



# ВЕСТНИК

ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

№8 (24)  
2003

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА,  
ФИЗИКА, ХИМИЯ»

Выпуск 4

60-ЛЕТИЮ  
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА  
ПОСВЯЩАЕТСЯ

Редакционная коллегия

д.т.н., профессор Михайлов Г.Г. (*отв. редактор*),  
д.ф.-м.н., профессор Бескачко В.П. (*отв. секретарь*),  
д.т.н., профессор Гуревич С.Ю., д.ф.-м.н., профессор Менихес Л.Д.,  
к.ф.-м.н., профессор Заляпин В.И., д.х.н., профессор Лыкасов А.А.,  
д.х.н., профессор Рябухин А.Г.

Соответствие  
подписанному экземпляру  
экземпляру подлинного издания

## СОДЕРЖАНИЕ

### Математика

- ДИЛЬМАН В.Л. Пластическая стабильность и условия разрушения под действием  
внутреннего давления тонкостенной торовой оболочки ..... 3
- ЛЕПИНИН Е.Ф., ШИРЯЕВ В.И. Нейросетевая реализация алгоритма фильтрации ... 7
- ПАНИУКОВ А.В., БУДУЕВ Д.В., МАЛОВ Д.Н. Системы пассивного мониторинга  
грозовой деятельности ..... 11

### Физика

- КОРЕНЧЕНКО А.Е., БЕСКАЧКО В.П., ВЯТКИН Г.П. Влияние твердого ядра  
на колебания крутильного вискозиметра ..... 21
- КОРЕНЧЕНКО А.Е., ГОЛОВНЯ О.А., БЕСКАЧКО В.П. Численная модель  
крутильного вискозиметра, заполненного ньютоновской жидкостью ..... 25

## Содержание

АЛЕКСЕЕВА Т.О., ГУСЕВ А.В., МОРОЗОВ С.И., ПРИВАЛОВА Т.П. Поверхностные фазы в поликристаллическом и жидком состояниях сплавов Cu–Ag–Sn .....	30
ШУЛЬГИНОВ А.А., ГУРЕВИЧ С.Ю. Низкочастотные флуктуации проводимости пермаллоя при температуре магнитного фазового перехода .....	33
ШУЛЬГИНОВ А.А., СТАДНИК О.С. Элементный анализ биоэлектрограмм .....	37
ANDRIANOV B.A. Resonance absorption of <i>rf</i> electric field energy by negative point-to- plane gap .....	41
ANDRIANOV B.A. Direct pairing of electrons .....	46
TOLIPOV Kh. B. Sound wave propagation along the wedge edge .....	51
ГУРЕВИЧ С.Ю., ГОЛУБЕВ Е.В. Лазерное возбуждение поверхностных акустических волн в ферромагнетике при тепловом механизме .....	54
ГУРЕВИЧ С.Ю., ХАБИРОВ К.Б. Термооптическое возбуждение упругих колебаний в ферромагнитных пластинах .....	60
КИРКО И.М., КУЗНЕЦОВ В.А. Исследование электрической заряженности озонированного газа при турбулентном режиме работы озонатора .....	64
САДАКОВ О.С., ШУЛЬЖЕНКО С.И. Использование структурной модели для описания реологических свойств двухфазных сред .....	67
САДАКОВ О.С., ШАПИРО А.А. О корректности решения геометрически нелинейных задач пакетом МКЭ .....	72
ЧЕРНЯВСКИЙ А.О. Развитие поверхностных систем трещин при механической нагрузке .....	78
САПОЖНИКОВ С.Б., ЩЕРБАКОВА А.О. Кинетика деформирования и разрушения монослоя армированного пластика в трансверсальном направлении с учетом дилатационных воздействий .....	83
САДАКОВ О.С. Структурная модель в реологии конструкции .....	88
ЕМЕЛЬЯНЕНКО Н.Ю. Моделирование орбит комет .....	99
ЧЕРНЯВСКИЙ О.Ф. Метод конечных элементов в задачах предельного равновесия и приспособляемости пластин и оболочек .....	107
КАРАВАЕВ А.В., БЕСКАЧКО В.П. Моделирование углеродных наноструктур методом молекулярной динамики .....	112

### Химия

КЛЕЩЕВА Р.Р., ПОПОВ М., КЛЕЩЕВ Д.Г., ТОЛЧЕВ А.В. Особенности фазообразования при окислении водных растворов FeSO <sub>4</sub> и (или) суспензий Fe(OH) <sub>2</sub> кислородом воздуха .....	122
КЛЕЩЕВА Р.Р., ПОПОВ М.А., ТОЛЧЕВ А.В., КЛЕЩЕВ Д.Г. Кристаллообразующие комплексы: механизм фазовых и химических превращений FeOОН в водных растворах .....	127
РЯБУХИН А.Г. Расчет молярных теплоемкостей нестехиометрических бинарных соединений (бертоллидов) .....	134
КОСЬЯНОВ П.М. Рентгенорадиометрический анализ вещества сложного химического состава .....	142
КОСЬЯНОВ П.М. Учет матричного эффекта при количественном рентгенофазовом анализе .....	145

## ПЛАСТИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ И УСЛОВИЯ РАЗРУШЕНИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНУТРЕННЕГО ДАВЛЕНИЯ ТОНКОСТЕННОЙ ТОРОВОЙ ОБОЛОЧКИ

*В.Л. Дильман*

На основании гипотезы о постоянстве радиуса круговой оси тонкостенной торовой оболочки получены новые формулы для вычисления напряжений в стенке оболочки, деформируемой под действием внутреннего давления. На этой основе получены аналитические выражения для вычисления критических значений напряжений, деформаций и внутреннего давления, при которых оболочка теряет несущую способность.

Хорошо известно, что в торообразной тонкостенной оболочке в зоне упругих деформаций безмоментное напряженное состояние может возникнуть лишь под действием «экзотической» нагрузки [1, с. 332]; равномерное внутреннее давление такой нагрузкой не является. Нетрудно показать, что равномерное внутреннее давление не приводит к безмоментному напряженному состоянию оболочки из упрочняемого материала и при ее пластическом деформировании. Тем не менее, при исследовании несущей способности и условий разрушения криволинейных участков трубопроводов, изогнутых труб, отводов и тонкостенных торовых оболочек, работающих под внутренним давлением, в целях упрощения теоретических построений нередко используются формулы Фёпла [1] безмоментной теории:

$$\begin{cases} \sigma_{\varphi} = \frac{pr}{2t} \cdot \frac{2R + r \sin \alpha}{R + r \sin \alpha}, \\ \sigma_{\theta} = \frac{pr}{2t}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь  $\sigma_{\varphi}$  и  $\sigma_{\theta}$  – меридиональные (кольцевые, тангенциальные) и широтные (продольные, осевые) напряжения соответственно;  $p$  – внутреннее давление;  $r$  – внутренний радиус меридионального сечения оболочки;  $R$  – радиус круговой оси внутренней торовой поверхности;  $\alpha$  – угол между радиус-вектором точки этой поверхности в меридиональном сечении и осью вращения тора.

Другой упрощающий подход может быть основан на экспериментально обоснованных гипотезах относительно поведения геометрических параметров оболочки в процессе нагружения. В работе [2] утверждается, что экспериментально проверены гипотезы о поведении тонкостенной торовой оболочки при ее пластическом деформировании под действием внутреннего давления:

- 1) сечение меридиональной плоскостью остается круглым;
- 2) радиус круговой оси тора  $R$  постоянен.

Эти гипотезы значительно облегчают теоретические расчеты и позволяют найти напряжение в любой точке стенки оболочки в момент потери ее несущей способности, соответствующее критическое давление и рассчитать толщину стенки равнопрочной оболочки [3, 4]. В то же время эти гипотезы противоречат безмоментному характеру нагружения, и при их выполнении формулы (1) неверны. Точнее говоря, гипотеза 1 в инженерных расчетах может быть принята и на основе безмоментной теории: можно показать, что параметр овализации (отношение полуосей меридионального сечения) в процессе пластического деформирования при напряжениях, подчиняющихся закону (1), мало отклоняется от единицы. Однако гипотеза 2 приводит к формулам для вычисления напряжений, отличающимся от уравнений Фёпла (1):

$$\begin{cases} \sigma_{\Theta} = \frac{pr}{2t} \cdot \frac{(R + 3r \sin \alpha)(R + r \sin \alpha)}{R^2 + 3Rr \sin \alpha + 3r^2 \sin^2 \alpha}, \\ \sigma_{\varphi} = \sigma_{\Theta} \frac{2R + 3r \sin \alpha}{R + 3r \sin \alpha}. \end{cases} \quad (2)$$

Напряжения, вычисленные по формулам (1) и (2), мало отличаются при значениях параметра гнуща  $\gamma = r/R = 0,1 - 0,2$  и меньше, но заметно отличаются для крутоизогнутых оболочек.

Целью работы является вывод формул (2) и определение на их основе критических деформаций и напряжений в стенке оболочки, а также внутреннего давления, соответствующих моменту потери оболочкой стабильности пластического деформирования. Пластическая стабильность может рассматриваться как критерий несущей способности [3]. Она определяется на основе принципа Свифта–Марциньяка [5], который в случае нагружения оболочки только внутренним давлением равносителен критерию максимума внутреннего давления: оболочка теряет стабильность своего пластического деформирования в момент достижения внутренним давлением своего наибольшего значения. В работе предполагается, что напряженно-деформированное состояние (НДС) оболочки в зоне развитых пластических деформаций подчиняется теории течения, согласно которой

$$\frac{\sigma_{\varphi} - \sigma}{d\varepsilon_{\varphi}} = \frac{\sigma_{\Theta} - \sigma}{d\varepsilon_{\Theta}} = \frac{\sigma_r - \sigma}{d\varepsilon_r}, \quad (3)$$

где  $\sigma_r$  – радиальные напряжения в стенке оболочки,  $\sigma = 1/3(\sigma_{\varphi} - \sigma_{\Theta} - \sigma_r)$ ;  $\varepsilon_{\varphi}$ ,  $\varepsilon_{\Theta}$  и  $\varepsilon_r$  – истинные деформации в меридиональном, широтном и радиальном направлениях. Кроме того, в процессе пластического деформирования оболочки предполагается выполнение условия постоянства объема

$$\varepsilon_{\varphi} + \varepsilon_{\Theta} + \varepsilon_r = 0 \quad (4)$$

и условия тонкостенности

$$\sigma_r = 0. \quad (5)$$

Обозначим  $m = \sigma_{\Theta} / \sigma_{\varphi}$  – коэффициент двухосности нагружения стенки оболочки. Тогда из (3)–(5) следует, что

$$\frac{d\varepsilon_{\Theta}}{d\varepsilon_{\varphi}} = \frac{2m - 1}{2 - m}. \quad (6)$$

Рассмотрим сечение тора плоскостью, содержащей ось тора. В этой плоскости введем систему координат  $(\rho, \alpha)$ , где  $\rho$  – расстояние от оси тора до точки,  $\alpha$  – угловая координата точки; при этом

$$\rho = R + r \sin \alpha. \quad (7)$$

Из гипотезы 2 о постоянстве  $R$  в процессе деформирования следуют формулы для вычисления элементарных приращений истинных деформаций  $d\varepsilon_{\varphi}$  и  $d\varepsilon_{\Theta}$ :

$$d\varepsilon_{\varphi} = \frac{dr}{r}; \quad d\varepsilon_{\Theta} = \frac{dr}{r} \left( 1 - \frac{R}{\rho} \right)$$

откуда

$$\frac{d\varepsilon_{\Theta}}{d\varepsilon_{\varphi}} = 1 - \frac{R}{\rho}.$$

Из этого равенства, формул (6) и (7) получаем

$$m = \frac{3\rho - 2R}{3\rho - R} = \frac{R + 3r \sin \alpha}{2R + 3r \sin \alpha}. \quad (8)$$

В частности, на стенках, где одна из двух главных кривизн нулевая ( $\alpha = 0$ ),  $m = 0,5$ ; на выпуклой стенке  $\left( \alpha = \frac{\pi}{2} \right)$  и вогнутой стенке  $\left( \alpha = -\frac{\pi}{2} \right)$  соответственно

$$m = \frac{R+3r}{2R+3r} \text{ и } m = \frac{R-3r}{2R-3r}.$$

Если  $R \gg r$ , т.е. радиус круговой оси тора велик по сравнению с радиусом трубы (кривизна изогнутого участка трубопровода мала), то  $m \approx 0,5$  во всех точках – хорошо известный факт для цилиндрической оболочки, находящейся под внутренним давлением. Для применяемых в промышленности отводов с диапазоном значений параметра  $\gamma = r/R$  порядка  $0,3 \dots 0,5$  на вогнутой стенке  $m \approx 0$ , причем, при  $\gamma > 0,33$   $m < 0$ , т.е. в широтном направлении на вогнутой стенке могут возникнуть отрицательные нормальные (сжимающие) напряжения. На выпуклой стенке  $m > 0,5$ .

В принятых предположениях напряжения  $\sigma_\varphi$  и  $\sigma_\theta$  удовлетворяют системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\sigma_\varphi}{r} + \frac{\sigma_\theta}{r+R/\sin\alpha} = \frac{\rho}{t}, \\ \frac{\sigma_\theta}{\sigma_\varphi} = \frac{R+3r\sin\alpha}{2R+3r\sin\alpha}. \end{cases} \quad (9)$$

$$\frac{\sigma_\theta}{\sigma_\varphi} = \frac{R+3r\sin\alpha}{2R+3r\sin\alpha}. \quad (10)$$

Здесь (9) – уравнение Лапласа для торовой оболочки, (10) следует из (8). Решая эту систему, получаем (2).

В силу определения логарифмических деформаций,

$$t = t_0 \exp \varepsilon_n, \quad \rho = \rho_0 \exp \varepsilon_\theta. \quad (11)$$

Покажем, что при условии  $R = \text{const}$  выполняется, хотя бы в первом приближении, равенство

$$r = r_0 \exp \varepsilon_\varphi,$$

т.е. что относительное изменение радиуса пропорционально относительному изменению длины дуги. Действительно, из (6) и (8) следует, что

$$\frac{d\varepsilon_\varphi}{d\varepsilon_\theta} = \frac{1+\gamma\sin\alpha}{\gamma\sin\alpha}. \quad (12)$$

В процессе нагружения  $\gamma$  изменяется незначительно, поэтому в первом приближении  $\gamma = \text{const}$ . Тогда

$$\varepsilon_\theta = \frac{\gamma\sin\alpha}{1+\gamma\sin\alpha} \varepsilon_\varphi. \quad (13)$$

Используя теперь (7), (11) и (13), с точностью до слагаемых порядка  $\varepsilon_\varphi^2$ , получаем

$$\begin{aligned} r &= \frac{R-\rho}{\sin\alpha} = \frac{R-\rho_0 \exp \varepsilon_\theta}{\sin\alpha} = \frac{R-\rho_0 \left(1 + \frac{\gamma\sin\alpha}{1+\gamma\sin\alpha} \varepsilon_\varphi\right)}{\sin\alpha} = \\ &= r_0 + \frac{\rho_0 \gamma \varepsilon_\varphi}{1+\sin\alpha} = r_0 (1 + \varepsilon_\varphi) = r_0 \exp \varepsilon_\varphi, \end{aligned}$$

что и требовалось. Заметим еще, что из условия постоянства объема (4) и формулы (13)

$$\varepsilon_r = -\frac{1+2\gamma\sin\alpha}{1+\gamma\sin\alpha} \varepsilon_\varphi. \quad (14)$$

Исследуем вопрос о критических деформациях и напряжениях. Очевидно из (2), что, во-первых,  $\sigma_\varphi > \sigma_\theta$  во всех точках оболочки при  $\gamma < 2/3$ , и поэтому разрушение вызывают кольцевые деформации, и, во-вторых, кольцевые напряжения достигают экстремальных значений при  $\alpha = \pm\pi/2$ , причем, максимум – при  $\alpha = -\pi/2$ , т.е. на вогнутой стенке. Из (2) следует, что

$$p = \frac{t}{r} \cdot \frac{1-3\gamma+3\gamma^2}{(1-1,5\gamma)(1-\gamma)} \bar{\sigma}_\varphi, \quad (15)$$

где  $\bar{\sigma}_\varphi$  – кольцевые напряжения на вогнутой стенке. Запишем формулу (15) более подробно, используя (11)–(14). Получим (формальные преобразования не приводим) с точностью до слагаемых порядка  $\varepsilon_\varphi^2$ :

$$\begin{cases} \rho = \frac{t_0}{r_0} (1 - K(\gamma_0) \bar{\varepsilon}_\varphi) \bar{\sigma}_\varphi, \\ K(\gamma) = \frac{1-2\gamma}{1-\gamma} + 1 + \frac{3\gamma(1-2\gamma)}{1-3\gamma+3\gamma^2} - \frac{\gamma(2,5-3\gamma)}{1-2,5\gamma+1,5\gamma^2}, \end{cases} \quad (16)$$

где  $\bar{\varepsilon}_\varphi$ ,  $\bar{\sigma}_\varphi$  – кольцевые деформации и напряжения на вогнутой стенке.

Считая материал оболочки упрочняемым, зависимость между интенсивностями напряжений и деформаций аппроксимируем степенной функцией  $\sigma_i = A\varepsilon_i^n$ ,  $A = n^{-n} \exp n \sigma_B$ , где  $n$  – показатель упрочнения,  $\sigma_B$  – временное сопротивление. Тогда [3]

$$\sigma_\varphi = (1 - m + m^2)^{-\frac{1+n}{2}} n^{-n} (\exp n) \varepsilon_\varphi^n \sigma_B. \quad (17)$$

Можно показать, что зависимость величины  $\sqrt{1 - m + m^2}$  от  $\varepsilon_\varphi$  незначительна [3], и эту величину можно считать постоянной. Тогда из (16) следует, что

$$p = B \exp(-K(\gamma_0) \bar{\varepsilon}_\varphi) \cdot \bar{\varepsilon}_\varphi.$$

Найдем, исходя из критерия максимума внутреннего давления, критическое значение для деформации  $\bar{\varepsilon}_\varphi^n$ , соответствующее потере оболочки пластической устойчивости. Получим из дифференциального уравнения  $p'(\bar{\varepsilon}_\varphi) = 0$  после упрощений

$$\bar{\varepsilon}_\varphi^{kp} = \frac{n}{K(\gamma_0)}. \quad (18)$$

Подставив это в (17), найдем критическое значение кольцевого напряжения на внутренней стенке  $\sigma_\varphi^{kp}(\gamma_0)$ :

$$\bar{\sigma}_\varphi^{kp}(\gamma) = \frac{(2-3\gamma) \exp n}{\sqrt{3} \sqrt{1-3\gamma+3\gamma^2}} \left( \frac{2-3\gamma}{\sqrt{3}(1-3\gamma+3\gamma^2)K(\gamma)} \right)^n \sigma_B. \quad (19)$$

Для вычисления критического давления следует выражения (18) и (19) подставить в первую из формул (16).

Заметим, что в предельном случае прямой трубы (тонкостенной цилиндрической оболочки), когда  $\gamma = 0$ , из формул (16), (18) и (19) следует, что коэффициент  $K = 2$ ,  $\varepsilon_\varphi^{kp} = n/2$ ,

$\sigma_\varphi^{kp} = \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \right)^{n+1} (\exp n) \sigma_B$ ,  $p^{kp} = \frac{t_0}{r_0} \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \right)^{n+1} \sigma_B$  – хорошо известные результаты, характеризующие потерю несущей способности цилиндрической оболочки под действием внутреннего давления.

### Литература

1. Новожилов В.В., Черных К.Ф., Михайловский Е.И. Линейная теория тонких оболочек. – Л.: Политехника, 1991. – 656 с.
2. Моношков А.Н., Пустин И.А., Сериков С.В. Прочность торových оболочек и отводов при нагружении внутренним давлением // Проблемы прочности. – 1980. – № 5. – С. 112–115.
3. Дильман В.Л., Остсемин А.А. Развитие методики оценки несущей способности равнопрочных тонкостенных торových оболочек и отводов // Заводская лаборатория. – 2002. – Т. 68. – № 3. – С. 47–52.
4. Дильман В.Л. Напряженно-деформированное состояние и пластическая устойчивость торовой разностенной оболочки, нагруженной внутренним давлением // Обзорение прикл. и промышл. матем. – 2001. – Т. 8, в. 2. – С. 585.
5. Дильман В.Л., Остсемин А.А. О влиянии двухосности нагружения на несущую способность магистральных трубопроводов // Известия РАН. МТТ. – 2000. – № 5. – С. 59–65.

Поступила в редакцию 15 апреля 2003 г.

# НЕЙРОСЕТЕВАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА ФИЛЬТРАЦИИ

*Е.Ф. Лепинин, В.И. Ширяев*

Рассматривается нейросетевой алгоритм решения задачи фильтрации. Предлагается структура искусственной нейронной сети, реализующая алгоритм фильтрации, процедура обучения нейронной сети. Проводится сравнительная оценка алгоритмов фильтрации с использованием и без использования искусственных нейронных сетей.

Применение искусственных нейронных сетей (ИНС) находит в настоящее время все более широкое распространение в теории управления [2, 6, 8]. Одной из задач теории управления, где необходимо использовать параллельные вычисления, является задача фильтрации динамического процесса [1, 4].

