microstructure / M. Avrami // Journal of Chemical Physics. – 1941. – Т. 9, № 2. – С. 177–185.

4. Колмогоров, А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов / А.Н. Колмогоров. – Изв. АН СССР, Серия математическая. – 1937. – № 3. – С. 355–358.

5. Дрозин, А.Д. Теоретический анализ образования неметаллических включений в жидком металле / А.Д. Дрозин // Изв. АН СССР. Металлы. – 1987. – № 6. – С. 19–22.

6. Производство аморфной и нанокристаллической ленты методом литья на одновалковой МНЛЗ. / И.И. Данилова, В.В. Маркин, О.В. Смолякова и др. // Электрометаллургия. – 2008. – № 6. – С. 25–30.

7. Дудоров, М. В. Теоретическое исследование начального периода кристаллизации эвтектических сплавов при сверхглубоком переохлаждении / М.В. Дудоров, А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин // Современные проблемы электрометаллургии стали: тез. докл. 10-й Междунар. конф. – Челябинск: ЮУрГУ, 1998. – С. 37–38.

8. Михайловский, Б.В. Оценка термодинамических функций кристаллизации аморфных сплавов системы Fe–Si–В / Б.В. Михайловский, И.Б. Куценок, В.А. Гейдериш // Журнал физической химии. – 1997. – Т. 71, № 3. – С. 409–414.

9. Образование и рост кристаллических зародышей в процессе аморфизации сплавов / М.В. Дудоров, А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.А. Жерсебцов // От булата до современных материалов: тезисы докладов международной конференции. – Курган: Изд.-во КГУ, 1999. – С. 33.

10. Дрозин, А.Д. Компьютерное моделирование процессов кристаллизации при затвердевании переохлажденного эвтектического расплава / А.Д. Дрозин, М.В. Дудоров, В.Е. Рошин // Компьютерное моделирование физико-химических свойств расплавов: тезисы докладов 5-го Российского семинара. – Курган: Изд.-во КГУ, 2000. – С. 51

11. Ершов, Г.С. Строение и свойства жидких и твердых металлов / Г.С. Ершов, В.Г. Черняков. – М.: Металлургия, 1978. – 248 с.

12. Задумкин, С.Н. Современные теории поверхностной энергии чистых металлов / С.Н. Задумкин // Известия АН СССР. Отделение технических наук. Металлургия и топливо. – 1965. – № 1. – С. 55 – 60.

13. Арсентьев, П.П. Металлические расплавы и их свойства / П.П. Арсентьев, Л.А. Коледов. – М.: Металлургия, 1976. – 376 с.

14. Эллиот, Д.Ф. Термохимия сталеплавильных процессов. / Д.Ф. Эллиот, М. Глейзер, В. Рамакришна. – М.: Металлургия, 1969. – 252 с.

15. Зиновьев, В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах / В.Е. Зиновьев. – М.: Металлургия, 1989. – 384 с.

16. Зайт, В. Диффузия в металлах / В. Зайт. – М.: Иностранная литература, 1958. – 382 с.

17. Маслов, В.В. Кинетика и механизм кристаллизации аморфного сплава Fe<sub>85</sub>B<sub>15</sub> в присутствии растворимых примесей / В.В. Маслов // Металлофизика и новейшие технологии. – 1997. – Т.19, №2. – С. 17–26.



18. Свойства элементов / М.Е. Дриц, П.Б. Будберг, Г.С. Бурханов и др. – М.: Металлургия, 1989. – 672 с.
19. Вол, А.Е. Стросние и свойства двойных металлических систем: в 4 т. / А.Е. Вол. – М.: Физматгиз, 1959. – Т. 1. – 755 с.
20. Определение критических условий охлаждения расплава  $Fe_{83}V_{17}$  при сверхбыстрой закалке в аморфное состояние / М.Х. Шоршоров, А.П. Куприн, А.А. Новакова и др. // Физика металлов и металловедение. – 1990. – № 9. – С. 130–135.
21. Дрозин, А.Д. Рост микрочастиц продуктов химических реакций в жидком растворе: монография / А.Д. Дрозин // Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. – 56 с.
22. Дрозин, А.Д. Химические потенциалы компонентов малых тел / А.Д. Дрозин // Расплавы. – 1990. – № 4. – С. 65–69.
23. Экспериментальная проверка методики расчета гомогенного образования включений в жидком металле / А.Д. Дрозин, А.В. Кузнецов, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Изв. АН СССР. Металлы. – 1991. – № 1. – С. 52–56.
24. Дрозин, А.Д. Общая теория зарождения продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин // Черная металлургия: научные проблемы и технические решения: Юбил. сб. науч. тр. – Челябинск: ЧГТУ, 1997. – С. 40–47.
25. Дудоров М.В. Теоретическое исследование механизма образования и роста зародышей в переохлажденных эвтектических расплавах / М.В. Дудоров, А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин // Уральская металлургия на рубеже тысячелетий: тез. докл. Междунар. науч.-техн. конф. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1999. – С. 113–114.
26. Дрозин, А.Д. Зарождения фаз в процессе кристаллизации растворов / А.Д. Дрозин, М.В. Дудоров, В.Е. Рошин // Стросние и свойства металлических и шлаковых расплавов: тез. докл. 9-й Всерос. конф. (15–18 сентября 1998 г., г. Екатеринбург). – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1998. – Т. 1. – С. 50.
27. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 1. Термодинамика зарождения / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Расплавы. – 1990. – № 2. – С. 97–103.
28. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 2. Равновесные концентрации зародышей / А.Д. Дрозин // Расплавы. – 1990. – № 3. – С. 116–120.
29. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 3. Вероятности переходных процессов / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Расплавы. – 1990. – № 5. – С. 8–14.
30. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 4. Интенсивность образования зародышей / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Расплавы. – 1990. – № 6. – С. 78–83.
31. Дрозин, А.Д. Исследование термодинамических закономерностей зарождения продуктов раскисления в жидком железе / А.Д. Дрозин, Д.Я. Поволоцкий, В.Е. Рошин // Изв. вузов. Черная металлургия. – 1976. – № 12. – С. 35–38.
32. Рошин, В.Е. Математический анализ термодинамических функций гомогенного зарождения продуктов химических реакций сложного состава в расплавах железа / В.Е. Рошин, А.Д. Дрозин // Современные проблемы электрометаллургии стали: труды 3 Всесоюз. науч. конф. – Челябинск: ЧПИ, 1977. – № 206. – С. 28–32.
33. Дрозин, А.Д. К термодинамике зарождения продуктов раскисления в жидком железе / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Вопросы производства и обработки стали: сб. трудов. – Челябинск: ЧПИ, 1980. – № 245. – С. 17–28.
34. Дрозин, А.Д. Химическое пересыщение расплава железа кислородом и раскислителем в момент образования окислов титана и кремния / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Современные проблемы электрометаллургии стали: тез. докл. 2 Всесоюз. науч. конф. – Челябинск, 1974. – С. 61–62.
35. Дрозин, А.Д. Математическая модель концентрационных условий зарождения и роста включений в жидком железе при встречной диффузии реагентов / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Вопросы производства и обработки стали. – Челябинск: ЧПИ, 1975. – № 163. – С. 45–53.

36. Концентрационные условия зарождения продуктов раскисления алюминисом, титаном и кремнием в жидком железе / Д.Я. Поволоцкий, В.Е. Рошин, А.Д. Дрозин, Ю.В. Сорокин // Изв. АН СССР. Металлы. – 1977. – № 2. – С. 43–48.

37. Рошин, В.Е. Определение интенсивности зарождения новой фазы при раскислении расплавов железа / В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий, А.Д. Дрозин // Вопросы производства и обработки стали: сб. трудов. – Челябинск: ЧПИ, 1980. – № 245. – С. 28–34.

38. Экспериментальное определение концентрационных условий зарождения продуктов раскисления железа титаном и кремнием / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий и др. // Вопросы производства и обработки стали сб. трудов. – Челябинск: ЧПИ, 1975. – № 163. – С. 54–63.

*Поступила в редакцию 4 марта 2012 г.*

## MATHEMATICAL DESCRIPTION OF THE NUCLEATION IN SUPERCOOLED EUTECTIC MELT

*A.D. Drozin<sup>1</sup>, M.V. Dudorov<sup>2</sup>, V.E. Roshchin<sup>3</sup>, P.A. Gamov<sup>4</sup>, L.D. Menikhes<sup>5</sup>*

Theoretical research and mathematical description of a supercooled eutectic melt are carried out. The special emphasis is placed on the mutual influence of dynamically changing parameters (concentrations of components and the temperature of the melt) on processes of formation and growth of crystal clusters of various phases in a supercooled melt. A mathematical description is obtained. The equations of the mathematical model are used to calculate nucleation and growth of crystal clusters in Fe-B melt at various initial concentrations of components and different supercooling. This allowed to receive new information about nucleation and crystallization eutectic melts.

*Keywords: nucleation, eutectic, supercooling, nucleation model, growth model.*

### References

1. Avrami M. Kinetics of Phase Change. I. General Theory. Journal of Chemical Physics. 1939. Vol. 7, Issue 12, p. 1103–1113. DOI:10.1063/1.1750380

2. Avrami M. Kinetics of Phase Change. II. Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei. Journal of Chemical Physics. 1940. Vol. 8, Issue 2, p. 212–225. DOI:10.1063/1.1750631

3. Avrami M. Kinetics of Phase Change. III. Granulation, Phase Change, and Microstructure. Journal of Chemical Physics. 1941. Vol. 9, Issue 2, p.177–185. DOI:10.1063/1.1750872

4. Kolmogorov A.N. K statisticheskoy teorii kristallizatsii metallov (Statistical theory of crystallization of metals). *Izv. AN SSSR, Seriya matematicheskaya*. 1937. no. 3. pp. 355–358. (in Russ.).

5. Drozin A.D. Teoreticheskij analiz obrazovaniya nemetallicheskih vkljuchenij v zhidkom metalle (Theoretical analysis of the formation of nonmetallic inclusions in the liquid metal) // *Izv. AN SSSR. Metally*. 1987. no. 6. pp. 19–22. (in Russ.).

6. Danilova I.I., Mapkin V.V., Smoljakova O.V., Roshhin V.E., Il'in S.I., Goykhenbeg Yu.N., Proizvodstvo amorfnojj i nanokristallicheskojj lenty metodom lit'ja na odnovalkovojj MNLZ (Production of amorphous and nanocrystalline tape casting method for single roller casters). *Ehlektrometallurgija*. 2008. no. 6. pp. 25–30. (in Russ.).

7. Dudorov M.V., Drozin A.D., Roshhin V.E. Teoreticheskoe issledovanie nachal'nogo perioda kristallizatsii ehvtekticheskikh splavov pri sverkhglubokom pereokhlazhdenii (Theoretical study of the

<sup>1</sup> Drozin Aleksandr Dmitrievich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Head of the Mathematical Analysis Department, Head of the Faculty of Mathematics and Mechanics, South Ural State University.

E-mail: drozin@mail.ru

<sup>2</sup> Dudorov Maksim Vladimirovich is Cand. Sc. (Engineering), Pyrometallurgical Processes Department, South Ural State University.

e-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>3</sup> Roshin Vasilij Efimovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Head of the Pyrometallurgical Processes Department, South Ural State University.

E-mail: vero@met.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Gamov Pavel Aleksandrovich is Post-graduate Student, Pyrometallurgical Processes Department, South Ural State University.

E-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>5</sup> Menikhes Leonid Davidovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of Functional Analysis Department, South Ural State University.

E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

initial period of solidification of eutectic alloys at very deep undercooling) // *Tez. dokl. 10-ij Mezhdunar. konf. "Sovremennye problemy ehlektrometallurgii stali"*. Cheljabinsk, JuUrGU, 1998. pp. 37–38. (in Russ.).

8. Mikhajlovskij B.V., Kucenok I.B., Gejjderikh V.A. Ocenka termodinamicheskikh funkcij kristallizacii amorfnykh splavov sistemy Fe–Si–B (Evaluation of thermodynamic functions of crystallization of amorphous alloys of the Fe–Si–B). *Zhurnal fizicheskij khimii*. 1997. Vol. 71, no. 3. pp. 409–414. (in Russ.).

9. Dudorov M.V., Drozin A.D., Roshhin V.E., Zherebcov D.A. Obrazovanie i rost kristallicheskich zarodyshejj v processe amorfizacii splavov (Formation and growth of crystal nuclei in the amorphous alloys). *Tezisy dokladov mezhdunarodnoj konf. "Ot bulata do sovremennykh materialov"*. Kurgan. Izd.-vo KGU, 1999. p. 33. (in Russ.).

10. Drozin A.D., Dudorov M.V., Roshhin V.E. Komp'juternoe modelirovanie processov kristallizacii pri zatverdevanii pereokhlazhdenogo ehvtekticheskogo rasplava (Computer simulation of crystallization processes during solidification of undercooled eutectic melt). *Tezisy dokladov 5-go rossijskogo seminar. "Komp'juternoe modelirovanie fiziko-khimicheskikh svojstv rasplavov"*. Kurgan: Izd.-vo KGU, 2000. p. 51. (in Russ.).

11. Ershov G.S., Chernjakov V.G. Stroenie i svojstva zhidkikh i tverdykh metallov (Structure and properties of liquid and solid metals). Moscow, Metallurgija, 1978. 248 p. (in Russ.).

12. Zadumkin S.N. Sovremennie teorii poverhnostnoj energii chistih metallov (Modern theories of the surface energy of pure metals). *Izvestija AN SSSR. Otdelenie tekhnicheskikh nauk. Metallurgija i toplivo*. 1965. no. 1. p. 55. (in Russ.).

13. Arsent'ev P.P., Koledov L.A. Metallicheskie raspilavy i ikh svojstva (The metal melts and their properties). Moscow, Metallurgija, 1976. 376 p. (in Russ.).

14. Elliot F., Gleiser M., Ramakrishna V. Thermo chemistry of steel making processes . Moscow, Metallurgiya, 1969. 252 p. (in Russ.). [Elliott J.F., Gleiser M., Ramakrishna V. Thermochemistry for Steelmaking. Vol. II. Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Mass. 1963.]

15. Zinov'ev V.E. *Teplofizicheskie svojstva metallov pri vysokikh temperaturakh* (Thermophysical properties of metals at high temperatures). Moscow, Metallurgija, 1989. 384 p. (in Russ.).

16. Zajjt V. *Diffuzija v metallakh* (Diffusion in Metals). Moscow, Inostrannaja literatura, 1958. 382 p. (in Russ.). [Seith W. Diffusion in Metallen (platzwechselreakti). Springer-Verlag. 1955. 306 p. (in Germ.).]

17. Maslov V.V. Kinetika i mekhanizm kristallizacii amorfno go splava  $Fe_{85}B_{15}$  v prisutstvii rastvorimyx primesejj (Kinetics and mechanism of crystallization of amorphous alloy  $Fe_{85}B_{15}$  in the presence of soluble impurities). *Metallofizika i novejjshie tekhnologii*. 1997. Vol. 19, no. 2. pp. 17–26. (in Russ.).

18. Dric M.E. *Svojstva ehlementov* (Properties of Elements: A Handbook). Moscow, Metallurgija, 1989. 672 p. (in Russ.).

19. Vol A.E. *Stroenie i svojstva dvojjnykh metallicheskich sistem: v 4-kh t* (Structure and properties of binary metal systems: in 4 volumes). M.: Fizmatgiz, 1959. Vol. 1. 755 p. (in Russ.).

20. Shorshorov M.X., Kuprin A.P., Novakova A.A., Sidorova G.V., Sirotinina G.A., Kharat'jan S.I. Opredelenie kriticheskikh uslovijj okhlazhdenija raspilava  $Fe_{83}B_{17}$  pri sverkhbystrojj zakalke v amorfnoe sostojanie (Determination of critical conditions for the cooling of the melt  $Fe_{83}B_{17}$  ultrafast quenching to the amorphous state). *Fizika metallov i metallovedenie*. 1990. no. 9. pp. 130–135. (in Russ.).

21. Drozin A.D. *Rost mikrochastich produktov khimicheskikh reakcij v zhidkom rastvore: monografija* (The growth of micro products of chemical reactions in liquid solution: monograph). Cheljabinsk: Izd.-vo JuUrGU, 2007. 56 p. (in Russ.).

22. Drozin A.D. Khimicheskie potencialy komponentov malykh tel (The chemical potentials of components of small bodies). *Raspilavy*. 1990. № 4. pp. 65–69. (in Russ.).

23. Drozin A.D., Kuznecov A.V., Roshhin V.E., Povolockij D.Ya. Ehksperimental'naja proverka metodiki rascheta gomogennogo obrazovanija vkljuchenijj v zhidkom metalle (Experimental verification of the calculation method of homogeneous formation of inclusions in liquid metal). *Izv. AN SSSR. Metallurgija*. 1991. no. 1. pp. 52–56. (in Russ.).

24. Drozin A.D., Roshhin V.E. *Obshhaja teorija zarozhdenija produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh* (The general theory of the origin of products heterophase

chemical reactions in liquid solutions). *Chernaja metallurgija: nauchnye problemy i tekhnicheskie reshenija*: Jubil. sb. nauch. tr. Cheljabinsk: ChGTU, 1997. pp. 40–47. (in Russ.).

25. Dudorov M.V., Drozin A.D., Roshhin V.E. *Teoreticheskoe issledovanie mekhanizma obrazovanija i rosta zarodyshejj v pereokhlazhdennykh ehvtekticheskikh rasplavakh* (Theoretical study of the mechanism of nucleation and growth in undercooled eutectic melts) // *Ural'skaja metallurgija na rubezhe tysjacheletijj*: Tez. dokl. Mezhdunar. nauch.-tekhn. konf. (Proceedings of Internat. scientific and engineering conference “Ural Metallurgy at the Millennium”). Cheljabinsk: JuUrGU, 1999. pp. 113–114. (in Russ.).

26. Drozin A.D., Dudorov M.V., Roshhin V.E. *Zarozhdenie faz v processe kristallizacii rastvorov* (The origin of the phases in the process of crystallization solutions / Structure and properties of metal and slag melts) / *Stroenie i svojstva metallicheskih i shlakovykh rasplavov*: Tez. dokl. 9-ij Vseros. konf. (15–18 sentjabrja 1998 g., g. Ekaterinburg) (Proceedings of 9th All-Russian conference “Structure and properties of metal and slag melts” (15–18 September 1998, Ekaterinburg)). Cheljabinsk: JuUrGU, 1998. Vol. 1. p. 50. (in Russ.).

27. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh. 1. Termodinamika zarozhdenija* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 1. Thermodynamics of nucleation). *Rasplavy*. 1990. no. 2. pp. 97–103. (in Russ.).

28. Drozin A.D. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh. 2. Ravnovesnye koncentracii zarodyshejj* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 2. The equilibrium concentration of nuclei). *Rasplavy*. 1990. no. 3. pp. 116–120. (in Russ.).

29. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh. 3. Verojatnosti perekhodnykh processov* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 3. The probabilities of transition processes). *Rasplavy*. 1990. no. 5. pp. 8–14. (in Russ.).

30. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh. 4. Intensivnost' obrazovanija zarodyshejj* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 4. The intensity of the nucleation). *Rasplavy*. 1990. no. 6. pp. 78–83. (in Russ.).

31. Drozin A.D., Povolockijj D.Ya., Roshhin V.E. *Issledovanie termodinamicheskikh zakonomenostej zarozhdenija produktov raskislenija v zhidkom zheleze* (The study of the thermodynamic laws of nucleation of deoxidation products in liquid iron). *Izv. vuzov. Chernaja metallurgija*. 1976. no. 12. pp. 35–38. (in Russ.).

32. Roshhin V.E., Drozin A.D. *Matematicheskijj analiz termodinamicheskikh funkcijj gomogenogo zarozhdenija produktov khimicheskikh reakcij slozhnogo sostava v rasplavakh zheleza* (Mathematical analysis of the thermodynamic functions of homogeneous nucleation of chemical reactions of complex composition in molten iron) // *Sovremennye problemy ehlektrometallurgii stali: trudy 3 Vsesojuzn. nauch. konf. ChPI*. (Proceedings of the 3rd All-Union scientific conference “Current problems electrometallurgy steel”. ChPI). Cheljabinsk, 1977. no. 206. pp. 28–32. (in Russ.).

33. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *K termodinamike zarozhdenija produktov raskislenija v zhidkom zheleze* (To the thermodynamics of nucleation of deoxidation products in liquid iron). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1980. no. 245. pp. 17–28. (in Russ.).

34. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *Khimicheskoe peresyshhenie rasplava zheleza kislorodom i raskislitelem v moment obrazovanija okislov titana i kremnija* (Chemical oxygen supersaturation of the molten iron and deoxidizing agents at the time of formation of oxides of titanium and silicon). *Sovremennye problemy ehlektrometallurgii stali: Trudy 2 Vsesojuzn. nauch. konf. ChPI*. (Proceedings of the 2nd All-Union scientific conference “Current problems electrometallurgy steel”. ChPI). – Cheljabinsk, 1974. pp. 61–62. (in Russ.).

35. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *Matematicheskaja model' koncentracionnykh uslovijj zarozhdenija i rosta vkljuchenijj v zhidkom zheleze pri vstrechnojj diffuzii reagentov* (A mathematical model of the concentration conditions of nucleation and growth of inclusions in liquid iron at the counter diffusion of the reactants). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1975. no. 163. pp. 45–53. (in Russ.).

36. Povolockijj D.Ja., Roshhin V.E., Drozin A.D., Sorokin Ju.B. Koncentracionnye uslovija zarozhdenija produktov raskislenija aljumiem, titanom i kremniem v zhidkom zheleze (Concentration conditions for the birth products of deoxidation with aluminum, titanium and silicon in liquid iron). *Izv. AN SSSR. Metally*. 1977. no. 2. pp. 43–48. (in Russ.).

37. Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya., Drozin A.D. Opredelenie intensivnosti zarozhdenija novojj fazy pri raskislenii rasplavov zheleza (Determination of the birth of a new phase in the deoxidation of molten iron). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1980. no. 245. pp. 28–34. (in Russ.).

38. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya., Sorokin Ju.V., Povolockijj V.D. Eksperimental'noe opredelenie koncentracionnykh uslovijj zarozhdenija produktov raskislenija zheleza titanom i kremniem (Experimental determination of the concentration conditions for the nucleation of deoxidation products of iron titanium and silicon). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1975. no. 163. pp. 54–63. (in Russ.).

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТОДОМ ВИРТУАЛЬНЫХ ОБЪЕМОВ

*М.В. Дудоров*<sup>1</sup>, *А.Д. Дрозин*<sup>2</sup>, *В.Е. Рощин*<sup>3</sup>, *П.А. Гамов*<sup>4</sup>, *Л.Д. Менихес*<sup>5</sup>

С использованием метода виртуальных объемов дано математическое описание кристаллизации многокомпонентного металлического расплава. Учтено взаимное влияние динамически изменяющихся параметров – концентрации компонентов и температуры расплава – на процессы образования и роста зародышей. Получена зависимость, описывающая скорость роста кристалла с учетом тепловых и диффузионных эффектов.

*Ключевые слова:* зарождение кристаллов, эвтектические сплавы, переохлаждение, модель образования зародышей, модель роста зародышей.

**Введение.** Описание кристаллизации многокомпонентного расплава связано с существенными трудностями. Задача предполагает изучение взаимосвязанных процессов роста всех кристаллов в расплаве. Существуют разнообразные подходы к решению задачи [1]. Традиционно для описания кристаллизации металлических расплавов используются методы [2–5], построенные на основе упрощенных моделей независимого роста характерных групп кристаллов. Для учета взаимодействия между кристаллами используются дополнительные эмпирические коэффициенты, что позволяет получить удовлетворительные результаты для конкретных практических задач. В серии работ [6–26] авторами настоящей статьи разработаны математические модели процессов кристаллизации многокомпонентных расплавов, учитывающие влияние динамического изменения характеристик расплава на группы кристаллов различного размера.

Особенностью процессов зарождения новой фазы в метастабильных многокомпонентных расплавах является образование большого количества близко расположенных центров кристаллизации. В качестве практических примеров можно привести процессы кристаллизации при глубоких переохлаждениях эвтектических расплавов или кристаллизацию нагреваемых аморфных металлических материалов. Изменения концентрации компонентов и температуры расплава вблизи поверхности растущего кристалла в таких системах оказывают существенное влияние на рост соседних кристаллов. Указанные изменения необходимо учитывать при построении общей модели. Настоящая работа посвящена развитию разработанных авторами методов применительно к кристаллизации метастабильных металлических расплавов.

**Определение виртуальных объемов.** Рассмотрим кристалл, растущий в многокомпонентном расплаве. Для упрощения примем сферическую систему координат с началом в центре растущей частицы (рис. 1),  $R$  – эффективный радиус кристалла. Также примем распределение параметров системы сферически симметричным. Для удобства используем символ  $\Psi$  для обозначения фазы расплава и  $\Phi$  – фазы зародыша.

Пусть в растворе присутствует  $n$  компонентов  $A_1, A_2, \dots, A_n$ , тогда рост кристалла будет определяться  $n$  процессами межфазового перехода компонентов через поверхность кристалла:

$$A_1^\Psi \longrightarrow A_1^\Phi,$$

<sup>1</sup> Дудоров Максим Владимирович – кандидат технических наук, кафедра пирометаллургических процессов, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>2</sup> Дрозин Александр Дмитриевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой математического анализа, декан механико-математического факультета, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: drozin@mail.ru

<sup>3</sup> Рощин Василий Ефимович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой пирометаллургических процессов, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: vero@met.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Гамов Павел Александрович – аспирант, кафедра пирометаллургических процессов, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>5</sup> Менихес Леонид Давидович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

$$A_2^\Psi \longrightarrow A_2^\Phi, \quad (1)$$

.....

$$A_n^\Psi \longrightarrow A_n^\Phi.$$

Вблизи поверхности растущего кристалла изменяется температура расплава и концентрация его компонентов. При значительном удалении от поверхности кристалла температура и концентрация достигают некоторых средних значений для данного расплава. Процессы у поверхности кристалла протекают значительно быстрее, чем глобальные изменения температуры и концентрации компонентов в расплаве. Поэтому, в случае если кристаллы зарождаются на значительном расстоянии друг от друга и не оказывают влияние на рост друг друга, систему кристалл–расплав можно считать изолированной.

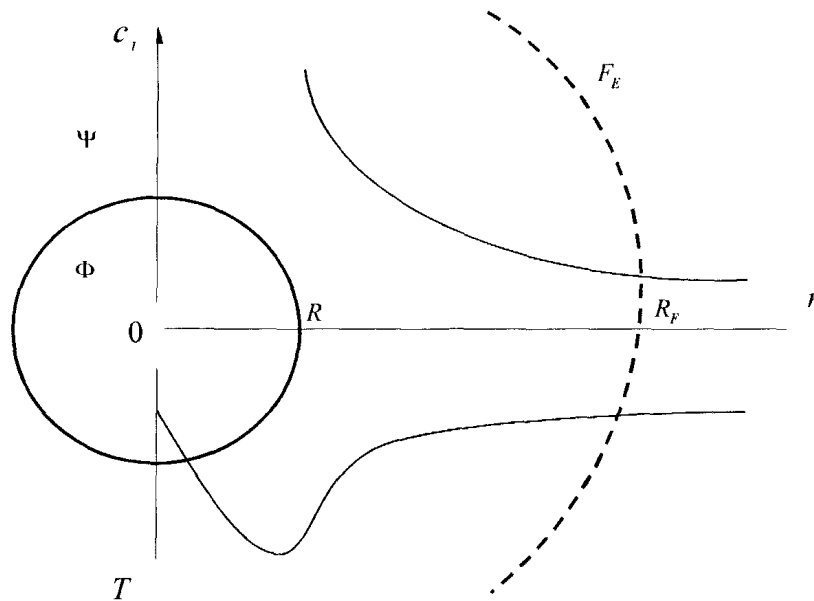


Рис. 1. Изменение концентрации компонента расплава и температуры вблизи растущего зародыша

Опишем систему более детально. Выделим объем  $V_s$  (далее объем  $V_s$ , с определенным допущением, будем называть равновесным объемом), заключенный в сфере с центром в центре кристалла и радиусом  $R_s$  существенно большим  $R$ , т.е.  $R_s \gg R$ . Тогда без учета глобальных изменений переменных можно принять:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{R_s} = 0, \quad (2)$$

$$\left. \frac{\partial c_i}{\partial r} \right|_{R_s} = 0, \quad i = 1 \dots n-1, \quad (3)$$

где  $T$  – температура,  $c_i$  – концентрация  $i$ -го компонента.

Такое описание является весьма удобным. При построении модели кристаллизации системы мы изучаем изолированные объемы  $V_s$  и оцениваем глобальное изменение концентрации компонентов системы с учетом изменения массы этих компонентов в фазе  $\Phi$ . Однако такое возможно лишь при существенной изолированности кристаллов, и не совсем подходит для нашей системы. Такой подход приводит к двум ключевым проблемам.

1. Расстояние между кристаллами может быть меньше  $R_s$ . Необходимо дополнительно оценивать влияние взаимного роста кристаллов.
2. При большом количестве небольших расположенных рядом кристаллов изменение концентрации у поверхности зародыша существенно влияет на глобальное изменение концентрации компонентов расплава.

Для учета указанных эффектов введем дополнительную сферическую поверхность  $F_E$  радиусом  $R_E$ , который выберем из соображения:

$$R < R_E < R_S, \quad \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{R_E} \neq 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_R \gg \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{R_E}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial r} \Big|_{R_E} \neq 0, \quad \frac{\partial c_i}{\partial r} \Big|_R \gg \frac{\partial c_i}{\partial r} \Big|_{R_E}, \quad i=1..n. \quad (5)$$

Будем считать, что изменение температуры и концентрации компонентов на поверхности  $F_E$  несущественно влияет на протекание внутри поверхности процессов. Будем для сокращения называть поверхность  $F_E$  виртуальной поверхностью, а объем  $V_E$  – виртуальным объемом.

При росте зародыша будет соответственно увеличиваться виртуальный объем. Для удобства примем  $R_E = kR$ , где  $k$  – постоянный, неизменяемый во времени коэффициент пропорциональности.

**Описание кристаллизации расплава.** Выделим произвольный объем расплава. Будем рассматривать изменение числа зародышей в пространстве их размеров  $q^\Phi$  (число молекул в зародыше) во времени  $t$ . При этом будем учитывать, что одновременно (в силу соотношения  $R_E = kR$ ) изменяется  $q^\Psi = q^\Psi(q^\Phi)$  – количество молекул фазы  $\Psi$  этого виртуального объема. Пусть  $N(t, q^\Phi)$  – такая величина, что для малого интервала  $\Delta q^\Phi$  размеров зародышей произведение  $N(t, q^\Phi) \Delta q^\Phi$  равно числу зародышей, находящихся в выбранном объеме и имеющих размер от  $q^\Phi$  до  $q^\Phi + \Delta q^\Phi$ . Можно показать, что величины  $N(t, q)$  подчиняются уравнению переноса в пространстве размеров  $q^\Phi$ :

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial (N b)}{\partial q^\Phi} = 0, \quad (6)$$

где  $b(t, q^\Phi)$  – скорость роста зародыша.

Примуществом рассматриваемого подхода является возможность определять количество образующихся зародышей и их размеры для каждой из фаз в произвольный момент времени, что позволяет определять значения концентрации компонентов в произвольный момент времени. Так количество молекул  $i$ -го компонента, оставшихся в растворе, не вошедших в виртуальные объемы, равно

$$N_i^l(t) = N_0 \tilde{c}_{\Sigma_i}^0 - \int_{q_\Gamma}^{\infty} N_i^\Phi(t, q^\Phi) (\tilde{c}_{\Sigma_i}^\Phi q^\Phi + \tilde{c}_{\Sigma_i}^\Psi q^\Psi(q^\Phi)) dq^\Phi, \quad (7)$$

$$\tilde{c}_{\Sigma_i} = \frac{N_i^l(t)}{\sum_{j=1}^n N_j^l(t)}, \quad (8)$$

где  $N_0$  – исходное количество молекул в растворе,  $q_\Gamma$  – выбранный граничный размер зародышей, начиная с которого действуют макроскопические законы роста,  $\tilde{c}_{\Sigma_i}^0$  – исходная мольная доля  $i$ -го компонента в растворе,  $\tilde{c}_{\Sigma_i}^\Phi$  и  $\tilde{c}_{\Sigma_i}^\Psi$  – средняя мольная доля  $i$ -го компонента соответственно в фазе  $\Phi$  и фазе  $\Psi$  всего данного виртуального объема,  $\tilde{c}_{\Sigma_i}$  – средняя мольная доля  $i$ -го компонента в расплаве.

Дополняя полученные соотношения уравнениями интенсивности образования и скорости роста зародышей, а также уравнениями, описывающими граничные условия, получим математическую модель кристаллизации расплава.



**Скорость роста кристалла.** Рост кристаллов является сложным многопараметрическим процессом. Для упрощения будем рассматривать процесс распределения температуры и компонентов расплава в фазе  $\Psi$  виртуального объема как стационарный процесс. Воспользуемся уравнением диффузии в сферической системе координат:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial c_i}{\partial r} \right). \quad (9)$$

Примем допущения:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = 0, \quad (10)$$

$$c_i(t, R) = c_{Ei}, \quad c_i(t, R_k) = c_{\Sigma i}, \quad (11)$$

где  $c_{Ei}$  – равновесная концентрация компонента в расплаве.

Тогда, с учетом  $R_E = kR$ , уравнение (9) преобразуется к виду:

$$r^2 \frac{\partial c_i}{\partial r} = A, \quad c_i = -\frac{A}{r} + B,$$

где  $A$  и  $B$  – константы интегрирования. При  $r = R$

$$B = \frac{A}{R} + c_{Ei}, \quad c_i = A \left( \frac{r - R}{rR} \right) + c_{Ei}, \quad (12)$$

при  $r = R_E$

$$c_{\Sigma i} = A \left( \frac{kR - R}{kR^2} \right) + c_{Ei}, \quad c_i = \frac{k}{k-1} (c_{\Sigma i} - c_{Ei}) \left( \frac{r - R}{r} \right) + c_{Ei}$$

или

$$c_i = -\frac{k}{k-1} (c_{\Sigma i} - c_{Ei}) \frac{R}{r} + \frac{k}{k-1} (c_{\Sigma i} - c_{Ei}) + c_{Ei}. \quad (13)$$

Используя выражение (13), находим производные от концентрации компонентов, которые понадобятся нам позднее:

$$\left. \frac{\partial c_i}{\partial r} \right|_{r=R} = \left( \frac{k}{k-1} (c_{\Sigma i} - c_{Ei}) \frac{R}{r^2} \right) \Big|_{r=R} = \frac{k}{k-1} \frac{c_{\Sigma i} - c_{Ei}}{R}, \quad (14)$$

$$\left. \frac{\partial c_i}{\partial r} \right|_{r=R_E} = \frac{1}{k(k-1)} \frac{c_{\Sigma i} - c_{Ei}}{R}. \quad (15)$$

Для нахождения скорости роста кристалла при изучении равновесного объема  $V$ , было бы достаточно рассчитать скорость изменения концентрации компонентов и температуры у поверхности.

В случае виртуального объема частные производные  $\left. \frac{\partial c_i}{\partial r} \right|_{r=R}$  и  $\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R}$  зависят как от  $r$ ,

так и от  $k$ . Изменение температуры и концентрации компонентов определяется положением виртуальной поверхности.

Для получения требуемых уравнений рассмотрим случай, когда  $R_E = R_S$ , т.е. границы равновесного и виртуального объемов совпадают. Тогда мы можем считать систему изолированной в рамках принятых ранее допущений. Тогда в соответствии с принципом минимального производства энтропии Пригожина [7] вариация полного производства энтропии системы равна нулю:

$$\delta P = 0.$$

Ключевым допущением нашего подхода будет выполнение этого уравнения для виртуального объема меньшего равновесного объема. Применим принцип минимального производства энтропии для описания виртуального объема. При этом в отличие от традиционного подхода [7] будем рассматривать производство энтропии как функцию  $P(R, \dot{R})$  радиуса кристалла и его скорости, а наш зародыш как растущее сферическое макротело. Для доказательства допустимости такого подхода рассмотрим растущий зародыш на небольшом интервале времени от  $t_1$  до  $t_2$ . Каждому  $R$  соответствует значение  $P$ , значение функции однозначно определяется ее переменными  $R$  и  $\dot{R}$ . При этом выполняется принцип инвариантности относительно направления течения времени.

Такое описание сближает подход с классическими вариационными методами механики. На небольшом участке времени можно говорить, что значение функции  $P$  однозначно определяется значениями двух переменных  $R$  и  $R$ . Используя уравнение Эйлера–Лагранжа [8], варьируем  $P$ :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial P}{\partial \dot{R}} - \frac{\partial P}{\partial R} = 0. \quad (16)$$

Вспользуемся следующим выражением для  $P$  [10, 27]. Полное производство энтропии в системе состоит из трёх составных частей: производства энтропии  $\sigma^\Phi$  в фазе  $\Phi$ , производства энтропии в фазе  $\Psi$  с интенсивностью  $\sigma^\Psi$  и производства энтропии на поверхности раздела фаз  $\Phi$  и  $\Psi$ :

$$P = \int_{V^\Phi} \sigma^\Phi dV + \int_{V^\Psi} \sigma^\Psi dV + \int_{F^\Phi} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) dF, \quad (17)$$

$$\sigma^\Phi = \bar{J}_q^\Phi \cdot \overline{\text{grad}} \left( \frac{1}{T} \right) - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \bar{J}_i^\Phi \cdot \sum_{j=1}^{n-1} (\mu_{ij}^\Phi - \mu_{nj}^\Phi) \overline{\text{grad}} c_j, \quad (18)$$

$$\sigma^\Psi = \bar{J}_q^\Psi \cdot \overline{\text{grad}} \left( \frac{1}{T} \right) - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \bar{J}_i^\Psi \cdot \sum_{j=1}^{n-1} (\mu_{ij}^\Psi - \mu_{nj}^\Psi) \overline{\text{grad}} c_j, \quad (19)$$

где  $I_i$  – мольная скорость образования продукта на единице площади поверхности раздела фаз  $\Phi$  и  $\Psi$ ;  $A_i$  – химическое сродство  $i$ -го межфазового перехода;  $J_i = -\rho^\Phi D_i^\Phi \frac{\partial c_i^\Phi}{\partial r}$  – плотность диффузионного потока  $i$ -го компонента в сферической системе координат;  $J_q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r}$  – плотность теплового потока;  $\mu_{ij} = \frac{\partial \mu_i}{\partial c_j}$ ,  $\mu_i$  – химический потенциал  $i$ -го компонента.

Из выражений (17)–(19) следует, что  $\frac{d}{dt} \frac{\partial P}{\partial \dot{R}} = 0$  и, следовательно,

$$\frac{\partial P}{\partial R} = 0. \quad (20)$$

Таким образом, имеем стационарное состояние с минимальным производством энтропии.

Применяя формулу Остроградского–Гаусса преобразуем уравнения (17), (20) к виду:

$$\frac{\partial}{\partial R} \left( \int_{V^\Phi} \left[ \sigma^\Phi + \text{div} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \right] dV + \int_{V^\Psi} \sigma^\Psi dV \right) = 0. \quad (21)$$

Учитывая сферическую систему координат, получаем:

$$\frac{\partial}{\partial R} \left( \int_0^R 4\pi \left[ r^2 \sigma^\Phi + r^2 \text{div} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \right] dV + \int_R^{kR} 4\pi r^2 \sigma^\Psi dV \right) = 0 \quad (22)$$

или

$$R^2 \sigma^\Phi \Big|_{r=R} + R^2 \text{div} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \Big|_{r=R} + \frac{k \partial}{\partial k R} \int_0^{kR} r^2 \sigma^\Psi dV - \frac{\partial}{\partial R} \int_0^R r^2 \sigma^\Psi dV = 0, \quad (23)$$

$$\sigma^\Phi \Big|_{r=R} + \text{div} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \Big|_{r=R} + k^3 \sigma^\Psi \Big|_{r=kR} - \sigma^\Psi \Big|_{r=R} = 0. \quad (23)$$

Разберем часть выражения (23):

$$\sigma^\Phi \Big|_{r=R} + k^3 \sigma^\Psi \Big|_{r=kR} - \sigma^\Psi \Big|_{r=R}. \quad (24)$$

Выражение состоит из двух групп слагаемых.

1. Тепловые эффекты:

$$\begin{aligned}
 & -\lambda^\Phi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R-0} \left( -\frac{1}{T^2} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} + \lambda^\Psi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R+0} \left( -\frac{1}{T^2} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} - k^3 \lambda^\Psi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=kR+0} \left( -\frac{1}{T^2} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=kR} = \\
 & = \sum_{i=1}^n \frac{I_i \Delta H_i}{T^2} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} - k^3 \lambda^\Psi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=kR+0} \left( -\frac{1}{T^2} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=kR}. \quad (25)
 \end{aligned}$$

2. Диффузионные эффекты:

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} (\mu_{ij}^\Phi - \mu_{nj}^\Phi) \rho^\Phi D_i^\Phi \frac{\partial c_i^\Phi}{\partial r} \frac{\partial c_j^\Phi}{\partial r} \right]_{r=R} - \left[ \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} (\mu_{ij}^\Psi - \mu_{nj}^\Psi) \rho^\Psi D_i^\Psi \frac{\partial c_i^\Psi}{\partial r} \frac{\partial c_j^\Psi}{\partial r} \right]_{r=R} + \\
 & + \left[ k^3 \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} (\mu_{ij}^\Psi - \mu_{nj}^\Psi) \rho^\Psi D_i^\Psi \frac{\partial c_i^\Psi}{\partial r} \frac{\partial c_j^\Psi}{\partial r} \right]_{r=kR}. \quad (26)
 \end{aligned}$$

Преобразуем оставшуюся часть выражения (26). При этом будем учитывать, что

$$\begin{aligned}
 \mu_{ij}^\Psi & = \frac{\partial \mu_i}{\partial c_j} = \frac{\partial (\mu_i^0 + R_\Gamma T \ln c_i^\Psi)}{\partial c_j} = \frac{R_\Gamma T}{c_i^\Psi} \quad (\text{при } i=j) \text{ или } = 0 \quad (\text{при } i \neq j). \\
 & - \left[ \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \mu_{ii}^\Psi \rho^\Psi D_i^\Psi \left( \frac{\partial c_i^\Psi}{\partial r} \right)^2 \right]_R + \left[ \frac{k^3}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \mu_{ii}^\Psi \rho^\Psi D_i^\Psi \left( \frac{\partial c_i^\Psi}{\partial r} \right)^2 \right]_{kR} = \\
 & = - \left[ R_\Gamma \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\rho^\Psi}{c_i^\Psi} D_i^\Psi \left( \frac{\partial c_i^\Psi}{\partial r} \right)^2 \right]_R + \left[ k^3 R_\Gamma \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\rho^\Psi}{c_i^\Psi} D_i^\Psi \left( \frac{\partial c_i^\Psi}{\partial r} \right)^2 \right]_{kR}.
 \end{aligned}$$

С учетом (14) и (15) получаем

$$\begin{aligned}
 & -R_\Gamma \rho^\Psi \sum_{i=1}^{n-1} \frac{D_i^\Psi}{c_{Ei}^\Psi} \left( \frac{k}{k-1} \frac{c_{\Sigma i} - c_{Ei}}{R} \right)^2 + k^3 R_\Gamma \rho^\Psi \sum_{i=1}^{n-1} \frac{D_i^\Psi}{c_{\Sigma i}^\Psi} \left( \frac{1}{k(k-1)} \frac{c_{\Sigma i} - c_{Ei}}{R} \right)^2 = \\
 & = R_\Gamma \rho^\Psi \sum_{i=1}^{n-1} D_i^\Psi \left( \frac{k}{k-1} \frac{c_{\Sigma i} - c_{Ei}}{R} \right)^2 \left( \frac{1}{c_{\Sigma i}^\Psi} - \frac{1}{c_{Ei}^\Psi} \right). \quad (27)
 \end{aligned}$$

3. Поверхностные эффекты:

$$\operatorname{div} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \Big|_{r=R} = \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \right) \Big|_{r=R}.$$

Учитывая допущение о локальном равновесии компонентов вблизи растущего зародыша  $A_i = 0$ , получаем:

$$\operatorname{div} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \Big|_{r=R} = \left( \sum_{i=1}^n \frac{I_i}{T} \frac{\partial A_i}{\partial r} \right) \Big|_{r=R}. \quad (28)$$

Учитывая  $\frac{\partial c_i^\Phi}{\partial r} \rightarrow 0$  и  $A_i = M_i (\mu_i^\Psi - \mu_i^\Phi)$  [10] ( $M_i$  – молекулярная масса соответствующего компонента), получаем

$$\left( \frac{\partial A_i}{\partial r} \right)_{r=R} = \left( R_\Gamma T \frac{\partial \ln(c_i^\Psi)}{\partial r} \right)_{r=R} = \left( \frac{v_i^\Psi R_\Gamma T}{c_i^\Psi} \right)_{r=R} = M_i \frac{R_\Gamma T}{c_{Ei}^\Psi}.$$

Тогда

$$\operatorname{div} \left( \sum_{i=1}^n I_i \frac{A_i}{T} \right) \Big|_{r=R} = \sum_{i=1}^n M_i \frac{I_i R_\Gamma}{c_{Ei}^\Psi}. \quad (29)$$

Из (23), (25), (27), (29) окончательно получаем уравнение:

$$\sum_{i=1}^n \frac{I_i \Delta H_i}{T^2} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} - k^3 \lambda^\Psi \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=kR+0} \left( -\frac{1}{T^2} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=kR} + \sum_{i=1}^n v_i^\Psi \frac{I_i R_\Gamma}{c_{Ei}} + R_\Gamma \rho^\Psi \sum_{i=1}^{n-1} D_i^\Psi \left( \frac{k}{k-1} \frac{c_{\Sigma i} - c_{Ei}}{R} \right)^2 \left( \frac{1}{c_{\Sigma i}} - \frac{1}{c_{Ei}} \right) = 0. \quad (30)$$

Объединяя уравнения (9), (10), (30), а также используя уравнение скорости роста зародыша [10]

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{\rho^\Phi} \sum_{i=1}^n M_i I_i,$$

получаем систему уравнений кристаллизации расплава.

**Выводы.** Разработан метод виртуальных объемов для математического моделирования кристаллизации многокомпонентного расплава с учетом взаимного влияния изменения температуры и концентрации компонентов расплава у поверхности растущих кристаллов. Метод применим для широкого круга задач кристаллизации метастабильных расплавов, к примеру, для описания кристаллизации при глубоких переохлаждениях эвтектических расплавов или кристаллизации нагретых аморфных металлических материалов.

### Литература

1. Херлах, Д. Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов / Д. Херлах, П. Галенко, Д. Холланд-Мориц; пер. с англ. Н.В. Худойкиной; под ред. П.К. Галенко. – М.; Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010. – 481 с.
2. Avrami, M. Kinetics of Phase Change. I. General Theory / M. Avrami // Journal of Chemical Physics. – 1939. – Т. 7, № 12. – С. 1103–1113.
3. Avrami, M. Kinetics of Phase Change. II. Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei / M. Avrami // Journal of Chemical Physics. – 1940. – Т. 8, № 2. – С. 212–225.
4. Avrami, M. Kinetics of Phase Change. III. Granulation, Phase Change, and Microstructure / M. Avrami // Journal of Chemical Physics. – 1941. – Т. 9, № 2. – С. 177–185.
5. Колмогоров, А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов / А.Н. Колмогоров. – Изв. АН СССР. Серия математическая. – 1937. – № 3. – С. 355–358.
6. Дрозин, А.Д. Теоретический анализ образования неметаллических включений в жидком металле / А.Д. Дрозин // Изв. АН СССР. Металлы. – 1987. – № 6. – С. 19–22.
7. Дудоров, М. В. Теоретическое исследование начального периода кристаллизации эвтектических сплавов при сверхглубоком переохлаждении / М.В. Дудоров, А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин // Современные проблемы электрометаллургии стали: тез. докл. 10-й Междунар. конф. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1998. – С. 37–38.
8. Образование и рост кристаллических зародышей в процессе аморфизации сплавов / М.В. Дудоров, А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.А. Жеребцов // От булата до современных материалов: тезисы докладов Международной конференции. – Курган: Изд-во КГУ, 1999. – С. 33.
9. Дрозин, А.Д. Компьютерное моделирование процессов кристаллизации при затвердевании переохлажденного эвтектического расплава / А.Д. Дрозин, М.В. Дудоров, В.Е. Рошин // Компьютерное моделирование физико-химических свойств расплавов: тезисы докладов 5-го Российского семинара. – Курган: Изд-во КГУ, 2000. – С. 51
10. Дрозин, А.Д. Рост микрочастиц продуктов химических реакций в жидком растворе: монография / А.Д. Дрозин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. – 56 с.
11. Дрозин, А.Д. Химические потенциалы компонентов малых тел / А.Д. Дрозин // Расплавы. – 1990. – № 4. – С. 65–69.
12. Экспериментальная проверка методики расчета гомогенного образования включений в жидком металле / А.Д. Дрозин, А.В. Кузнецов, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Изв. АН СССР. Металлы. – 1991. – № 1. – С. 52–56.
13. Дрозин, А.Д. Общая теория зарождения продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин // Черная металлургия: научные проблемы и технические решения: Юбил. сб. науч. тр. – Челябинск: ЧГТУ, 1997. – С. 40–47.