Рассматривается динамический процесс, описываемый  $n$ -мерной линейной системой:

$$x_{k+1} = A_k x_k + \delta_k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (1)$$

Измерение сигнала имеет вид

$$z_{k+1} = H_k x_k + \eta_k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (2)$$

где  $A_k$ ,  $H_k$  – матрицы  $m \times n$  считаются известными,  $x_k$  – вектор состояния,  $\delta_k$ ,  $\eta_k$  – гауссовский шум возмущений и наблюдений, соответственно. Известны характеристики:  $Mx_0 = \hat{x}_0$ ,  $V_{x_0} = P_0$ ,  $M\xi_0 = \bar{\xi}_0$ ,  $V_{\xi_k} = Q_k$ ,  $M\eta_k = \bar{\eta}_k$ ,  $V_{\eta_k} = R_k > 0$ .

Требуется найти оценку  $\hat{x}_k$  вектора  $x_k$  по совокупности измерений  $z_k(\cdot) = \{z_1, z_2, \dots, z_k\}$ . Для дискретного фильтра Калмана [4] находим решение в виде оценки  $\bar{x}_{k+1}$  из системы уравнений:

$$\begin{aligned} \bar{x}_{k+1} &= A_k \bar{x}_k + L_k (y_k - G A_k x_k); \\ L_k &= P_k G R^{-1}; \\ P_k &= M_k - M_k G^T (G M_k G^T + R)^{-1} G M_k; \\ M_k &= A_k P_{k-1} A_k^T + Q. \end{aligned}$$

Исходя из описанной выше оценки решение задачи фильтрации можно представить в виде последовательной многослойной нейронной сети. Оценку вектора  $\bar{x}_{k+1}$  удобно представить, как решение системы линейных уравнений вида  $Ax=b$ , где  $x$  – искомая величина оценки данного вектора ( $\bar{x}_{k+1}$ ), а  $b$  – правая часть уравнения фильтра Калмана. Тогда полный вид нейросетевого алгоритма представим, как и для решения системы уравнений [3], в следующем виде:

$$\begin{cases} x(0) = [0]; \\ y(k) = f(x(k) - b); \\ x(k+1) = y(k) - 2NA^T y(k), \end{cases}$$

где  $N$  – задаваемая погрешность,  $x(k)$  – вход нейрона на  $k$ -м шаге работы нейронной сети,  $x(k+1)$  – вход нейрона на  $k+1$ -м шаге,  $y(k)$  – выход нейрона,  $f$  – функция нелинейного преобразования.

Разбивая решение фильтра на несколько частей, строим отдельно слои ИНС, решающие системы уравнений и искомые матрицы  $L$ ,  $P$ ,  $M$ . Так для нахождения матрицы  $L$  нейросетевым методом следует решить следующую систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} x_{11} + x_{12} + \dots + x_{1n} = b_1; \\ x_{21} + x_{22} + \dots + x_{2n} = b_2; \\ \dots \\ x_{n1} + x_{n2} + \dots + x_{nn} = b_n, \end{cases}$$

где  $x_{11} \dots x_{nn}$  – элементы матрицы  $L$ , матрица  $A=E$ , а  $b_1 \dots b_n$  – элементы матрицы  $b$ , равной  $P_{k+1}G^TR^{-1}$ . Входным сигналом этой сети будет матрица  $L$  размером  $n \times n$ . Когда выходной сигнал будет отличаться от нулевого вектора меньше, чем на заданную точность, тогда входной сигнал будет являться решением данной системы. Окончательный вид нейронного слоя нахождения матрицы  $L$  представлен на рис. 1 и 2. Аналогично находим оценки вектора  $\bar{x}_{k+1}$ . В качестве элементов вектора  $b$  принимаются элементы выражения  $A_k \bar{x}_k + L_k(y_k - GA_k x_k)$ . Входным сигналом этого участка ИНС является вектора  $\bar{x}_{k+1}$  размером  $n \times n$ . Когда выходной сигнал будет отличаться от нулевого вектора меньше заданной погрешности, тогда входной сигнал будет являться решением данной системы. Продолжая рассуждения, получаем аналогичные слои НС для расчета матриц  $P$  и  $M$ . Общий вид фильтра Калмана представлен на рис. 3.

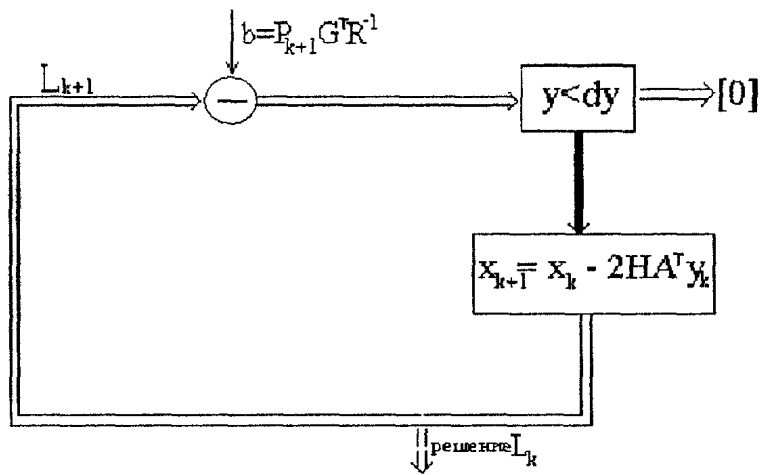


Рис. 1. Слой ИНС для расчета матрицы  $L$

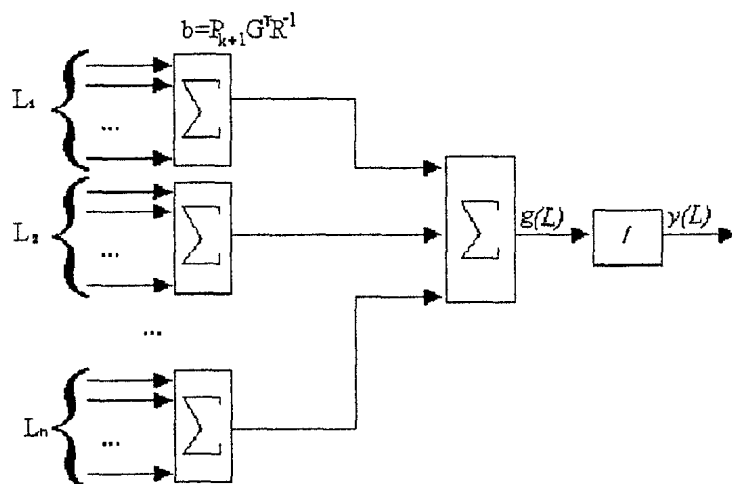


Рис. 2. Вид нейрона для расчета матрицы  $L$

В таблице приведены временные затраты на фильтрацию с помощью нейросетевого алгоритма и метода линейного программирования. Расчеты проводились на ПК с процессором Intel Celeron 800.



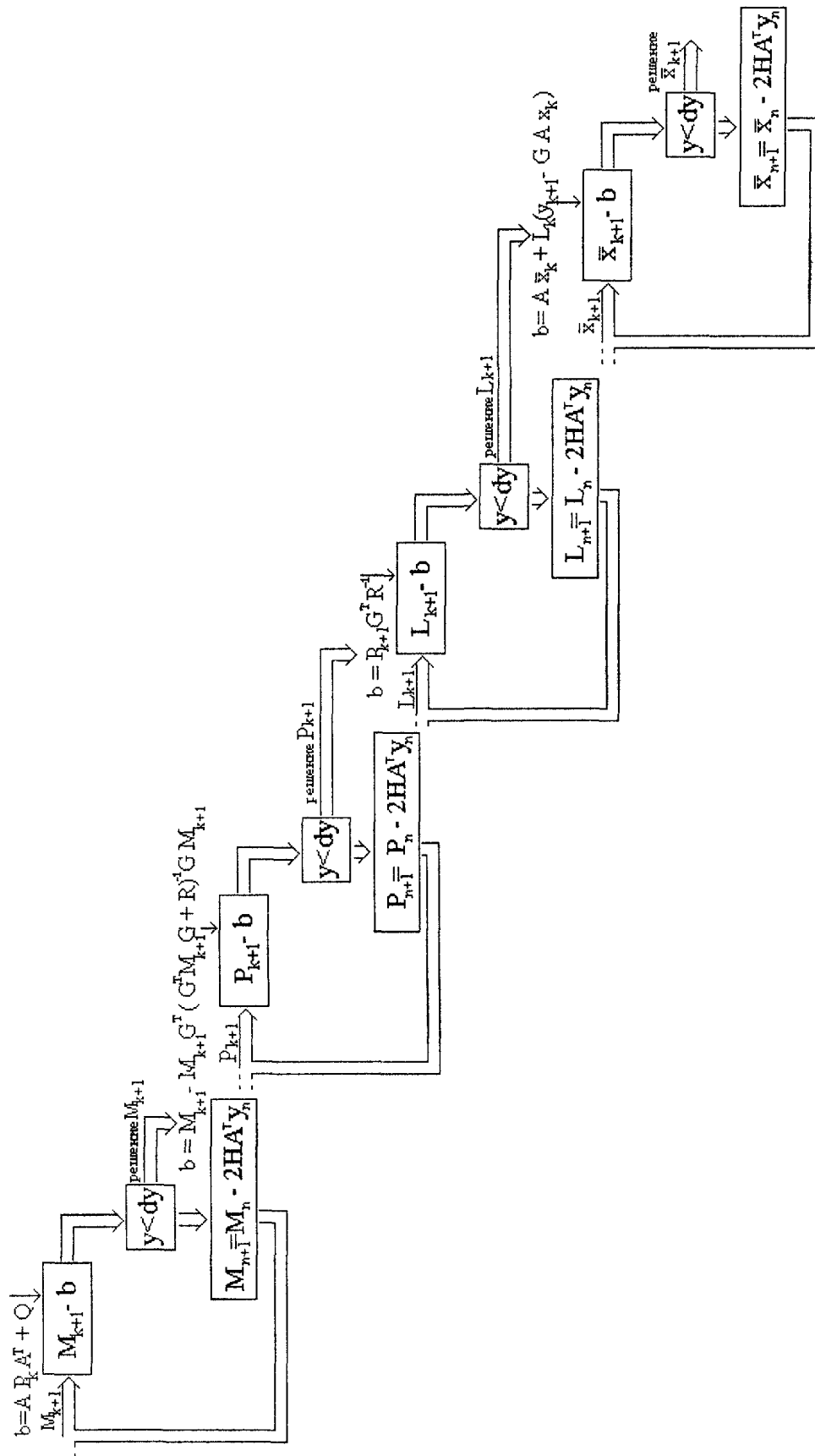


Рис. 3. Представление фильтра Калмана с помощью нейросетей

Временные затраты при решении задачи фильтрации

Размеры входной матрицы	СООТНОШЕНИЕ ВРЕМЕНИ		Время обучения ИС
	Метод лин. программ.	Метод ИС	
3×3	1	5	8,89
4×4	1	4,8	10,4
5×5	1	2,5	11,8
6×6	1	0,6	12,3
7×7	1	0,3	14,75
8×8	1	0,1	15,3

Сравнение результатов работы последовательно реализованного фильтра и нейросетевого показали превосходство последнего по скорости решения уже на задачах с размерностью входных матриц 6×6 и резкое увеличение этого разрыва (до 10 раз) с матрицами 8×8. Необходимо заметить, что в расчете решения задачи на ИНС не входит время, требуемое на обучение сети. Таким образом, решение задачи фильтрации на основе фильтра Калмана с использованием ИНС удастся представить как решение некоторого количества систем линейных уравнений [5, 7]. Очевидно, что так можно представить многогранники, описывающие информационное множество в задачах минимаксно-стохастической фильтрации.

**Литература**

1. Балакришнан А.В. Теория фильтрации Калмана. – М.: Мир, 1988.–168 с.
2. Бурков М.В. Синтез нейронного регулятора // Изв. АН. ТиСУ.– 1999.– №3.– С. 140–145.
3. Галушкин А.И., Судариков В.А., Шабанов Е.В. Нейроматематика: методы решения задач на нейрокомпьютерах // Математическое моделирование. – Т.3.– № 8. – 1991. – С. 93–111.
4. Кац И.Я., Куржанский А.Б. Минимаксная многошаговая фильтрация в статистически неопределенных ситуациях // Автоматика и телемеханика. – 1978.– № 11. – С. 74–87.
5. Лепинин Е.Ф., Агафонов Е.О. Нейронные алгоритмы в задачах управления в условиях неопределенности // Научно-техническая конференция «Дни науки–98». Тез. докл. – Озерск: ОТИ МИФИ.– 1998.– С. 137–139.
6. Лепинин Е.Ф. Нейросетевой подход к решению задачи фильтрации // Тр. 31-й Региональной молодежной конф. «Проблемы теоретической и прикладной математики». Тез. докл. – Екатеринбург: УрО РАН.– 2000. – С. 115–116.
7. Сигеру О., Марзуки Х., Рубия Ю. Нейроуправление и его приложения. – М.: ИПРЖР, 2000. – 272 с.
8. Ширяев В.И. Синтез управления линейными системами при неполной информации// Изв. РАН. Техн. киберн.– 1994.– № 3.– С. 229–237.

*Поступила в редакцию 20 мая 2003 г.*

# СИСТЕМЫ ПАССИВНОГО МОНИТОРИНГА ГРОЗОВОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

*А.В. Панюков, Д.В. Будуев, Д.Н. Малов*

Рассмотрен круг вопросов, связанный, во-первых, со способами регистрации и обработки атмосфериков с целью извлечения информации о координатах источника излучения, во-вторых, с созданием программно-аппаратных комплексов, обладающих достаточной для практических и исследовательских целей точностью, надежностью, быстродействием, удобством представления информации.

## **Введение<sup>1</sup>**

Вопросы определения местоположения молниевых разрядов радиотехническими методами представляют интерес, как для фундаментальной науки, так и для практики. Оперативная и достоверная информация о грозовых явлениях позволит решать многие проблемы геологии, метеорологии, физики атмосферы, изучения флуктуаций электромагнитного поля Земли. С практической точки зрения, обнаружение грозовых очагов и слежение за их перемещением важно, например, для грозозащиты линий электропередачи (ЛЭП), предупреждения поражения самолетов молниями.

Морские штормы, торнадо и ураганы, оказывающие большое воздействие на погодную обстановку и угрожающие жизни людей, обыкновенно сопровождаются значительным числом грозовых разрядов, что позволяет определять координаты таких атмосферных явлений с помощью систем местоопределения молниевых разрядов. Знание точных координат центров зарождения подобных природных явлений позволит определить причины их возникновения и предсказывать их появление. Так же перманентные очаги грозовой активности могут указывать на залежи полезных ископаемых или наличие скоплений подземных вод.

До сих пор, несмотря на значительный прогресс современной науки в исследовании мощных электрических разрядов, аналоги природных молний не могут быть воссозданы в лабораторных условиях. Поэтому пассивные системы местоопределения могут быть использованы для исследования структуры и этапов развития молниевых разрядов, определение причин их возникновения и разработки методов защиты от ударов молний.

Подавляющее количество аварий и отключений ЛЭП обусловлено прорывом молний сквозь тросовую защиту и поражением фаз, что наносит большой экономический ущерб. Кроме того, молния является источником помех, которые, распространяясь по линиям электропередачи, доходят до потребителя и могут вызвать сбои или отказы в работе приборов. Знание грозовой обстановки позволит диспетчерским службам ЛЭП принять решение о коммутации отдельных линий и аварийных работах.

Приближение воздушных судов к грозовому облаку может создать аварийную ситуацию. При поражении самолета молнией выходят из строя системы управления двигателями и оперением. Возникают наводки, нарушающие работу бортовых вычислительных машин, что приводит к непредсказуемым последствиям. Наиболее ответственными этапами полета являются взлет и посадка, которые должны выполняться в безопасных условиях. Поэтому наземным авиационным службам очень важно достоверно определить местоположение грозовых очагов в районе аэропорта, иметь прогноз их развития, чтобы выдать пилотам соответствующие указания.

Активным коммерческим потребителям информации о грозах могут быть строительные и страховые компании. Для страховых компаний требуется подтверждение факта удара молнии как состоявшегося события. А наличие многолетнего банка данных по грозовой активности в конкретном географическом районе позволяет проектировать системы грозозащиты зданий и определять страховую сумму для имеющихся и строящихся объектов с учетом их возможной поражаемости молнией.

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 01-07-90161 и 03-07-06052-мас).

В настоящее время используются как радиолокационные методы, так и пассивные методы местоопределения гроз. Метеоролокаторы оценивают состояние облаков косвенным путем по результатам измерения ориентации игольчатых кристалликов льда в электрическом поле облака. Пассивные радиотехнические системы используют то обстоятельство, что удар молнии порождает так называемый атмосферик – мощный электромагнитный импульс, который распространяется на большое расстояние с малым затуханием. Достаточно широкий и полный обзор пассивных методов местоопределения гроз содержится в работах [2; 3; 7; 21; 22]. В данной работе рассмотрен круг вопросов, связанный с отысканием конкретных способов обработки регистрируемых атмосфериков с целью извлечения информации о координатах источника излучения и созданием программно-аппаратных комплексов, обладающих достаточной для практических и исследовательских целей точностью, надежностью, быстродействием, удобством представления информации.

### Современные системы пассивного мониторинга

Известно несколько типов систем пассивного местоопределения гроз, основанных на мониторинге электромагнитного поля Земли в сверхдлинноволновом или ультракоротковолновом (далее СДВ или УКВ, соответственно) диапазонах. Наиболее распространенными являются многопунктовые системы местоопределения гроз [22], использующие либо пеленгационный, либо разностно-дальномерный методы, либо их комбинацию и предполагающие наличие 3-х и более пунктов наблюдения.

В **разностно-дальномерном** способе предполагается, что в каждом пункте наблюдения измеряется время регистрации сигнала от источника электромагнитного излучения. Разность между временами прихода сигнала на два пункта определяет гиперболу, и несколько пунктов определяют несколько гипербол, пересечение которых указывает на источник излучения. Пусть в пункте  $j \in J$  с неизвестными координатами  $(x_j, y_j)$  измерено время  $t_j$  появления сигнала от источника электромагнитного излучения,  $c$  – скорость света, тогда

$$(\forall j \in J) \quad \left( c^2 (t_j - t)^2 = (x - x_j)^2 + (y - y_j)^2 \right).$$

Таким образом, разностно-дальномерный способ заключается в построении и решении этой системы нелинейных алгебраических уравнений с неизвестными  $t, x, y$ .

На разностно-дальномерном способе местоопределения основана работа широко распространенной системы NLDN фирмы Global Atmospheric (США) [25], работающей в УКВ диапазоне. К недостаткам данной системы следует отнести: необходимость высокоточной синхронизации системных часов на пунктах регистрации (вплоть до субмикросекундного уровня), работоспособность системы только в пределах прямой видимости, фиксацию только части разрядов, происходящих в зоне наблюдения, и возможное наличие зон с неоднозначным местоопределением разряда.

В случае использования для работы СДВ диапазона снимается условие прямой видимости разряда, но возникают сложности при идентификации принадлежности принятых в разных пунктах сигналов одному и тому же разряду. Возможные интервалы времени между моментами поступления сигналов на разные приемные пункты тем больше, чем длиннее база системы [7]. В пределах такого интервала времени может произойти несколько молниевых разрядов, что приведет к возникновению неопределенности в идентификации соответствия зарегистрированных сигналов конкретному молниевому разряду и, в конечном счете, к снижению вероятности правильного определения местоположения разряда. Вероятность отсутствия такой ошибки уменьшается экспоненциально с укорочением базы системы, но сближение приемных пунктов системы приводит к возрастанию погрешности местоопределения.

Сущность **пеленгационного** способа исходит из предположения, что возможно измерение азимута источника электромагнитного излучения из каждого пункта наблюдения. Местоположение молниевых разряда определяется как пересечение этих азимутов. Так, если в каждом пункте  $j \in J$  с известными координатами  $(x_j, y_j)$  возможно измерение азимута  $\psi_j$  источника электромагнитного излучения, то координаты  $(x, y)$  источника излучения должны удовлетворять системе линейных алгебраических уравнений

$$(\forall j \in J) \quad \left( (x - x_j) \sin \psi_j = (y - y_j) \cos \psi_j \right).$$

Такой способ, основанный на УКВ интерферометрах, реализован в системе SAFIR [24] фирмы Vaisala Dimensions. Из-за свойства УКВ сигнала распространяться только в пределах прямой видимости, эта и подобные ей системы имеют ограниченный радиус действия. Однако, это свойство, вместе с тем фактом, что УКВ импульсы коротки по времени, позволяет моделировать источники УКВ излучения, как точечные источники и определять их место в трех измерениях. Недостатками системы являются возможность работы системы только в пределах прямой видимости, уменьшение точности при увеличении базовых размеров системы, наличие зон с возрастающей ошибкой местоопределения и отсутствие оценок погрешности определения местоположения молниевых разряда.

В случае использования для определения азимутов рамочных СДВ пеленгаторов снимается условие прямой видимости разряда, но сильно возрастают погрешности определения пеленга, возникающие из-за ошибок, вызванных наличием аномальной составляющей в магнитном поле [3; 4]. В частности, из-за неперпендикулярности молниевых каналов измеряемая рамочными СДВ пеленгаторами величина  $\varphi$  может существенно отличаться от пеленга  $\psi$  на источник излучения. Интерференционные методы пеленгации в диапазоне СДВ в сущности сводятся к разностно-дальномерному методу.

Повысить вероятность и точность местоопределения при работе в диапазоне УКВ позволяет разработанная в начале 1990-х годов компанией Global Atmospheric (США) система ИМРАСТ [20; 22; 25], основанная на комбинации разностно-дальномерного и пеленгационного способов. В этом комбинированном способе с каждой пункта наблюдения на сервер передаются пеленг на молниевый разряд и время прихода сигнала. Сервер по этим данным идентифицирует принадлежность принятого атмосферика конкретному молниевому разряду, затем вычисляет координаты этого молниевых разряда и предоставляет пользователям системы доступ к результатам вычислений. Однако в новой системе осталась необходимость высокоточной синхронизации, к тому же потребовалось увеличение плотности расположения пунктов наблюдения.