14. Дудоров М.В. Теоретическое исследование механизма образования и роста зародышей в пересохлажденных эвтектических расплавах / М.В. Дудоров, А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин // Уральская металлургия на рубеже тысячелетий: тез. докл. Междунар. науч.-техн. конф. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1999. – С. 113–114.
15. Дрозин, А.Д. Зарождения фаз в процессе кристаллизации растворов / А.Д. Дрозин, М.В. Дудоров, В.Е. Рошин // Стросные и свойства металлических и шлаковых расплавов: тез. докл. 9-й Всерос. конф. (15–18 сентября 1998 г., г. Екатеринбург). – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1998. – Т. 1. – С. 50.
16. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 1. Термодинамика зарождения / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Расплавы. – 1990. – № 2. – С. 97–103.
17. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 2. Равновесные концентрации зародышей / А.Д. Дрозин // Расплавы. – 1990. – № 3. – С. 116–120.
18. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 3. Вероятности переходных процессов / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Расплавы. – 1990. – № 5. – С. 8–14.
19. Дрозин, А.Д. Зарождение продуктов гетерофазных химических реакций в жидких растворах. 4. Интенсивность образования зародышей / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Расплавы. – 1990. – № 6. – С. 78–83.
20. Дрозин, А.Д. Исследование термодинамических закономерностей зарождения продуктов раскисления в жидком железе / А.Д. Дрозин, Д.Я. Поволоцкий, В.Е. Рошин // Изв. вузов. Черная металлургия. – 1976. – № 12. – С. 35–38.
21. Рошин, В.Е. Математический анализ термодинамических функций гомогенного зарождения продуктов химических реакций сложного состава в расплавах железа / В.Е. Рошин, А.Д. Дрозин // Современные проблемы электрометаллургии стали: труды 3 Всесоюз. науч. конф. – Челябинск: ЧПИ, 1977. – № 206. – С. 28–32.
22. Дрозин, А.Д. К термодинамике зарождения продуктов раскисления в жидком железе / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Вопросы производства и обработки стали. – Челябинск: ЧПИ, 1980. – № 245. – С. 17–28.
23. Дрозин, А.Д. Химическое пересыщение расплава железа кислородом и раскислителем в момент образования окислов титана и кремния / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Современные проблемы электрометаллургии стали: тез. докл. 2 Всесоюз. науч. конф. – Челябинск, 1974. – С. 61–62.
24. Дрозин, А.Д. Математическая модель концентрационных условий зарождения и роста включений в жидком железе при встречной диффузии реагентов / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий // Вопросы производства и обработки стали. – Челябинск: ЧПИ, 1975. – № 163. – С. 45–53.
25. Рошин, В.Е. Определение интенсивности зарождения новой фазы при раскислении расплавов железа / В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий, А.Д. Дрозин // Вопросы производства и обработки стали. – Челябинск: ЧПИ, 1980. – № 245. – С. 28–34.
26. Экспериментальное определение концентрационных условий зарождения продуктов раскисления железа титаном и кремнием / А.Д. Дрозин, В.Е. Рошин, Д.Я. Поволоцкий и др. // Вопросы производства и обработки стали. – Челябинск: ЧПИ, 1975. – № 163. – С. 54–63.
27. де Гроот, С. Неравновесная термодинамика / С. де Гроот, П. Мазур; пер. с англ В.Т. Хозяинова; под ред. Д.Н. Зубарева. – М.: Мир, 1964. – 456 с.
28. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: В 10 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – 5-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – Т. 1. Механика. – 224 с.

Поступила в редакцию 4 марта 2012 г.

**MATHEMATICAL DESCRIPTION OF CRYSTALLIZATION BY THE VIRTUAL VOLUME METHOD**

*M.V. Dudorov<sup>1</sup>, A.D. Drozin<sup>2</sup>, V.E. Roshchin<sup>3</sup>, P.A. Gamov<sup>4</sup>, L.D. Menikhes<sup>5</sup>*

Using the virtual volume method, a mathematical description of the crystallization of multi-component metallic melts is obtained. Model takes into account the effects of dynamically changing parameters such as component concentrations and temperature, on the processes of nucleation and growth of the nuclei.

*Keywords: nucleation, eutectic, supercooling, growth model.*

**References**

1. Kherlakh D., Galenko P., Kholand-Moric D. *Metastabil'nye materialy iz pereokhlazhdennykh rasplavov (Metastable Solids from Undercooled Melts)*. Moscow, Izhevsk: Izhevskijj institut komp'juternykh issledovaniij, NIC «Reguljarnaja i khaoticheskaja dinamika», 2010. 481 p. (in Russ.). [Herlach D.M, Galenko P., Holland-Moritz D. *Metastable Solids from Undercooled Melts*. Amsterdam: Elsevier, 2006. 448 p.]
2. Avrami M. Kinetics of Phase Change. I. General Theory. *Journal of Chemical Physics*. 1939. Vol. 7, Issue 12, p. 1103–1113. DOI:10.1063/1.1750380
3. Avrami M. Kinetics of Phase Change. II. Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei. *Journal of Chemical Physics*. 1940. Vol. 8, Issue 2, p. 212–225. DOI:10.1063/1.1750631
4. Avrami M. Kinetics of Phase Change. III. Granulation, Phase Change, and Microstructure. *Journal of Chemical Physics*. 1941. Vol. 9, Issue 2. p. 177–185. DOI:10.1063/1.1750872
5. Kolmogorov, A.N. K statisticheskoi teorii kristallizacii metallov (Statistical theory of crystallization of metals). *Izv. AN SSSR, Serija matematicheskaja*. 1937. no. 3. pp. 355–358. (in Russ.).
6. Drozin A.D. Teoreticheskijj analiz obrazovanija nemetallicheskich vkljuchenij v zhidkom metalle (Theoretical analysis of the formation of nonmetallic inclusions in the liquid metal) // *Izv. AN SSSR. Metally*. 1987. no. 6. pp. 19–22. (in Russ.).
7. Dudorov M.V., Drozin A.D., Roshhin V.E. Teoreticheskoe issledovanie nachal'nogo perioda kristallizacii ehvtekticheskikh splavov pri sverkhglubokom pereokhlazhdenii (Theoretical study of the initial period of solidification of eutectic alloys at very deep undercooling) // *Tez. dokl. 10-ij Mezhdunar. konf. "Sovremennye problemy ehlektrometallurgii stali"*. Cheljabinsk, JuUrGU, 1998. pp. 37–38. (in Russ.).
8. Dudorov M.V., Drozin A.D., Roshhin V.E., Zherebcov D.A. Obrazovanie i rost kristallicheskich zarodyshejj v processe amorfizacii splavov (Formation and growth of crystal nuclei in the amorphous alloys). *Tezisy dokladov mezhdunarodnoj konf. "Ot bulata do sovremennykh materialov"*. Kurgan. Izd.-vo KGU, 1999. p. 33. (in Russ.).
9. Drozin A.D., Dudorov M.V., Roshhin V.E. Komp'juternoe modelirovanie processov kristallizacii pri zatverdevanii pereokhlazhdennogo ehvtekticheskogo rasplava (Computer simulation of crystallization processes during solidification of undercooled eutectic melt). *Tezisy dokladov 5-go Rossijskogo seminara "Komp'juternoe modelirovanie fiziko-khimicheskikh svojjstv rasplavov"*. Kurgan: Izd.-vo KGU, 2000. p. 51. (in Russ.).

<sup>1</sup> Dudorov Maksim Vladimirovich is Cand. Sc. (Engineering), Pyrometallurgical Processes Department, South Ural State University  
E-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>2</sup> Drozin Aleksandr Dmitrievich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Head of the Mathematical Analysis Department, Head of the Faculty of Mathematics and Mechanics, South Ural State University  
E-mail: drozin@mail.ru

<sup>3</sup> Roshhin Vasilij Efimovich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Head of the Pyrometallurgical Processes Department, South Ural State University  
E-mail: vero@met.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Gamov Pavel Aleksandrovich is Post-graduate Student, Pyrometallurgical Processes Department, South Ural State University  
E-mail: steel@met.susu.ac.ru

<sup>5</sup> Menikhes Leonid Davidovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of Functional Analysis Department, South Ural State University  
E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

10. Drozin A.D. *Rost mikrochastich produktov khimicheskikh reakcij v zhidkom rastvore: monografija* (The growth of micro products of chemical reactions in liquid solution: monograph). Cheljabinsk: Izd-vo JuUrGU, 2007. 56 p. (in Russ.).
11. Drozin A.D. Khimicheskie potentsialy komponentov malyx tel (The chemical potentials of components of small bodies). *Rasplavy*. 1990. № 4. pp. 65–69. (in Russ.).
12. Drozin A.D., Kuznecov A.V., Roshhin V.E., Povolockij D.Ya. Eksperimental'naja proverka metodiki rascheta gomogenogo obrazovaniya vkljuchenij v zhidkom metalle (Experimental verification of the calculation method of homogeneous formation of inclusions in liquid metal). *Izv. AN SSSR. Metallj*. 1991. no. 1. pp. 52–56. (in Russ.).
13. Drozin A.D., Roshhin V.E. *Obshhaja teorija zarozhdenija produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh* (The general theory of the origin of products heterophase chemical reactions in liquid solutions). *Chernaja metallurgija: nauchnye problemy i tekhnicheskie reshenija*: Jubil. sb. nauch. tr. Cheljabinsk: ChGTU, 1997. pp. 40–47. (in Russ.).
14. Dudorov M.V., Drozin A.D., Roshhin V.E. *Teoreticheskoe issledovanie mekhanizma obrazovaniya i rosta zarodyshejj v pereokhlazhdennykh ehvtekticheskikh rasplavakh* (Theoretical study of the mechanism of nucleation and growth in undercooled eutectic melts) // *Ural'skaja metallurgija na rubezhe tysjacheletij*: Tez. dokl. Mezhdunar. nauch.-tekhn. konf. (Proceedings of Internat. scientific and engineering conference “Ural Metallurgy at the Millennium”). Cheljabinsk: JuUrGU, 1999. pp. 113–114. (in Russ.).
15. Drozin A.D., Dudorov M.V., Roshhin V.E. *Zarozhdenie faz v processe kristallizacii rastvorov* (The origin of the phases in the process of crystallization solutions / Structure and properties of metal and slag melts) / *Stroenie i svojjstva metallicheskich i shlakovykh rasplavov*: Tez. dokl. 9-ij Vseros. konf. (15–18 sentjabrja 1998 g., g. Ekaterinburg) (Proceedings of 9th All-Russian conference “Structure and properties of metal and slag melts” (15–18 September 1998, Ekaterinburg)). Cheljabinsk: JuUrGU, 1998. Vol. 1. p. 50. (in Russ.).
16. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockij D.Ya. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh*. 1. *Termodinamika zarozhdenija* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 1. Thermodynamics of nucleation). *Rasplavy*. 1990. no. 2. pp. 97–103. (in Russ.).
17. Drozin A.D. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh*. 2. *Ravnesnye koncentracii zarodyshejj* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 2. The equilibrium concentration of nuclei). *Rasplavy*. 1990. no. 3. pp. 116–120. (in Russ.).
18. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockij D.Ya. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh*. 3. *Verojatnosti perekhodnykh processov* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 3. The probabilities of transition processes). *Rasplavy*. 1990. no. 5. pp. 8–14. (in Russ.).
19. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockij D.Ya. *Zarozhdenie produktov geterofaznykh khimicheskikh reakcij v zhidkikh rastvorakh*. 4. *Intensivnost' obrazovaniya zarodyshejj* (The origin of heterophase products of chemical reactions in liquid solutions. 4. The intensity of the nucleation). *Rasplavy*. 1990. no. 6. pp. 78–83. (in Russ.).
20. Drozin A.D., Povolockij D.Ya., Roshhin V.E. *Issledovanie termodinamicheskikh zakonov zarozhdenija produktov raskislenija v zhidkom zheleze* (The study of the thermodynamic laws of nucleation of deoxidation products in liquid iron). *Izv. vuzov. Chernaja metallurgija*. 1976. no. 12. pp. 35–38. (in Russ.).
21. Roshhin V.E., Drozin A.D. *Matematicheskij analiz termodinamicheskikh funkcij gomogenogo zarozhdenija produktov khimicheskikh reakcij slozhnogo sostava v rasplavakh zheleza* (Mathematical analysis of the thermodynamic functions of homogeneous nucleation of chemical reactions of complex composition in molten iron) // *Sovremennye problemy ehlektrometallurgii stali*: Trudy 3 Vsesojuzn. nauch. konf. ChPI. (Proceedings of the 3rd All-Union scientific conference “Current problems electro-metallurgy steel”. ChPI). Cheljabinsk, 1977. no. 206. pp. 28–32. (in Russ.).
22. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockij D.Ya. *K termodinamike zarozhdenija produktov raskislenija v zhidkom zheleze* (To the thermodynamics of nucleation of deoxidation products in liquid iron). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1980. no. 245. pp. 17–28. (in Russ.).

23. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *Khimicheskoe peresyshhenie rasplava zheleza kislorodom i raskislitelem v moment obrazovaniya oksidov titana i kremnija* (Chemical oxygen supersaturation of the molten iron and deoxidizing agents at the time of formation of oxides of titanium and silicon). *Sovremennye problemy ehlektrometallurgii stali: Trudy 2 Vsesojuzn. nauch. konf. ChPI*. (Proceedings of the 2rd All-Union scientific conference "Current problems electrometallurgy steel". ChPI). – Cheljabinsk, 1974. pp. 61–62. (in Russ.).

24. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya. *Matematicheskaja model' koncentracionnykh uslovijj zarozhdenija i rosta vkljuchenijj v zhidkom zheleze pri vstrechnojj diffuzii reagentov* (A mathematical model of the concentration conditions of nucleation and growth of inclusions in liquid iron at the counter diffusion of the reactants). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1975. no. 163. pp. 45–53. (in Russ.).

25. Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya., Drozin A.D. *Opređenje intensivnosti zarozhdenija novojj fazy pri raskislenii rasplavov zheleza* (Determination of the birth of a new phase in the deoxidation of molten iron). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1980. no. 245. pp. 28–34. (in Russ.).

26. Drozin A.D., Roshhin V.E., Povolockijj D.Ya., Sorokin Ju.V., Povolockijj V.D. *Ehksperimental'noe opredelenie koncentracionnykh uslovijj zarozhdenija produktov raskislenija zheleza titanom i kremniem* (Experimental determination of the concentration conditions for the nucleation of deoxidation products of iron titanium and silicon). *Voprosy proizvodstva i obrabotki stali*. Cheljabinsk, ChPI, 1975. no. 163. pp. 54–63. (in Russ.).

27. de Groot S., Mazur P. *Neravnovesnaja termodinamika* (Non-equilibrium thermodynamics). Moscow, Mir, 1964. 456 p. (in Russ.). [de Groot S.R., Mazur P. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. North-Holland, Amsterdam; Wiley, New York, 1962. 510 p.]

28. Landau L.D., Lifshiz E.M. *Teoreticheskaja fizika. T.1. Mekhanika* (Theoretical Physics. Vol. 1. mechanics). Moscow, FIZMATLIT, 2004. 224 p. (in Russ.).



# ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ КРУПНОЗЕРНИСТОЙ МОДЕЛИ ЛИПИДОВ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

А.В. Иванова<sup>1</sup>, В.П. Бескачко<sup>2</sup>

Рассматривается крупнозернистая модель липидного бислоя, в которой параметры интрамолекулярных потенциалов огрубленной молекулы диглицерофосфатидилхолина (ДПФХ) определяются подгонкой под ее механические свойства, оцененные с помощью квантово-химических расчетов из первых принципов. Найденные с помощью предложенной модели физико-химические свойства бислоя хорошо согласуются с опытными данными.

*Ключевые слова:* липиды, липидные мембраны, квантовая химия, молекулярная динамика.

**Введение.** Липиды являются важнейшим структурным элементом липидных мембран, а последние, в свою очередь, – конструкционным и функциональным элементом клеточных систем. Они интенсивно изучаются на биологическом и химическом, а в последние несколько десятков лет – и на физическом уровне. Здесь, наряду с инструментальными (дифракционными, спектроскопическими, микроскопическими и пр.) методами исследований, все шире используются методы компьютерного моделирования, базирующиеся в той или иной мере на фундаментальных физических принципах.

Главной особенностью элементов биологических систем как объектов моделирования является их мезоскопический характер: число атомов в них слишком велико для полноатомного описания системы, но слишком мало, чтобы воспользоваться методами физики сплошных сред. Компромисс между этими двумя группами методов найден в подходе, называемом крупнозернистым огрублением. Его суть заключается в выборе целых групп атомов в качестве элементарных структурных единиц, слагающих мезоскопическую систему. Такой подход к моделированию сокращает число степеней свободы, однако тут же возникает вопрос о законе взаимодействия между такими частицами. Этот вопрос не является простым даже при атомистическом моделировании. В данном же случае потенциал межчастичного взаимодействия с самого начала должен рассматриваться как эффективный, отвечающий некоторой совокупности внутренних состояний крупной частицы, которая (предположительно) существенно не изменяется вследствие ее движений. В отсутствие или, лучше сказать, вследствие трудностей в реализации фундаментально обоснованных методов расчета эффективных потенциалов сейчас существует множество рецептов их конструирования, основанных на качественных соображениях. В соответствии с ними выбирается форма потенциала, которая затем параметризуется некоторым набором констант. Для определения последних используются различные способы [1]. Чаще всего с этой целью используют подгонку под какой-либо круг опытных данных или результатов численного моделирования (молекулярно-динамического, либо методом Монте-Карло). В таком случае в дальнейшем моделированию подлежат свойства, не связанные с этими данными, во всяком случае – не связанные непосредственно. Это несколько снижает прогностическую ценность модели. Другой возможный подход заключается в том, чтобы в качестве таких данных использовать результаты микроскопического моделирования небольших групп крупных частиц, составляющих «биологически значимую» структурную единицу, например, молекулу липида [2, 3].

В настоящей работе делается попытка создания такого круга данных о свойствах изолированной молекулы липида, который можно было бы использовать в процедуре подгонки параметров ее крупнозернистой модели.

Предлагаемая методика оценки параметров крупнозернистой модели включает несколько этапов: квантово-химическое моделирование механических свойств изолированной молекулы липида методом Хартри–Фока, обработку полученных данных для оценки параметров потенциалов межчастичного взаимодействия заранее выбранной формы, использование последних для

<sup>1</sup> Иванова Анастасия Владимировна – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: nastya.v.ivanova@gmail.com

<sup>2</sup> Бескачко Валерий Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет

молекулярно-динамического моделирования поведения липидов в воде и оценка свойств такой системы. Эти этапы моделирования более подробно описаны ниже.

**Квантово-химическое моделирование.** Объектом исследования являлась молекула дипальмитоилфосфатидилхолина (ДПФХ), скелетная форма которой показана на рис. 1. Фосфатидилхолин относится к классу фосфолипидов, которые наряду с белками и гликолипидами являются одним из важнейших компонентов в составе клеточной мембраны. Каждая молекула ДПФХ, как и многие органические соединения, состоит из углеводородных нитей с присоединенными к ним группами, содержащими кислород, азот и фосфор.

Начальная конфигурация молекулы оптимизировалась методом Хартри–Фока (ROHF) в базисе 3-21G с использованием квантово-химического пакета Firefly [4], поглотившего ранее широко распространенный код GAMESS (US) [5]. Расчеты выполнялись в режиме параллельных вычислений на кластере СКИФ-Урал ЮУрГУ.

Для каждого расчета использовалось одно лезвие blade-системы, состоящее из 8 ядер Intel Xeon частотой по 3 ГГц. Время оптимизации геометрии одной молекулы составляло около 2 часов.

Алгоритм расчета механических свойств молекулы состоял в следующем. Из оптимизированной конфигурации свободной молекулы создавалась новая (напряженная) конфигурация посредством однородной деформации вдоль какой-либо оси на некоторую малую относительную величину  $\epsilon$ . Для сохранения полной величины этой деформации координаты крайних атомов «замораживались», а положения остальных атомов оптимизировались с помощью указанной выше процедуры, создающей новую геометрию молекулы и обеспечивающей минимум ее полной энергии. На следующем шаге эта конфигурация вновь деформировалась на  $\epsilon$  и процедура оптимизации повторялась. Процедура прекращалась, если нарушались критерии оптимизации или происходил разрыв молекулы, о чем свидетельствовало резкое уменьшение полной энергии молекулы.

Рассмотренные нами направления деформаций показаны на рис. 2. Они отличаются друг от друга не только осью, по которой проводилась деформация, но и количеством закрепленных атомов. Для деформации, показанной на рис. 2, а, расчет проводился в двух вариантах фиксации координат. В одном случае были закреплены все три координаты атомов N46, C33 и C50, а в другом – три координаты атома N46 и по одной координате двух других атомов вдоль оси растяжения. В остальных случаях (рис. 2, б–г) фиксируются соответственно те атомы, через которые проходит ось растяжения (сжатия). Для каждого типа деформации строилась зависимость  $E(\epsilon)$  полной энергии молекулы от величины относительной деформации, а также оценивалось изменение углов и длин связей.

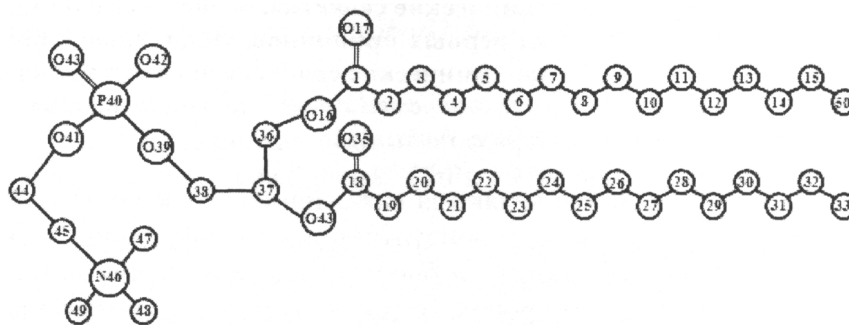


Рис. 1. Молекула дипальмитоилфосфатидилхолина (ДПФХ) с нумерацией атомов (для атомов углерода обозначение С опущено)

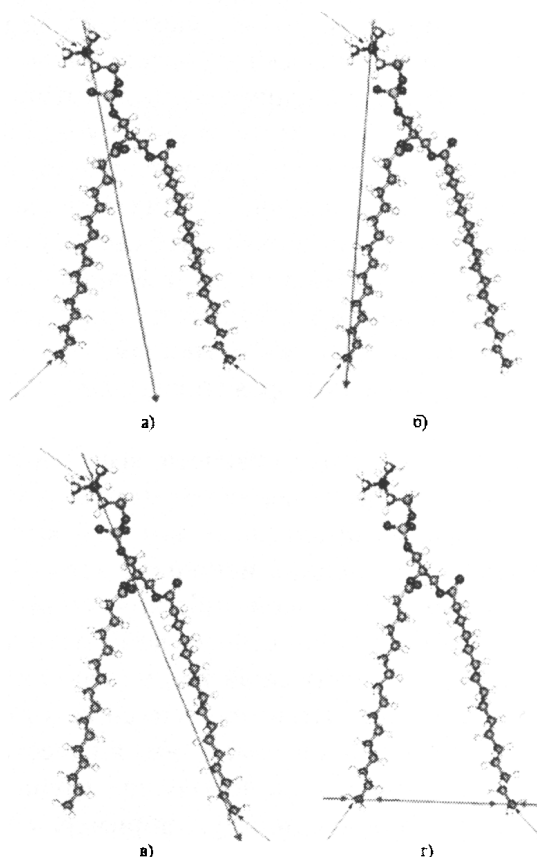


Рис. 2. Направления деформаций молекулы липида: а) деформация по оси, проходящей через атом N46 и середину между атомами C50 и C33 (рис. 1); б) деформация по оси, проходящей через атомы N46 и C33 (рис. 1); в) деформация по оси, проходящей через атомы N46 и C50 (рис. 1); г) деформация по оси, проходящей через атомы C50 и C33 (рис. 1)

В области малых деформаций (до 5–10 %) все функции  $E(\varepsilon)$ , полученные при растяжении, хорошо аппроксимируются квадратичной зависимостью. На рис. 3 для примера представлены результаты расчетов для деформации, показанной на рис. 2, а. Для деформаций сжатия по тем же осям функции  $E(\varepsilon)$  имеют менее регулярное, чем на рис. 3, поведение, однако с достаточной точностью также аппроксимируются квадратичными зависимостями.

При конечной температуре  $T$  в ансамбле липидов (мембране) за счет теплового движения возможны деформации, энергии которых имеют порядок  $kT$ . Результаты моделирования показывают, что для температур в районе комнатной величина этих деформаций будет составлять до 5 %, если речь идет о растяжениях-сжатиях по осям, указанным на рис. 2, а–в. Для деформации вида рис. 2, г типичная величина  $\varepsilon$  при тепловых возбуждениях намного больше – может достигать 10 %, как и следовало ожидать, учитывая ее характер: изгиб длинных цепей, против их растяжения в первых трех случаях.

#### Оценка силовых констант и описание крупнозернистой модели.

Поскольку все результаты, полученные для зависимостей  $E(\varepsilon)$  в области деформаций, обусловленных тепловым движением, могут быть аппроксимированы квадратичным законом, то появляется возможность использовать для описания деформации молекулы ДПФХ гармонические потенциалы и в рамках молекулярной динамики перейти от атомистической модели этой молекулы к ее упрощенной (огрубленной) модели. За основу предлагаемой модели взята крупнозернистая модель с явно заданным растворителем, описанная в работах [6, 7]. В ней молекула ДПФХ представлена двенадцатью взаимодействующими центрами вместо 130 атомов, входящих в ее состав. На рис. 4 показано сопоставление молекулы ДПФХ и ее крупнозернистой модели. Огрубление производится таким образом, что масса каждой крупной частицы примерно соответствует массе четырех молекул воды. По характеру взаимодействия в модели выделяются четыре основных типа крупных частиц [6]: три гидрофильных (полярный, неполярный, заряженный) и один гидрофобный. В свою очередь, каждый из них делится на несколько подтипов, различающихся либо способностью создавать водородные связи (d – донор, а – акцептор, da – оба, n – отсутствует), либо степенью поляризуемости частицы, изменяющейся от единицы (низкая поляризуемость) до пяти (высокая).

Приведенная классификация относится к взаимодействиям частиц, не связанных химически. Ковалентные же взаимодействия описываются посредством гармонических потенциалов вида

$$V_{bond}(r) = \frac{1}{2} K_{bond} (R - R_{bond})^2. \quad (1)$$

В работе [6] для молекул ДПФХ использовались следующие значения параметров в (1):  $R_{bond} = 0,47$  нм и  $K_{bond} = 1250$  кДж/(моль·нм<sup>2</sup>). Для простоты они принимались одинаковыми для любой пары химически связанных частиц. Если для оценки параметров потенциала (1) использовать результаты численных расчетов, описанных выше, полагая при этом, что все связи между крупнозернистыми частицами одинаковы и являются гармоническими, то величина сило-

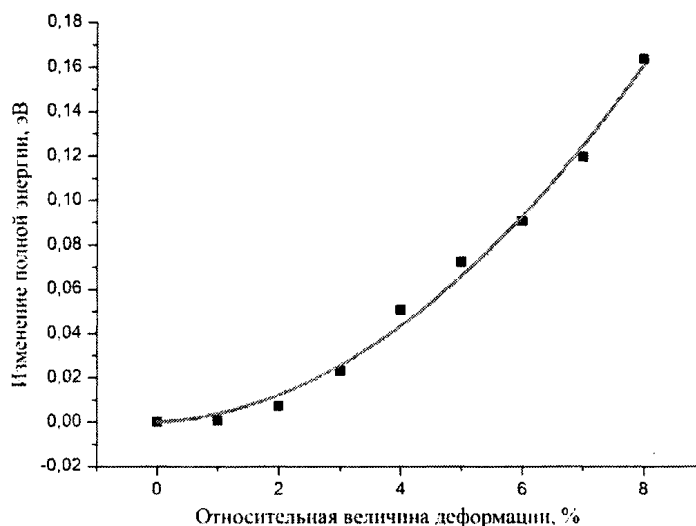


Рис. 3. Зависимости энергии молекулы ДПФХ от относительного удлинения при деформации вдоль оси, проходящей через атомы N46 и C33 (рис. 2, б)

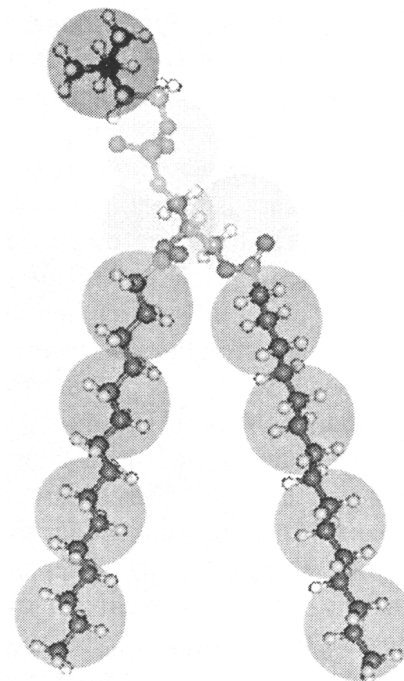


Рис. 4. Крупнозернистая модель молекулы ДПФХ

вой константы оказывается иной –  $K_{bond} = 3946 \pm 385$  кДж/(моль·нм<sup>2</sup>). Это более чем в три раза превосходит значение, использованное в [6] – в нашей модели молекулы липида оказались более жесткими. Равновесные расстояния между крупнозернистыми частицами были выбраны, исходя из конфигурации оптимизированной молекулы, и были различны для каждой пары частиц. Для описания жесткости молекулы на изгиб использовался слабый гармонический потенциал [6]

$$V_{angle}(\theta) = \frac{1}{2} K_{angle} \{ \cos(\theta) - \cos(\theta_0) \}^2. \quad (2)$$

Для алифатических, не содержащих ароматических связи цепей силовая константа  $K_{angle} = 25$  кДж/моль и равновесный угол между связями  $\theta_0 = 180^\circ$ .

**Параметры моделирования.** Для проверки возможности самосборки липидной мембраны использовался метод молекулярной динамики, реализованный в пакете Gromacs [8, 9]. Для моделирования была выбрана система, состоящая из 256 молекул дипальмитоилфосфатидилхолина и 2000 молекул крупнозернистой воды, которая помещалась в кубический бокс с размером ребра 10 нм и периодическими граничными условиями. Для создания стартовой конфигурации в боксе случайным образом добавлялись молекулы ДПФХ в необходимом количестве, после чего конфигурация системы оптимизировалась с несколькими шагами процедуры наискорейшего спуска, после этого оставшееся пространство заполнялось растворителем (водой), и конфигурация возникшей системы вновь оптимизировалась упомянутым методом. После создания такой конфигурации запускался собственно молекулярно-динамический расчет с использованием нижеприведенных параметров.

Ансамбль для моделирования в пакете Gromacs явно не задается. Переход от NPT к NVT ансамблю происходит при отключении баростата. В данной работе моделирование производилось в NPT ансамбле. Использовался термостат Берендсена [10], который поддерживал температуру системы на уровне 323 К, а также аналогичный баростат с давлением в 1 бар.

Система моделировалась в течение 68 нс. Интегрирование ньютоновских уравнений движения происходило по алгоритму с перескакиванием (leap frog) с шагом в 25–30 фс для обеспечения устойчивости решения, хотя возможно было и использование временного шага в 40 фс. Расчет запускался в параллельном режиме на процессоре Intel Core i5 с частотой каждого ядра в 3,3 ГГц. Моделирование рассматриваемой системы при этом занимало не более получаса.

**Результаты моделирования.** Результатом моделирования является фазовая траектория изучаемой системы. Приложение VMD [11] позволяет визуализировать конфигурации системы на различных этапах ее эволюции. На рис. 5 показаны скриншоты этих конфигураций на наиболее интересном отрезке эволюции от 1 до 40 мкс, когда тенденция к образованию липидного бислоя становится явной. В конце этого отрезка отчетливо видно разделение фаз в системе – обособление из водного раствора упорядоченной липидной фазы. Факт ее самопроизвольного формирования уже сам по себе свидетельствует о работоспособности модели и позволяет ставить вопрос о физико-химических свойствах бислоя, таких как его толщина, площадь, приходящаяся на один липид, коэффициент латеральной диффузии липидов и параметр порядка для интралипидных связей. Для этих величин существуют опытные данные разной степени надежности, которые можно использовать для проверки корректности модели [12–14]. Для сопоставления с опытом использовались самые поздние этапы эволюции системы, когда переходные процессы, ведущие к формированию бислоя, уже в значительной мере завершились.

Площадь, приходящаяся на липид,  $A_L$  есть мера плотности упаковки липидов в бислой. Чтобы ее получить, можно просто разделить площадь полученного липидного бислоя на половину количества липидов в системе. Строго говоря, это не совсем точно, потому что самоорганизованный бислой может быть слегка асимметричен по количеству липидов в каждом из монослоев. Поэтому лучше оценивать среднее по монослоям значение удельной площади липида. Полученное таким образом среднее значение площади составило  $A_L = 0,61$  нм<sup>2</sup>. Разброс экспериментальных значений этого параметра достаточно широк. В работе [12] произведен подробный анализ опытных данных, полученных с помощью различных методик: рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей, ядерного магнитного резонанса. В ней в качестве наиболее достоверной величины площади, приходящейся на липид в бислой в жидкой фазе, приводится значение  $A_L = 0,64 \pm 0,02$  нм<sup>2</sup>. Оно очень близко к полученному нами с использованием крупнозернистой модели.

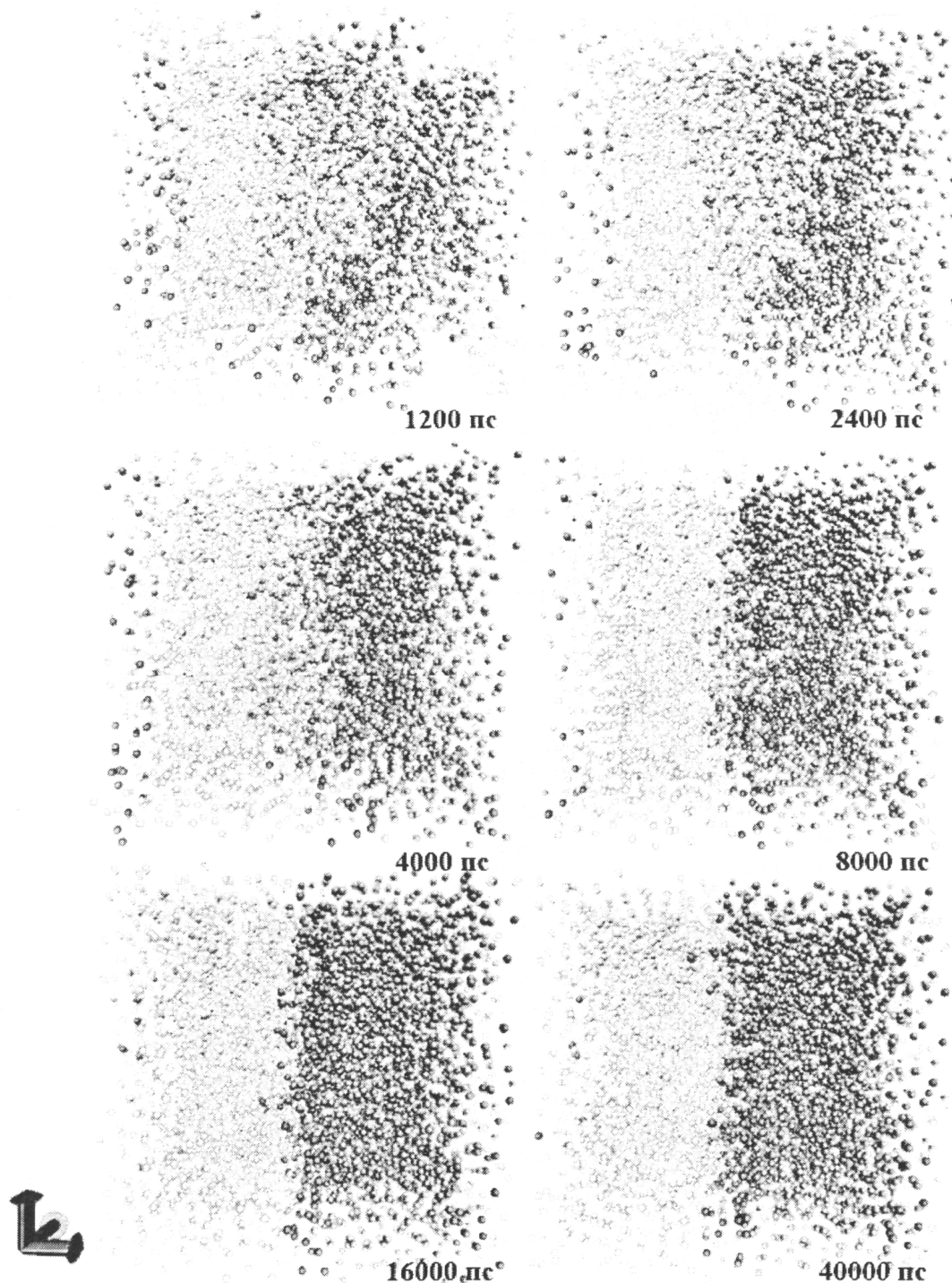


Рис. 5. Визуализация модельной системы (256 молекул ДПФХ и 2000 молекул крупнозернистой воды). Отчетливо видно разделение фаз и формирование липидного бислоя

Другим важным параметром является толщина бислоя, также характеризующая плотность упаковки липидов. Для получения этого параметра использовалась процедура *g\_density* пакета GROMACS [15], позволяющая строить профили плотности компонент системы: массовую плотность, плотность частиц выбранного сорта и электронную плотность.

На рис. 6 показано распределение плотности частиц различных компонентов системы по нормали к бислою. Толщину последнего можно получить как расстояние между пиками, отвечающими фосфатным группам. Для рассматриваемой модели получено значение в 4,25 нм, тогда как экспериментальное значение равно 3,85 нм. Этого и следовало ожидать, если учесть, что площадь, приходящаяся на одну молекулу липида, в данной модели оказалась несколько меньше указанного выше экспериментального значения, вследствие чего толщина бислоя должна быть несколько больше, так как эти параметры, безусловно, связаны.

Параметр порядка интрамолекулярных связей определяется как

$$P_2 = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \langle \theta \rangle - 1), \quad (3)$$

где  $\theta$  – угол между направлением связи данного типа и нормалью к бислою. Если  $P_2 = 1$ , то это означает полное выравнивание связей вдоль нормали,  $P_2 = -0,5$  – их перпендикулярную ориентацию и  $P_2 = 0$  – случайную ориентацию.

На рис. 7 показаны параметры порядка для каждого типа связей, все данные усреднены для обоих «хвостов» молекулы липида. Для сравнения результатов с данными атомистического моделирования четыре соседние метильные группы в атомистической модели были объединены. Детали атомистического моделирования приведены в работе [6]. Все три профиля параметров порядка очень схожи. Наблюдается также хорошее количественное совпадение результатов крупнозернистой модели, представленной в данной работе, результатов моделирования с использованием силового поля MARTINI [7] и результатов атомистического моделирования [6]. Связи между фосфатной и холиновой, а также между глицериновыми группами ориентированы преимущественно параллельно поверхности, тогда как остальные связи выстраиваются вдоль нормали к бислою. Кроме того, подтверждается, что с приближением к концам «хвостов» липидов упорядоченность уменьшается. Параметры порядка, полученные с использованием крупнозернистой модели, не могут быть непосредственно сравнены с полученными в эксперименте, так как в огрубленной модели представлена не вся информация о связях в молекуле. Подробное же сравнение данных атомистического моделирования с экспериментальными данными произведено в работе [13].

Коэффициент латеральной диффузии  $D$  вычислялся с использованием процедуры  $g\_msd$  пакета GROMACS [15]. При его вычислении необходимо следить за тем, чтобы оценка  $D$  производилась на линейном участке зависимости среднеквадратичных отклонений от времени. Важно также правильно определить направление нормали к бислою.

При сравнении коэффициента диффузии, полученного в моделировании, с экспериментальным для учета ускорения процессов при использовании крупнозернистой модели из-за более

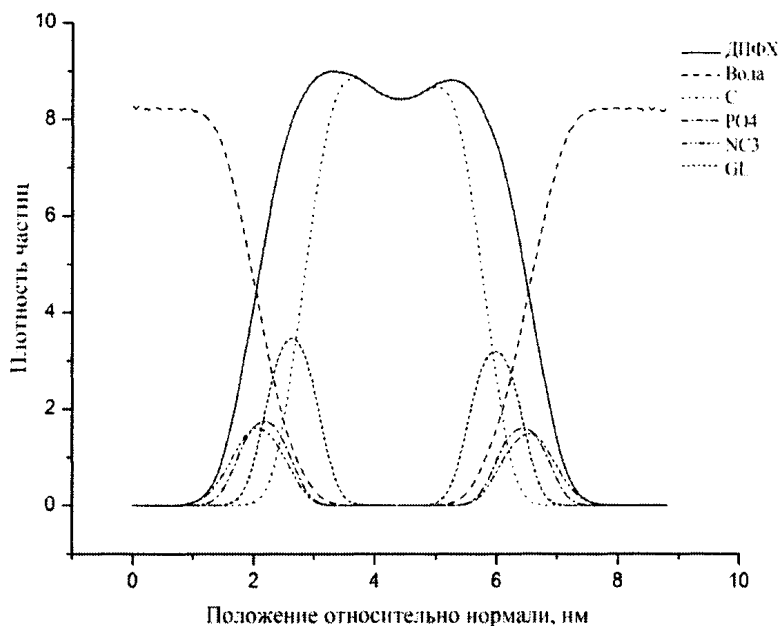


Рис. 6. Распределение частиц разного сорта в направлении нормали к бислою

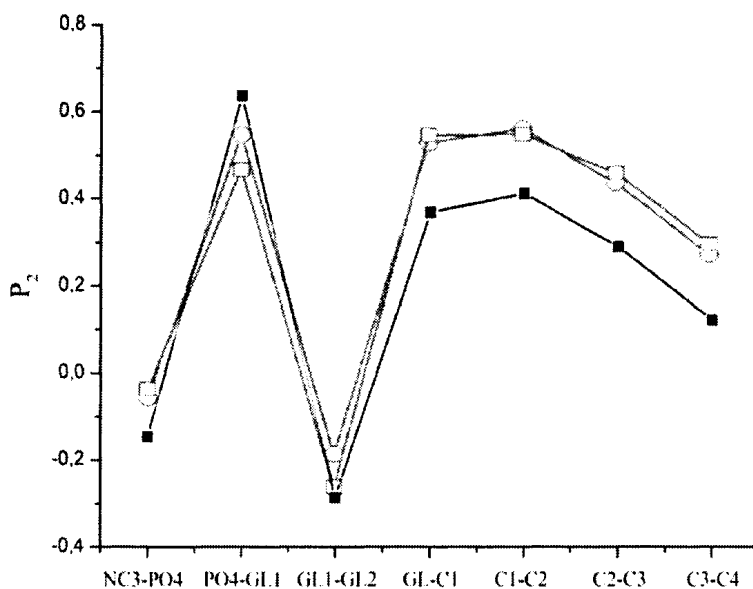


Рис. 7. Параметр порядка  $P_2$  последовательности связей относительно нормали к бислою. Данные усреднены для обоих «хвостов» липида. Черными квадратиками обозначены данные, полученные в рамках этой работы, серым – данные, полученные с использованием атомистического (квадраты) и крупнозернистого моделирования в силовом поле MARTINI (окружности)

сглаженной поверхности свободной энергии должен применяться коэффициент преобразования около четырех. Подробнее об интерпретации временной шкалы в крупнозернистых моделях изложено в работе [7].

Коэффициент латеральной диффузии, полученный в данной работе, оказался равен  $D = 5,11 \pm 0,25 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$ . При моделировании же с использованием силового поля MARTINI его оценка составляет  $D = 3 \pm 1 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$  [7]. По порядку величины полученное значение совпадает также с экспериментальными данными, приведенными, например, в работе [14].

**Заключение.** Предложенный подход, использующий первопринципные методы для оценки параметров интрамолекулярных потенциалов крупнозернистых моделей биологических систем, обладает следующими достоинствами. Во-первых, позволяет выявить относительно жесткие фрагменты в молекуле, которые следует отнести к одной укрупненной частице. Например, обосновывает модели липида, использующие по одной частице для каждой функциональной группы в молекуле. Во-вторых, он оправдывает применение той или иной формы межчастичного (интрамолекулярного) потенциала, например гармонического и, наконец, в-третьих, позволяет оценить его параметры, не прибегая к атомистическому моделированию и опытным данным. Это позволяет существенно расширить предсказательные способности обсуждаемого метода моделирования биологических систем.

### Литература

1. Mesoscopic models of biological membranes / M. Venturoli, M.M. Sperotto, M. Kranenburg, B. Smit // *Physics Reports*. – 2006. – Т. 437, № 1–2. – С. 1–54.
2. Ayton, G. Bridging microscopic and mesoscopic simulations of lipid bilayers / G. Ayton, G.A. Voth // *Biophysical Journal*. – 2002. – Т. 83, № 6. – С. 3357–3370.
3. de Vries, A.H. Molecular dynamics simulation of the spontaneous formation of a small DPPC vesicle in water in atomistic detail / A.H. de Vries, A.E. Mark, S.J. Marrink // *Journal of the American Chemical Society*. – 2004. – Т. 126, № 14. – С. 4488–4489.
4. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
5. Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later / M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert *и др.* // *Journal of Computational Chemistry*. – 1993. – Т. 14. – С. 1347–1363.
6. Marrink, S.J. Coarse grained model for semi-quantitative lipid simulations / S.J. Marrink, A.H. de Vries, A.E. Mark // *Journal of Physical Chemistry B*. – 2004. – Т. 108, № 2. – С. 750–760.
7. The MARTINI Force Field: Coarse Grained Model for Biomolecular Simulations / S.J. Marrink, H.J. Risselada, S. Yefimov *и др.* // *Journal of Physical Chemistry B*. – 2007. – Т. 111, № 27. – С. 7812–7824.
8. GROMACS: Fast, Flexible and Free / D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess *и др.* // *Journal of Computational Chemistry*. – 2005. – Т. 26, № 16. – С. 1701–1718.
9. GROMACS 4: Algorithms for Highly Efficient, Load-Balanced, and Scalable Molecular Simulation / B. Hess, C. Kutzner, D. van der Spoel, E. Lindahl // *Journal of Chemical Theory and Computation*. – Т. 4, № 3. – С. 435–447.
10. Molecular dynamics with coupling to an external bath / H.J.C. Berendsen, J. P. M. Postma, A. Di Nola, J.R. Haak // *Journal of Chemical Physics*. – 1984. – Т. 81, № 8. – С. 3684–3690.
11. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
12. Nagle, J.F. Structure of lipid bilayers / J.F. Nagle, S. Tristram-Nagle // *Biochimica et Biophysica Acta*. – 2000. – Т. 1469, № 3. – С. 159–195.
13. Lindahl, E. Mesoscopic undulations and thickness fluctuations in lipid bilayers from molecular dynamics simulations / E. Lindahl, O. Edholm // *Biophysical journal*. – 2000. – Т. 79, № 1. – С. 426–433.
14. Sheats, J.R. A photochemical technique for measuring lateral diffusion of spin-labeled phospholipids in membranes / J.R. Sheats, H.M. McConnell // *PNAS*. – 1978. – Т. 75, № 10. – С. 4661–4663.
15. <http://www.gromacs.org>

Поступила в редакцию 10 января 2012 г.

## ESTIMATION OF PARAMETERS OF THE LARGE-GRAINED MODEL OF LIPIDS WITH QUANTUM-CHEMICAL METHODS

A.V. Ivanova<sup>1</sup>, V.P. Beskachko<sup>2</sup>

A large-grained model of a lipid bilayer is analyzed in the article. The parameters of the intramolecular potentials of coarse-grained dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) molecule are determined by adjusting to its mechanical properties evaluated by quantum-chemical calculations from first principles. Physicochemical properties of the bilayer obtained by the offered model are in good agreement with the experimental results.

*Keywords:* lipids, lipid membranes, quantum chemistry, molecular dynamics.