Исторически сложилось так, что в России, где испытывался недостаток в повсеместно развитых и доступных системах связи, применение многопунктовых систем было затруднено и наибольшее внимание уделялось развитию однопунктовых методов.

Задачу **однопунктового местоопределения** в радиусе до 100 км можно решить, используя диапазон СДВ. При этом, поскольку длина волны существенно превосходит размеры молнии, то в качестве математической модели молниевых разрядов используется произвольно ориентированный электрический диполь. Вполне адекватной математической моделью земной поверхности для рассматриваемых расстояний и длин волн является бесконечно проводящая плоскость. Как показано в [4], ортогональные проекции компонент поля, индуцируемого в точке  $O$  электрическим диполем, размещенным над бесконечно проводящей плоскостью, равны

$$e_z(t) = q(t) \cdot v + q'(t) \frac{v}{\alpha} + q''(t) \frac{u}{\alpha^2},$$

$$h_x(t) = \sin \varphi \left( q'(t) \frac{1}{\alpha} + q''(t) \frac{1}{\alpha^2} \right), \quad h_y(t) = -\cos \varphi \left( q'(t) \frac{1}{\alpha} + q''(t) \frac{1}{\alpha^2} \right),$$

$$e_x(t) = e_y(t) = h_z(t) = 0.$$

Здесь  $\alpha = c/r$  – величина, обратная времени распространения волны от источника до точки  $O$ , переменные  $u, v, \varphi, q(t)$  определяются равенствами

$$w \sin \varphi = \sin \theta \cos \theta_0 \sin \phi - \cos \theta \sin \theta_0 \sin \phi_0,$$

$$w \cos \varphi = \sin \theta \cos \theta_0 \cos \phi - \cos \theta \sin \theta_0 \cos \phi_0,$$

$$u = \sin \theta \cos (\varphi - \phi), \quad v \sin (\phi - \phi_0) = \sin (\varphi - \phi_0), \quad q(t) = \frac{w \alpha^2 p(t)}{(2\pi c^2 r)},$$

$p(t)$  – дипольный момент источника излучения, остальные параметры представлены на рис. 1.

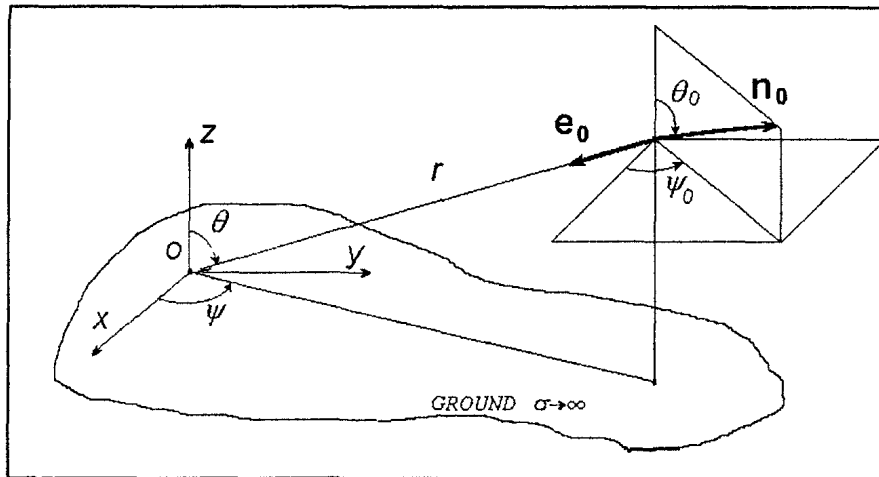


Рис. 1. Определение геометрических параметров задачи

В рассматриваемом случае компоненты  $e_z$ ,  $h_x$  и  $h_y$  могут быть измерены с помощью антенной системы, состоящей из вертикальной электрической антенны и пары взаимно ортогональных рамочных магнитных антенн и, следовательно, использованы в качестве исходных данных для решения задачи оценки координат  $(r, \psi, \theta)$  точки размещения диполя. Оценка параметра  $\varphi$ , называемого в дальнейшем псевдопеленг, в отличие от пеленга  $\psi$ , может быть получена с помощью известной техники пеленгования. В частности, в инструментальном программном комплексе «Гроза» [5] данная оценка осуществляется с помощью алгоритма.

$$\cos(2\varphi) = \frac{h_{xx} - h_{yy}}{\sqrt{(h_{xx} - h_{yy})^2 + 4 \cdot h_{xy}^2}}, \quad \sin(2\varphi) = \frac{2h_{xy}}{\sqrt{(h_{xx} - h_{yy})^2 + 4 \cdot h_{xy}^2}}, \quad (1)$$

где

$$h_{xx} = \int_0^{\infty} [h_x(t)]^2 dt, \quad h_{yy} = \int_0^{\infty} [h_y(t)]^2 dt, \quad h_{xy} = \int_0^{\infty} h_x(t) \cdot h_y(t) dt, \quad h_x(t), \quad h_y(t)$$

– сигналы, наблюдаемые в рамочных магнитных антеннах.

Если принять гипотезу о вертикальности диполя ( $\theta_0=0$ ), то  $\psi=\varphi$  и  $u \approx v=1$ . Данная гипотеза была принята при разработке отечественного промышленного образца сверхдлинноволнового автономного грозопеленгатора-дальномера, далее – СДВ АГПД, «Очаг-2П» [1]. Опытная эксплуатация показала возможность применения такого рода однопунктовых систем, однако из-за невысоких точностных и вероятностных характеристик данный АГПД широкого применения не получил.

В работах [4; 6] предложен и исследован **прямой алгоритм** определения параметров  $u$ ,  $v$ , и  $\alpha$  в модели с произвольной ориентацией диполя:

$$\begin{cases} \alpha = \sqrt{(\tilde{h}_1 \tilde{e}_2 - \tilde{h}_2 \tilde{e}_1) / (\tilde{h}_2 \tilde{e}_0 - \tilde{h}_1 \tilde{e}_1)}, \\ u = (\tilde{e}_0 \tilde{e}_2 - \tilde{e}_1^2) / (\tilde{h}_2 \tilde{e}_0 - \tilde{h}_1 \tilde{e}_1), \\ v = (3\tilde{h}_0 u \alpha - \tilde{e}_0 \alpha - g) / (2\tilde{h}_0 \alpha), \end{cases} \quad (2)$$

где

$$\tilde{e}_k = \int_0^{+\infty} e^{(k)}(t) h^{(k)}(t) dt, \quad \tilde{h}_k = \int_0^{+\infty} (h^{(k)}(t))^2 dt, \quad \tilde{g} = \int_0^{+\infty} e'(t) h(t) dt, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

$$h(t) = h_x(t) \cdot \sin \varphi - h_y(t) \cdot \cos \varphi.$$

По вычисленным параметрам  $u$ ,  $v$ ,  $\alpha$ ,  $\varphi$  можно определить расстояние до диполя  $r = c / \alpha$ , а также гарантированные интервальные оценки и вероятностные характеристики угловых координат точки размещения диполя [4]

$$P \{|\varphi - \psi| \leq \Delta\} = \frac{\operatorname{arctg} ((\operatorname{tg} \Delta) / s)}{\operatorname{arctg} ((\operatorname{tg} \arccos u) / s)}, \quad P \{\theta \leq \Theta\} = \frac{\operatorname{arctg} (\sqrt{\sin^2 \Theta - u^2} / (su))}{\operatorname{arctg} ((\operatorname{tg} \arccos u) / s)},$$

где  $s = |(1 - uv)/(uv)|$ ,  $0 \leq \Delta \leq \arccos u$ ,  $\arcsin u \leq \Theta \leq \frac{\pi}{2}$ .

Наиболее вероятные оценки для координат диполя в большинстве случаев совпадают с оценками, получаемыми при принятии гипотезы о вертикальности диполя:  $\psi = \varphi$ ,  $\theta = \arcsin u$ . Однако в общем случае, произвольная ориентация диполя вносит неопределенность в задачу определения угловых координат его местоположения по результатам одноточечного наблюдения индуцируемого им электромагнитного поля.

Рассмотренная математическая модель и алгоритм оценки ее параметров по сигналам  $e_z$ ,  $h_x$  и  $h_y$  составили основу российско-американского проекта по разработке АГПД нового поколения, поддержанного Международным научно-техническим центром [26].

Неопределенность в определении местоположения диполя, характерную для однопунктового метода можно устранить, определяя параметры  $u$ ,  $v$ ,  $\alpha$ ,  $\varphi$  в двух или более точках [4]. Действительно, если  $(x, y, z)$  – декартовы координаты молниевое разряда;  $(x_i, y_i)$  – заданные декартовы координаты  $i$ -й точки наблюдения,  $i \in J$ ;  $(r_i, \varphi_i, u_i)$  – соответствующие параметры молниевое разряда, измеренные в  $i$ -й точке наблюдения; то имеют место равенства

$$(x_i - x) \cos \varphi_i + (y_i - y) \sin \varphi_i = r_i u_i, \quad i \in J, \quad (3)$$

представляющие систему линейных алгебраических уравнений с двумя неизвестными  $(x, y)$ . Если наблюдаемый диполь не является горизонтальным, то система (3) имеет полный ранг и может быть решена методом наименьших квадратов.

Рассмотренный метод, в дальнейшем называемый **дальномерно-пеленгационным**, для расчетов использует измеренные автономными грозопеленгаторами-дальномерами значения  $u$ ,  $v$ ,  $\alpha$ ,  $\varphi$ , а не значения пеленгов  $\psi$ , как классический пеленгационный метод. Это делает его нечувствительным к наличию аномальной составляющей в наблюдаемом магнитном поле. Кроме того, в нем отсутствует требование высокоточной синхронизации часов на пунктах наблюдения, характерное для разностно-дальномерного способа, а возможность оценки местоположения молниевое разряда на каждом пункте устраняет коллизии в идентификации соответствия зарегистрированных сигналов конкретным молниевым разрядам. Наконец, данный метод дает возможность определения трех координат местоположения эквивалентного дипольного источника.

### Развитие систем пассивного мониторинга

Таким образом, за счет интеграции однопунктовых систем пассивного мониторинга грозовой деятельности в единую вычислительную сеть можно повысить вероятность обнаружения молниевое разряда и точность определения его координат. Кроме того, анализ параметров молниевое разряда  $(u_j, v_j, \alpha_j, \varphi_j)$ ,  $j \in J$ , в совокупности позволяет сделать прогноз развития грозовой деятельности, открывает новые возможности в исследованиях по метеорологии, гидрологии, геологии, атмосферному электричеству, а также в других сферах.

В 2001 г. РФФИ поддержал проект 01-07-90161 «Сетевое инструментальное программное обеспечение для многопунктовой системы пассивного мониторинга грозовой деятельности». Цель проекта – развитие инструментальных программно-аппаратных средств для однопунктовых и многопунктовых систем местоопределения грозовых очагов по результатам пассивного мониторинга электромагнитного поля в диапазоне СДВ. Основные задачи проекта:

- 1) анализ методов организации распределенной вычислительной сети АГПД;
- 2) разработка программно-аппаратного обеспечения, позволяющего
  - a) вырабатывать согласованное решение о месте, времени и других параметрах молниевое разряда;
  - b) в режиме реального времени предоставлять информацию о грозовой обстановке и делать прогноз ее развития;
  - c) вести базу данных о грозовых явлениях, обеспечить свободный доступ через Интернет к интерфейсным формам формируемой базы данных.

**Автономный гронопеленгатор-дальномер**

*Погрешность алгоритмов определения псевдопеленга*

Так как инструментальная погрешность известных пеленгаторов оказывается существенно меньше погрешностей, обусловленных произвольностью ориентации эквивалентного дипольного источника излучения, то задача пеленгования молниевых разрядов считалась решенной. Выше были указаны способы исключения влияния ориентации диполя на оценку его размещения. В связи с этим актуальной становится задача повышения точности определения псевдопеленга  $\varphi$ .

В ходе исследований [9; 12; 13] была найдена дисперсия  $D\{\varphi\}$  оценки псевдопеленга с помощью алгоритма (1) при наличии аддитивного шума в наблюдаемых сигналах

$$D\{\varphi\} \approx \frac{\sigma^2}{S^2} (1 - 2|\sin 2\varphi| \cdot \cos^2 2\varphi),$$

где  $\sigma^2, S^2$  – мощность шума и сигнала соответственно. Таким образом, среднеквадратическое отклонение оценки псевдопеленга не превосходит отношения мощности шума к мощности сигнала т.е. относительной погрешности моделирования. Следовательно, алгоритм (1) является вполне устойчивым к погрешностям моделирования. Применение трех дополнительных пар рамочных антенн, ориентация которых отличается от ориентации используемых антенн на угол  $\pi/8, \pi/4$  и  $3\pi/8$  уменьшит дисперсию  $D\{\varphi\}$  еще в три раза.

*Экстремальный алгоритм*

Прямой алгоритм (2) был получен в предположении, что источник излучения является диполем, а подстилающая поверхность – плоскостью с бесконечной проводимостью. В силу неидеальности моделей и наличия шумов в наблюдаемых сигналах, приходится допускать наличие невязок в полученных уравнениях. Поэтому, с интуитивной точки зрения предпочтительней использовать принцип наименьших квадратов, в соответствии с которым параметры модели определяются из условия

$$I(\mathbf{x}) = \int_0^\infty \left[ x_1 e' + x_2 e + x_3 h' + x_4 h + x_5 \int_0^t h(\tau) d\tau \right]^2 dt = (\mathbf{x}, \mathbf{Ax}) \rightarrow \min_{\mathbf{x}}$$

где

$$\mathbf{A} = \int_0^\infty \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}^T dt, \quad \mathbf{s} = \left( k \cdot e'(t) \quad e(t) \quad k \cdot h'(t) \quad h(t) \quad \frac{1}{k} \int_0^t h(\tau) d\tau \right)^T,$$

$k$  – постоянная времени дифференцирующего и интегрирующего звеньев, введенная для согласования масштабов координат вектора  $\mathbf{x}$ .

Пусть  $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \lambda_4$  – собственные числа матрицы  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{x}^{(i)}, i = 0, 1, 2, 3, 4$  – соответствующие собственные векторы. **Экстремальный алгоритм** [8] определения параметров  $u, v$ , и  $\alpha$  устойчивый к ошибкам в исходных данных состоит в вычислении

$$k\alpha = \begin{cases} \frac{2\Delta_{25}}{-\Delta_{24} - \Delta_{15} - \sqrt{(\Delta_{24} + \Delta_{15})^2 - 4\Delta_{14}\Delta_{25}}}, & \text{если } |\Delta_{25}| \geq |\Delta_{14}|, \\ \frac{-\Delta_{24} - \Delta_{15} - \sqrt{(\Delta_{24} + \Delta_{15})^2 - 4\Delta_{14}\Delta_{25}}}{2\Delta_{14}}, & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

$$u = \frac{k\alpha\Delta_{13} + \Delta_{23}}{\Delta_{12}}, \quad v = \frac{-\Delta_{45}}{k\alpha\Delta_{24} + \Delta_{25}},$$

где  $\Delta_{mn}$  – определитель матрицы, полученной из матрицы  $(\mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{x}^{(3)}, \mathbf{x}^{(4)})$  путем удаления строк с номерами  $m$  и  $n$ .

*Программно-аппаратное обеспечение АГПД*

Проведенные теоретические и численные исследования показывают, что найденные математические модели и алгоритмы могут быть основой нового поколения однопунктовых систем местоопределения гроз в ближней зоне. В частности, достаточен шаг дискретизации по времени



$5 \cdot 10^{-6}$  сек при числе уровней квантования  $2^{12}$ . При этом,  $2^7$  уровней необходимо для состоятельной оценки и  $2^5$  дополнительных уровней необходимо для вариации амплитуды сигналов.

Разрабатываемый АГПД [15; 19] состоит из антенной системы с блоком преобработки сигналов, локального канала связи и компьютера. Сигналы, принимаемые антенной системой, преобразуются в цифровую форму в блоке преобработки сигналов. Далее осуществляется цифровая фильтрация, буферизация и передача сигналов по каналу связи на компьютер

Блок преобработки вполне может быть реализован на основе одноплатного промышленного компьютера половинного размера РСА-6771, пассивной объединительной платы РСА-6104Р4 и многофункциональной высокоскоростной платы аналого-цифрового преобразования L-783. Компьютер РСА-6771 реализован на базе процессора Pentium III, содержит коммуникационное устройство – контроллер Ethernet 10/100Base-T, последовательные порты, контроллеры жесткого магнитного диска и внешнюю шину PCI. Объединительная плата РСА-6104Р4 обеспечивает соединение компьютера РСА-6771 и платы аналого-цифрового преобразования L-783 по внешней шине PCI.

Программное обеспечение [17] компьютера обеспечивает прием сигналов по локальному каналу связи, сохранение сигналов в базе данных, решение задачи идентификации параметров используемой математической модели. Кроме того, данное программное обеспечение поддерживает решение задач мониторинга и исследования грозовой активности, визуализацию и анализ накопленных данных, а также фоновое тестирования системы.

### Сеть АГПД

#### Дальномерный метод

В работах [16; 18] представлены результаты анализа точностных характеристик дальномерно-пеленгационного алгоритма (3). В случае двухпунктовой системы имеет место неустойчивость алгоритма в области близкой к линии, соединяющей точки наблюдения. В связи с этим сделан вывод о целесообразности использования трех и более пунктов наблюдения. Другим недостатком дальномерно-пеленгационного метода (3) является использование в системе уравнений параметра  $u$ , для нахождения которого необходимо знать достаточно точные значения действующих высот магнитных и электрические антенн в каждом пункте наблюдения. Получение значений действующих высот с заданной точностью является технически сложной задачей, требует длительного времени для сбора данных и наличия эталонного измерителя.

В ходе работы был построен дальномерный метод, не требующий предварительного знания действующих высот. Сущность метода в том, что декартовы координаты  $(x_i, y_i)$   $i$ -го пункта наблюдения  $i = 1, 2, \dots, n$ ,  $n \geq 3$ , декартовы координаты молниевоего разряда  $(x, y, z)$  и дальности  $r_i$  от пунктов  $i=1, 2, \dots, n$  до источника удовлетворяют системе уравнений

$$r_i^2 = (x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Если пункты наблюдения не лежат на одной прямой, то полученная система будет иметь полный ранг, ее наилучшее, в смысле метода наименьших квадратов решение будет равно:

$$\begin{pmatrix} r^2 \\ x \\ y \end{pmatrix} = (C^T \cdot C)^{-1} \cdot C^T \cdot B, \quad z = \sqrt{r^2 - (x^2 + y^2)},$$

где

$$C = \begin{pmatrix} 1 & -2x_1 & -2y_1 \\ 1 & -2x_2 & -2y_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & -2x_n & -2y_n \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} r_1^2 - (x_1^2 + y_1^2) \\ r_2^2 - (x_2^2 + y_2^2) \\ \dots \\ r_n^2 - (x_n^2 + y_n^2) \end{pmatrix} \quad (4)$$

Легко заметить, что при фиксированном множестве пунктов наблюдения матрица  $C$  постоянна, а неизвестные  $x, y, r^2$  определяются как линейные комбинация измеренных значений  $r_i^2$ ,  $i=1, 2, \dots, n$ . Следовательно, еще на этапе проектирования системы легко построить оптимальный по точности алгоритм вычисления неизвестных.

## Программно-аппаратное обеспечение сети АГПД

Архитектура сети АГПД приведена на рис. 2. В состав сети входят несколько СДВ АГПД, расположенных в различных пунктах наблюдения, вычисляющий сервер с базой данных о наблюдаемых явлениях, блок управления, и сеть передачи данных, используемая для связи между компонентами системы [10; 14; 16]. Доступ пользователей к результатам наблюдений осуществляется с помощью разработанных форм через сеть Интернет.