## References

1. Venturoli M., Sperotto M.M., Kranenburg M., Smit B. Mesoscopic models of biological membranes. *Physics Reports*. 2006. Vol. 437, no 1–2. pp. 1–54.
2. Ayton G., Voth G.A. Bridging microscopic and mesoscopic simulations of lipid bilayers. *Biophysical Journal*. 2002. Vol. 83, no 6. pp. 3357–3370.
3. de Vries A.H., Mark A.E., Marrink S.J. Molecular dynamics simulation of the spontaneous formation of a small DPPC vesicle in water in atomistic detail. *Journal of the American Chemical Society*. 2004. Vol. 126, no 14. pp. 4488–4489.
4. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
5. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later. *Journal of Computational Chemistry*. 1993. Vol. 14. pp. 1347–1363.
6. Marrink S.J., de Vries A.H., Mark A.E. Coarse grained model for semi-quantitative lipid simulations. *Journal of Physical Chemistry B*. 2004. Vol. 108, no. 2. pp. 750–760.
7. Marrink S.J., Risselada H.J., Yefimov S., Tieleman D.P., de Vries A.H. The MARTINI Force Field: Coarse Grained Model for Biomolecular Simulations. *Journal of Physical Chemistry B*. 2007. Vol. 111, no. 27. pp. 7812–7824.
8. van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., Groenhof G., Mark A.E., Berendsen H.J.C. GROMACS: Fast, Flexible and Free. *Journal of Computational Chemistry*. 2005. Vol. 26, no. 16. pp. 1701–1718.
9. Hess B., Kutzner C., van der Spoel D., Lindahl E. GROMACS 4: Algorithms for Highly Efficient, Load-Balanced, and Scalable Molecular Simulation. *Journal of Chemical Theory and Computation*. Vol. 4, no. 3. pp. 435–447.
10. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Di Nola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath. *Journal of Chemical Physics*. 1984. Vol. 81, no. 8. pp. 3684–3690.
11. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
12. Nagle J.F., Tristram-Nagle S. Structure of lipid bilayers. *Biochimica et Biophysica Acta*. 2000. Vol. 1469, no. 3. pp. 159–195.
13. Lindahl E., Edholm O. Mesoscopic undulations and thickness fluctuations in lipid bilayers from molecular dynamics simulations. *Biophysical Journal*. 2000. Vol. 79, no. 1. pp. 426–433.
14. Sheats J.R., McConnell H.M. A photochemical technique for measuring lateral diffusion of spin-labeled phospholipids in membranes. *PNAS*. 1978. Vol. 75, no. 10. pp. 4661–4663.
15. <http://www.gromacs.org>

<sup>1</sup> Ivanova Anastasia Vladimirovna is postgraduate student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University. E-mail: nastya.v.ivanova@gmail.com

<sup>2</sup> Beskachko Valeriy Petrovich is Dr. Sc (Physics and Mathematics), Professor, Head of the General and Theoretical Physics, Department of Physics, South Ural State University



# О РАВНОВЕСНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ВАКАНСИЙ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА С ВОДОРОДОМ<sup>1</sup>

Д.А. Мирзаев<sup>2</sup>, А.А. Мирзоев<sup>3</sup>, К.Ю. Окишев<sup>4</sup>, А.Д. Шабуров<sup>5</sup>,  
Г.Е. Рузанова<sup>6</sup>, А.В. Урсаева<sup>7</sup>

Разработана статистическая теория твёрдых растворов железа и водорода с учётом взаимодействия последнего с вакансиями, уточняющая теорию А.А. Смирнова. Сделаны оценки энергии образования комплексов вакансий с различным числом атомов водорода «из первых принципов». Проведены количественные оценки концентрации таких комплексов в зависимости от температуры и влияния взаимодействия вакансий с водородом на их равновесную концентрацию.

*Ключевые слова:* железо, водород, вакансия, первопринципные расчёты, концентрация вакансий.

Р.А. Рябов и П.В. Гельд [1] предложили теорию образования флоксов, в которой они рассматриваются как разросшиеся дискообразные скопления вакансий, возникающие благодаря конденсации неравновесных (избыточных) вакансий в условиях относительно быстрого охлаждения. Радиус диска может увеличиваться благодаря присоединению других вакансий. Начиная с какого-то момента водород испаряется внутрь диска, а его газ создаёт внутреннее давление, стимулирующее развитие флокса, ибо подвижность атомов водорода во много раз выше подвижности вакансий. Предложенный авторами [1] качественный механизм образования флоксов не противоречит известным в практике фактам.

Существование притяжения между вакансиями и атомами водорода отмечено в нескольких исследованиях [2–4]. Первопринципные расчёты [5, 6] также позволяют сделать вывод о сильном притяжении вакансий и атомов водорода в  $\alpha$ -железе. Оказалось, что в одной вакансии могут накапливаться до шести атомов водорода [2, 5, 7]. Подобное взаимодействие приводит к росту концентрации вакансий, о чем свидетельствует ряд экспериментов [8, 9]. Поэтому возникает иная задача о влиянии взаимодействия водород–вакансия на равновесное количество вакансий и степень захвата вакансиями атомов водорода. Последнее может не стимулировать, а наоборот задерживать образование флоксов.

В данной работе представлены результаты расчётов «из первых принципов» энергии взаимодействия в комплексах вакансия–атом(ы) водорода и термодинамического моделирования температурной зависимости концентрации таких комплексов.

Первопринципные расчеты проводились методом линейных присоединённых плоских волн (LAPW) с учетом обобщенного градиентного приближения (GGA'96) в программном пакете WIEN-2k. В качестве модели для расчетов была выбрана суперячейка ОЦК-железа из 54 атомов, из которой удалялся 1 атом приблизительно в центре суперячейки. Все вычисления проводились

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» и поддержана грантом РФФИ 10-03-00295-а.

<sup>2</sup> Мирзаев Джалал Аминович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического металловедения и физики твёрдого тела, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: mirzaev@physmet.susu.ac.ru

<sup>3</sup> Мирзоев Александр Аминович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Окишев Константин Юрьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физического металловедения и физики твёрдого тела, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: okishev@physmet.susu.ac.ru

<sup>5</sup> Шабуров Андрей Дмитриевич – аспирант кафедры физического металловедения и физики твёрдого тела, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: adshaburov@mail.ru

<sup>6</sup> Рузанова Галина Евгеньевна – магистрант кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ruzanova@physics.susu.ac.ru

<sup>7</sup> Урсаева Анастасия Владимировна – магистрант кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ursaeava@physics.susu.ac.ru

с использованием 27  $k$ -точек в неприводимой области зоны Бриллюэна. При этом радиус muffin-tin сферы  $R_{\text{mt}}$  был равен 2,0 а.е. и 0,7 а.е. для железа и водорода соответственно, параметр  $K_{\text{max}} = 5,0$ ;  $E_{\text{cut}} = 7,0$  РБ.

На первом этапе была проведена релаксация атомов железа вокруг точечной вакансии, и для равновесного параметра решетки было получено значение  $a = 2,84 \text{ \AA}$ . Был проведён расчёт энергии образования вакансии для системы из  $N$  атомов в ячейке по следующей формуле:

$$E_V^f(N) = E_1(N-1, 1, \Omega) - \frac{N-1}{N} \cdot E_1(N, 0, \Omega), \quad (1)$$

где  $E_1(N, m, \Omega)$  – энергия структуры, содержащей  $N$  атомов и  $m$  вакансий в равновесном объёме  $\Omega$ . При найденном равновесном значении постоянной решётки энергия образования вакансии  $\epsilon_V = E_V^f(54) = 2,15$  эВ. Авторами [5] и [6] были получены значения соответственно  $\epsilon_V = 2,00$  и  $2,17$  эВ.

Энергия захвата атома водорода в одиночную вакансию, содержащую  $n-1$  атомов водорода с образованием комплекса  $VH_n$ , определялась соотношением

$$E_{\text{trap}}(1, n) = E_2(1, n-1, \Omega) + E_2(0, 1, \Omega) - E_2(1, n, \Omega) - E_2(0, 0, \Omega), \quad (2)$$

где  $E_2(1, n, \Omega)$  – энергия системы, состоящей из 53 атомов железа и  $n$  атомов водорода, находящихся внутри вакансии в равновесном положении с объемом  $\Omega$ ;  $E_2(0, 1, \Omega)$  – энергия системы из 54 атомов железа и атома водорода в тетрапоре;  $E(0, 0, \Omega)$  – энергия системы из 54 атомов чистого железа при равновесном объеме  $\Omega$ .

Результаты расчётов в сравнении с данными работы [5] приведены в табл. 1. Видно, что они очень близки, поэтому найденные значения энергий  $E_{\text{trap}}(1, n)$ , по-видимому, можно считать достаточно надёжными. Для  $n=1$  имеется также очень близкий результат [6]:  $E_{\text{trap}}(1, 1) = 0,57$  эВ. Экспериментальные оценки [2] дают усреднённые значения 0,63 эВ для  $n=1...2$  и 0,43 эВ для  $n=3...6$ . В дальнейших расчётах будут использоваться найденные в нашей работе значения  $E_{\text{trap}}(1, n)$  для  $n=1...4$  и значения [5] для  $n=5$  и 6, которые нами не определялись.

Таблица 1

Энергии захвата атома водорода вакансионными комплексами  $E_{\text{trap}}(1, n)$

Образующийся вакансионный комплекс	$E_{\text{trap}}(1, n)$ , эВ	
	Наши данные	Данные [5]
$VH_1 (n=1)$	0,603	0,56
$VH_2 (n=2)$	0,607	0,62
$VH_3 (n=3)$	0,396	0,40
$VH_4 (n=4)$	0,260	0,27
$VH_5 (n=5)$	–	0,33
$VH_6 (n=6)$	–	–0,02

Общий подход к решению задачи о термодинамике твёрдых растворов внедрения, содержащих вакансии, был разработан А.А. Смирновым [10]; позже схожая теория была предложена авторами [11]. Однако указанные работы относятся к сплавам с ГЦК-решёткой; кроме того, некоторые использованные в них допущения не подтверждаются первопринципными расчётами, результаты которых представлены выше. Поэтому в данной работе проведено повторное рассмотрение задачи о равновесной концентрации вакансий.

Известно, что водород, растворяясь в ОЦК-железе, благодаря своему малому радиусу занимает тетраэдрические междоузлия в кристаллической решетке [5, 6, 12]. Рассмотрим твёрдый раствор внедрения водорода в решётке ОЦК-железа, содержащей вакансии, взаимодействующие с растворёнными атомами водорода. Будем считать, что атомы водорода занимают центры тетраэдрических пор, расположенных на гранях куба симметрично на расстоянии  $\frac{1}{4}a$  от центра грани в количестве 4 поры на грань. Расстояние от центра тетраэдрической поры до центров ближай-

ших атомов железа равно  $r_1 = \frac{\sqrt{5}}{4} a$ . Количество тетрапор, приходящихся в целом на один узел решётки, есть  $\nu = 6$ , но фактически каждый атом железа или вакансия окружены  $z_2 = 24$  тетраэдрическими порами, в которых могут находиться атомы водорода.

Таким образом,  $N_H$  атомов водорода размещены в  $\nu N$  тетрапорах, где общее число узлов  $N = N_{Fe} + N_V$  включает в себя  $N_{Fe}$  узлов, занятых атомами железа, и  $N_V$  вакантных узлов. Концентрацию атомов водорода  $\theta_H$  будем выражать отношением

$$\theta_H = \frac{N_H}{N}. \quad (3)$$

Для описания всевозможных конфигураций атомов водорода вокруг вакансий удобно ввести параметр  $n_{Vl}$  – число вакансий, имеющих в ближайшем соседстве  $l$  атомов водорода [10]. Если обозначить через  $\varepsilon_{VH}$  энергию связи атома водорода и вакансии, взятую с противоположным знаком, то для полной потенциальной энергии взаимодействия  $V-H$  во всей системе получится выражение

$$\varepsilon_{VH} \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} l, \quad (4)$$

к которому необходимо добавить энергию образования всех вакансий

$$\varepsilon_V \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} = \varepsilon_V N_V, \quad (5)$$

где  $\varepsilon_V$  – энергия образования моновакансии.

Однако приведённые выше результаты первопринципного компьютерного моделирования (см. табл. 1) свидетельствуют о том, что формула (4), предложенная в [10], неточна. При образовании комплекса  $VH_1$  энергия системы изменяется на  $\varepsilon_{VH1} = -0,6$  эВ; присоединение следующего атома водорода (комплекс  $VH_2$ ) уменьшает энергию ещё на 0,6 эВ. Но для третьего атома водорода понижение энергии составляет уже 0,4 эВ, для четвёртого и пятого  $\sim 0,3$  эВ, а для шестого оно отсутствует.

В используемом приближении взаимодействия ближайших соседей конфигурационная энергия кристалла при  $\theta_H \ll 1$  имеет вид

$$E = E^0(\theta_H) + \varepsilon_V \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} + \sum_{l=0}^{z_2} \varepsilon_{VHl} n_{Vl}. \quad (6)$$

Термодинамическая вероятность, или число различных конфигураций взаимного расположения ближайших взаимодействующих соседей – атомов железа, водорода и вакансий при заданных  $N_{Fe}$ ,  $N_V$  и всех  $n_{Vl}$  определяется выражением, приведённым в [10]:

$$W = \frac{\left( N_{Fe} + \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} \right)!}{N_{Fe}! \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl}} \prod_{l=0}^{z_2} \left( \frac{z_2!}{l!(z_2-l)!} \right)^{n_{Vl}} W_2, \quad (7)$$

где первый множитель отражает число микросостояний, возникающих при всевозможных размещении по решётке вакансий, имеющих различное число ближайших соседей – атомов водорода, а

$$W_2 = \frac{\left\{ \nu \left( N_{Fe} + \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} \right) - z_2 \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} \right\}!}{\left( N_H - \sum_{l=0}^{z_2} l n_{Vl} \right)! \left\{ \nu \left( N_{Fe} + \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} \right) - z_2 \sum_{l=0}^{z_2} n_{Vl} - N_H + \sum_{l=0}^{z_2} l n_{Vl} \right\}!} \quad (8)$$

представляет число способов размещения атомов водорода по тетрапорам с одинаковыми энергиями вдали от вакансий. Отрицательное слагаемое в числителе (8) возникает потому, что каждая вакансия, независимо от точного количества окружающих её атомов водорода, блокирует  $z_2$  тетрапор от заполнения их дополнительными атомами водорода. Второй множитель в формуле (7)

отражает различные конфигурации, которые могут возникать при размещении  $l$  атомов водорода в  $z_2$  тетрапорах внутри вакансии. Возможно, что не все из них являются стабильными, и действительное число возможных конфигураций атомов водорода меньше; но этот вопрос требует отдельного исследования.

Поскольку конфигурационная свободная энергия

$$F = E - TS = E - kT \ln W, \quad (9)$$

то для нахождения равновесного распределения атомов водорода по ближайшему окружению вакансий после подстановки соотношений (6), (7) и (8) в это выражение следует выполнить условие минимума свободной энергии как функции от  $n_{Vl}$ :

$$\frac{\partial F}{\partial n_{Vl}} = 0 \quad (l = 0, 1, 2, 3, \dots). \quad (10)$$

После простых расчётов с использованием единственного допущения  $N_H \gg N_V$  находим равновесные значения

$$\frac{n_{Vl}}{N} = \frac{z_2!}{l!(z_2 - l)!} \cdot \left(\frac{N_H}{vN_{Fe}}\right)^l \cdot \left(1 - \frac{N_H}{vN_{Fe}}\right)^{z_2 - v - l} \exp\left(-\frac{\epsilon_V + \epsilon_{VHl}}{kT}\right). \quad (11)$$

Это выражение переходит в формулу (7) статьи [10], если принять  $v = 1$ ,  $z_2 = 6$  и  $\epsilon_{VHl} = l\epsilon_{VH1}$ . Если взаимодействие вакансий с атомами водорода будет отсутствовать ( $\epsilon_{VHl} = 0$ ), то согласно выражению (11) концентрация комплексов  $VH_l$  будет соответствовать хаотическому распределению атомов водорода в железе с концентрацией вакансий:

$$\frac{n_V^{Fe}}{N} = \exp\left(-\frac{\epsilon_V}{kT}\right). \quad (12)$$

На основе полученной общей формулы запишем конкретные выражения для  $n_{Vl}$  при различных  $l$ . В частности, доля вакантных узлов, в окружении которых нет ни одного атома водорода,

$$\frac{n_{V0}}{N} = \left(1 - \frac{N_H}{6N_{Fe}}\right)^{18} \exp\left(-\frac{\epsilon_V}{kT}\right); \quad (13a)$$

поскольку  $N_H \ll N_{Fe}$ , то она практически совпадает с долей вакансий в чистом железе (12). Далее,

$$\frac{n_{V1}}{N} = 24 \left(\frac{N_H}{6N_{Fe}}\right)^1 \cdot \left(1 - \frac{N_H}{6N_{Fe}}\right)^{17} \exp\left(-\frac{\epsilon_V + \epsilon_{VH1}}{kT}\right); \quad (13б)$$

$$\frac{n_{V2}}{N} = 276 \left(\frac{N_H}{6N_{Fe}}\right)^2 \cdot \left(1 - \frac{N_H}{6N_{Fe}}\right)^{16} \exp\left(-\frac{\epsilon_V + \epsilon_{VH2}}{kT}\right); \quad (13в)$$

$$\frac{n_{V3}}{N} = 2024 \left(\frac{N_H}{6N_{Fe}}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{N_H}{6N_{Fe}}\right)^{15} \exp\left(-\frac{\epsilon_V + \epsilon_{VH3}}{kT}\right) \quad (13г)$$

и т.д.

Выше в табл. 1 представлено изменение энергии связи при добавлении каждого следующего атома водорода к комплексу  $VH_{l-1}$ ; суммирование от 1 до  $l$  позволяет найти  $\epsilon_{VHl}$ :

$$\epsilon_{VHl} = -\sum_{n=1}^l E_{trap}(1, n); \quad (14)$$

рассчитанные значения  $\epsilon_{VHl}$  приведены в табл. 2.

Для расчётов по формулам (13) требуется также энергия образования вакансии  $\epsilon_V$ . Следует отметить, что полученная из первопринципного расчёта величина  $\epsilon_V = 2,15$  эВ находится на верхнем пределе диапазона значений, наблюдавшихся экспериментально (от  $1,4 \pm 0,1$  до  $2,0 \pm 0,2$  эВ) [13, 14]. А. Зесгер в обзоре [15] на основании литературных данных и собственных экспериментов пришёл к значениям  $\epsilon_V = 1,61 \dots 1,75$  эВ, а из результатов работы [16], где непосредственно измерялась концентрация вакансий после закалки от 1040 К, получил  $\epsilon_V = 1,59$  эВ.

М.А. Штремель [17] считает наиболее надёжным значение  $\epsilon_V = 1,6$  эВ. Авторы [13] показали, что повышение концентрации углерода в  $\alpha$ -железе с  $2 \cdot 10^{-5}$  до  $1 \cdot 10^{-3}$  мас. % приводит к снижению наблюдаемой энергии образования вакансии с  $1,79 \pm 0,10$  до  $1,53 \dots 1,60$  эВ. Возможно, именно поэтому рассчитанное для чистого железа значение  $\epsilon_V$  выше, чем в большинстве экспериментов. В дальнейших расчётах мы использовали экспериментальное значение  $\epsilon_V = 1,6$  эВ.

Таблица 2

Энергии захвата вакансией  $l$  атомов водорода  $\epsilon_{VHl}$

$l$	0	1	2	3	4	5	6
$\epsilon_{VHl}$ , эВ/вакансия	0	-0,603	-1,210	-1,606	-1,866	-2,196	-2,176

Результаты расчётов доли вакантных узлов, окружённых различным числом  $l$  атомов водорода, представлены на рисунке для концентраций водорода  $\theta_H = 10^{-5}$  и  $10^{-4}$ , что соответствует массовым концентрациям 1 и 11 ppm.

При всех температурах доля вакансий, содержащих 1, 2, 3 и более атомов водорода, значительно превышает долю одиночных вакансий, причём проявляется конкуренция между вакансиями с различным окружением. С понижением температуры преимущество последовательно получают комплексы  $VH_2$ ,  $VH_3$ , а ниже 350...450 К почти все вакансии оказываются связанными с пятью атомами водорода ( $VH_5$ ).

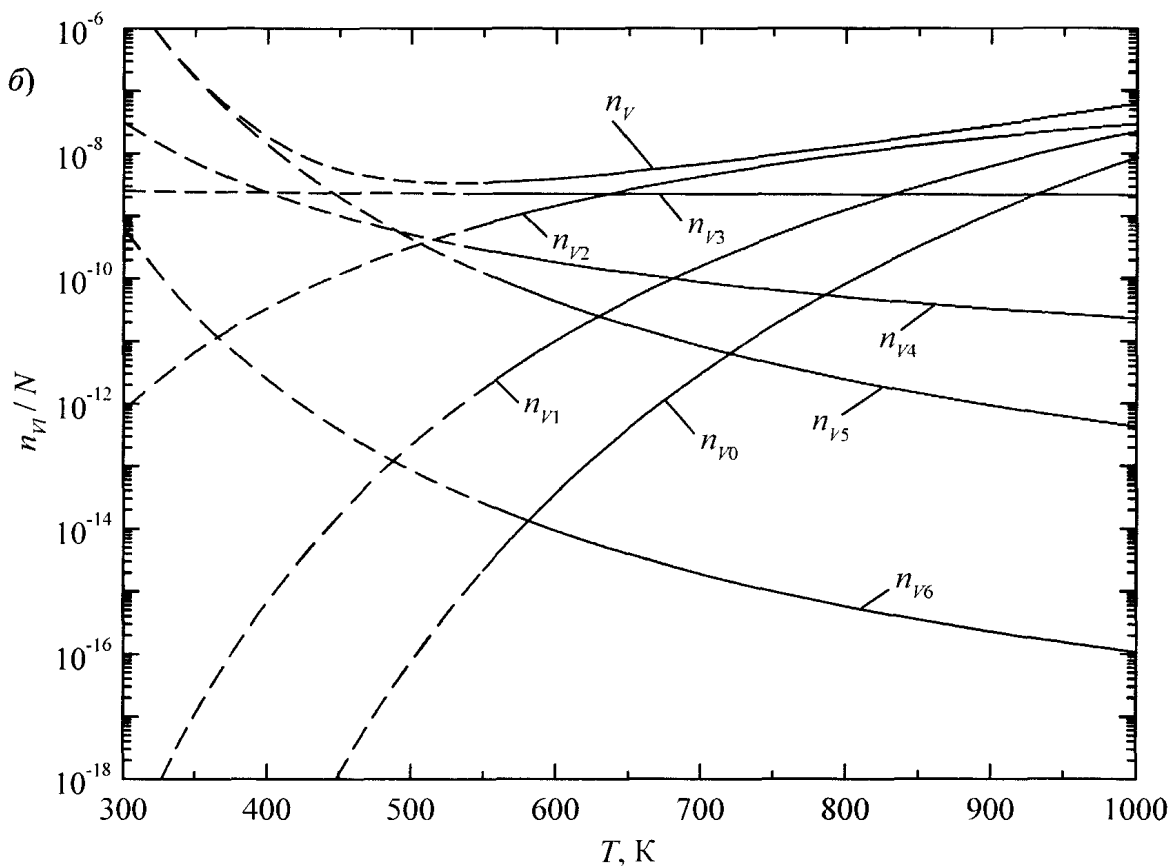
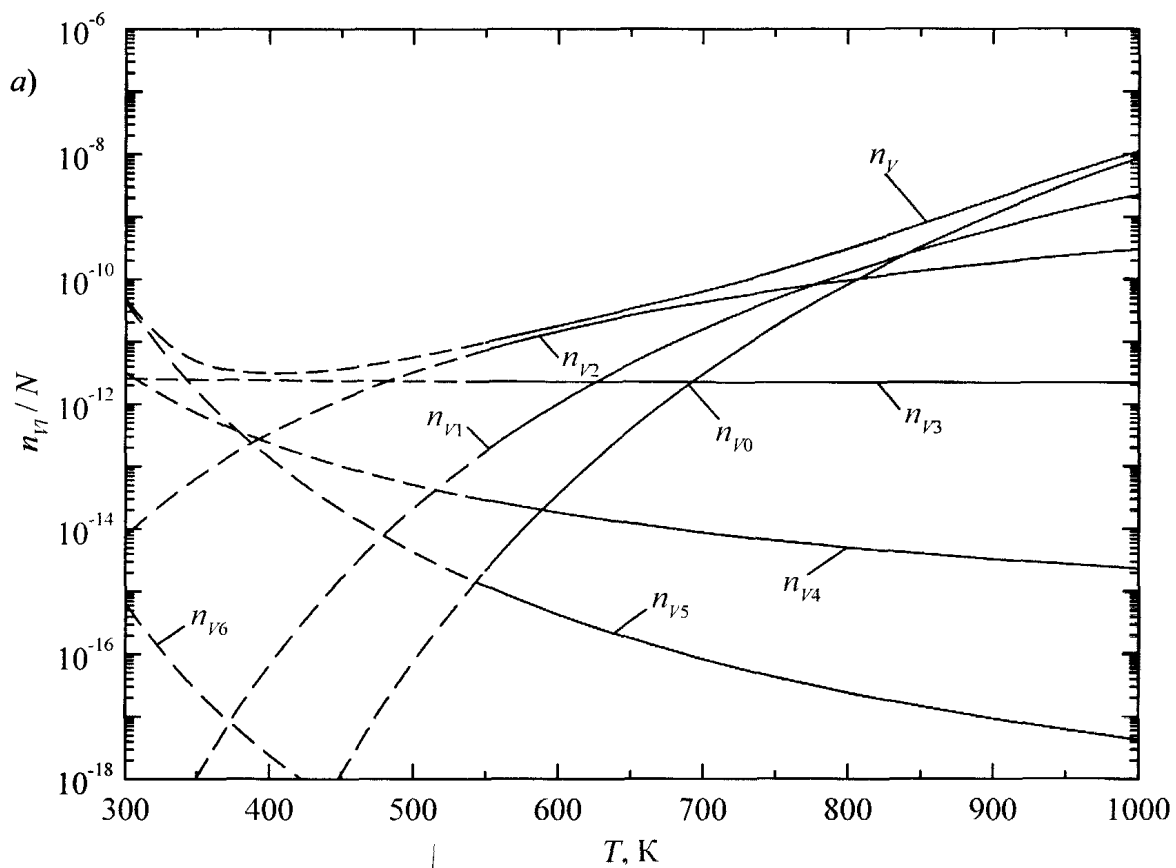
Равновесное количество самих вакансий можно найти как сумму всех  $n_{Vl}$ . При таком суммировании можно ограничиться  $l=0 \dots 6$ , так как начиная с  $l=6$  энергия  $\epsilon_{VHl}$  начинает уменьшаться (табл. 2), что приводит к резкому уменьшению соответствующих  $n_{Vl}$  (см. рисунок):

$$\frac{n_V}{N} = \sum_{l=0}^6 \frac{n_{Vl}}{N}. \quad (15)$$

Из графиков на рисунке видно, что взаимодействие с атомами водорода резко увеличивает равновесную концентрацию вакансий (напомним, что доля вакансий в железе, не содержащем водорода, практически совпадает с  $\frac{n_{V0}}{N}$ ). С понижением температуры этот эффект усиливается и при 500 К может достигать 5...8 порядков. При более низких температурах значительной становится доля комплексов  $VH_4$  и  $VH_5$ , для которых энергия взаимодействия  $\epsilon_{VHl}$  превышает по абсолютной величине энергию образования вакансии  $\epsilon_V$  и снижение концентрации вакансий должно смениться её ростом. Этот эффект резко усиливается с ростом общей концентрации водорода.