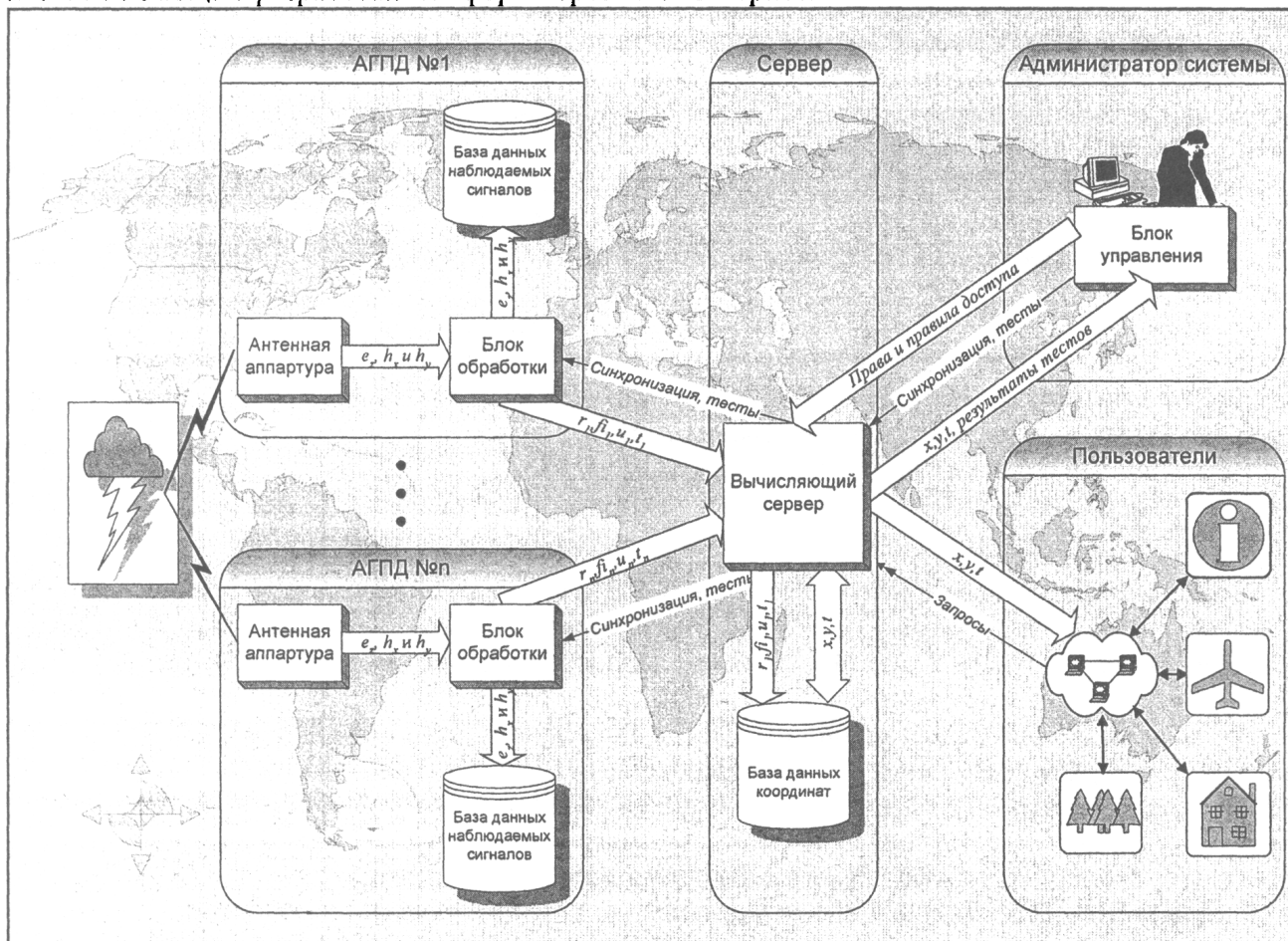


Рис. 2. Архитектура сети АГПД

Используемые в качестве сенсоров, АГПД осуществляют мониторинг электромагнитного поля Земли в СДВ диапазоне, регистрацию молниевых разрядов и определение его обобщенных координат (время регистрации  $t$ , дальность  $r$ , псевдопеленг  $\varphi$  и параметр  $u$ ), и их передачу на вычисляющий сервер. По командам с вычисляющего сервера, АГПД осуществляют коррекцию показаний системных часов и выполнение тестов [11].

Вычисляющий сервер и блок управления реализованы на одном или нескольких компьютерах стандартной архитектуры с использованием программного обеспечения [23], разработанного в рамках проектов РФФИ 01-07-90161, 02-07-060090-мас, 03-07-06052-мас. Блок управления позволяет администратору системы задавать конфигурацию вычисляющего сервера и управлять работой всей системы, устанавливать права доступа пользователей к данным, инициировать коррекцию показаний системных часов всех АГПД, проводить тестирование работоспособности системы в целом и ее отдельных элементов, а также отображать информации об их состоянии.

Вычисляющий сервер по полученным с АГПД результатам наблюдений идентифицирует наблюдаемые сигналы по отношению конкретному грозовому разряду, производит отбор АГПД, данные которых будут участвовать в расчетах, и в итоге, находит по этим данным декартовы координаты разряда в соответствии с (3) или (4). Полученные координаты соотносятся с земной поверхностью для получения географических координат молниевых разрядов, которые вместе с полученными исходными данными записываются в базу данных. Помимо этого вычисляющий сервер вырабатывает сигналы для коррекции системных часов всех АГПД и формирует команды

к АГПД, на выполнение тестовых заданий в фоновом режиме или по указанию блока управления. Результаты тестирования всей системы и ее отдельных элементов передаются на блок управления для анализа их администратором системы.

При работе с клиентами, вычисляющий сервер регистрирует компьютеры пользователей и обеспечивает доступ к информации в соответствии с установленными правами и правилами, предоставляет по требованию пользователей либо оперативную информацию о грозовой обстановке, либо обеспечивает работу с архивом наблюдений. Для обеспечения взаимодействия компьютеров пользователей с вычисляющим сервером на них должно быть установлена клиентская часть программного обеспечения [23]. В качестве сети передачи данных между компонентами системы может быть использована любая стандартная компьютерная сеть, в том числе и сеть Интернет.

### Заключение

Создание нового поколения систем местоопределения гроз и расширение круга решаемых ими задач ведут не только к существенному пересмотру требований к их техническим характеристикам, но и к разработке новых математических моделей и алгоритмов анализа грозовых явлений, их трассирования и отображения, а также ведения архивов и их использования специалистами разных предметных областей. Решение данных проблем – цель будущих исследований.

### Литература

1. Грозопеленгатор-дальномер «Очаг-2П». – Л: Гидрометеиздат. – 1988. – 30 с.
2. Раков В.А. Современные пассивные радиотехнические системы местоопределения молний // Метеорология и гидрология. – 1990. – № 11. – С.118–123.
3. Кононов И.И., Петренко И.А. Современное состояние пассивных методов местоопределения гроз // Радиотехника и электроника. – 1992. – Т. 32. – № 7. – С. 1153–1167.
4. Panyukov A. V. Estimation of the location of an arbitrarily oriented dipole under single-point direction finding // Journal of geophysical research. – Vol. 101. – № D10. –P. 14,977–14,982. June 27, 1996. (USA)
5. Панюков А.В., Захаров Е., Королев М. Комплекс программ для системы местоопределения грозовых очагов в ближней зоне («Гроза»). // Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем. – Официальный бюллетень Российского агентства по патентам и товарным знакам. № 1(19), 1997. – М.: РосАПО. – Рег. № 970109. – С. 59.
6. Панюков А. В. Анализ погрешности прямого алгоритма определения дальности до электрического диполя // Известия вузов. Радиофизика, том XLII. – № 3. – 1999. – С. 266–277.
7. Александров М. С., Орлов А. В. Сравнительный анализ разностно-дальномерного и пеленгационного методов местоопределения грозовых очагов // Радиотехника и электроника. – № 3. – 2001. – С. 304–312.
8. Панюков А. В., Будуев Д. В. Алгоритм определения расстояния до местоположения молниевых разрядов // Электричество. – № 4. – 2001. – С. 10–14.
9. Панюков А. В., Малов Д. Н. Погрешность алгоритмов определения псевдопеленга дипольного источника излучения // Известия высших учебных заведений России. Радиоэлектроника. – № 1. – 2001. – С. 81–88.
10. Малов Д. Н., Панюков А. В. Сеть одноpunktовых грозопеленгаторов для локализации грозовых очагов. // Обозрение прикладной и промышленной математики. – Том 8. – Вып. 2. – 2001. – С. 643–644.
11. Будуев Д. В., Панюков А. В. Программное обеспечение полевых испытаний автономного грозопеленгатора. // Обозрение прикладной и промышленной математики. – Том 8. – Вып. 2. – 2001. – С. 545.
12. Малов Д. Н., Панюков А. В. Исследование точности пеленгования дипольного источника излучения // Алгоритмический анализ неустойчивых задач. Тезисы докладов Всероссийской научной конференции. Екатеринбург, 26 февраля – 2 марта 2001. – Екатеринбург: Изд-во УрГУ, 2001. – С. 292–293.
13. Малов Д. Н., Панюков А. В. Погрешность алгоритмов пеленгации // Труды 12-й Байкальской международной конференции «Методы оптимизации и их приложения». – Иркутск, Байкал, 24 июня – 1 июля 2001. / Том 6: Прикладные задачи естествознания и динамики. – Иркутск: Иркутская государственная экономическая академия. – 2001. – С. 194–197.

14. Panyukov A.V., Malov D.N. The WWW software of multistation system for passive monitoring of thunderstorm activity. // Proceedings of the 3rd International Workshop on Computer Science and Information Technologies. Ufa, Yangantau, Russia, September 21–26, 2001. Volume 2. – USATU. – 2001. – P. 20–23.
15. Panyukov A.V., Buduev D.V. Single-point lightning location system // International Conference on Lightning Protection. Krakow, Poland, 2nd–6th September 2002. Conference Proceedings. Vol. 1. – АРЕЕ. – P. 127–130.
16. Panyukov A.V., Malov D.N. Influence of lightning location finder errors on accuracy of fixing by means of the multipoint systems // International Conference on Lightning Protection. Krakow, Poland, 2nd–6th September 2002. Conference Proceedings. Vol. 1. – АРЕЕ. – P. 131–136.
17. Панюков А.В., Будуев Д.В. Библиотека методов определения местоположения дипольного источника излучения. Свидетельство РосАПО об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2002610234. // Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем. Официальный бюллетень Российского агентства по патентам и товарным знакам. 1(39) – 2002. – С. 149–150.
18. Малов Д.Н., Панюков А.В. Влияние погрешности измерения дальности на точность определения положения дипольного источника излучения. // Компьютерное и математическое моделирование в естественных и технических науках: Материалы IV Всероссийской научной конференции (апрель–май 2002 г.) / Гл. ред. серии А.А. Арзамасцев. – Тамбов: ИМФИ ТГУ им. Г.Р. Державина. – 2002 г. – Вып. 15. – С. 33–36.
19. Будуев Д.В., Панюков А.В. Однопунктовая система определения местоположения грозовых очагов. // Компьютерное и математическое моделирование в естественных и технических науках: Материалы IV Всероссийской научной конференции (апрель–май 2002 г.) / Гл. ред. серии А.А. Арзамасцев. – Тамбов: ИМФИ ТГУ им. Г. Р. Державина. – 2002 г. – Вып. 19. – С. 28–34
20. Murphy M, Zaharescu R, Holle R. Three-dimensional Lightning Mapping Using LDAR II Systems // Proceedings 26th International conference on lightning protection. Vol. 2. (Krakow, Poland, September 1–6, 2002). – Krakow mining university. – P. 85–90.
21. Murphy M, Cummins K.L. Overview of Lightning Detection in the VLF, LF, and VHF Frequency Ranges // Proceedings of 26th International conference on lightning protection. Vol. 2. (Krakow, Poland, September 1–6, 2002). – Krakow mining university. – P. 100–110.
22. Kenneth L. Cummins, Martin J. Murphy. Overview of Lightning Detection in the VLF, LF, and VHF // Proceedings of 17th International Lightning Detection Conference.
23. Панюков А.В., Малов Д.Н. Комплекс программ для сети автономных грозопеленгаторов-дальномеров. Свидетельство РосАПО об официальной регистрации программы для ЭВМ №2002611854. // Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем. Официальный бюллетень Российского агентства по патентам и товарным знакам. – 1(42) – 2003. – С. 57–58.
24. SAFIR Total Lightning Localization and Thunderstorm Forecasting System – [http://www.vaisala.com/DynaGen\\_Attachments/Att2751/2751.pdf](http://www.vaisala.com/DynaGen_Attachments/Att2751/2751.pdf)
25. National Lightning Detection Network of Improved Performance from Combined Technology (IMPACT) Radio Frequency Antenna System [http://ghrc.msfc.nasa.gov:5721/sensor\\_documents/NLDN\\_antenna.html](http://ghrc.msfc.nasa.gov:5721/sensor_documents/NLDN_antenna.html)
26. Development and Investigation of the Single-Point System for Lightning Location in the Range of Super-Long Waves – <http://www.istc.ru/istc/db/projects.nsf/prjn/1822>.

*Поступила в редакцию 28 апреля 2003 г.*

## ВЛИЯНИЕ ТВЕРДОГО ЯДРА НА КОЛЕБАНИЯ КРУТИЛЬНОГО ВИСКОЗИМЕТРА

*А.Е. Коренченко, В.П. Бескачко, Г.П. Вяткин*

В работе представлены результаты численного расчета физической ситуации, когда внутри цилиндрического крутильного вискозиметра помещен твердый цилиндр, имитирующий зону застоя, возникающую вблизи оси вращения в вязко-пластичной жидкости. Ось внутреннего цилиндра совпадает с осью вискозиметра. Рассмотрены два различных способа возбуждения колебаний: а) внешний цилиндр повернут на небольшой угол относительно состояния покоя и затем отпущен, б) внешний цилиндр испытывает начальный толчок из состояния покоя.

**Введение.** Существует класс жидкостей (называемых вязко-пластичными или бингамовскими), в которых вязкое течение возникает лишь после того, как сдвиговое напряжение превзойдет некоторый предел, а до тех пор такая жидкость ведет себя как твердое тело. Подобным поведением обладают многие материалы, объединяемые ныне понятием «мягкие» («soft matter») и служащие в последнее время объектом интенсивных исследований во всем мире. Если предел текучести такой жидкости весьма мал, она будет вести себя как ньютоновская практически во всех реологических экспериментах, где обычно весьма трудно создать достаточно малые деформации и напряжения. Исключение, по-видимому, составляет метод крутильных колебаний, где по мере затухания колебаний интересующие нас величины становятся сколь угодно малыми. Крутильный вискозиметр представляет собой цилиндр, подвешенный вдоль геометрической оси на длинной упругой нити, и является широко распространенным инструментом для изучения вязкости расплавов. Численный анализ колебаний вискозиметра, заполненного ньютоновской жидкостью, проведен в [1]. Расчеты [1] показывают, что в части цилиндра, примыкающей к оси, жидкость практически неподвижна, а интенсивное движение происходит лишь в окрестности твердых границ. Если жидкость бингамовская, тогда естественно ожидать, что внутри вискозиметра вблизи его оси формируется область покоя, граница которой зависит от распределения сдвиговых напряжений и, следовательно, изменяется в процессе колебаний, перемещаясь от оси вискозиметра к его стенкам. Целью настоящей работы является изучение качественных особенностей в движении вискозиметра, связанных с присутствием внутри него твердого ядра. Рассматривается простейшая модель, когда это ядро представляет собой цилиндр неизменного радиуса, соосный с вискозиметром и имеющий плотность, совпадающую с плотностью жидкости.

**Математическая модель.** В безразмерных переменных, когда все расстояния отнесены к радиусу  $R_{ex}$  внешнего цилиндра, скорость – к  $\nu/R_{ex}$  ( $\nu$  – кинематическая вязкость жидкости), давление – к  $\rho\nu^2/R_{ex}^2$  ( $\rho$  – плотность жидкости), время – к  $R_{ex}^2/\nu$ , движение цилиндра и заполняющей его жидкости описывается следующей системой уравнений [2]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \Delta \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{d\omega_{ex}}{dt} = -G\varphi - M_{тр1}, \quad (3)$$

$$\frac{d\omega_{in}}{dt} = M_{тр2}. \quad (4)$$

Здесь  $\mathbf{u}$  и  $p$  – поля скорости и избыточного по сравнению с  $\rho g z$  давления в жидкости,  $\omega_{\text{ex}}$ ,  $\omega_{\text{in}}$  – угловые скорости внешнего и внутреннего цилиндров,  $\varphi$  – угол поворота внешнего цилиндра относительно равновесного положения,  $G = \frac{R_{\text{ex}}^4 \kappa}{\nu^2 I_{\text{ex}}}$  – безразмерный коэффициент упругости нити

на кручение,  $\kappa$  – коэффициент жесткости нити,  $I_{\text{ex}}$  – момент инерции внешнего цилиндра,  $M_{\text{тр}1,2}$  – безразмерные моменты вязких сил трения, приложенных к цилиндрам со стороны жидкости. Уравнения (1) отражают закон изменения импульса для частиц жидкости, (2) – условие ее несжимаемости, (3) – описывает крутильные колебания внешнего цилиндра, (4) описывает движение внутреннего цилиндра под действием сил трения. Далее рассмотрим только случай, когда течение между цилиндрами является осесимметричным.

В качестве граничных условий примем условия прилипания жидкости ко всем твердым границам:

$$\begin{aligned} w(1, z, t) &= \omega_{\text{ex}}, \\ w(r, 0, t) &= w(r, H/R_{\text{ex}}, t) = \omega_{\text{ex}} \cdot r, \\ v(r, 0, t) &= u(r, 0, t) = v(r, H/R_{\text{ex}}, t) = u(r, H/R_{\text{ex}}, t) = v(1, z, t) = u(1, z, t) = 0, \\ v(R_{\text{in}}/R_{\text{ex}}, z, t) &= u(R_{\text{in}}/R_{\text{ex}}, z, t) = 0, \quad w(R_{\text{in}}/R_{\text{ex}}, z, t) = \omega_{\text{in}} \cdot R_{\text{in}}/R_{\text{ex}}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $H$  – высота столба жидкости в вискозиметре, а  $R_{\text{in}}$  – радиус внутреннего цилиндра. В (5) предполагается, что сверху жидкость соприкасается с твердой границей – крышкой.

В зависимости от способа возбуждения колебаний рассматривались два типа начальных условий:

а) при  $t = 0$  внешний цилиндр повернут на угол  $\varphi_0$  и покоится вместе с заполняющей его жидкостью:  $\varphi(0) = \varphi_0$ ;  $\omega_{\text{in}}(0) = \omega_{\text{ex}}(0) = 0$ ;

б) при  $t = 0$  покоящийся вместе с жидкостью в положении равновесия вискозиметр скачком приобретает некоторую угловую скорость  $\omega_0$ :  $\varphi(0) = 0$ ;  $\omega_{\text{in}}(0) = 0$ ;  $\omega_{\text{ex}}(0) = \omega_0$ .

Физические параметры жидкости соответствовали воде.

**Численное решение** находилось методом конечных разностей. Использовались равномерные пространственные сетки с максимальной размерностью  $50 \times 50$  в осевом и радиальном направлениях. Дискретизация гидродинамических уравнений производилась по схеме центральных разностей по пространственным переменным и односторонних по времени. Линеаризация полученных в результате нелинейных алгебраических разностных уравнений проводилась по схеме:

$$f^{n+1} \cdot g^{n+1} = f^n \cdot g^{n+1} + f^{n+1} \cdot g^n - f^n \cdot g^n,$$

а решение линеаризованных систем уравнений на каждом временном этапе – методом исключения Гаусса [3].

**Результаты и обсуждение.** В работе были получены поля скоростей и давления в зависимости от времени для обоих случаев возбуждения, а также законы движения  $\varphi(t)$  и  $\omega(t)$  для обоих цилиндров. Исследовался вопрос о влиянии отношения

$$\eta = R_{\text{in}}/R_{\text{ex}}$$

(радиусов внутреннего и внешнего цилиндров) на наблюдаемые параметры колебаний вискозиметра – период и декремент затухания.

Как показывают расчеты, движение внутреннего цилиндра существенно зависит от способа возбуждения. На рис. 1 и 2 изображены зависимости  $\varphi_{\text{in}}(t)$  и  $\omega_{\text{in}}(t)$  для обоих способов возбуждения колебаний при  $\eta = 0,2$ . Видно, что при возбуждении толчком внутренний цилиндр совершает движение, очень похожее на затухающие колебания, но с небольшим дрейфом положения равновесия. Возможно, этот дрейф связан с накоплением ошибки вычислений на больших временах. При возбуждении колебаний начальным поворотом законы движения  $\varphi_{\text{in}}(t)$  и  $\omega_{\text{in}}(t)$  существенно иные: угловая скорость внутреннего цилиндра на начальном этапе движения может не изменять знака (рис. 1), то есть, его вращение происходит только в одну сторону. С точностью до малой модуляции зависимость  $\varphi_{\text{in}}(t)$  напоминает затухающее вращение свободного цилиндра

в неподвижной жидкости (рис. 2). К моменту затухания колебаний вискозиметра внутренний цилиндр успевает повернуться на конечный угол – порядка двух радиан в приведенном примере

Такое различие можно объяснить тем, что при возбуждении колебаний поворотом угловая скорость вискозиметра на начальном этапе не меняет знак на протяжении полупериода. За этот интервал знакопостоянства угловой скорости первоначально покоящаяся масса жидкости вместе с внутренним цилиндром вовлекается во вращение и по истечении полупериода обладает большим, чем в случае возбуждения толчком, суммарным моментом импульса. Поэтому последующий интервал, на котором скорость внешнего цилиндра имеет обратный знак, приводит лишь к замедлению вращения внутреннего цилиндра, но не к перемене направления его вращения.

Из рис. 1 видно также, что по истечении некоторого времени внутренний цилиндр приходит в состояние затухающих колебаний, как и при первом способе возбуждения (но около нового положения равновесия).

На рис. 3 изображена зависимость коэффициента затухания колебаний вискозиметра от отношения  $\eta$  радиусов внутреннего и внешнего цилиндров. Как видно из рисунка, коэффициент затухания возрастает с увеличением  $\eta$ , а темп этого роста зависит от отношения  $\gamma = H / R_{\text{ex}}$  и тем выше, чем меньше это отношение. Диссипация механической энергии происходит в пограничных слоях около твердых стенок и для длинных цилиндров ( $\gamma \gg 1$ ) ее механизм существенно изменяется при достижении таких  $\eta$ , когда пограничные слои на боковых поверхностях цилиндров начинают перекрываться. Чем короче цилиндр, тем больший вклад в затухание дает диссипация энергии около торцов, и тем больший относительный объем жидкости вовлекается в движение.