Впрочем, диффузия вакансий в железе ниже 500...600 К почти прекращается, поэтому указанные изменения равновесной концентрации вакансий при низких температурах в действительности могут не реализоваться. Это должно оказывать влияние и на эффекты захвата вакансиями водорода.

Таким образом, в данной работе предложен новый вариант статистической теории образования вакансий в сплавах Fe-H, учитывающий обнаруженный при первопринципных компьютерных расчётах эффект неодинаковой энергии связи с вакансией для различных групп атомов водорода, расположенных в первой координационной сфере, и показано, что, как и в теории А.А. Смирнова, взаимодействие с атомами водорода увеличивает равновесную концентрацию вакансий.



Температурная зависимость доли вакансий с различным окружением атомами водорода, рассчитанная по формулам (11), (13): а – при общей концентрации водорода  $\theta_H = 1 \cdot 10^{-6}$ ; б – при  $\theta_H = 1 \cdot 10^{-4}$

### Литература

1. Рябов, Р.А. К вопросу о механизме образования флоксонов / Р.А. Рябов, П.В. Гельд // Металлы. – 1975. – № 6. – С. 114–116.
2. Besenbacher, F. Multiple hydrogen occupancy of vacancies in Fe / F. Besenbacher, S.M. Myers, P. Nordlander, J.K. Nørskov // J. Appl. Phys. – 1987. – Т. 61, № 5. – С. 1788–1794.
3. Hydrogen-induced equilibrium vacancies in FCC iron-base alloys / V.G. Gavriljuk, V.N. Bugaev, Yu.N. Petrov *et al.* // Scripta Materialia. – 1996. – Т. 34, № 6. – С. 903–907.
4. Fukai, Y. Formation of superabundant vacancies in M–H alloys and some of its consequences: a review / Y. Fukai // Journal of Alloys and Compounds. – 2003. – Т. 356–357. – С. 263–269.
5. Tateyama, Y. Stability and clusterization of hydrogen-vacancy complexes in  $\alpha$ -Fe: an *ab initio* study / Y. Tateyama, T. Ohno // Phys. Rev. B. – 2003. – Т. 67. – С. 174105-1–174105-10.
6. Counts, W.A. First-principles energetics of hydrogen traps in  $\alpha$ -Fe: point defects / W.A. Counts, C. Wolverton, R. Gibala // Acta Mat. – 2010. – Т. 58, № 14. – С. 4730–4741.
7. Mao, J. Thermodynamics of Hydrogen and Vacancies in Metals: A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree Doctor of Philosophy / J. Mao. – Houston, 2002.
8. Fukai, Y. Evidence of copious vacancy formation in Ni and Pd under a high hydrogen pressure / Y. Fukai, N. Okuma // Jap. J. Appl. Phys. – 1993. – Т. 32, Ч. 2, № 9A. – С. L1256–L1259.
9. Iwamoto, M. Superabundant vacancy formation in iron under high hydrogen pressures: thermal desorption spectroscopy / M. Iwamoto, Y. Fukai // Mater. Trans. JIM. – 1999. – Т. 40, № 7. – С. 606–611.
10. Смирнов, А.А. Теория вакансий в сплавах внедрения / А.А. Смирнов // Украинский физический журнал. – 1992. – Т. 37, № 8. – С. 1188–1211.
11. Fukai, Y. Superabundant vacancy formation and its consequences in metal–hydrogen alloys / Y. Fukai, Y. Kurokawa, H. Hiraoka // J. Jap. Inst. Metals. – 1997. – Т. 61, № 8. – С. 663–670.
12. Jiang, D.E. Diffusion of interstitial hydrogen into and through BCC Fe from first principles / D.E. Jiang, E.A. Carter // Phys. Rev. B. – 2004. – Т. 70. – С. 064102.
13. Positron Annihilation on Pure and Carbon-Doped  $\alpha$ -Iron in Thermal Equilibrium / L. De Schepper, D. Segers, L. Dorikens-Vanpraet *et al.* // Phys. Rev. B. – 1983. – Т. 27, № 9. – С. 5257–5269.
14. Atomic Defects in Metals / ed. by H. Ullmaier. – Landolt–Börnstein, New Series. – Springer-Verlag, 1991. – Т. III/25. – 128 с.
15. Seeger, A. Lattice vacancies in high-purity  $\alpha$ -iron / A. Seeger // Physica Status Solidi (a). – 1998. – Т. 167, № 2. – С. 289–311.
16. Seydel, O. Quenching-in of vacancies in pure  $\alpha$ -iron / O. Seydel, G. Frohberg, H. Wever // Physica Status Solidi (a). – 1994. – Т. 144, № 1. – С. 69–79.
17. Шгремель, М.А. Прочность сплавов: в 2 ч. / М.А. Шгремель. – М.: МИСиС, 1999. – Ч. I: Дефекты решётки. – 384 с.

Поступила в редакцию 15 февраля 2012 г.

D.A. Mirzaev<sup>1</sup>, A.A. Mirzoev<sup>2</sup>, K.Yu. Okishev<sup>3</sup>, A.D. Shaburov<sup>4</sup>, G.E. Ruzanova<sup>5</sup>, A.V. Ursaeva<sup>6</sup>

The authors developed a statistic theory of solid iron-hydrogen alloys considering interaction of hydrogen with the vacancies for improving A.A. Smirnov's theory. The authors estimated the energy of formation of the complexes with different number of hydrogen atoms "from the first principles". They gave the quantitative evaluation of concentration of such complexes depending on the temperature and influence of mutual interaction of the vacancies with hydrogen on their equilibrium concentration.

*Keywords: iron, hydrogen, vacancy, first principle calculations, vacancy concentration.*

### References

1. Ryabov R.A., Geld P.V. К вопросу о механизме образования флокенов (*On the question of formation mechanism of flakes*) // *Metally*. 1975. no. 6. pp. 114–116. (in Russ.).
2. Besenbacher F., Myers S.M., Nordlander P., Nørskov J.K. Multiple hydrogen occupancy of vacancies in Fe. *J. Appl. Phys.* 1987. Vol. 61, no. 5. pp. 1788–1794. DOI:10.1063/1.338020
3. Gavriljuk V.G., Bugaev V.N., Petrov Yu.N., Tarasenko A.V., Yanchitski B.Z. Hydrogen-induced equilibrium vacancies in FCC iron-base alloys. *Scripta Materialia*. 1996. Vol. 34, no. 6. pp. 903–907.
4. Fukai Y. *Journal of Alloys and Compounds*. 2003. Vol. 356–357. pp. 263–269. DOI:10.1016/S0925-8388(02)01269-0
5. Tateyama Y., Ohno T. Stability and clusterization of hydrogen-vacancy complexes in  $\alpha$ -Fe: an *ab initio* study. *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. pp. 174105-1–174105-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.174105
6. Counts W.A., Wolverton C., Gibala R. First-principles energetics of hydrogen traps in  $\alpha$ -Fe: point defects. *Acta Mat.* 2010. Vol. 58, no. 14. pp. 4730–4741. DOI:10.1016/j.actamat.2010.05.010
7. Mao J. Thermodynamics of Hydrogen and Vacancies in Metals: A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree Doctor of Philosophy. Houston, 2002.
8. Fukai Y., Okuma N. Evidence of copious vacancy formation in Ni and Pd under a high hydrogen pressure. *Jap. J. Appl. Phys.* 1993. Vol.32, Pt. 2, no. 9A. pp. L1256–L1259. DOI: 10.1143/JJAP.32.L1256
9. Iwamoto M., Fukai Y. Superabundant vacancy formation in iron under high hydrogen pressures: thermal desorption spectroscopy. *Mater. Trans. JIM*. 1999. Vol. 40, no. 7. pp. 606–611.
10. Smirnov A.A. Теорія вакансій в сплавах введнення (*Theory of vacancies in interstitial alloys*). *Ukrainian Journal of Physics*. (Russ. Ed.). 1992. Vol. 37, no. 8. pp. 1188–1211. (in Russ.).
11. Fukai Y., Kurokawa Y., Hiraoka H. *J. Jap. Inst. Metals*. 1997. Vol. 61, no. 8. pp. 663–670.
12. Jiang D.E., Carter E.A. Diffusion of interstitial hydrogen into and through BCC Fe from first principles. *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70. p. 064102. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.064102
13. De Schepper L., Segers D., Dorikens-Vanpraet L., Dorikens M., Knuyt G., Stals L.M., Moser P. *Phys. Rev. B* 1983. Vol. 27, no. 9. pp. 5257–5269. DOI: 10.1103/PhysRevB.27.5257
14. Ullmaier H. (ed.) Atomic Defects in Metals. Landolt-Börnstein – Group III Condensed Matter. Vol. 25. 1991. 128 p.
15. Seeger A. *Physica Status Solidi (a)*. 1998. Vol. 167, no. 2. pp. 289–311.
16. Seydel O., Frohberg G., Wever H. Quenching-in of vacancies in pure  $\alpha$ -iron. *Physica Status Solidi (a)*. 1994. Vol. 144, no. 1. pp. 69–79. DOI: 10.1002/pssa.2211440108
17. Shtremel M.A. *Prochnost' splavov. Ch. I. Defekty reshjotki* (Strength of alloys. Part I. Lattice defects). Moscow: MISIS, 1999. 384 p.

<sup>1</sup> Mirzaev Dzhahal Aminulovich is Dr Sc (Physics and Mathematics), professor of the Physical Metallurgy and Solid State Physics Department, Southern Ural State University E-mail mirzayev@physmet.susu.ac.ru

<sup>2</sup> Mirzoev Alexander Ammulaevich is Dr Sc (Physics and Mathematics), professor of the General and Theoretical Physics Department, Southern Ural State University E-mail mirzoev@physics.susu.ac.ru

<sup>3</sup> Okishev Konstantin Yurievich is Cand Sc (Physics and Mathematics), an associate professor of the Physical Metallurgy and Solid State Physics Department, Southern Ural State University e-mail okishev@physmet.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Shaburov Andrey Dmitrievich is a post-graduate student of the Physical Metallurgy and Solid State Physics Department, Southern Ural State University E-mail adshaburov@mail.ru

<sup>5</sup> Ruzanova Galina Evgenievna is an undergraduate student of the General and Theoretical Physics Department, Southern Ural State University E-mail ruzanova@physics.susu.ac.ru

<sup>6</sup> Ursaeva Anastasia Vladimirovna is an undergraduate student of the General and Theoretical Physics Department, Southern Ural State University E-mail ursaeva@physics.susu.ac.ru



# НАЧАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ СПЛАВОВ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ ПО ТЕМПЕРАТУРНО-ПРОГРАММИРУЕМОЙ ДЕСОРБЦИИ

С.И. Морозов<sup>1</sup>, Д.А. Жеребцов<sup>2</sup>

Рассмотрены состояния свободной поверхности двухкомпонентных сплавов Cu–Ag по изображениям, полученным с помощью растрового электронного микроскопа. Исследовано начальное распределение компонентов сплавов, изученных методом температурно-программируемой десорбции. Подтверждено расслоение поверхностного твердого раствора на две фазы, богатые медью и серебром, отмечена их эволюция в зависимости от объемного содержания серебра

*Ключевые слова:* температурно-программируемая десорбция, масс-спектрометрия, поверхность, поверхностные фазы, двухкомпонентные сплавы Cu–Ag, растровая электронная микроскопия.

**Введение.** Развитие промышленного производства в современных условиях требует постоянного совершенствования технологических процессов, создания новых материалов с заданными свойствами, использования специальных датчиков для измерения и контроля изготавливаемой продукции. Разработка новых технологий невозможна без четкого понимания процессов, протекающих на поверхности металлов и их сплавов в широком интервале температур как в твердом, так и жидком состоянии. Для изучения свойств поверхности используются различные методы, которые взаимно дополняют друг друга и позволяют получить уникальную информацию для создания необходимых моделей. Одним из таких методов является метод температурно-программируемой десорбции [1], позволяющий получить надежную информацию в области температур от 800 до 1500 К.

**Метод.** В данной работе исследовались свободные поверхности двухкомпонентных сплавов Cu–Ag с содержанием серебра 5,0; 19,9 и 72,0 вес. %, которые изучались ранее методом температурно-программируемой десорбции (ТПД) в интервале температур от 700 до 1500 К как в твердом, так и жидком состояниях [2].

Данные сплавы приготовлены из чистых металлов Cu (99,99 %) и Ag (99,999 %) плавкой в корундовом тигле в атмосфере гелия марки ВЧ с выдержкой 10 мин при  $T = 1500$  К с последующим гомогенизирующим отжигом в течение двух часов при 1100 К.

В связи с особенностями физической реализации метод ТПД [3] не позволяет получать надежную и точную информацию о состоянии поверхности сплавов при комнатной температуре. Данные о модели поверхностного слоя можно извлечь косвенно, используя предложенную методику [4]. Для ее проверки и уточнения полученной модели было проведено данное исследование морфологии поверхности закристаллизованных расплавов на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-7001F с термополевой пушкой с радиусом острия катода 350 нм, при токе электронного пучка 335 пА, разрешение 7 нм, при вакууме в камере образца  $10^{-5}$  Па, при увеличении от 200 до 20 000 крат. Элементный анализ проводился при помощи рентгенофлуоресцентного анализатора Oxford INCA X-max 80 с кремний-дрейфовым детектором площадью 80 мм<sup>2</sup>, охлаждаемым элементами Пельтье до  $-60$  °С.

**Результаты.** С помощью электронного микроскопа получены изображения поверхности исследуемых двойных сплавов Cu–Ag с содержанием серебра 5,0; 19,9 и 72,0 вес. % (рис. 1).

На рис. 1 представлены свободные поверхности исследуемых сплавов, что позволяет проследить изменения состояния поверхности с увеличением содержания серебра.

<sup>1</sup> Морозов Сергей Иванович – доцент, кандидат физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail morozov@physics.susu.ac.ru

<sup>2</sup> Жеребцов Дмитрий Анатольевич – кандидат химических наук, инженер, кафедра физической химии, Южно-Уральский государственный университет

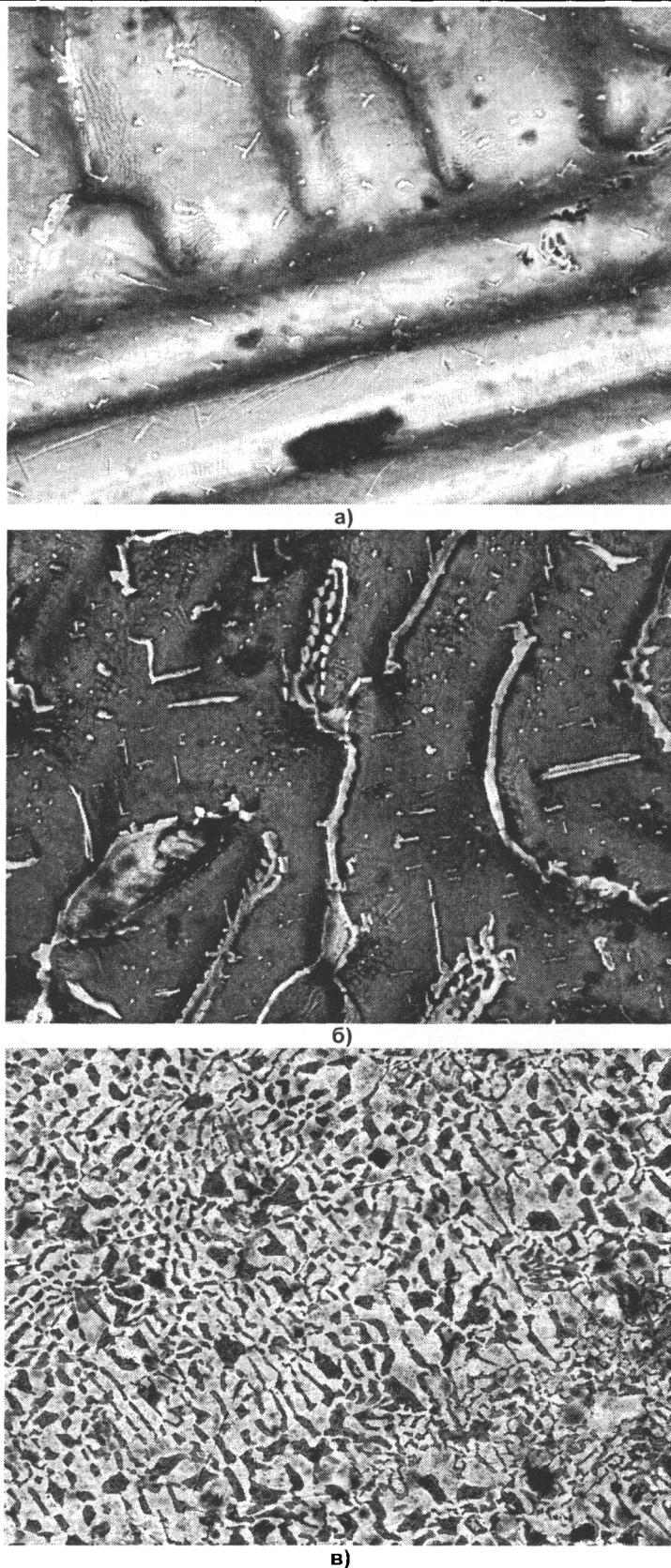


Рис. 1. Морфология свободной поверхности двухкомпонентных сплавов Cu–Ag в режиме регистрации отраженных электронов (увеличение 1000):  
 а) 5,0 вес. % Ag, б) 19,9 вес. %, в) 72,0 вес. %

На рис. 1, а отчетливо видны монокристаллические области меди размером 10x200 мкм, упорядоченные в перпендикулярных направлениях. На их поверхности заметные светлые игольчатые кристаллы, когерентно выделившиеся из твердого раствора фазы на основе серебра (рис. 2), имеющие другую ориентацию, но сохраняющие перпендикулярность между собой. Поперечное сечение кристаллов фазы на основе серебра составляет от 0,25 мкм до 1 мкм.

С помощью микрорентгеноспектрального анализа были получены карты распределения элементов сплава Cu с 5 вес. % Ag (рис. 3) (белые светлые области отражают большее содержание соответствующего элемента на поверхности).



Рис. 2. Фаза богатая серебром (увеличение в 20 000 раз)

С увеличением содержания серебра в объеме до 19,9 вес. % количество областей богатых серебром возрастает. Они, кроме отмеченных ранее, образуют кристаллы фазы на основе серебра между кристаллами фазы на основе меди (рис 1, б). Размер кристаллов фазы на основе серебра достигает 2,5 x 40 мкм.

Образование кристаллов двух фаз становится особенно отчетливым при 72,0 вес. % Ag (рис. 1, в). Области богатые серебром занимают обширную часть поверхности. Размеры кристаллов обеих фаз составляют 2,5–5 мкм.

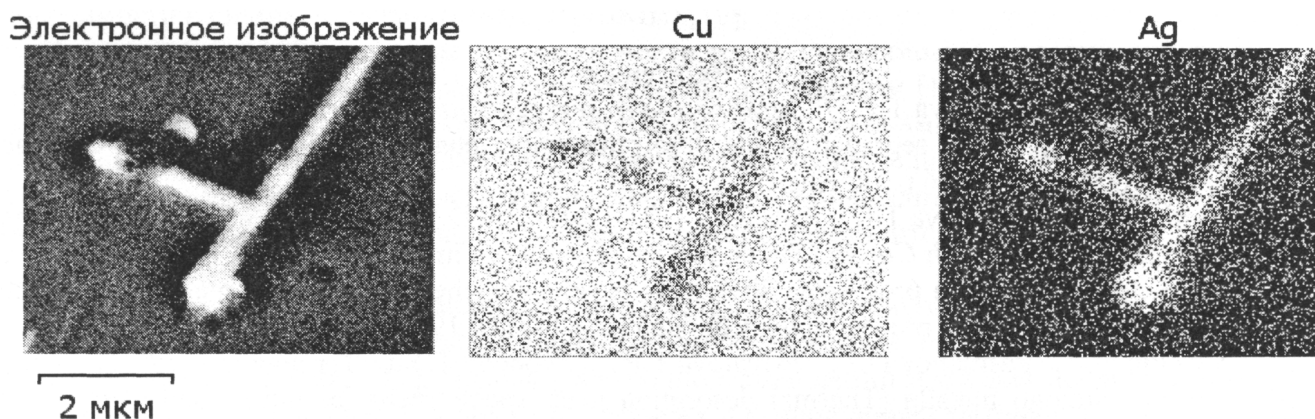


Рис. 3. Распределение элементов сплава Cu–Ag с 5 вес. % (увеличение в 1000 раз)

Как показывает элементный анализ, состав поверхности исследуемых образцов (см. таблицу) незначительно отличается от объемного состава, что не согласуется с [2]. Возможно, это объясняется более значительной глубиной поверхностного слоя (до 10 мкм), используемой анализатором для определения состава поверхности.

**Выводы.** Таким образом, исследовано распределение компонентов сплавов Cu–Ag, которое частично подтверждает модель расположения атомов меди и серебра на поверхности, предложенную в работе [2] по результатам изучения термической десорбции компонентов исследуемых сплавов в твердом и жидком состояниях.

Концентрация компонентов сплава  
в поверхностных слоях, вес. %

Сплав Cu–Ag	Cu	Ag
5,0	94,9	5,1
19,9	76,3	23,7
72,0	32,8	67,3

### Литература

1. Вяткин, Г.П. Поверхностная сегрегация и десорбция при фазовых переходах в металлах // Г.П. Вяткин, Т.П. Привалова. – Ч.: Издательство ЧГТУ, 1996. – 276 с.
2. Поверхностная сегрегация серебра в сплавах Cu–Ag / Г.П. Вяткин, Т.О. Алексеева, Т.П. Привалова и др. // Физико-химические основы металлургических процессов: сб. науч. тр. – Челябинск: ЧГТУ, 1995. – С. 80–85.
3. Термодесорбционная масс-спектрометрия жидкого металла / Г.П. Вяткин, Д.В. Пастухов, Т.П. Привалова, Т.Ю. Никонова // Расплавы. – 1993. – № 1. – С. 3–9.
4. Пат. 2000625 Российская Федерация, МПК<sup>5</sup> H01J49/14, H01J49/26. Способ определения поверхностной концентрации компонентов бинарного сплава методом термодесорбционной масс-спектрометрии / Д.В. Пастухов, Г.П. Вяткин, Т.П. Привалова, А.Н. Головин; опубл. 07.09.1993.

Поступила в редакцию 30 марта 2012 г.

## THE INITIAL DISTRIBUTION OF ALLOY COMPONENTS IN THE EXPERIMENT OF TEMPERATURE PROGRAMMING DESORPTION

S.I. Morozov<sup>1</sup>, D.A. Zherebtsov<sup>2</sup>

This paper considers the conditions of the binary alloys Cu–Ag free surfaces judging by the images obtained by means of a scanning electron microscope. The initial distribution of alloy components, studied by temperature programming desorption method, were analyzed. The solid solution layering to Cu and Ag rich phases was confirmed. Their evolution depending on Ag volume content was observed.

*Keywords: temperature-programming desorption, mass-spectrometry, surface, surface phases, Cu–Ag binary alloy, scanning electronic microscope.*

### References

1. Vyatkin G.P., Privalova T.P. *Poverkhnostnaia segregatsiia i desorbtsiia pri fazovykh perekhodakh v metallakh* (Surface segregation and desorption under phase transitions in metals). Chelyabinsk, Izd-vo ChGTU, 1996. 276 p. (in Russ.).
2. Vyatkin G.P., Alekseeva T.O., Privalova T.P., Pastukhov D.V., Morozov S.I. *Poverkhnostnaja segregaciya srebra v splavakh Cu–Ag* (Silver surface segregation in alloys Cu–Ag). *Fiziko-khimicheskie osnovy metallurgicheskikh processov: sb. nauch. tr* (Physico-chemical bases of metallurgical processes: a collection of scientific proceedings). Cheljabinsk: ChGTU, 1995. pp. 80–85. (in Russ.).
3. Vyatkin G.P., Pastukhov D.V., Privalova T.P., Nikonova T.Yu. *Termodesorbcionnaja mass-spektrometrija zhidkogo metalla* (Thermal desorption mass spectrometry of liquid metal). *Rasplavy*. 1993. no. 1. pp. 3–9. (in Russ.).
4. Pastukhov D.V., Vyatkin G.P., Privalova T.P., Golovin A.N. *Sposob opredelenija poverkhnostnoj koncentracii komponentov binarnogo splava metodom termodesorbcionnoj mass-spektrometrii* (The method for determining surface concentrations of the binary alloy using thermal desorption mass spectrometry). Patent RU 2000625 no. 2000625 МПК<sup>5</sup> H01J49/14, H01J49/26.

<sup>1</sup> Morozov Sergey Ivanovich is Cand. Sc (Physics and Mathematics), associate professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University. E-mail: morozov@physics.susu.ac.ru

<sup>2</sup> Zherebtsov Dmitry Anatolievich is Cand. Sc. (Chemistry), engineer, Physical Chemistry Department, South Ural State University

# СОСТОЯНИЕ ВЫСОКОЙ ПРОВОДИМОСТИ В СИСТЕМАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

Л.М. Свирская<sup>1</sup>

Рассматривается связь состояния высокой электронной проводимости с пониженной размерностью проводящей подсистемы. Обсуждается возможность теоретического объяснения существования такого состояния на основе критерия отключения взаимодействия электронов с элементарными возбуждениями.

*Ключевые слова:* состояние высокой проводимости, низкоразмерные системы.

## Введение

Известно, что твёрдые тела, проводящие электрический ток, могут находиться в нормальном и сверхпроводящем состоянии [1]. Однако начиная с работы [2] стали накапливаться экспериментальные факты [3–8, 17, 18, 34], приводящие к выводу о возможности реализации в нормальном состоянии наряду с состоянием обычной электронной проводимости особого состояния высокой проводимости (СВП). В отличие от сверхпроводимости, в СВП вещество имеет необычно высокую, но конечную проводимость.

В то время, как сверхпроводимость, открытая 100 лет назад [9], хорошо изучена экспериментально и теоретически, имеются общепризнанные феноменологические и микроскопические теории низкотемпературной сверхпроводимости [1, 10, 11], природа СВП изучена недостаточно. Одним из первых экспериментальных исследований, в котором было обнаружено СВП, является работа Р. Огга [2]. Он обнаружил, что быстрозамороженные растворы натрия в аммиаке ( $C_{Na} \sim 2,5\text{--}3$  ат. %) обладают при температурах жидкого азота и кислорода аномально высокой проводимостью. Резкое падение (более чем на 17 порядков) электросопротивления затвердевшего раствора он отождествил со сверхпроводимостью. Им же была предложена интерпретация сверхпроводимости, основанная на гипотезе бозе-эйнштейновской конденсации пар электронов с противоположными проекциями спинов. Эта интерпретация предвосхитила установленное значительно позже понимание роли электронных куперовских пар в микроскопической теории сверхпроводимости Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [10].

Последующие многочисленные попытки подтвердить существование сверхпроводящего состояния в быстрозамороженных растворах не увенчались успехом [12–14] и привели к противоречивым выводам относительно характера проводимости металл-аммиачных растворов. Обсуждалась возможность реализации высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в этих системах [15, 16], в частности, было высказано предположение о появлении неравновесной ВТСП [16] при быстром охлаждении раствора, когда образец быстро переводится через температуру фазового перехода.

Для объяснения СВП в полимерных композитах, исследованных в 1980–90-е гг., были предложены такие модели, как стимулированная давлением инжекция электронов из металла в зону проводимости диэлектрика [17], модель электронной самоорганизации для полярных эластомеров [18], модель проводящих каналов, возникающих в изолирующей матрице [6]. Однако общей теории, описывающей переход из диэлектрического состояния в СВП, предложено не было. Рассматриваемый период можно охарактеризовать как этап накопления эмпирических данных о СВП в полимерах.

В последние два десятилетия активно исследуется как экспериментально, так и теоретически явление электронного переключения в СВП в «сэндвич»-структурах металл–полимер–металл [19–22] и в соединениях переходных металлов [23], возникающего в результате каких-либо внешних воздействий. Установление механизмов проводимости в этих материалах и определение

<sup>1</sup> Свирская Людмила Моисеевна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: svirskayalm@mail.ru

условий возникновения проводящего состояния является актуальной задачей [20]. Для объяснения эффекта переключения в СВП были предложены различные механизмы переноса заряда: термоэлектронная эмиссия Шоттки [20, 21], квантовое туннелирование на ловушечные уровни вблизи уровня Ферми [20], прыжковый транспорт носителей заряда по объёмным ловушечным состояниям полимерной пленки [20]. Возникновение высокопроводящего состояния в полимерных пленках связывается в [21] с формированием узкой проводящей зоны вблизи уровня Ферми, расположенной в запрещенной зоне диэлектрика. Согласно [22] ответственным за эффект электронного переключения полимерного диэлектрика является фазовый переход первого рода, происходящий в металле, который влияет на параметры потенциального барьера на границе металл–полимер. В [23] прослеживается идея о взаимосвязи между переходом металл–изолятор и электронным переключением в соединениях переходных металлов в неравновесных условиях.

В упомянутых выше работах содержатся экспериментальные факты, указывающие на взаимосвязь высокопроводящего состояния с пониженной размерностью проводящей подсистемы (слой металл-аммиачного раствора в виде замкнутого кольца в экспериментах [2], одномерные проводящие капилляры в затвердевшем металл-аммиачном растворе [4], одномерные проводящие каналы в пленках окисленного полипропилена [6], высокопроводящие наноразмерные каналы, окруженные диэлектрической средой полимера [21]). Однако теории, объясняющей переход в высокопроводящее состояние на основе указанной взаимосвязи, в приведенных работах не содержится.

В данной работе приводится теоретическое объяснение СВП как результата неполного, но существенного отключения взаимодействия токоносителей с элементарными возбуждениями в квазиодномерных системах. Основы теории СВП для квазиодномерных систем были созданы в работах [24, 25]. За прошедшее время альтернативных теоретических подходов к рассматриваемой проблеме предложено не было. Остался также открытым вопрос о природе резкого возрастания эффективной массы токоносителей при переходе в СВП [26, 27].

### Основные экспериментальные факты

В 1946 г. Огг установил, что при быстром охлаждении растворов натрия в аммиаке до температур порядка 90–190 К (это на порядок выше температур, при которых тогда наблюдалась сверхпроводимость металлов, сплавов и соединений) электросопротивление затвердевшего раствора упало до значений порядка  $10^{-13}$  Ом, в то время как жидкие образцы имели электросопротивление порядка тысяч Ом. Огг предположил, что исследованные им замороженные растворы переходят при указанных выше температурах в сверхпроводящее состояние. Если бы это предположение подтвердилось, то честь открытия высокотемпературной сверхпроводимости принадлежала бы Оггу, а дату открытия ВТСП следовало бы передвинуть на 40 лет назад – с 1986 г. на 1946 г.

В 1988 г. Арндт [4, 26, 27] экспериментально установил возможность перехода в СВП геля, полученного при распаде металл-аммиачных растворов ( $M + NH_3 \rightarrow MNH_2 + \frac{1}{2} H_2$ , 3–5 мол. % металла,  $M = Na, Li$ ). До перехода в СВП коэффициент  $\sigma$  удельной электропроводности составлял величину порядка  $20 \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ , после перехода –  $\sigma \sim 1,8 \cdot 10^9 \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ . Арндт высказал предположение, что это – следствие образования одномерных капилляров из нераспавшегося раствора внутри губкообразной структуры из коагулированных частиц аминов Na и Li и что вдоль капилляров скользят волны зарядовой плотности и реализуется состояние, близкое к сверхпроводимости. При этом проводимость капилляров в 3 000 раз превосходит проводимость меди при комнатной температуре, а плотность тока в капилляре  $j \approx 8,8 \cdot 10^6 \text{ А/см}^2$ . Анализируя экспериментальные данные, Арндт пришел к заключению: «наблюдаемая высокая проводимость, возможно, имеет нетривиальные причины, т.е. мы имеем дело с новым, высокопроводящим, состоянием» [27].

В [6] было обнаружено, что удельное электросопротивление тонких плёнок полипропилена (ПП) после окисления (~ 3 ч) и облучения ультрафиолетом (~ 60 мин) уменьшается скачком более чем на 10 порядков, достигая значений  $\rho \sim 1 - 100 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ . По мнению авторов работы [6], исследованный материал представляет собой изолирующую матрицу с одномерными проводящими каналами, диаметр которых не превышает  $10^{-5}$  см. Было высказано предположение, что каналы являются сверхпроводящими в области 300 К.

В [28, 29] было установлено скачкообразное разрушение аномально сильного диамагнетизма ПП магнитным полем с переходом образца в ферромагнитное состояние. Согласно оценкам [29] диаметр проводящих каналов, соответствующих сосуществованию СВП и ферромагнетизма в ПП, не превышает 2 мкм.

Во всех перечисленных экспериментах наблюдалось резкое уменьшение электросопротивления, но оно все же не обращалось в нуль, как должно быть в состояниях идеальной проводимости или сверхпроводимости. Не обнаружен в исследованных материалах также эффект Мейсснера, являющийся существенным признаком сверхпроводящего состояния. Всё это указывает на актуальность поиска механизма реализации СВП, отличного от сверхпроводимости. Учитывая пониженную размерность описанных выше систем, представляется целесообразным при объяснении СВП использовать выводы, вытекающие из модели квазиодномерной проводящей подсистемы [24, 25], без предположения о существовании локальных сверхпроводящих областей с энергетической щелью для возбуждений.

### Теория состояния высокой проводимости в квазиодномерной проводящей подсистеме

В [24, 25] рассмотрен случай одномерного движения зонного электрона, имеющего закон дисперсии

$$E(k) = E_0 - 2|L|\cos ka, \quad (1)$$

где  $L$  – интеграл переноса,  $a$  – параметр кристаллической решетки,  $k$  – волновой вектор электрона,  $E_0$  – атомный уровень, и фонона с законом дисперсии

$$\omega_q = \frac{2u}{a} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|, \quad (2)$$

где  $\omega$  – частота,  $q$  – волновой вектор фонона,  $u$  – скорость звука при  $q \rightarrow 0$ . Из законов сохранения энергии и квазиимпульса вытекают условия, определяющие возможность взаимодействия электронов с реальными фононами. Эти условия приведены в табл. 1.

Таблица 1

Излучение (поглощение) фонона зонным электроном

Излучение реального фонона возможно	Излучение реального фонона невозможно
$\frac{2 L a}{\hbar} \geq u, \quad (3)$	$\frac{2 L a}{\hbar} < u, \quad (3.1)$
$V_{\max} \geq u, \quad (4)$	$V_{\max} < u, \quad (4.1)$
$\Delta E_e \geq \Delta E_{ph}, \quad (5)$	$\Delta E_e < \Delta E_{ph}, \quad (5.1)$
$am_o^*u \leq \hbar \quad (6)$	$am_o^*u > \hbar \quad (6.1)$

При выполнении (3.1)–(6.1) исчезает «решеточное» электросопротивление, обусловленное процессами излучения или поглощения фононов электронами, что должно способствовать установлению СВП.

Величина максимальной скорости электрона в условии (4) определяется равенством

$$V_{\max} = \frac{2|L|a}{\hbar}, \quad (7)$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ .

Энергетические спектры (1) и (2) являются ограниченными. Ширина энергетической зоны электрона и фонона соответственно имеют вид:

$$\Delta E_e = 4|L|, \quad (9)$$

$$\Delta E_{ph} = \frac{2\hbar u}{a}. \quad (10)$$

Из неравенства (5.1) следует, что установлению СВП способствует достаточная узость энергетической зоны электрона по сравнению с энергетической зоной фонона. При  $u \approx 10^5$  см/с,  $a \sim 10^{-8}$  см,  $\Delta E_{ph} \sim 0,01$  эВ. Поэтому согласно (5.1) критическое значение ширины энергетической зоны электрона  $\Delta E_{e,k} \sim 0,01$  эВ. При  $\Delta E_e < \Delta E_{e,k}$  излучение фонона невозможно.

Из квантового критерия СВП (6.1) видно, что переходу в высокопроводящее состояние способствует достаточно большая эффективная масса  $m_0^*$  электрона у дна энергетической зоны (при фиксированном параметре кристаллической решётки). Если в некотором канале при собственных ему значениях  $u, a, \Delta E_e$  выполняются условия (3)–(6), то электросопротивление, обусловленное излучением или поглощением фононов, включено. Если же в этом канале под влиянием термического или другого воздействия величины  $u, a, \Delta E_e$  изменяются таким образом, что выполняются условия (3.1)–(6.1), то «решеточное» электросопротивление выключается, что приводит к возможности реализации СВП.

При построении теории СВП существенным является отсутствие предположения о наличии энергетической щели в спектре элементарных возбуждений. Известно, что критерий сверхтекучести жидкого гелия был получен Ландау также для бесщелевого спектра элементарных возбуждений. Условие (4.1) появления СВП является аналогом условия появления сверхтекучести квантовой жидкости  $V < V_k$ , где  $V$  – скорость жидкости,  $V_k$  – критическое значение скорости, при котором в жидкости появляются элементарные возбуждения и сверхтекучесть исчезает. Это свидетельствует об определенном сходстве явлений сверхтекучести и высокой проводимости. Имеет место также схожесть условий, при которых наблюдаются эти явления: жидкий гелий обладает способностью протекать без вязкости по узким капиллярам диаметром порядка  $10^{-5}$  см, в то же время сверхвысокая проводимость в окисленном полипропилене реализуется в материале с одномерными проводящими каналами такого же диаметра [6].

Критерий СВП может быть обобщен на случай взаимодействия зонного электрона с другими квазичастицами. В частности, для зонного ферромагнетона с законом дисперсии

$$E = 4Is(1 - \cos(ka)), \tag{11}$$

где  $I$  – обменный интеграл,  $s$  – величина спина в узле кристаллической решетки, имеют место следующие выражения для максимальной скорости  $V_{\max, m}$  магнетона, его эффективной массы  $m_{0, m}^*$  и ширины энергетической зоны  $\Delta E_m$ :

$$V_{\max, m} = \frac{4a}{\hbar} Is, \tag{12}$$

$$m_{0, m}^* = \frac{\hbar^2}{4a^2 Is}. \tag{13}$$

$$\Delta E_m = 8Is. \tag{14}$$

Условия взаимодействия зонного электрона с ферромагнетом представлены в табл. 2, из которой следует, что излучение ферромагнетона зонным электроном будет возможным, если ширина энергетической зоны электрона не превышает ширину энергетической зоны ферромагнетона. Если выполняется противоположное условие, то излучение ферромагнетона будет невозможно.

Таблица 2

Излучение (поглощение) ферромагнетона зонным электроном

Возможно		Невозможно	
$V_{\max, e} \leq V_{\max, m}$ ,	(15)	$V_{\max, e} > V_{\max, m}$ ,	(15.1)
$m_{0, e}^* \geq m_{0, m}^*$ ,	(16)	$m_{0, e}^* < m_{0, m}^*$ ,	(16.1)
$\Delta E_e \leq \Delta E_m$	(17)	$\Delta E_e > \Delta E_m$	(17.1)

Сравнение условий табл. 1 и 2 показывает, что ширина энергетической зоны излучаемой квазичастицы оказывает противоположное влияние на установление СВП. В случае достаточно узкой энергетической зоны электронов, когда излучение зонного фонона невозможно, излучение ферромагнетона может согласно (17) оказаться возможным. Это может привести к соответствующему ферромагнетонному вкладу в электросопротивление, и, следовательно, препятствовать установлению СВП.

Согласно (17.1) и (5.1) для установления СВП благоприятна ширина энергетической зоны электрона, удовлетворяющая неравенствам



$$\Delta E_m < \Delta E_e < \Delta E_{ph}, \quad (18)$$

так как при выполнении этих неравенств невозможно излучение ни зонного фонона, ни зонного ферромагнетона. Из (14) и (18) следует, что для сосуществования СВП и ферромагнетизма благоприятны достаточно малые значения произведения  $Is$ , а при данном значении спина – достаточно малые значения обменного интеграла  $I$ .

В высокопроводящем состоянии может наблюдаться изотопический эффект. Так же как и в случае сверхпроводимости, причиной изотопического эффекта в СВП является зависимость скорости звука от массы иона

$$u = a \sqrt{\gamma/M}, \quad (19)$$

где коэффициент упругой связи  $\gamma$  не зависит (или очень слабо зависит) от массы иона  $M$ . Интеграл переноса  $L$  тоже практически не зависит от  $M$ . Из (3.1) и (19) следует условие реализации СВП в виде

$$M < M_{\max}, \quad (20)$$

где

$$M_{\max} = \gamma \left( \frac{h}{2|L|} \right)^2. \quad (21)$$

Из (21) вытекает вывод о возможности реализации СВП только в системах, содержащих достаточно легкие элементы.

Принципиальным для теории СВП является вопрос о поведении эффективной массы токоносителей. Квантовый критерий (6.1) устанавливает влияние эффективной массы на возможность перехода в СВП (при других фиксированных параметрах, входящих в (6.1)), но не выявляет физического механизма, ответственного за возрастание эффективной массы при переходе в СВП. Микроскопический подход к описанию поведения эффективной массы требует выхода за рамки простых зонных представлений и может быть дан на основе полярной теории кристаллов Шубина–Вонсовского [30], в которой носителями тока являются «двойки» (два электрона с противоположными проекциями спина в одном узле кристаллической решетки) и «дырки» (положительно ионизованные узлы, лишенные валентного электрона).

Учет кулоновского отталкивания  $U$  электронов в «двойках» и матричного элемента  $t$  перехода между двумя соседними узлами кристаллической решетки приводит к существенной зависимости эффективной массы электрона от отношения  $U/t$ . В частном случае, когда число электронов  $N_e$  равно числу  $N$  узлов решетки, эффективная масса в полярной модели определяется равенством

$$m^* = \frac{2h^2}{ta^2 \left[ 1 - \left( \frac{U}{4t} \right)^2 \right]}. \quad (22)$$

В общем случае, когда  $N_e \neq N$ , эффективная масса зависит от отношения  $N_e/N$ , при этом сохраняется зависимость от отношения  $U/4t$ . Такое поведение эффективной массы может служить указанием на взаимосвязь проблемы СВП с теорией сильно коррелированных электронных систем [31].

### Возможность теоретической интерпретации экспериментальных фактов

1. В [26] установлено значительное возрастание эффективной массы зонного электрона при переходе в СВП. Из квантового критерия СВП (6.1) видно, что переходу в СВП способствует достаточно большая эффективная масса токоносителей вблизи дна энергетической зоны (при фиксированных значениях  $a$  и  $\Delta E_e$ ). Этот вывод согласуется с экспериментальными данными [26], согласно которым до перехода в высокопроводящее состояние зонная масса электрона  $m_b \approx 1,25 m_0$  ( $m_0$  – масса свободного электрона), а после перехода  $m_b \approx 2,3 \cdot 10^4 m_0$ . Скорость звука  $u \approx 1,6 \cdot 10^5$  см/с. Поэтому до перехода в СВП величина  $am^*u \approx 10^{-30}$  эрг·с и может реализоваться

ваться решеточное электросопротивление, а после перехода в СВП величина  $am^*u \approx 10^{-26}$  эрг·с и, следовательно, выполняется условие (6.1) появления СВП.

2. Критерий (6.1) использовался в [32] для объяснения высокой интенсивности эмиссии электронов церия при импульсном давлении до 10 кбар. Под давлением может происходить резкое увеличение плотности состояний на поверхности Ферми и, следовательно, рост эффективной массы, либо значительное возрастание межатомных сил связи с возрастанием скорости звука. Освобождение энергии сильного межатомного сцепления при образовании трещин приводит к интенсивной фрактоэмиссии электронов. Когда произведение  $am_o^*u$  достигает величины порядка  $\hbar$  или превышает ее, в материале создаются условия для появления высокопроводящего состояния.

3. Согласно [33] высокопроводящее состояние окисленного полипропилена разрушается критической плотностью тока  $j_k \geq 10^8$  А/см<sup>2</sup>, что было интерпретировано в [33] как разрушение сверхпроводимости. Критическая плотность тока связана с критической скоростью  $V_k$  соотношением

$$j_k = neV_k. \quad (23)$$

Полагая в случае СВП в соответствии с (4)  $V_k \approx u$ , получаем из (23)

$$n \approx \frac{j_k}{eu}. \quad (24)$$

При  $j_k \approx 10^8$  А/см<sup>2</sup>,  $u \sim 10^5$  см/с получаем  $n \sim 10^{22}$  1/см<sup>3</sup>, что согласуется с обычной оценкой концентрации электронов проводимости в металлах. Это позволяет считать, что обнаруженное в [33] разрушение высокопроводящего состояния критическим током может быть интерпретировано не как исчезновение сверхпроводимости, а как разрушение СВП при достаточно большой скорости дрейфа токоносителей.

4. Квантовый критерий (6) позволяет объяснить резкое увеличение электросопротивления (на 7 порядков) тонких диэлектрических пленок и полимерных композиций при критическом давлении  $P_k = 13$  кбар [34], а также наблюдаемые особенности поведения электросопротивления органических проводников, содержащих локализованные спины (например,  $Co^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$ ) в анионных слоях, в зависимости от давления [35]. Однако в отличие от [34], для объяснения особенностей зависимости электросопротивления от давления  $R(P)$  [35] необходимо учесть возможность взаимодействия зонного электрона с коллективными возбуждениями, которые могут существовать в магнитоупорядоченных системах.

5. Поскольку при выполнении условий (3.1 – 6.1) табл. 1 зонный электрон не может излучать зонные фононы, то при этом должна отсутствовать доминирующая при низких температурах часть «решеточного» электросопротивления. Электросопротивление, обусловленное поглощением фононов или взаимодействием электронов проводимости с примесями, может при этом привести к электросопротивлению, слабо зависящему или не зависящему от температуры. Возможно, этим объясняются наблюдаемые в некоторых сверхпроводящих металлооксидных керамиках выше  $T_c$  области температур, в которых сопротивление почти не зависит от температуры [36] и демонстрирует ступенчатый характер, стабильно воспроизводимый как при понижении, так и при повышении температуры. Аналогичным образом квантовый критерий СВП позволяет объяснить независимость электросопротивления от температуры для некоторых полимеров в области от 77 до 340 К при постоянном давлении, превышающем пороговое значение [5].