Вспомним теперь, что для вязко-пластичной жидкости граница раздела между твердой и текучей фазами должна по мере затухания колебаний перемещаться от оси к стенкам вискозиметра. Это означает, что параметр  $\eta$  в процессе измерений будет изменяться от некоторого минимального значения до единицы. Тогда, ссылаясь на рис. 3, мы должны ожидать, что по мере затухания колебаний их декремент не будет оставаться постоянным, а будет изменяться (увеличиваться) от одного колебания к другому. Таким образом, по данным о параметрах колебаний можно судить о присутствии внутри вискозиметра жидкости с вязко-пластичными свойствами. Ожидается также, что указанный эффект легче наблюдать в случае «коротких» цилиндров – с малым отношением высоты к радиусу.

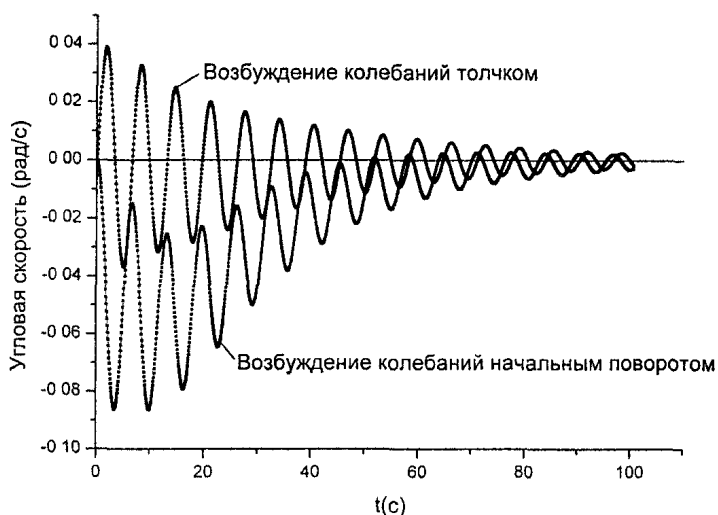


Рис. 1. Зависимость угловой скорости внутреннего цилиндра от времени для различных способов возбуждения колебаний

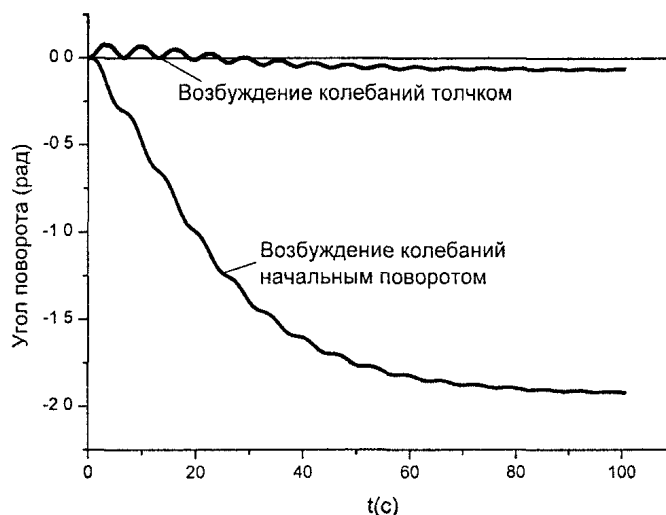


Рис. 2. Зависимость угла поворота внутреннего цилиндра от времени для различных способов возбуждения колебаний

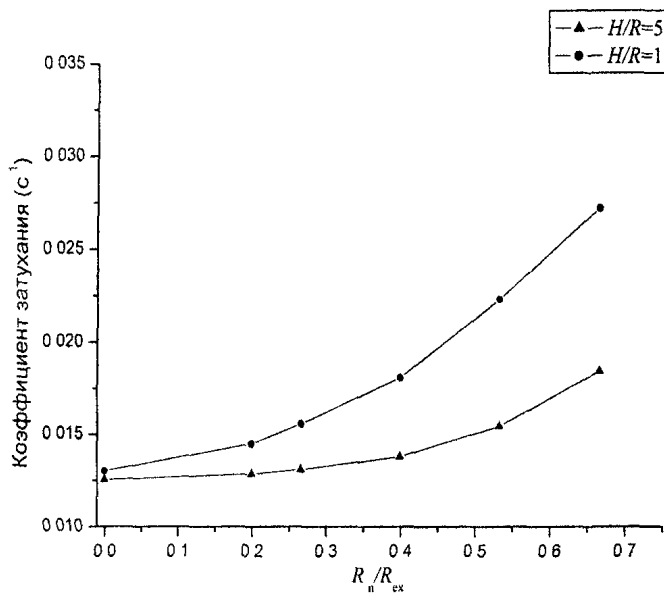


Рис 3 Зависимость коэффициента затухания от отношения радиусов внешнего и внутреннего цилиндров

Работа выполнена при поддержке РФФИ-Урал (№ 01-01-96424).

**Литература**

1. Коренченко А.Е., Бескачко В.П. Особенности установления колебаний в крутильном вискозиметре // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия» – 2002. – № 3. – Вып. 2. – С. 62–67.
2. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Механика сплошных сред. – М.: Наука, 1988. – 518 с.
3. Ши Д. Численные методы в задачах теплообмена. – М : Мир, 1988. – 537 с.

Поступила в редакцию 14 сентября 2003 г.



# ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ КРУТИЛЬНОГО ВИСКОЗИМЕТРА, ЗАПОЛНЕННОГО НЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТЬЮ

А.Е. Коренченко., О.А. Головня, В.П. Бескачко

Численными методами решается задача о движении крутильного вискозиметра, заполненного ньютоновской жидкостью, за пределами приближений, принятых в стандартных аналитических теориях. Расчеты проведены для случая бесконечного цилиндра и для осесимметричных течений в конечном цилиндре. Проведено сравнение с результатами аналитических вычислений.

**Введение.** Крутильный вискозиметр является широко распространенным инструментом для изучения вязкости жидкостей, в особенности, агрессивных, например, металлических расплавов. Он представляет собой прямой круговой цилиндр, заполненный исследуемой жидкостью и подвешенный вдоль своей геометрической оси на упругой нити. Непосредственно наблюдаемыми величинами являются период  $T$  и декремент  $\delta$  режима установившихся затухающих колебаний. Эти две величины зависят от выбора параметров установки, а также от свойств заполняющей цилиндра жидкости – ее (кинематической) вязкости  $\nu$  и плотности  $\rho$ . Задача вискозиметрической теории заключается в установлении связи между наблюдаемыми параметрами колебаний ( $T$  и  $\delta$ ), параметрами установки и параметрами жидкости ( $\nu$  и  $\rho$ ). С формально-математической точки зрения она представляет собой сопряженную задачу о движении твердого тела и заполняющей его жидкости, точное решение которой в конечном аналитическом виде в настоящее время не найдено, да и вряд ли существует вообще. Известен лишь ряд приближенных решений, справедливых при некоторых предположениях о характере течения жидкости, первое из которых было найдено в [1]. Практически все имеющиеся сегодня экспериментальные данные обработаны с использованием методики, предложенной в этой работе или подобных ей и отличающихся друг от друга вычислительными деталями, но не исходными положениями. Накопившиеся, однако, противоречия в вискозиметрических данных делают привлекательной попытку решения той же задачи за пределами принятых приближений, полагаясь только на фундаментальные принципы механики. Сделать это в настоящее время можно только численными методами, что и составляет цель настоящей работы, первые результаты которой были уже представлены в [2].

**Математическая модель.** Пусть цилиндр с замкнутыми сверху и снизу торцами полностью заполнен исследуемой жидкостью, которая полагается ньютоновской. Уравнение его движения при условии пренебрежения затуханием колебаний, связанным с процессами внутреннего трения в нити и трением о воздух, имеет вид

$$I_{\text{ц}} \frac{df}{dt} = -\kappa \varphi + M_{\text{тр}}. \quad (1)$$

Здесь  $I_{\text{ц}}$ ,  $f$  и  $\varphi$  – момент инерции, угловая скорость и угол поворота цилиндра,  $\kappa$  – крутильная жесткость нити,  $M_{\text{тр}}$  – момент вязких сил, действующий на цилиндр со стороны жидкости:

$$M_{\text{тр}} = M_1 + M_2,$$

где моменты  $M_1$  и  $M_2$  обусловлены трением жидкости о боковую поверхность цилиндра и его торцы соответственно:

$$M_1 = 2\pi\eta R^2 \int_0^H \left( \frac{\partial V_\varphi}{\partial r} - \frac{V_\varphi}{r} \right) \Big|_{r=R} dz,$$

$$M_2 = 2\pi\eta \int_0^R \left( \frac{\partial V_\varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} r^2 dr - 2\pi\eta \int_0^R \left( \frac{\partial V_\varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z=H} r^2 dr.$$

Здесь  $V_\varphi = V_\varphi(r, \varphi, z, t)$  – азимутальная компонента поля скорости  $\mathbf{V} = (V_r, V_\varphi, V_z)$  (введена цилиндрическая система координат),  $H$  и  $R$  – высота и радиус цилиндра. В работе ограничимся изуче-

нием только осесимметричных режимов течения, когда ни одна из интересующих нас переменных не зависит от азимутального угла  $\varphi$ .

Движение цилиндра возбуждает течение заполняющей его жидкости, подчиняющееся системе уравнений Навье – Стокса и неразрывности. Введем следующие безразмерные переменные и

параметры:  $x = \frac{z}{R}$ ,  $y = \frac{r}{R}$  – компоненты радиус-вектора,  $\tau = \frac{t\nu}{R^2}$  – безразмерное время,  $\mathbf{v} = (u, v, w)$

– компоненты вектора скорости,  $\mathbf{v} = \mathbf{V} \frac{R}{\nu}$ ,  $p$  – возмущение давления сверх  $\rho g z$ , отнесенное к

$\frac{R}{\rho \nu^2}$ ,  $G = \frac{R^4 \kappa}{\nu^2 I_{\text{ц}}}$  – безразмерный коэффициент жесткости нити на кручение,  $m_f$  – момент вязких

сил. Тогда движение цилиндра и заполняющей его жидкости описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{df}{d\tau} = -G\varphi + m_f, \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \tau} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\nabla p + \Delta \mathbf{v}, \\ \frac{1}{y} \frac{\partial(yv)}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Граничными условиями для (2) служат условия прилипания жидкости ко всем твердым границам:

$$\begin{aligned} w(1, x, \tau) &= f, \\ w(y, 0, \tau) &= w(y, H/R, \tau) = f \cdot y, \\ v(y, 0, \tau) &= u(y, 0, \tau) = v(y, H/R, \tau) = u(y, H/R, \tau) = v(1, x, \tau) = u(1, x, \tau) = 0. \end{aligned} \quad (3a)$$

Кроме того, на оси сосуда выполняются условия

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad (3б)$$

обусловленные осевой симметрией течения. Жидкость в начальный момент времени покоится, а цилиндр удерживается в состоянии покоя в положении, повернутом на угол  $\varphi_0$  относительно положения равновесия. В соответствии со сказанным выше начальными условиями для уравнений (2) являются:

$$v(x, y) = 0, \quad f(0) = 0, \quad \varphi(0) = \varphi_0. \quad (4)$$

Задача заключается в отыскании закона движения цилиндра  $\varphi(\tau)$ .

**Численное решение.** Численное решение системы (2) с граничными условиями (3) и начальными условиями (4) находилось методом конечных разностей. Использовались равномерные пространственные сетки с максимальной размерностью  $36 \times 36$  в осевом и радиальном направлениях. Дискретизация гидродинамических уравнений производилась по схеме центральных разностей с точностью  $(\Delta x)^2$  по пространственным переменным. Линеаризация получаемых в результате нелинейных разностных уравнений проводилась методом Ньютона, а решение линеаризованных систем уравнений – методом исключения Гаусса. Для контроля консервативных свойств решения проверялось равенство нулю суммарного потока в каждом поперечном сечении цилиндра или замкнутость линий тока в осевом сечении в любой момент времени. Расчеты проводились для цилиндров с размерами, обычно используемыми на практике: внутренний радиус изменялся в пределах от 1 до 3 см, а высота – от 1 до 7 см. Отношение моментов инерции цилиндра и «замороженной» жидкости варьировалось в диапазоне от 2 до 20, а вязкость исследуемой жидкости выбиралась в интервале  $(10^{-7} \text{ м}^2/\text{с} \leq \nu \leq 8 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с})$ , свойственном легкотекучим жидкостям (вода, металлические расплавы).

**Результаты и обсуждение.** Вернемся к приближениям, используемым в стандартных вискозиметрических теориях и оценим их справедливость, располагая численным решением рассматриваемой задачи

1 Предположение о малости радиальной и осевой компонент скорости жидкости по сравнению с азимутальной не всегда верно для цилиндра конечной длины. В работе [2] обнаружено, что в осевой плоскости вискозиметра образуются течения, длящиеся во все время существования крутильных колебаний. Однако вопрос об абсолютных величинах осевой и радиальной компонент в сравнении с азимутальной в [2] не обсуждался. На рис. 1 показано поле скорости в осевой плоскости для цилиндра с  $R=H=1$  см, заполненного жидкостью с вязкостью  $5 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ . Видно образование четырех вихрей, причем наибольшая осевая скорость наблюдается вблизи оси цилиндра. На рис. 2 приведены временные зависимости осевой скорости в жидкости для отношений  $\gamma=H/R=1$  и  $\gamma=2$ , и указано амплитудное значение азимутальной скорости. Из рисунка видно, что абсолютное значение осевой скорости увеличивается при уменьшении отношения  $\gamma$ , а отношение наибольших значений осевой и азимутальной скоростей для  $\gamma=1$  превышает 0,1. Это не дает достаточных оснований для пренебрежения нелинейными слагаемыми в уравнениях (2), во всяком случае, на начальном этапе колебаний.

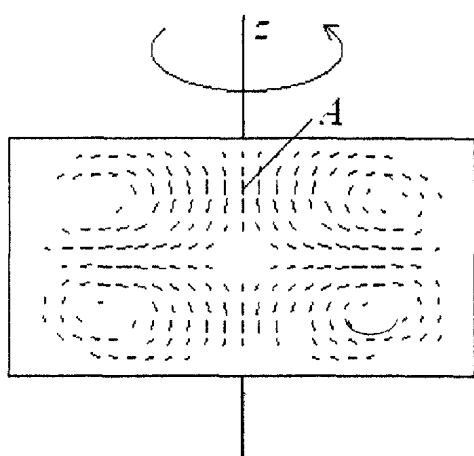


Рис. 1 Распределение скоростей в осевой плоскости цилиндра. Наибольшая осевая скорость отвечает точке А (0, 8H, 0)

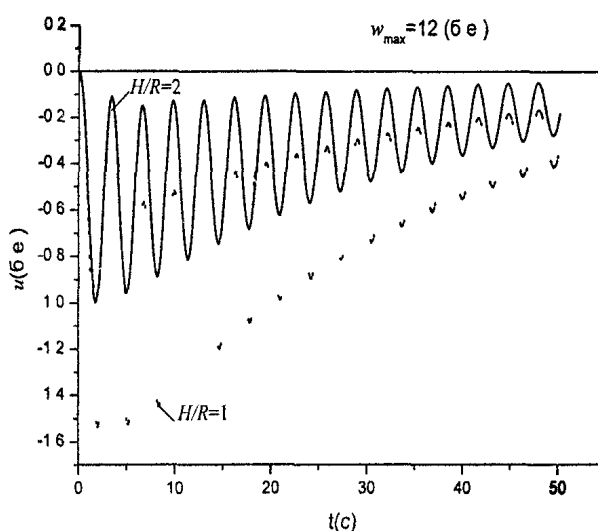


Рис. 2 Осевая скорость в области наиболее интенсивного движения,  $I_{ц}/I_{ж} = 20$

2 Для разделения переменных в уравнениях (2) используется предположение о том, что жидкость внутри цилиндра совершает колебательные движения около положения равновесия с частотой, равной частоте колебаний цилиндра и фазой, определяемой скоростью передачи момента импульса к внутренним слоям. Это предположение выполняется не всегда. На рис. 3 изображены зависимости от времени азимутальной скорости на небольших расстояниях ( $r=R/4$ ) от оси вращения для жидкостей с различной вязкостью. Условия подобраны так, чтобы частота колебаний была одинаковой для всех трех рассмотренных случаев. Как видно из рисунка, предположение о гармоническом характере изменения азимутальной скорости выполняется лишь асимптотически и тем позднее, чем

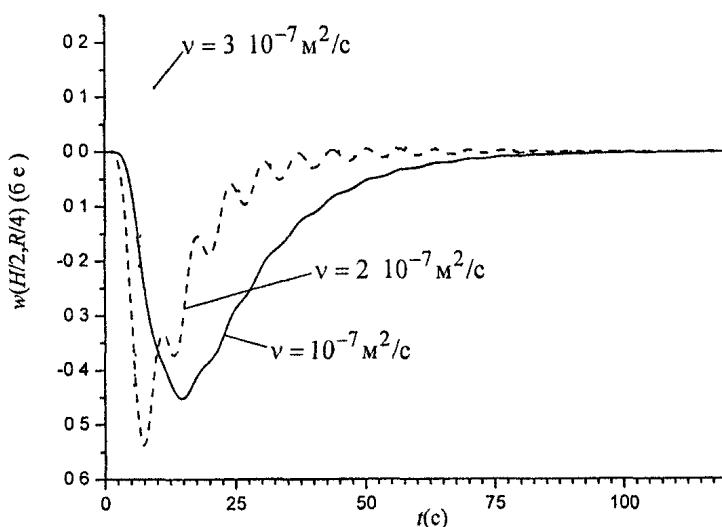
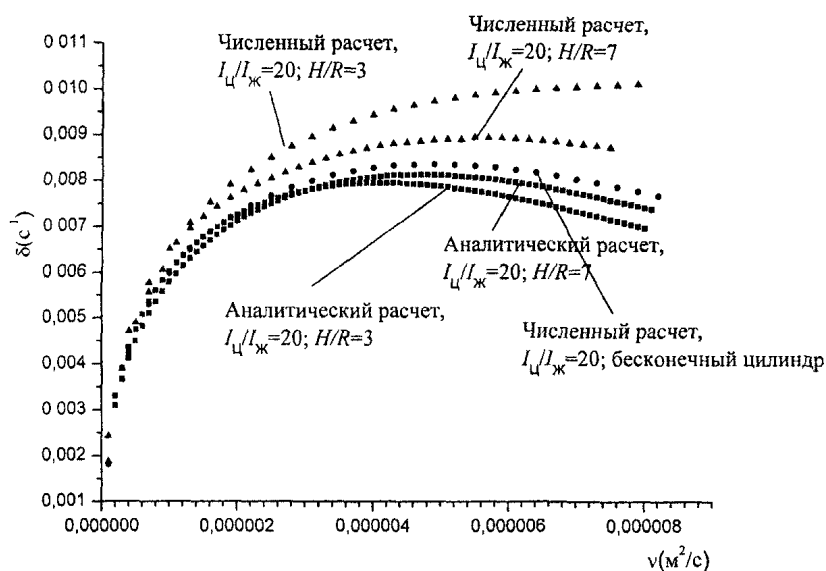


Рис. 3. Зависимость азимутальной скорости вблизи оси от времени,  $I_{ц}/I_{ж} = 2$

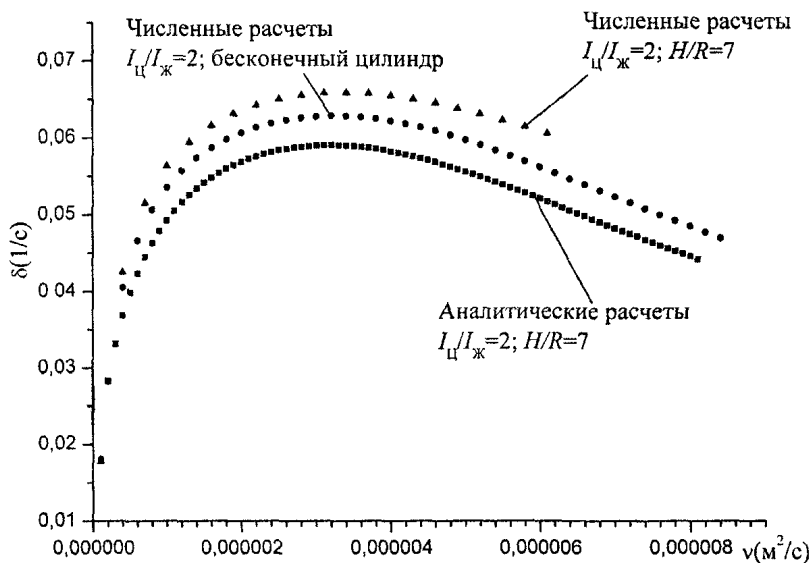
меньше вязкость жидкостей. Чем дальше от оси (и ближе к стенкам), тем быстрее устанавливается режим затухающих колебаний.