6. Квантовый критерий (6.1) позволяет объяснить переход в СВП тонких полимерных пленок под влиянием одноосного механического давления [7] и существование критической толщины пленки, при превышении которой СВП исчезает [21]. Поскольку этот переход сопровождается образованием высокопроводящих наноразмерных каналов [21], под влиянием давления (уменьшения толщины пленки) в указанных каналах могут возникать условия, согласующиеся с (6.1), что приводит к возможности реализации СВП.

7. Соотношение (18) позволяет дать объяснение возможности сосуществования СВП и ферромагнетизма, установленного в [28, 29]. Если в образце ширина электронной энергетической зоны превышает ширину энергетической зоны ферромагнетона, но остается меньше ширины эне-

гетической зоны фонона, то при этих условиях возможно сосуществование высокопроводящего состояния с ферромагнитным порядком.

8. Условие реализации СВП (20) согласуется с тем, что экспериментально СВП наблюдалось в случаях легких элементов (например, Li и Na в  $\text{NH}_3$ ) в полипропилене, полиуретане, каучукоподобных полимерах.

### Заключение

Регулируемое законами сохранения энергии и квазиимпульса отключение процессов излучения токоносителями элементарных возбуждений может оказать существенное влияние на величину электросопротивления как неферромагнитных, так и ферромагнитных материалов и тем самым на возможность реализации СВП.

Теория, основанная на взаимосвязи состояния высокой электронной проводимости с пониженной размерностью проводящей подсистемы, позволяет объяснить переход в СВП в материалах, являющихся перспективными для неорганической и органической электроники.

Микроскопический подход к описанию высокопроводящего состояния в системах с пониженной размерностью возможен на основе многоэлектронной полярной теории кристаллов.

### Литература

1. Абрикосов, А.А. Основы теории металлов / А.А. Абрикосов. – М.: Наука, 1987. – 520 с.
2. Ogg, R.A. Bose-Einstein condensation of trapped electron pairs. Phase separation and superconductivity of metal-ammonia solutions / R.A. Ogg // *Phys. Rev.* – 1946. – Т. 69. – С. 243–244.
3. Васильченко, С.А. Особенности высокопроводящего состояния в твердой фазе натрий-аммиачных растворов / А.С. Васильченко, И.М. Дмитренко, А.А. Мошенский // *Физика низких температур.* – 1985. – Т. 11, вып. 2. – С. 221–226.
4. Arendt, P. The xerogel made from decomposing liquid metal-ammonia solutions / P. Arendt // *J. Phys. Chem. Sol.* – 1988. – Т. 49, № 5. – С. 511–517.
5. Аномально низкое электрическое сопротивление тонких пленок диэлектриков / Н.С. Ениколопан, Ю.А. Берлин, С.И. Бсщенко, В.А. Жорин // *Письма в ЖЭТФ.* – 1981. – Т. 33. – Вып. 10. – С. 508–511.
6. Архангородский, В.М. Высокопроводящее состояние в плёнках окисленного полипропилену / В.М. Архангородский, Е.Г. Гук, А.М. Ельяшевич // *ДАН СССР.* – 1989. – Т. 309, № 3. – С. 603–606.
7. Лачинов, А.Н. Высокопроводящее состояние в тонких пленках полимеров. Влияние электрического поля и одноосного давления / А.Н. Лачинов, А.Ю. Жеребов, В.М. Корнилов // *ЖЭТФ.* – 1992. – Т. 102. – В. 1(7). – С. 187–193.
8. Лачинов, А.Н. Электроника тонких слоёв широкозонных полимеров / А.Н. Лачинов, Н.В. Воробьева // *УФН.* – 2006. – Т. 176, № 12. – С. 1249–1266.
9. Kamerlingh Onnes, H. Further Experiments with Liquid Helium. G. On the Electrical Resistance of Pure Metals, etc. VI. On the Sudden Change in the Rate at which the Resistance of Mercury Disappears / H. Kamerlingh Onnes // *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden.* – 1911. – № 124 c.
10. Bardeen, J. The theory of superconductivity / J. Bardeen, L. Cooper, J. Schrieffer // *Phys. Rev.* – 1957. – Т. 108. – С. 1175–1204.
11. Гинзбург, В.Л. К теории сверхпроводимости / В.Л. Гинзбург, Л.Д. Ландау // *ЖЭТФ.* – 1950. – Т. 20. – С. 1064; Ландау, Л.Д. Собрание трудов / Л.Д. Ландау. – М.: Наука, 1969. – Т. 2. – С. 126–152.
12. Daunt, J.L. Conductivity of sodium-ammonia solutions (L). / J.L. Daunt // *Phys. Rev.* – 1946. – V. 70. – P. 219.
13. The electrical conductivity of rapidly frozen solutions of sodium in liquid ammonia (L) / H.A. Boorse, D.B. Cook, R.B. Pontius, M.W. Zemansky // *Phys. Rev.* – 1946. – Т. 70. – С. 92–93.
14. Туманов, К.А. К вопросу о сверхпроводимости растворов натрия в аммиаке // К.А. Туманов, А.И. Шальников, Ю.В. Шарвин // *ДАН СССР.* – 1947. – Т. 56, № 1. – С. 33–35.
15. Дмитренко, И.М. К вопросу о сверхпроводимости в системе натрий – аммиак / И.М. Дмитренко, И.С. Щеткин // *Письма в ЖЭТФ.* – 1973. – Т. 18. – С. 497–501.
16. Брандт, Н.Б. Гипотеза о возможном эффекте неравновесной высокотемпературной сверхпроводимости / Н.Б. Брандт, В.В. Толмачев // *Письма в ЖЭТФ.* – 1974. – Т. 19. – С. 439–442.

17. Новос высокопроводящее состояние композиций металл-полимер / Н.С. Ениколопян, Ю.А. Берлин, С.И. Бешенко, В.А. Жорин // ДАН СССР. – 1981. – Т. 258, № 6. – С. 1400–1403.
18. Григоров, Л.Н. Зарядовая неустойчивость полимеров в высокоэластическом состоянии / Л.Н. Григоров, В.М. Андреев // ВМС. – 1988. – Т. 30(Б), № 8. – С. 589–592.
19. Чурлина, Е.Е. Особенности электронного переключения в многослойных полимерных образцах / Е.Е. Чурлина, А.Н. Лачинов // Структура и динамика молекулярных систем. – 2003. – Вып. X. – Ч. 1. – С. 198–201.
20. Бунаков, А.А. Исследование особенностей переноса заряда в многослойных МДМ и МДП структурах на основе полидифениленфталата: дис. ... канд. физ.-мат. наук / А.А. Бунаков. – Уфа, 2006. – 142 с.
21. Салихов, Р.Б. Электронный транспорт в гетероструктурах на основе широкозонных полимерных материалов: автореферат дис. ... д-ра физ.-мат. наук / Р.Б. Салихов. – Уфа, 2011.
22. Набиуллин, И.Р. Влияние параметров потенциального барьера на интерфейсе металл/полимер на электронное переключение в структуре металл/полимер/металл / И.Р. Набиуллин, А.Н. Лачинов, А.Ф. Пономарев // ФТТ. – 2012. – Т. 54. Вып. 2. – С. 230–234.
23. Пергамент, А.Л. Электронные неустойчивости в соединениях переходных металлов: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / А.Л. Пергамент. – СПб, 2007. – 302 с.
24. Вонсовский, С.В. К теории взаимодействия зонного электрона с фононами / С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, Л.М. Свирская // ФММ. – 1989. – Т. 67. – С. 885 – 890.
25. Вонсовский, С.В. К теории состояния высокой проводимости / С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, Л.М. Свирская // ФММ. – 1992. – № 1. – С. 36–50.
26. Arendt, P. Natural units of current and voltage drop associated with Fröhlich conduction through a Gel made from decomposing liquid metal-ammonia solutions // P.Arendt // Solid State Comm. – 1988. – Т. 67, № 12. – С. 1161–1164.
27. Arendt, P. A high – conducting state in a liquid metal – ammonia solutions / P.Arendt // Journ. de Physique IV, Colloque C5, supplement au Journal de Physique I. – 1991. – Т. 1. – С. C5-245–C5-249.
28. Смирнова, С.Г. Индуцированный магнитным полем скачкообразный переход окисленного полипропилена в ферромагнитное состояние / С.Г. Смирнова, Л.Н. Григоров, О.В. Демичева // ВМС. – 1989. – Т. 31(Б), № 5. – С. 323–324.
29. Смирнова, С.Г. Аномальный ферромагнетизм окисленного полипропилена / С.Г. Смирнова, О.В. Демичева, Л.Н. Григоров // Письма в ЖЭТФ. – 1988. Т. 48. – Вып. 4. – С. 212–214.
30. Вонсовский, С.В. К теории самопроизвольной ионизации кристалла с взаимодействующими электронами. IV. Полярная модель с числом электронов, отличным от числа узлов кристаллической решетки / С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, Л.М. Свирская // ФММ. – 1997. – С. 59–74.
31. Изюмов, Ю.А. Материалы с сильными электронными корреляциями / Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмасев // ФММ. – 2008. – Т. 178, № 1. – С. 25–60.
32. Трапезников, В.А. Повышение прочности тонких поверхностных слоев твердых тел за счет кратковременного увеличения межатомных сил связи / В.А. Трапезников // Поверхность. – 1994. – № 8–9. – С. 136–143.
33. Разрушение сверхвысокой проводимости окисленного полипропилена критическим током / О.В. Демичева, Л.Н. Григоров, С.Г. Смирнова и др. // Письма в ЖЭТФ. – 1990. – Т. 51. – Вып. 4. – С. 228.
34. Измерение электрических свойств сверхтонких полимерных слоев. / Н.С. Ениколопян, С.Г. Груздева, С.Г. Галашина и др. // ДАН СССР. – 1985. – Т. 283, № 6. – С. 1404–1408.
35. Mory, T. Transport properties of organic metal containing magnetic ions (BEDT – TTF) CsCo(SCN) / T. Mory, A. Fuse, Sh. Tanaka // Physica C. – 1996. – Т. 264. – С. 208–210.
36. Веркин, Б.И. Электрические и магнитные свойства сверхпроводящих соединений La(Ba,Sr)CuO и YBaCuO / Б.И. Веркин, В.М. Дмитриев, А.И. Звягин // Проблемы ВТСП, ч. II. – Свердловск, 1987. – С. 164–165.

*Поступила в редакцию 13 января 2012 г.*

## HIGH-CONDUCTING STATE IN LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS

L.M. Svirskaya<sup>1</sup>

A connection between a state of high electron conductivity with low dimension of conducting subsystem is considered. A possibility of theoretical explanation of high-conducting state existence on the basis of criterion of switching electron interaction with elementary excitations is discussed.

*Keywords: high-conducting state, low-dimensional systems.*

## References

1. Abrikosov A.A. *Osnovy teorii metallov* (Fundamentals of the theory of metals). Moscow, Nauka, 1987. 520 p. (in Russ.).
2. Ogg R.A. Bose-Einstein condensation of trapped electron pairs. Phase separation and superconductivity of metal-ammonia solutions. *Phys. Rev.* 1946. Vol. 69. pp. 243–244.
3. Vasil'chenko A.S., Dmitrenko I.M., Moshenskij A.A. Osobennosti vysokoprovodjashhego sostojanija v tverdoj faze natrij-ammiachnykh rastvorov (Features high-conductivity state in the solid phase of sodium-ammonia solutions). *Fizika nizkikh temperatur.* 1985. Vol. 11. Issue 2. pp. 221–226. (in Russ.).
4. Arendt P. The xerogel made from decomposing liquid metal-ammonia solutions. *J. Phys. Chem. Sol.* 1988. Vol. 49, no. 5. pp. 511–517.
5. Enikolopjan N.S., Berlin Ju.A., Beshenko S.I., Zhorin V.A. Anomal'no nizkoe ehlektricheskoe soprotivlenie tonkikh plenok dielektrikov (Abnormally low electrical resistance of thin films of dielectrics). *Pisma v JETP.* 1981. Vol. 33. Issue 10. pp. 508–511. (in Russ.). [Enikolopyan N.S., Berlin Yu.A., Beshenko S.I., Zhorin V.A. Anomalously low resistance of compressed dielectric thin films. *JETP letters.* Vol. 33. Issue 10. p. 492].
6. Arkhangorodskij V.M., Guk E.G., El'jashevich A.M. Vysokoprovodjashhee sostojanie v pljonkakh okislenno polipropilena (High-conducting state in the films of oxidized polypropylene). *DAN SSSR.* 1989. Vol. 309, no. 3. pp. 603–606. (in Russ.).
7. Lachinov A.N., Zherebov A.Yu., Kornilov V.M. Vysokoprovodjashhee sostojanie v tonkikh plenkakh polimerov. Vlijanie ehlektricheskogo polja i odnoosnogo davlenija (High-conductivity state of thin polymer films: effects of an electric field and of a uniaxial pressure). *JETP.* 1992. Vol. 102. Issue 1 (7). pp. 187–193. (in Russ.).
8. Lachinov A.N., Vorob'eva N.V. Ehlektronika tonkikh slojov shirokozonykh polimerov (Electronics of thin wideband polymer layers). *Uspekhi Fizicheskikh Nauk.* 2006. Vol. 176, no. 12. pp. 1249–1266. DOI: 10.3367/UFNr.0176.200612a.1249 (in Russ.). [Lachinov A.N., Vorob'eva N.V. Electronics of thin wideband polymer layers. *Physics-Uspekhi.* 2006. Issue 49. pp.1223–1238. DOI: 10.1070/PU2006v049n12ABEH006176].
9. Kamerlingh Onnes H. Further Experiments with Liquid Helium. G. On the Electrical Resistance of Pure Metals, etc. VI. On the Sudden Change in the Rate at which the Resistance of Mercury Disappears. *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden.* 1911. no. 124 c.
10. Bardeen J., Cooper L., Schrieffer J. The theory of superconductivity. *Phys. Rev.* 1957. Vol. 108. pp. 1175–1204.
11. Ginzburg V.L., Landau L.D. K teorii sverkhprovodimosti (On the theory of superconductivity). *JETP.* 1950. Vol. 20. p. 1064; Landau L.D. *Sobranie trudov* (Collection of the Work). Moscow, Nauka, 1969. Vol. 2. pp. 126–152. (in Russ.).
12. Daunt J.L. Conductivity of sodium-ammonia solutions (L). *Phys. Rev.* 1946. V. 70. p. 219.
13. Boorse H.A., Cook D.B., Pontius R.B., Zemansky M.W. The electrical conductivity of rapidly frozen solutions of sodium in liquid ammonia (L). *Phys. Rev.* 1946. Vol. 70. pp. 92–93.
14. Tumanov K.A., Shal'nikov A.I., Sharvin Ju.V. K voprosu o sverkhprovodimosti rastvorov natrija v ammiake (The problem of superconductivity in ammonia solutions of sodium). *DAN SSSR.* 1947. Vol. 56, no. 1. pp. 33–35. (in Russ.).

<sup>1</sup> Svirskaya Lyudmila Moiseevna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University  
E-mail svirskayalm@mail.ru

15. Dmitrenko I.M., Shchetkin I.S. K voprosu o sverkhprovodimosti v sisteme natrij–ammiak (Concerning superconductivity in the sodium-ammonia system). *Pisma v JETP*. 1973. Vol. 18. pp. 497 – 501. (in Russ.). [Dmitrenko I.M., Shchetkin I.S. Concerning superconductivity in the sodium-ammonia system. *JETP letters*. Vol. 18. Issue 8. p. 292].
16. Brandt N.B., Tolmachev V.V. Gipoteza o vozmozhnom ehffekte neravnovesnoj vysokotemperaturnoj sverkhprovodimosti (The hypothesis of the possible effect of nonequilibrium high-temperature superconductivity). *Pisma v JETP*. 1974. Vol. 19. pp. 439–442. (in Russ.). [Brandt N.B., Tolmachev V.V. Hypothesis concerning the possible effect of nonequilibrium high-temperature superconductivity. *JETP letters*. Vol. 19. Issue 7. p. 237].
17. Enikolopjan N.S., Berlin Ju.A., Beshenko S.I., Zhorin V.A. Novoe vysokoprovodjashhee sostojanie kompozicijj metall-polimer (A new highly conducting state of metal-polymer compositions). *DAN SSSR*. 1981. Vol. 258, № 6. pp. 1400–1403. (in Russ.).
18. Grigorov L.N., Andreev V.M. Zarjadovaja neustojichivost' polimerov v vysokoeplasticheskom sostojanii (Charge instability of polymers in the highly elastic state). *Vysokomolekuljarnye soedinenija*. 1988. Vol. 30 (B), no. 8. pp. 589–592. (in Russ.).
19. Churlina E.E., Lachinov A.N. Osobennosti ehlektronnogo pereklyuchenija v mnogoslojnykh polimernykh obrazcakh (Features of electronic switching in multilayer polymer samples). *Struktura i dinamika molekuljarnykh sistem*. 2003. Issue X. Part 1. pp.198–201. (in Russ.).
20. Bunakov A.A. *Issledovanie osobennostejj perenosa zarjada v mnogoslojnykh MDM i MDP strukturakh na osnove polidifenilnftalida: dis. ...kand. fiz.-mat. nauk* (Investigation of the features of charge transport in multi-MDM and MDS structures on the basis polidifenilnftalida: thesis candidate Phys.-Math. Science). Ufa, 2006. 142 p.
21. Salikhov R.B. *Ehlektronnyj transport v geterostrukturakh na osnove shirokozonnnykh polimernykh materialov: avtoreferat dissertacija doktora fiz.-mat. nauk* (Electron transport in heterostructures based on wide-polymer materials: summary of the thesis of Dr. Sciences). Ufa, 2011.
22. Nabiullin I.R., Lachinov A.N., Ponomarev A.F. Vlijanie parametrov potencial'nogo bar'era na interfejse metall/polimer na ehlektronnoe pereklyuchenie v strukture metall/polimer/metal (The influence of the potential barrier at the interface of metal/polymer for electronic switching in a metal/polymer/metal). *Fizika tverdogo tela*. 2012. Vol. 54. Issue 2. pp. 230–234. (in Russ.).
23. Pergament A.L. *Ehlektronnye neustojichivosti v soedinenijakh perekhodnykh metallov: dissertacija doktora fiz.-mat. nauk* (Electronic instabilities in transition-metal compounds: the dissertation of Dr. Science). Sankt-Peterburg, 2007. 302 p.
24. Vonsovskijj S.V., Svirskijj M.S., Svirskaja L.M. K teorii vzaimodejstvija zonnogo ehlektrona s fononami (The theory of the interaction of itinerant electrons and phonons). *Fizika metallov i metallovedenie*. 1989. Vol. 67. pp. 885–890. (in Russ.).
25. Vonsovskijj S.V., Svirskijj M.S., Svirskaja L.M. *K teorii sostojanija vysokojj provodimosti* (The theory of the state of high conductivity). *Fizika metallov i metallovedenie*. 1992. no. 1. pp. 36–50. (in Russ.).
26. Arendt P. Natural units of current and voltage drop associated with Fröhlich conduction through a Gel made from decomposing liquid metal-ammonia solutions. *Solid State Comm.* 1988. Vol. 67, № 12. pp. 1161 – 1164.
27. Arendt P. A high-conducting state in a liquid metal-ammonia solutions. *Journ. de Physique IV, Colloque C5, supplement au Journal de Physique I*. 1991. Vol. 1. pp. C5-245–C5-249. (in Eng.).
28. Smirnova S.G., Grigorov L.N., Demicheva O.V. Inducirovannyj magnitnym polem skachkoobraznyj perekhod okislennogo polipropilena v ferromagnitnoe sostojanie (The induced magnetic field of an abrupt transition of the oxidized polypropylene in the ferromagnetic state). *Vysokomolekuljarnye soedinenija*. 1989. Vol. 31(B), no. 5. pp. 323–324. (in Russ.).
29. Smirnova S.G., Demicheva O.V., Grigorov L.N. Anomal'nyj ferromagnetizm okislennogo polipropilena (Anomalous ferromagnetism of oxidized polypropylene). *Pisma v JETP*. 1988. Vol. 48. Issue 4. p. 212–214. (in Russ.). [Smirnova S.G., Demicheva O.V., Grigorov L.N. Anomalous ferromagnetism of oxidized polypropylene. *JETP letters*. Vol. 48. Issue 4. p.231.]
30. Vonsovskijj S.V., Svirskijj M.S., Svirskaja L.M. K teorii samoproizvol'noj ionizacii kristalla s vzaimodejstvujushimi ehlektronami. IV. Poljarnaja model' s chislom ehlektronov, ot-lichnym ot chisla uzlov kristallicheskoj reshetki (The theory of spontaneous ionization of a crystal with interacting elec-

trons. IV. The polar model with the number of electrons different from the number of lattice sites). *Fizika metallov i metallovedenie*. 1997. pp. 59–74. (in Russ.).

31. Izjumov Ju.A., Kurmaev E.Z. Materialy s sil'nymi elektronnyimi korreljatsijami (Strongly electron-correlated materials). *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*. 2008. Vol. 178, no. 1. pp. 25–60. DOI: 10.3367/UFNr.0178.200801b.0025 (in Russ.). [Izyumov Yu.A., Kurmaev E.Z. Strongly electron-correlated materials. *Physics-Uspekhi*. 2008. Issue 178. pp.25–60.]

32. Trapeznikov, V.A. Povyshenie prochnosti tonkikh poverkhnostnykh sloev tverdykh tel za schet kratkovremennogo uvelichenija mezhatomnykh sil svyazi (Increasing the strength of thin surface layers of solids due to short-term increase of the interatomic binding forces). *Poverkhnost*. 1994. no. 8–9. pp. 136–143. (in Russ.).

33. Demicheva O.V., Rogachev D.N., Smirnova S.G., Shkljarova E.I., Jablokov M.Ju., Andreev V.M., Grigorov L.N. Razrushenie sverkhvysokoj provodimosti okislennogo polipropilena kriticheskim tokom (Destruction of ultrahigh conductivity of oxidized polypropylene by critical current). *Pisma v JETP*. 1990. Vol. 51. Issue 4. p. 228. (in Russ.). [Demicheva O.V., Rogachev D.N., Smirnova S.G., Shklyarova E.I., Yablokov M.Yu., Andreev V.M., Grigorov L.N. Destruction of ultrahigh conductivity of oxidized polypropylene by critical current. *JETP letters*. Vol. 51. Issue 4. p.258]

34. Enikolopjan N.S., Gruzdeva S.G., Galashina S.G., Shkljarova E.I., Grigorov L.N. Izmerenie ehlektricheskikh svojstv sverkhtonkikh polimernykh slojov (Measuring the electrical properties of ultrathin polymer layers). *DAN SSSR*. 1985. Vol. 283, no. 6. pp. 1404–1408. (in Russ.).

35. Mory T., Fuse A., Tanaka Sh. Transport properties of organic metal containing magnetic ions (BEDT – TTF) CsCo(SCN). *Physica C*. 1996. Vol. 264. pp. 208 – 210.

36. Verkin B.I., Dmitriev V.M., Zvjagin A.I. Ehlektricheskie i magnitnye svojstva sverkhprovodjashhikh soedinenij La(Ba,Sr)CuO i YBaCuO (Electrical and magnetic properties of superconducting compounds La (Ba, Sr) CuO and YBaCuO). *Problemy VTSP. Sverdlovsk*, 1987. Part II. pp. 164–165. (in Russ.).

## ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. Публикуются оригинальные работы, содержащие существенные научные результаты, не опубликованные в других изданиях, прошедшие этап научной экспертизы и соответствующие требованиям к подготовке рукописей.

2. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 8 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (не более 500 знаков с пробелами), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги и или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, аннотация (или реферат статьи объемом до 1800 знаков с пробелами), список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации, 11 pt. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стилль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Если рисунок создан не средствами MS Office, то желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»: Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, физический факультет, кафедра ОИТФ, ответственному редактору профессору Бескачко Валерию Петровичу. [Prof. Beskachko Valeriy Petrovich, General and Theoretical Physics Department, SUSU, 76, Lenin prospect, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: [vestnik@physics.susu.ac.ru](mailto:vestnik@physics.susu.ac.ru)

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта ЮУрГУ (<http://www.susu.ac.ru>) следуя ссылкам: «Наука», «Вестник ЮУрГУ», «Серии».

10. Журнал распространяется по подписке. Подписной индекс журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Математика. Механика. Физика»: 29211, каталог «Пресса России». Интернет-каталог агентства «Книга-Сервис», подписной индекс: E29211. Электронная версия: см. [www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru).

### ВЕСТНИК ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 11 (270) 2012

Серия  
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»  
Выпуск 6

Редактор Н.М. Лезина

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

---

Подписано в печать 11.04.2012. Формат 60×84 1/8. Печать графариетная.  
Усл. печ. л. 13,95. Тираж 500 экз. Заказ 80/200.

---

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.