Сравним, наконец, предсказания аналитических и численных расчетов параметров колебаний вискозиметра. Для этого, выбрав некоторые параметры установки и зафиксировав плотность жидкости, мы выполнили серию расчетов зависимости  $\varphi(\tau)$  для значений вязкости, типичных для низковязких жидкостей. Далее эти данные были подогнаны под зависимость вида

$$\varphi(\tau) = A \cdot e^{-\delta\tau} \sin(\omega\tau + \psi) \quad (5)$$



а)



б)

Рис. 4. Зависимость коэффициента затухания колебаний от вязкости жидкости; а)  $\beta = 20$ , б)  $\beta = 2$

с целью определения частоты колебаний  $\omega$  и коэффициента затухания  $\delta$ . Подгонка осуществлялась методом наименьших квадратов с минимизацией методом Розенброка [3]. На рис. 4а, б изображены зависимости коэффициента затухания от вязкости жидкости. Квадратами во всех случаях помечена аналитическая зависимость, полученная в [1], треугольниками показаны результаты численных расчетов. Видно, что аналитические и численные предсказания заметно отличаются друг от друга. Согласие между ними, видимо, достигается лишь в пределе малой вязкости, а с ростом вязкости становится тем хуже, чем больше вязкость. Из рис. 4а видно также, что при фиксированном значении  $\beta = I_c / I_j$  (равном 20 в данном случае) согласие тем лучше, чем «длиннее» цилиндр – чем больше параметр  $\gamma = H / R$ . При  $\gamma \rightarrow \infty$  аналитические и численные результаты практически повторяют друг друга, а при конечном  $\gamma$  располагаются по разные стороны от этой «кривой согласия» (отвечающей  $\gamma = \infty$ ) и отстоят от нее тем дальше, чем меньше  $\gamma$ . Таким образом, предсказания зависимости коэффициента затухания от выбора параметра  $\gamma$  при фиксированном значении вязкости жидкости в аналитических и численных моделях прямо противоположны друг другу: первая из них предсказывает уменьшение  $\delta$  с уменьшением  $\gamma$ , а вторая – его увеличение.

Наконец, при переходе в численной модели от  $\gamma = 7$  к  $\gamma = 3$  максимум на зависимости  $\delta(\nu)$  пропадает: либо перемещается за пределы исследованного интервала вязкостей, либо исчезает вовсе. Последняя возможность противоречит, однако, естественному предположению [1] о том, что функция  $\delta(\nu)$  должна уменьшаться при больших  $\nu$ . При переходе от  $\beta = 20$  к  $\beta = 2$  (рис. 4б) ситуация не становится лучше. Здесь дело осложняется тем, что предположение анали-

тической теории о характере движения внутренних слоев жидкости (затухающие колебания) выполняется тем хуже, чем меньше отношение  $\beta$ . При малых  $\beta$  внутренние области жидкости могут практически не участвовать в колебаниях (см. рис. 3), что может быть одной из причин расхождения аналитических и численных данных.

На данный момент трудно сказать, что является причиной несоответствия в предсказаниях аналитических и численных моделей. С одной стороны, аналитические модели основываются на приближениях, которые, как мы видели, оправдываются не безусловно. С другой стороны, при применении численных моделей встречаются свои подводные камни, препятствующие получению результатов необходимой точности. Среди них, помимо обычно обсуждаемых (таких как схема дискретизации, параметры сетки и т.п.), отметим специфические для данной задачи:

1) необходимость изучения асимптотических решений, справедливых при временах, достаточно удаленных от момента возбуждения колебаний,

2) необходимость получения максимально точной картины движения жидкости в окрестности твердых границ – в связи с расчетом вязких сил, действующих на твердое тело.

Преодоление каждой из отмеченных трудностей требует применения специальных вычислительных приемов и средств, которые не были использованы в настоящей работе в полной мере. Сейчас не ясно, насколько эти приемы и средства способны изменить описанные выше результаты. Для решения этого вопроса необходимы дальнейшие исследования.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ-Урал (№ 01-01-96424).*

#### Литература

1. Швидковский Е.Г. Некоторые вопросы вязкости расплавленных металлов. – М.: ГИТТЛ, 1955. – 206 с.

2. Коренченко А.Е., Бескачко В.П. Особенности установления колебаний в крутильном вискозиметре // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2002. – № 3. – Вып. 2. – С. 62–67.

3. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. – М.: Мир, 1975. – 534 с.

*Поступила в редакцию 25 апреля 2003 г.*

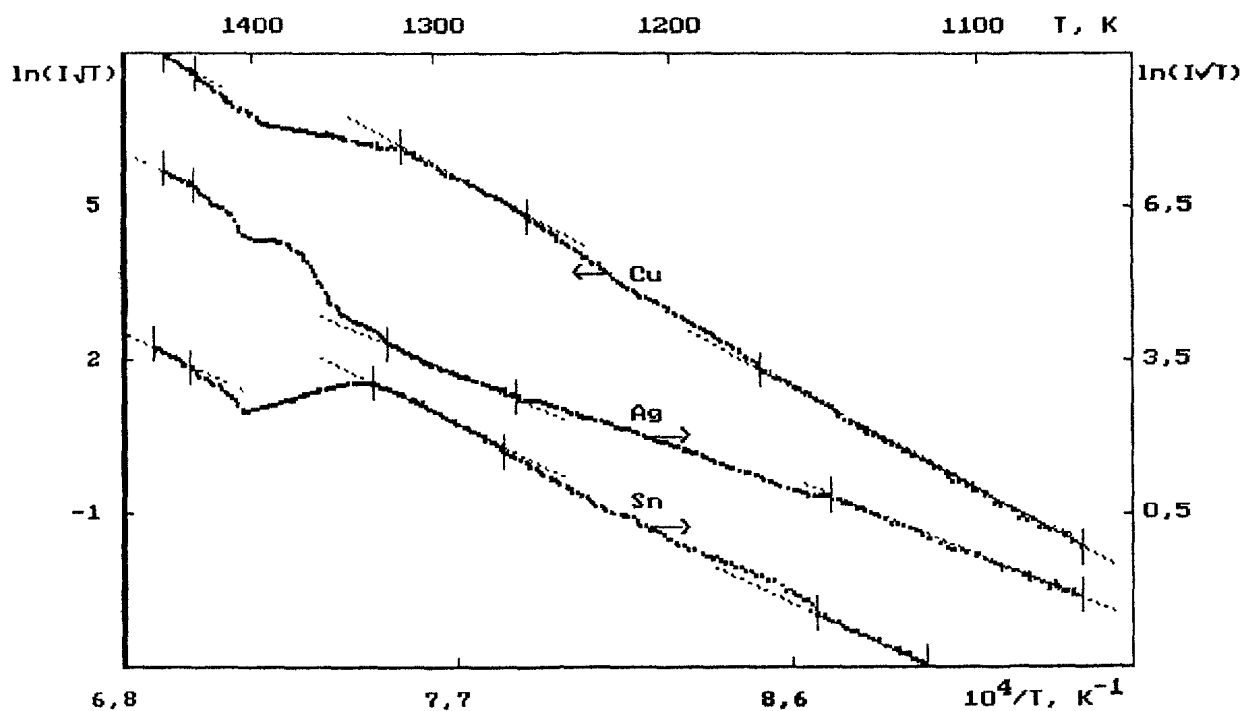
# ПОВЕРХНОСТНЫЕ ФАЗЫ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И ЖИДКОМ СОСТОЯНИЯХ СПЛАВОВ Cu–Ag–Sn

Т.О. Алексеева, А.В. Гусев, С.И. Морозов, Т.П. Привалова

Проведено экспериментальное исследование совместной поверхностной сегрегации серебра и олова в трехкомпонентном разбавленном растворе на основе меди, содержащем по 0,5 ат.% Ag и 0,1 ат.% Sn.

Серебро и олово в разбавленных двойных растворах на основе меди проявляют высокую капиллярную активность и образуют специфические поверхностные фазы в кристаллическом и жидком состояниях металла [1–9]. В растворах Cu(Ag) [1–6], с объемной концентрацией 0,1...1,0 ат.% Ag, происходит расслоение поверхности на две фазы: одна на основе Cu, а другая на основе Ag. При этом степень заполнения поверхности серебром  $\Theta_{Ag}=0,4$  и достигает 0,7 после поверхностного фазового перехода от структуры  $(1 \times 1)Ag$  к  $(9 \times 9)Ag$  при 750 К [4]. Эксперимент (ДЭНЭ, ОЭС [2,4], ТПД [5,6]) и моделирование [1,3,6] выявляют эти структуры и вытеснение атомов Ag в адсорбционные состояния. Атомы олова в поверхностном слое раствора Cu(Sn) образуют цепочечные структуры [9] и при концентрации 0,5 ат.% Sn в объеме заполнения поверхности достигает  $\Theta_{Sn}=0,3...0,5$  по данным эксперимента ОЭС [7] и ТПД [8]. Цель данной работы – экспериментальное изучение совместной поверхностной сегрегации серебра и олова в трехкомпонентном разбавленном растворе на основе меди, содержащем по 0,5 ат.% Ag и 0,1 ат.% Sn.

Измерения потоков десорбции частиц проводили методом температурно-программируемой десорбции (ТПД), который позволяет анализировать химический состав поверхности двух- и трехкомпонентных металлических сплавов в поликристаллическом и жидком состояниях [5–6, 8, 11]. По ТПД спектрам оценили степени заполнения поверхности  $\Theta$  [10] как относительные мольные концентрации компонентов. Для этого использовали отношения потоков термодесорбции атомов Cu, Ag и Sn в двух последовательных состояниях поверхности. Совместный анализ ТПД спектров этих частиц (см. рисунок) выявляет три состояния поверхности сплавов, каждому из которых соответствует линейный участок спектра с постоянной поверхностной концентрацией всех компонентов в данном температурном интервале.



ТПД спектры с поверхности сплава Cu–Ag–Sn

Низкотемпературные участки ТПД спектров (1070...1140 К) соответствуют малой скорости термодесорбции атомов, что не приводит к заметному уменьшению поверхностных концентраций. В этом первом состоянии поверхности поликристалла энергии активации десорбции компонентов сплава оказались близки к соответствующим значениям для чистых металлов. Это позволяет сделать вывод о ближайшем атомном окружении десорбирующихся частиц: их десорбция происходит с областей поверхности сплава, обогащенных данным компонентом, то есть из островковой поверхностной фазы.

В предликвидусной области температур (1270...1330 К) реализуется второе поверхностное состояние, при переходе к которому значительно уменьшается приращение скорости десорбции Ag при одновременном дополнительном росте потока десорбции атомов Cu и меньшем – для Sn. Причиной этого является уменьшение степени заполнения поверхности сплава фазой на основе Ag. Это позволяет заключить, что атомы серебра образуют преимущественно монослойные островки в отличие от фазы на основе олова и матрицы сплава – меди.

При плавлении металла наблюдаются значительные изменения скорости десорбции серебра и олова противоположного характера: рост для атомов Ag в 2,5 раза и снижение для Sn в 4 раза. Это свидетельствует о том, что поверхностная сегрегация Ag и Sn в разбавленных растворах на основе меди резко изменяется при переходе к жидкому состоянию, причем, островки поверхностной фазы содержащей олово, по-видимому, растворяются в объеме расплава. Кристаллизация металла сопровождается ростом скорости десорбции атомов Ag и Sn, но их изменения при охлаждении различны. Так, сравнительно узкий пик скорости десорбции Ag при кристаллизации обусловлен стимулированием поверхностной сегрегации серебра при протекании объемного фазового перехода [5] и сопровождается резким увеличением  $\Theta_{Ag}$ , в том числе с заполнением адсорбционных надповерхностных состояний. А для поверхностной фазы на основе олова восстанавливается величина  $\Theta_{Sn}$  до значения, соответствующего поликристаллу при его нагреве. Дальнейшее охлаждение металла, как и его нагрев в этом температурном интервале, практически не меняет  $\Theta_{Sn}$ , что возможно в случае многослойных островков фазы содержащей олово.

Третье поверхностное состояние расплава ограничено надликвидусной областью температур (1430...1450 К). Она выбрана достаточно малой, чтобы при высокой скорости десорбции Ag и Sn обеспечить для разбавленных растворов получение в сериях ТПД спектров воспроизводимых результатов.

Расчет по результатам эксперимента степени заполнения поверхностными фазами выполнен с использованием отношений потоков десорбции каждого компонента сплава для трех состояний поверхности (см. таблицу).

Таблица

Отношения потоков десорбции  $a_i^{(j,k)}$  частиц для различных фазовых состояний поверхности сплавов Cu–Ag–Sn, найденные из ТПД спектров при температурах  $T_1=1200\text{K}$  ( $a_i^{(1,2)}$ ) и  $T_2=1400\text{K}$  ( $a_i^{(2,3)}$ )

Cu		Ag		Sn	
$a_1^{(1,2)}$	$a_1^{(2,3)}$	$a_2^{(1,2)}$	$a_2^{(2,3)}$	$a_4^{(1,2)}$	$a_4^{(2,3)}$
$0,8 \pm 0,05$	$1,1 \pm 0,05$	$2,6 \pm 0,1$	$0,4 \pm 0,05$	$0,7 \pm 0,05$	$4,1 \pm 0,1$

Этот предварительный расчет показал, что заполнение поверхности фазой серебра снижается от  $\Theta_1=0,26 \pm 0,05$  до  $\Theta_2=0,10 \pm 0,03$ , а в жидком состоянии вновь достигает  $\Theta_3=0,24 \pm 0,05$ . По-видимому, во втором состоянии поверхностная фаза серебра находится в равновесии только с приповерхностным слоем сплава, обедненным серебром вследствие его интенсивной сегрегации при непрерывной десорбции атомов Ag. В связи с этим для оценки доли поверхностных фаз провели второй расчет на основе параметров ТПД спектров для двух состояний поверхности: низкотемпературного поликристаллического (1) и жидкого (3). Результаты этих двух расчетов практически совпадают. В поликристаллическом состоянии примерно треть поверхности сплава заполнена атомами Ag и Sn ( $\Theta_{Ag}=0,26$ ;  $\Theta_{Sn}=0,10$ ), а в жидком состоянии поверхностная фаза серебра ( $\Theta_{Ag}=0,24$ ) преобладает, так как заполнение поверхности оловом снижается до  $\Theta=0,03$ .

Информацию о структуре поверхностных фаз дает совокупность следующих экспериментальных данных: величины  $\Theta$  для Ag и Sn, значения порядков десорбции  $x=1$ , а также характер изменений  $\Theta$  при переходе от первого состояния поверхности ко второму и затем – к расплаву. Анализ этих результатов приводит к следующему заключению. Поверхностная фаза на основе Ag и в поликристаллическом, и в жидком состояниях, представляет собой плоские, практически монослойные островки, по-видимому, со структурой  $p(1 \times 1)$ , как и в двойных растворах Cu(Ag) [6]. Олово образует, по-видимому, трехмерную поверхностную фазу, для которой степень заполнения поверхности поликристалла  $\Theta_1 \approx \Theta_2 = 0,10$  остается неизменной в широком температурном интервале (1070...1330 К). Эта поверхностная фаза на основе олова становится неустойчивой на поверхности расплава и вновь образуется при кристаллизации. Сравнение ТПД спектров атомов Sn и частиц SnO показало, что термодесорбция олова происходит в основном в виде SnO, то есть атомы Sn являются осколочными при ионизации частиц SnO электронным ударом. Наиболее вероятной поверхностной фазой на основе олова является его оксид SnO<sub>2</sub>, который выделяется при кристаллизации металла вследствие уменьшения растворимости в нем примеси кислорода. С целью оценки толщины трехмерных островков оксида олова провели с помощью прибора РЭМ-100У рентгеновский микроанализ поверхности сплава после ТПД эксперимента. Он показал, что для исследуемого образца атомы Sn практически равномерно распределены вдоль поверхности. Это позволило заключить, что толщина островков SnO<sub>2</sub> не превышает 100 нм. Тот факт, что нагрев в ТПД эксперименте вплоть до плавления не приводит к уменьшению  $\Theta_{Sn}$ , позволяет с учетом скорости десорбции олова оценить минимальную толщину островков: она составляет  $\approx 10$  нм. При переходе к расплаву вследствие увеличения растворимости примеси кислорода в металле островки SnO<sub>2</sub> растворяются в объеме сплава.

Таким образом, в разбавленных растворах на основе меди ТПД эксперимент показывает превышение в 10–30 раз поверхностных концентраций Ag и Sn над объемными как в твердом, так и в жидком состояниях сплава.

*Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ-Урал № 01-03-96473 и № 01-03-96420.*

### Литература

1. Liu Y., Wynblatt P. Computer simulation of phase transitions associated with surface miscibility gaps // Surf. Sci. – 1990. – V.240. – P. 245–252.
2. Liu Y., Wynblatt P. On the existence of surface miscibility gaps in Cu-Ag alloys // Surf. Sci. Lett. – 1991. – V. 241. – P. L21–L24.
3. Treglia G., Legrand B., Eugene J., Aufray B., Cabane F. Surface segregation near the temperature of bulk phase separation: Incomplete wetting in Cu(Ag) alloys // Phys. Rev. B. – 1991. – V. 44. – № 11. – P. 5842–5854.
4. Eugene J., Aufray B., Cabane F. Equilibrium of segregation in Ag/Cu(111): kinetics and isotherms // Surf. Sci. – 1991. – V. 241. – № 1. – P. 1–5.
5. Вяткин Г.П., Привалова Т.П. Поверхностная сегрегация и десорбция при фазовых переходах в металлах. – Челябинск: Изд-во ЧГТУ, 1996. – 276 с.
6. Вяткин Г.П., Привалова Т.П., Алексеева Т.О., Чудаков А.Е. // ДАН. – 1999, 364, № 1. – С. 72–74.
7. Hofmann S., Erlewein J. Determination of diffusion coefficient of foreign atoms in metals via surface segregation // Scripta Metall. – 1976. – V. 10. – P. 857–860.
8. Вяткин Г.П., Привалова Т.П., Пастухов Д.В., Алексеева Т.О. Влияние фазовых переходов на термодесорбцию и поверхностную сегрегацию олова в сплавах системы Cu–Sn // ФММ. – 1994. – Т. 77. – № 3. – С. 125–132.
9. Вяткин Г.П., Привалова Т.П., Чудаков А.Е. Поверхностные фазы олова в сплавах (100) Fe–Sn и Cu–Sn // ДАН. – 1998. – Т. 363. – № 2. – С. 198–200.
10. Вяткин Г.П., Морозов С.И., Привалова Т.П. Поверхностные фазовые переходы при сегрегации углерода и марганца в сплавах Fe–Mn–C // ДАН. – 1998. – Т. 359. – № 1. – С. 46–47.
11. Вяткин Г.П., Морозов С.И., Привалова Т.П., Алексеев А.О. Поверхностные фазы богатые марганцем в сплавах Fe<sub>82,7-x</sub>Mn<sub>x</sub>C<sub>17,3</sub> (x = 0,3...1,0) // Расплавы. – 1999. – № 2. – С. 39–43.

*Поступила в редакцию 7 мая 2003 г.*



# НИЗКОЧАСТОТНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ ПРОВОДИМОСТИ ПЕРМАЛЛОЯ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ МАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

А.А. Шульгинов, С.Ю. Гуревич

Зарегистрированы флуктуации сопротивления пермаллоевой ленты при различных температурах, вплоть до температуры магнитного фазового перехода. Отмечено резкое увеличение амплитуды фликкер-шума сопротивления при достижении температуры магнитного фазового перехода. Это явление связано с процессом разрушения и перестройки доменов ферромагнетика.

## Введение

Шум всегда рассматривался как помеха при передаче информации, но в настоящее время в науке происходит пересмотр взглядов на шум. Среди шумов различной природы выделяют шумы, которые могут нести информацию как о его источнике, так и о внешних воздействиях. В данной работе сделана попытка применить эти идеи к физике металлов. Была поставлена цель исследовать шумы сопротивления металлов и связать их параметры с внутренним состоянием образцов.

Особый интерес в этом плане представляют собой шумы сопротивления ферромагнетиков. Электроны внутри ферромагнетика находятся в сильно неоднородном магнитном поле, вызванном наличием многочисленных областей намагниченности (доменов) в нём. Магниторезистивный эффект, обусловленный собственным неоднородным магнитным полем ферромагнетика, по нашему предположению, должен вызвать значительно больший уровень флуктуаций сопротивления по сравнению с неферромагнитными проводниками [1]. Если повысить температуру ферромагнетика, то можно предположить, что уровень флуктуаций сопротивления образца резко повысится вблизи температуры магнитного фазового перехода вследствие неустойчивости состояния. В нём непрерывно должны возникать и разрушаться доменные структуры. Это порождает фликкер-шум магнитного поля и проводимости ферромагнетика, имеющий спектр  $1/f$ . Фликкер-шум выступает как спутник необратимых процессов и несёт информацию о них [2]. Цель нашего исследования состояла в том, чтобы проверить эту гипотезу о фликкер-шуме ферромагнетика.

## Эксперимент

В качестве образца для исследования флуктуаций выбрана нелегированная пермаллоевая лента (никель – 70%, остальное – железо) толщиной 0,014 мм, шириной 1 мм. Точка Кюри образца – 560 °С. Сопротивление образцов находилось в пределах 30...60 Ом. При увеличении температуры до точки Кюри сопротивление ленты возрастало примерно в 2 раза. Её температурный коэффициент сопротивления  $\alpha$ , оказался равным  $2,6 \cdot 10^{-3}$  град<sup>-1</sup>. Лента намотана спирально на стержень длиной 5 см из чистого оксида алюминия, чтобы исключить ионную проводимость при высоких температурах. Четыре таких сопротивления соединены и установлены внутри муфельной печи одно рядом с другим вокруг длинного стержня из того же материала. Обмотка соседних сопротивлений произведена в противоположных направлениях. Это сделано для уменьшения влияния магнитных помех. Температура внутри печи контролировалась в разных точках с помощью трёх термопар. В процессе нагрева разность температур внутри не превышала 10 °С. Для уменьшения влияния внешних электромагнитных помех вся установка помещена в шкаф с металлическими стенками. Пермаллоевое сопротивление включено в мост Уитстона двумя разными способами:

1) пермаллоевое сопротивление включено в одно из плеч уравновешенного моста (в этом случае регистрировались флуктуации пермаллоевого сопротивления);

2) два пермаллоевых резистора с близкими сопротивлениями включались в соседние плечи моста (в этом случае регистрировалась разность флуктуаций в соседних пермаллоевых резисторах). При такой схеме подключения проще было поддерживать баланс с помощью других сопротивлений моста, которые находились вне печи в металлической коробке вместе с инструментальным усилителем (ИУ) AD623 (фирма «Analog Device») с очень низким уровнем собственных шумов

(менее 1 мкВ на входе). Коэффициент усиления – 500. Внутри этой коробки температура контролировалась с точностью до 1 °С. Вся схема получала питание от аккумулятора +12 В (фирма «Coslight»), чтобы уменьшить уровень электрических шумов. Для регистрации и обработки сигнала от ИС, а также от термопар создана система на основе персонального компьютера с использованием 32-канальной платы сбора данных L-154 (производство ЗАО «Лкард»). Для обработки данных создано программное обеспечение, включающее в себя программу для регистрации и записи данных, программы для анализа гистограмм и спектра.

На первом этапе эксперимента изучены флуктуации, которые даёт вся система регистрации. Для этого вместо пермаллового сопротивления в плечо моста было впаяно прецизионное сопротивление такой же величины. Затем вместо него было включено пермалловое сопротивление таким образом, что механические контакты находились вне печи и имели одинаковую температуру, чтобы исключить контактный термоэлектрический эффект Зеебека. Амплитуда шумов возросла примерно в 20–30 раз, хотя все сопротивления находились при комнатной температуре. Следовательно, были зарегистрированы преимущественно флуктуации сопротивления пермаллоя, которые составили  $\sigma_R/R \sim 10^{-5}$ , причём эта величина оказалась примерно одинаковой при разных способах включения сопротивления. Спектральный анализ проводился в диапазоне от 0,1 до 100 Гц. Он показал, что, если в плечо моста включено прецизионное сопротивление, то система генерирует белый шум в диапазоне 1...100 Гц. Когда в состав моста входит пермалловое сопротивление, то в спектре флуктуаций явно проявляются шумы различной природы (рис. 1): найквистовский белый шум (1), фликкер-шум (2) и магнитный шум (3), вызванный переменными низкочастотными магнитными полями. Аппаратными методами не удалось избавиться полностью от этих магнитных шумов, но это удалось сделать математически путём выделения спектрального диапазона, в котором они отсутствуют (0,1...5 Гц).

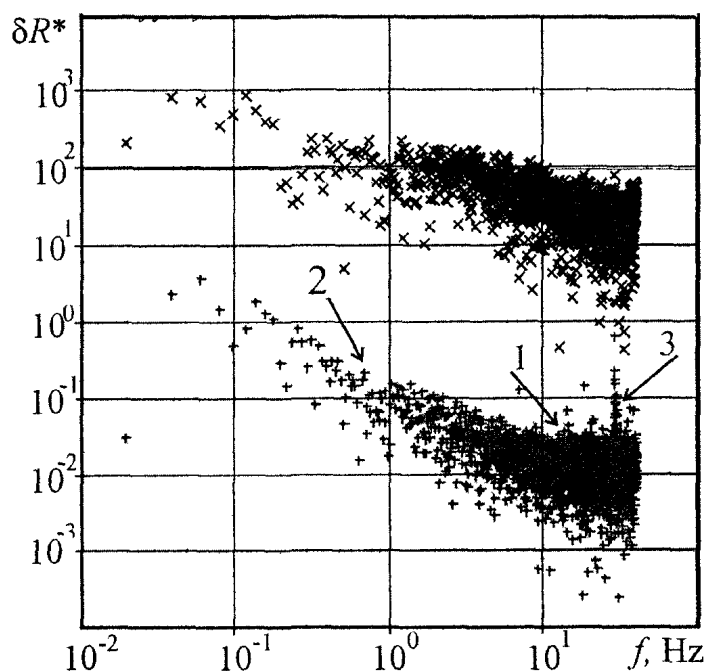


Рис. 1. Спектр флуктуаций сопротивления пермаллоя в отн. ед. при  $t=20$  °C (+) и при  $t=560$  °C (x)

Отметим, что в предыдущих экспериментах зарегистрированы пики в спектре флуктуаций проводимости пермалловой ленты на отдельных частотах. Детальные исследования показали, что эти пики есть магнитные шумы, и они имеют частоты кратные основным тонам 50 и 60 Гц. Были зарегистрированы гармоники этих магнитных шумов вплоть до одиннадцатой. Приближение ферромагнетика к детектору, естественно, их усиливает. Но нас интересует информативный фликкер-шум, вызванный внутренними процессами перестройки и разрушения магнитных доменов в ленте. Поэтому весь дальнейший анализ проводился только в диапазоне 0,1...5 Гц. Регистрация шумов на более низких частотах не проводилась, так как они вызваны нестабильностью температуры.

Цель следующего этапа эксперимента состояла в исследовании температурной зависимости амплитуды и других характеристик фликкер-шума. Включение нагревателя не вызвало мгновенного роста амплитуды флуктуаций. Нагрев производился на 2–4 °С в минуту. При этом наблюдался медленный рост амплитуды флуктуаций. Флуктуации фиксировались как при нагреве, так и при охлаждении печи. Заметных отличий в уровне и спектре шумов не обнаружено. В этих экспериментах использовались разные образцы ленты и разные схемы включения. На рис. 2а,б отображён результат всех экспериментов по нагреву и охлаждению пермалловых лент. В процессе записи флуктуаций температура ленты изменялась, поэтому наблюдался дрейф среднего сопротивления. Перед тем как сигнал обрабатывался с помощью процедуры быстрого Фурье-преобразования, сначала он подвергался вейвлет-анализу для исключения влияния дрейфа температуры. Полученный спектр флуктуаций относительного сопротивления

$$\frac{\delta R^*(f)}{R} = \left| \frac{1}{2\pi} \int_0^T \frac{\delta R(t)}{R} \exp(-i2\pi ft) dt \right| \quad (1)$$

был аппроксимирован степенной функцией

$$\frac{\delta R^*(f)}{R} = \frac{A}{f^n}, \quad (2)$$

где  $T$  – длительность одной записи ( $T = 51,5$  с),  $A$ ,  $n$  – амплитуда и степень шума.

### Основные результаты

Зарегистрирован фликкер-шум сопротивления пермаллоя, который во много раз превосходит шумы сопротивления неферромагнитных проводников. Это подтверждает гипотезу, что фликкер-шум проводимости ферромагнетиков связан с существенной неоднородностью магнитного поля внутри ферромагнетиков. Разработанный алгоритм анализа шумов, который состоит в последовательном применении вейвлет-анализа и быстрого Фурье преобразования, позволил выделить фликкер-шум проводимости ферромагнетика при нагреве и при охлаждении и определить его основные характеристики. Показано, что при температуре магнитного фазового перехода пермаллоя (560 °С) наблюдается резкое увеличение амплитуды фликкер-шума примерно в 100 раз (рис. 2б). Относительные флуктуации сопротивления  $\sigma_R/R$  также возрастают от  $10^{-5}$  до  $10^{-2}$ . Это связано с процессами разрушения и формирования доменов. У фликкер-шума степень  $n$  находится в пределах 0,8.. 1,2, а белый (найквистовский) шум имеет степень  $n=0$ . На рис. 3 показана температурная зависимость степени шума, полученная в этих экспериментах. Фликкер-шум преобладает в выбранном диапазоне частот (0,1–5 Гц) при температурах ниже точки Кюри. В области температуры магнитного фазового перехода наблюдается снижение степени шума, что указывает на то, что белый шум растёт гораздо быстрее фликкер-шума с увеличением температуры. Следовательно, разрушение доменов создаёт, в основном, белый шум.

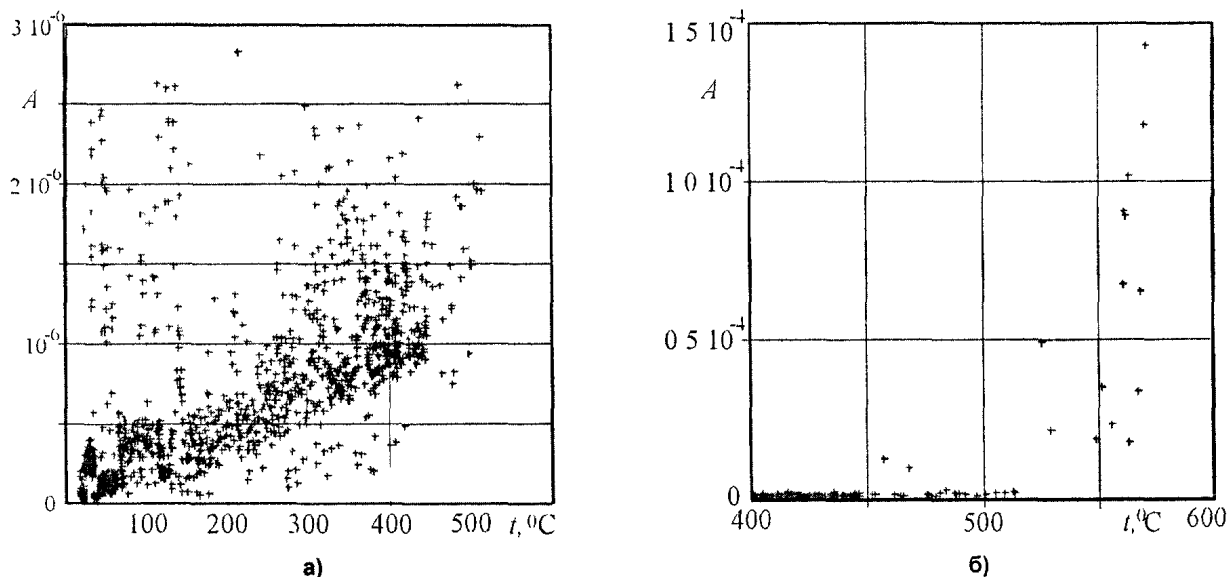


Рис. 2. Зависимость амплитуды фликкер-шума от температуры пермаллоя

а) до 500 °С; б) 400...600 °С

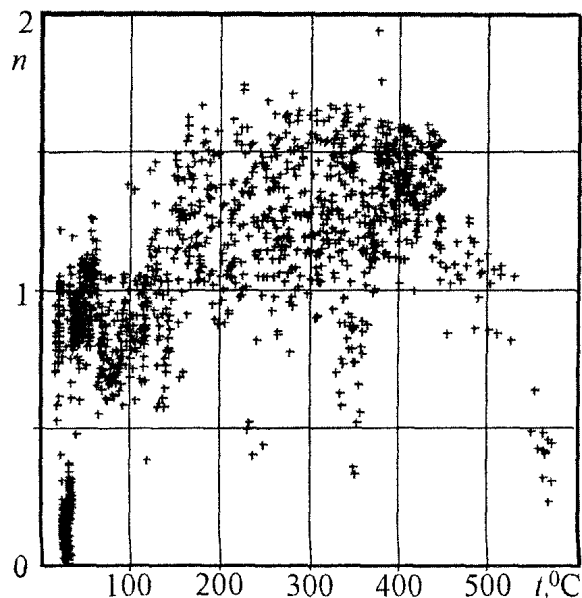


Рис. 3. Зависимость степени фликкер-шума от температуры

Проводился анализ функции распределения флуктуаций после проведённого вейвлет-преобразования. Он показал, что шум имеет распределение Гаусса во всём диапазоне температур, а коэффициенты асимметрии и эксцесса не зависят от температуры.

#### Благодарности

Шульгинов А.А выражает благодарности Петрову Ю.В., Прокопьеву К.В., Забейворота Н.С. за помощь в подготовке эксперимента и Пархомову А.Г. за полезные замечания к работе.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования РФ (грант № Е00-3.4-346), РФФИ и Администрации Челябинской области (грант № 01-02-96469).*

#### Литература

1. Шульгинов А.А. Разработка источника фликкер-шума для целей неразрушающего контроля // Вестник ЮУрГУ. Серия «математика, физика, химия». – Вып.1. – 2001. – №7(07). – С. 60–61.
2. Жигальский Г.П. Шум вида  $1/f$  и нелинейные эффекты в тонких металлических плёнках // УФН. – 1997. – Т. 167. – Вып. 6. – С. 623–648.

*Поступила в редакцию 20 марта 2003 г.*

## ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ БИОЭЛЕКТРОГРАММ

А.А. Шульгинов, О.С. Стадник

Метод газоразрядной визуализации человеческих эманаций даёт информацию обо всех системах и органах тела. Разработан метод анализа биоэлектрограмм пальцев человека. Изображение разделяется на отдельные элементы, определяются их координаты, затем производится их классификация.

### Введение

Самая фундаментальная проблема современной физики это исследование природы человека. Один из методов исследования разработан С.Д. Кирлиан и В.Х. Кирлиан в конце 50-х годов XX века [1], получивший название в научной литературе как метод Кирлиан. Испытуемый ставит палец между двумя электродами. Один из электродов плоский, и на него помещают фотобумагу. На электроды дают высокое переменное высокочастотное напряжение. Палец вблизи плоского электрода начинает светиться фиолетово-голубым свечением, которое фиксируется на фотобумаге. Это – газовый разряд, поэтому метод Кирлиан ещё называется газоразрядной визуализацией (ГРВ). На фотобумаге после проявления виден ореол вокруг пальца, называемый биоэлектрограммой. При разряде тока испытуемый почти не ощущает этого, так как ток высокой частоты благодаря скин-эффекту протекает по поверхности пальца. Таким же способом можно получить, например, биоэлектрограмму растений или других предметов. Свечение пальцев человека носит индивидуальный характер. Поэтому возникла идея применить метод ГРВ для диагностики состояния человека. Эту идею технически реализовала группа исследователей под руководством К.Г. Короткова [2]. Ими был создан прибор на основе персонального компьютера, который регистрирует газоразрядное свечение вокруг пальца с помощью ПЗС-матрицы и обрабатывает изображение. Метод диагностики оказался столь успешен, что был включён в федеральную программу Минздрава РФ на 2001–2005 годы по традиционной медицине. Тем не менее, физическая сторона этого явления остаётся неразгаданной. Любой биообъект окружён собственными эманациями (аурой). Газовый разряд, созданный высоким напряжением в воздухе, играет роль только визуализатора этой ауры. Вопрос состоит в том, какова природа этих эманаций. К.Г. Коротков считает, что форма, цвет и интенсивность газового разряда обусловлены газовыми примесями, выделяемыми с поверхности кожи [2, с. 35–45]. Другое объяснение дал В.М. Инюшин [3]. По его мнению аура имеет тонкоматериальную природу, названную «биоплазмой». Проф. М. Погорельский исследовал ГРВ в конце XIX в. [4] и пришёл к аналогичному выводу. Он назвал эманации человека «полярной физиологической энергией». Если это так, то метод ГРВ есть окно в мир скрытой материи, поиски которой ведутся сейчас во всём мире.

### Эксперимент

Для наблюдения и регистрации газового разряда мы применили традиционный метод. В качестве источника высокого напряжения использован генератор «Аура-МТ» производства НПО «Тех-радио». Свечение фиксировалось с помощью чёрно-белой контрастной фотобумаги «Берёзка», которая помещалась между плоским электродом и пальцем испытуемого. Электроды позволяют фиксировать пальцы строго под определённым углом к фотобумаге. Все биоэлектрограммы (более 1000 шт.) получены при одном и том же режиме работы генератора: экспозиция – 3 с, частота биполярных импульсов – 200 Гц, а частота колебаний напряжения – ~10 кГц. Амплитуда напряжения была одинаковой. Мы также пытались фиксировать излучения с помощью видеокамеры «Panasonic», однако качество видеозаписи было существенно хуже, чем фотографии, полученные традиционным методом с использованием фотобумаги.

### Основные результаты

На рис. 1 показана биоэлектрограмма неживого объекта. Аура гладкая и однородная. Никаких деталей выделить невозможно. Биоэлектрограммы человеческих пальцев принципиально отличаются (рис. 2) и несут сугубо индивидуальный характер. Заметна существенная неоднородность излучений. У некоторых испытуемых внешний вид ауры пальцев значительно изменяется в

течение суток, но были и такие, у которых она слабо изменяется в течение суток и даже лет (исследования проводились с 1996 по 2002 г.).

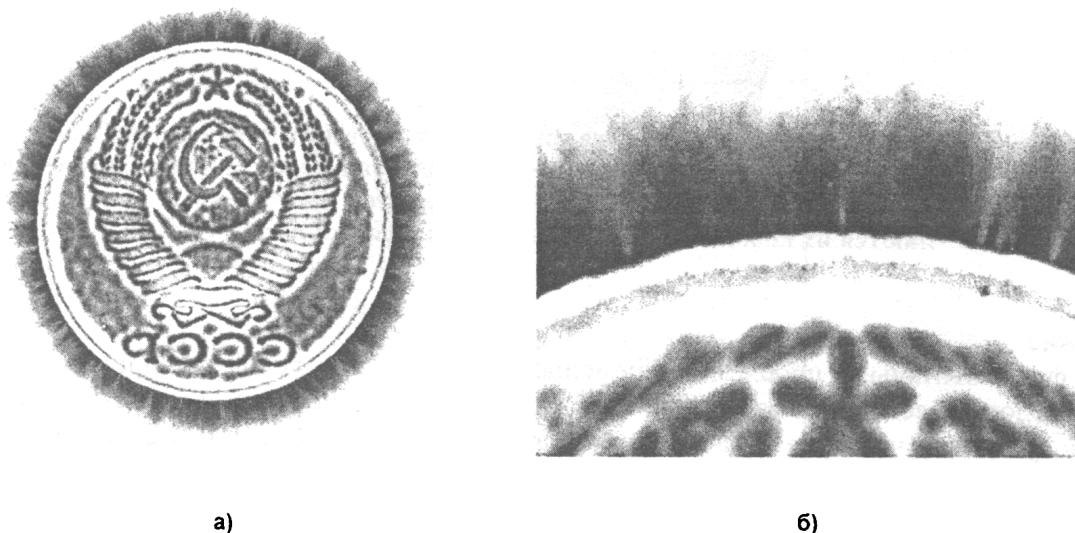


Рис. 1

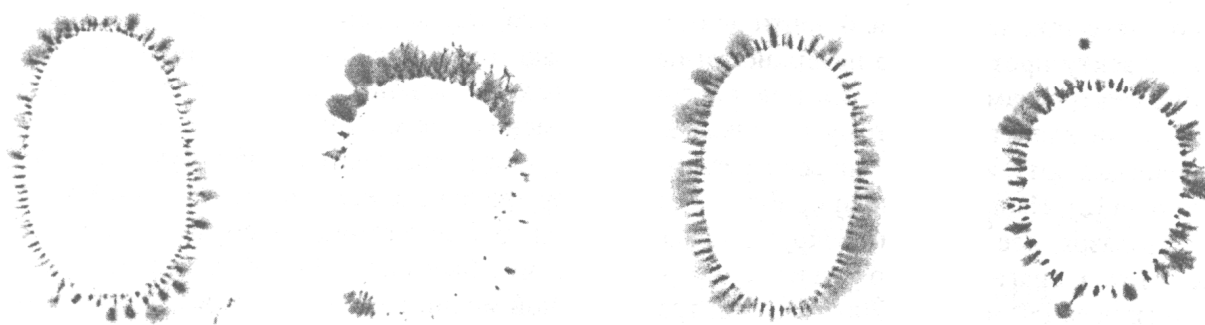


Рис. 2. Биоэлектrogramмы указательного пальца левой руки разных людей

К.Г. Коротков предложил использовать секторный анализ биоэлектrogramмы. Всё изображение разбивают на сектора. Поскольку каждый сектор каждого пальца связан с органами и системами организма, то по интенсивности свечения в соответствующих секторах можно определить состояние органов [5]. Наши исследования показали, что при увеличении фотоснимка можно выделить отдельные элементы. В отличие от ПЗС-матрицы фотоснимки дают высокое разрешение биоэлектrogramм. Это позволило рассмотреть и провести классификацию элементов. Несмотря на то, что каждое изображение биоэлектrogramмы носит индивидуальный характер, можно выделить несколько стандартных элементов в каждом изображении:

- 1) «Факел» (рис. 3а) – элемент с четкими границами и острой вершиной;
- 2) «Букет» (рис. 3б) – элемент, похожий на «факел», но с расширяющейся вершиной;
- 3) «Кусты» и «деревья» (рис. 3в) – фрактальные структуры без чётких форм;
- 4) «Выброс» (рис. 3г) – элемент, отделённый от основной ауры, который может быть как гладкими, так и фрактальными.

Такие типы элементов встречались у людей разного пола и возраста (от 3 до 60 лет). На основе этого нами предложен элементный анализ биоэлектrogramм. Изображение сканируется с разрешением 1200 dpi, которое достаточно для выделения и анализа элементов. Затем оно обрабатывается программой «GDV processor». Выделяется рабочая область (рис. 4). По внутреннему контуру может быть построен эллипс. Это позволяет построить собственную систему координат. Определяются координаты каждого элемента и их тип. Таким образом можно сравнить биоэлектrogramмы, полученные в разное время. Интегральное свечение ауры не связано однозначно с возрастом испытуемого. Хотя характеристики излучений варьируются во времени, но элементный состав биоэлектrogramмы в целом остаётся неизменным.

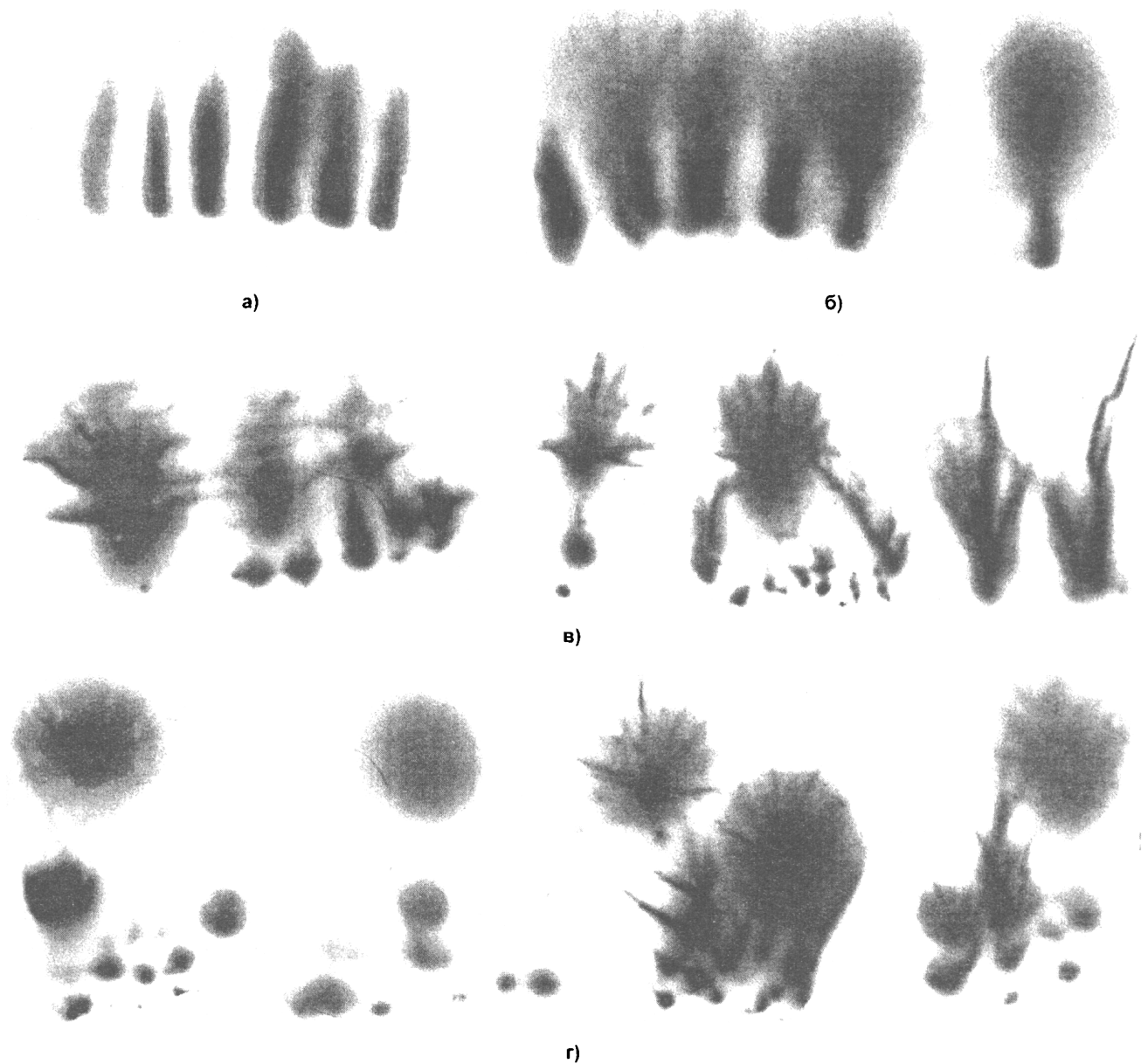


Рис. 3. Основные элементы биоэлектрограмм человека

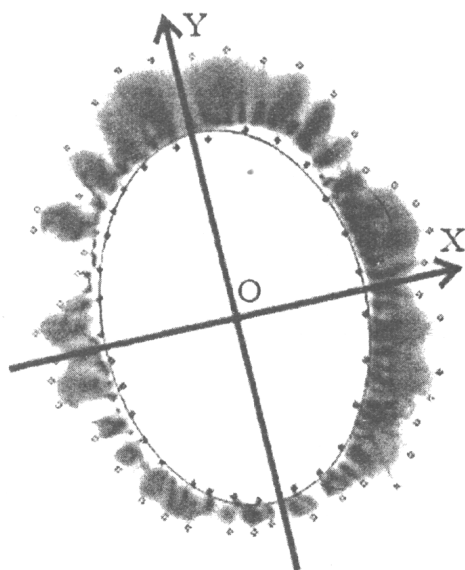


Рис. 4. Построение собственной системы координат

Аналогичный метод развит М. Шадури и др., названный биоголографией. Как заметили эти исследователи, элементы биоэлектрограмм похожи на отдельные органы и ткани организма. Изображения элементов можно найти в Интернете на сайте <http://www.bioholography.org>. Это подтверждает теорию о том, что человек устроен по голографическому принципу: в каждой части, в том числе и в каждом пальце, представлена информация обо всем организме. На этом основан метод диагностики и лечения, известный под названием Су Джок [6]. На ладонной поверхности концевой фаланги каждого пальца имеются точки, связанные с каждым органом. Поэтому именно элементный анализ биоэлектрограмм может быть более продуктивен, чем секторный анализ.

### Выводы

Биоэлектрограмма живого объекта, например, пальца человека, существенно отличается от биоэлектрограммы неживого объекта тем, что она имеет структуру и состоит из отдельных элементов. Форма элементов, по-видимому, несёт информацию о состоянии объекта. Сложность использования метода Кирлиан связана с трудностями интерпретации форм. Осложняет расшифровку неустойчивость картины излучений, наблюдаемая у некоторых испытуемых.

Свечение газового разряда принимает форму, зависящую от слабых воздействий эманаций пальца. Но какова природа этих эманаций: газовые выделения или неизвестная биоплазма? Наши наблюдения указывают на последнее. Во-первых, само наличие или разнообразие форм элементов биоэлектрограмм не подтверждает «газовую» теорию. Если это газ, то за счёт диффузии картина разряда должна быть однородной и никаких элементов не будет. «Факел» мог бы возникнуть, только если газ вырывается из поры под давлением. Ещё больше сложностей у «газовой» теории возникает при объяснении других форм, например, «выбросов» или «деревьев». Во-вторых, обращает на себя внимание индивидуальность биоэлектрограмм и зависимость от психического состояния. У некоторых испытуемых излучений вообще практически не было. Это не зависит от толщины кожи. Замечено ослабление излучений у студентов после физической тренировки вплоть до полного их исчезновения или у преподавателя после чтения лекции. Усиление излучений отмечено у испытуемых после психофизических упражнений по методике Т.В. Поповой. Эти корреляции также невозможно объяснить с помощью «газовой» теории. Попытки дать правдоподобное объяснение вполне понятны. Но эффект Кирлиан относится к той группе явлений, которые невозможно объяснить с точки зрения общеизвестных физических законов.

### Благодарности

Авторы выражают благодарность проф. Поповой Т.В. и студентам Корюкалову Ю.И. и Абакумовой Ю. за сотрудничество.

*Работа выполнена при поддержке Правительства Челябинской области и Министерства образования Российской Федерации.*

### Литература

1. Кирлиан С.Д., Кирлиан В.Х. Фотографирование и визуальное наблюдение при посредстве токов высокой частоты // Журнал. научн. и прикл. фотографии и кинематографии. – 1961. – Т. 6. – № 6. – С. 397–403.
2. От эффекта Кирлиан к биоэлектрографии. Сборник научных статей. – СПб: Изд-во «Ольга», 1998. – 344 с.
3. Инюшин В.М. Биоплазма и её излучение. Психическая саморегуляция. – Алма-Ата: Изд-во КГУ, 1974. – С. 320–322.
4. Погорельский М. Электрофосфены и энергография как доказательство существования физиологической полярной энергии или так называемого животного магнетизма и их значение для медицины и естествознания. – СПб. 1899. – 105 с.
5. Mandel P. Energy Emission Analysis; New Application of Kirlian Photography for Holistic Medicine. – Synthesis Publishing Co., W. Germany, 1986.
6. Пак Чжэ Ву. Су Джок для всех. – М.: Су Джок Академия, 1998. – 104 с.

*Поступила в редакцию 1 апреля 2003 г.*



## RESONANCE ABSORPTION OF RF ELECTRIC FIELD ENERGY BY NEGATIVE POINT-TO-PLANE GAP

B.A. Andrianov

Resonance absorption of *rf* energy, the maximum of which happens at the frequency equal to or a multiple of that of Trichel pulses, was discovered on connecting both an *rf* voltage of low amplitude and high direct voltage to the negative point-to-plane gap. Resonance curves were recorded by scanning the high voltage at fixed frequencies. It was found that the initial portion of dependence between resonance frequency and electrostatic field strength near the plane is linear, and has the same factor of proportionality for different gap lengths, estimated as  $(1.0 \pm 0.2)$  Hz m/V.

The most remarkable property of the negative corona is Trichel pulses [1]. Together with strict periodicity the characteristic feature of these pulses is linear dependence between their repetition frequency and an average discharge current over a vast frequency range. Such a capability of the negative corona for the self-ordering of electrical processes in itself seems to be vague evidence suggesting that Trichel pulses are a quantum phenomenon, and their reason is concealed deeper than it has been supposed up till now [2].

This experimental study of such a discharge was carried out by subjecting it to both direct and alternating electric fields with the frequency of the latter being varied from tens of kilocycles to a few megacycles. Experiments were performed in air at normal atmospheric pressure and room temperature.

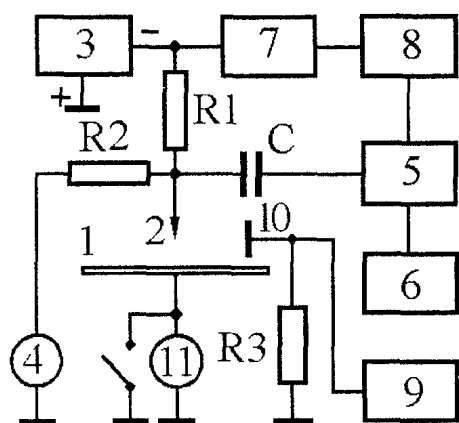


Fig.1. The scheme of the installation: 1 - plane; 2 - point; 3 - source of high voltage; 4 - kilovoltmeter C196; 5 - Q-meter E4-4; 6 - frequency meter 43-57; 7 - voltage divider; 8 - plotter H-307; 9 - oscilloscope C1-93; 10 - wire ring probe; 11 - microammeter M-494

The scheme of an installation is shown in Fig. 1. The electrode system consists of a grounded copper disk 1 and a sharp steel needle 2 which is connected through a resistor R1 to the negative pole of an adjustable source of high voltage 3. This voltage is measured by an electrostatic kilovoltmeter 4. Through a separating capacitor C the needle is also linked to the capacitor terminals of the Q-meter 5. A standard coil, from a kit of the Q-meter for a chosen frequency range, is connected to the inductance terminals of this device. The frequency is measured by a frequency meter 6. The output voltage of the Q-meter and the high voltage reduced by a divider 7 can be applied to the

Y- and X-inputs of a two coordinate plotter 8 respectively. The oscilloscope 9 is connected to a ring wire probe 10 and used for observing the amplitude of alternating electric fields. This probe also detects the Trichel pulses, which are clearly seen when the alternating electric field is turned off. Under this condition a frequency of Trichel pulses can be measured by the frequency meter 6 when it is disconnected from the Q-meter and connected to the probe 10 in parallel to the oscilloscope.

To facilitate observance of these pulses at higher frequencies the fast amplifier U3-29 (not shown on the scheme) can be connected between the probe and the oscilloscope. The average discharge current can be measured by a microammeter 11. So the Q-meter serves the dual function of supplying an alternative voltage to the gap, and monitoring any changes in its electrical properties by varying quality-factor of an oscillatory circuit. The gap with the series capacitor C and the built-in measuring capacitor of the Q-meter are connected in parallel and serve as a composed capacitor in this circuit. The choice of capacitance of the capacitor C permits us to preset an amplitude of the alternating voltage applied to the gap. Resistor R2 eliminates the impact of kilovoltmeter's capacitance on the oscillatory circuit described above.

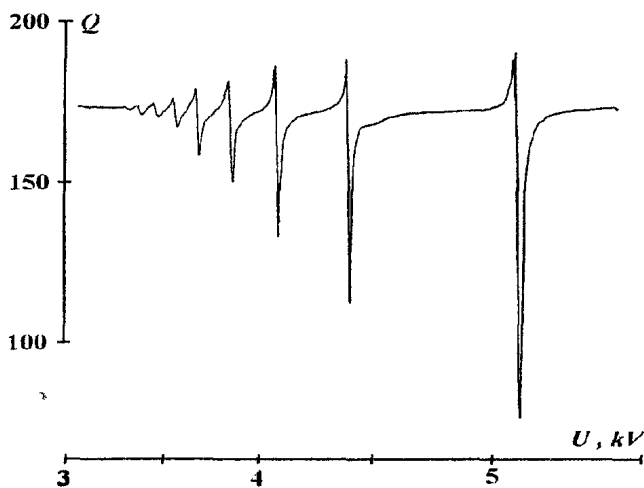


Fig. 2. Quality-factor  $Q$  of oscillatory circuit versus high direct voltage  $U$  at  $f = 1$  MHz,  $h = 5$  mm ( $f$  is a frequency of a built-in oscillator of the Q-meter, and  $h$  is a gap length)

The Q-meter is tuned to a chosen frequency, then a high direct voltage is applied to the gap. In the vicinity of certain values of this voltage one can observe a resonance decrease of the quality-factor as can be seen in Fig.2. By the smooth detuning of the Q-meter in the resonance minimum it can be easily verified that the natural frequency of the oscillatory circuit has remained intact (if, of course, the decrease of the quality-factor is not too much). Under resonance conditions the amplitude of the oscilloscope signal is subjected to an abrupt fall indicating considerable (sometimes almost complete) absorption of  $rf$  energy in the gap. The average discharge current changes monotonously under these conditions, so that the observed decrease of the quality-factor is not caused by any abrupt increase of the total conductance of the gap.

Nevertheless, the possibility of a local conductivity increase must not be ruled out if

one takes into account not the total dc conductance but the resonance admittance of the equivalent oscillatory circuit where the gap is regarded as an imperfect capacitor, represented by a pure capacitance  $C^*$  shunted by a resistance  $R$ . From considering this model the quality-factor of the circuit due to the loss in capacitor alone may be written as [3]  $Q \approx \omega_r C^* R$  ( $\omega_r$  is the resonance cyclic frequency). Therefore, the relative change of the quality-factor may be expressed through the relative change of  $R$  as  $\Delta Q/Q \approx \Delta R/R$  (The sign  $\Delta$  above and below means an absolute change of the value to its right). Taking into account that a resistance varies in inverse proportion to a carrier concentration  $n$  (the number of carriers per unit volume) [3] when a carrier mobility is assumed to be constant, one may write

$$\Delta Q/Q \approx - \Delta n / (n + \Delta n). \tag{1}$$

In other words, the resonance decrease of quality factor may be caused by resonance increase of an electron density in a space charge of the negative corona.

A family of resonance curves, presented in Fig.2, was recorded by scanning the high voltage at a fixed frequency. Measurements of the frequency  $f_{Tr}$  of Trichel pulses show that the resonance values of the high voltage correspond to the direct or multiple resonance frequency  $f_r$  of the alternating voltage to that of the Trichel pulses according to the equation

$$f_r = N f_{Tr} \quad (N = 1, 2, 3, \dots). \tag{2}$$

In Fig.2 the extreme right resonance curve was recorded at the equality  $f_r = f_{Tr}$  ( $N=1$ ), while the adjacent curve corresponds to  $N=2$  etc. One can follow resonances up to the eight-fold, i.e. when the Trichel pulses frequency is less than the tuned frequency by a factor of 8. No resonances are observed over the whole area where the Trichel pulses frequency exceeds that of the alternating electric field.

The shape of the resonance curve, as is obvious in Fig.2, is apt to be a mixture of absorption and dispersion signals well-known from ordinary magnetic resonance phenomena (see, for example, Fig.12 in [4]).

The contribution of each of these signals seems to depend on the accuracy of tuning and/or uncontrolled phase shifts in the measuring system.

Another feature of described phenomenon, in common with magnetic resonance, is  $rf$  widening: it was noticed that the half-width (the width at half height) of the resonance curve, recorded by scanning the high voltage, doubles when the amplitude of the  $rf$  voltage is increased two-fold as shown in Fig.3.

At first sight resonance absorption of  $rf$  energy in phase with Trichel pulses (or with their harmonics) would seem to be wholly expected. Nevertheless a detailed analysis, based on the expansion of Trichel pulses in the Fourier series, shows that all expectations are disproved by the experiment. Above all this is concerned with the shape of the resonance curve. If  $\Omega$  is not exactly equal to  $\omega_r$ , one must observe beats on the difference frequency  $|\Omega - \omega_r|$ . These beats should be expected because they are the

characteristic property of a superposition of any two vibrations with neighbouring frequencies. As the frequency of Trichel pulses is approached  $\omega_r$ , these beats should be better distinguished, that is they must be necessarily observed just close to the resonance minimum at  $\Omega=\omega_r$ . Therefore the shape of the resonance curve must be determined by these beats. In spite of these predictions, no beats are observed within the resonance curve even during the very slow scanning, as it can be seen in Fig.3: the shape of this curve has obviously nothing in common with the expected beats. Thus the absorption shape of the resonance curve is unexpected as well as the existence of this resonance itself.

Due to oscillatory circuit selectivity, frequency scanning cannot be performed in this installation, but frequency dependence of the resonance can be constructed from Q-values measured at different frequencies and fixed direct voltage. One example of that reconstruction is shown in Fig.4. It shows that the half-width of the resonance curve is about 10 kHz.

Thus the resonance curve can be obtained not only by the dc electric field scanning at a fixed frequency, but also by varying the frequency at a fixed dc electric field strength, just as in a well-known magnetic resonance phenomenon one can obtain a resonance curve by a dc magnetic field scanning or by a frequency scanning [4].

The resemblance of these phenomena manifests itself from another more important side: as it will be seen further, the particular relation between the resonance values of frequency and the dc electric field strength does exist, that it is something akin to a gyromagnetic ratio [4] in magnetic resonance.

Measurements of different pairs of resonance values of direct voltage  $U_r$  and frequency  $f_r$ , corresponding to a minimum of a resonance curve at fixed electrode distances  $h$ , and providing  $N=1$  in Eq.(2), show that the initial portion of the plot of  $f_r$  versus  $U_r$  is linear. Such a result may be expected because it is a consequence, on the one hand, of linear relationship between frequency of Trichel pulses and discharge current  $i$  and, on the other, of linearity of current-voltage curves in their initial portion [5]. The latter linearity was easily verified by direct recording of these curves on the XY-plotter.

The slope of the straight lines  $f_r(U_r)$ , of course, differs with different  $h$ -values. Nevertheless, the unexpected peculiarity is that one can get approximately the same slope for all lines by changing the voltage  $U_i$  to some electric field strength

$$E_r = kU_r/h, \tag{3}$$

where  $h$  is the gap length, and  $k$  is a constant to be found.

With a burning corona  $k$  certainly cannot be equal to 1 at any point on the symmetry axis of the gap owing to the influence of a space charge.

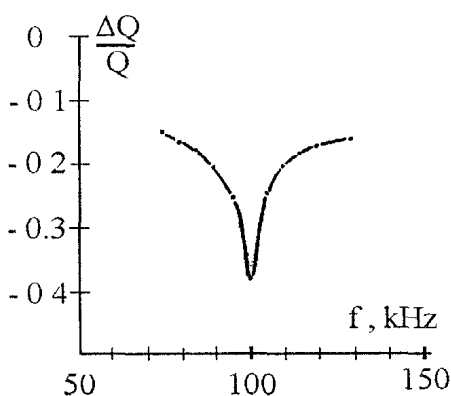


Fig.4. A relative decrease of the quality-factor  $\Delta Q/Q$  vs frequency at fixed high direct voltage  $U = 2.2$  kV and  $h = 2$  mm

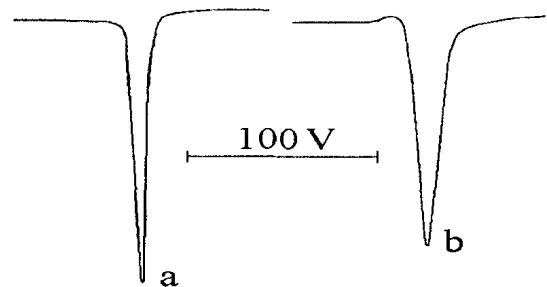


Fig. 3. Rf widening of the resonance curve at  $f = 800$  kHz,  $h = 2$  mm: rf voltage applied to the gap while recording the curve  $b$  is nearly twice as large as that for the curve  $a$ . Both curves are recorded according to the same horizontal scale, but the vertical scale for the curve  $b$  is halved. The resonance value of the high direct voltage is the same for both curves

To clear up whether such a spot really does exist in the corona discharge, where the electric field strength would satisfy the Eq.(3), one can use the results contained in the book [6]. This book includes a description of theoretical calculations and experimental research of electrostatic field distribution in the corona discharge in the point-to-plane gap, and the following approximate formula (independent of a point tip radius of curvature) was presented there for the electric field strength  $E$  on the symmetry axis of the gap at the distance  $x$  from the point tip towards the plane:

$$E = (3U/2h)\sqrt{x/h}. \tag{4}$$

Here  $U$  is a voltage between electrodes.

Experimental verification of Eq.(4) showed [6] that its calculation error does not exceed 10% even at distances up to  $0.7 h$  from the plane (i.e. at  $0.3 \leq x/h \leq 1$ ). Moreover, the electric

field strength does not differ from its value on the surface (i.e. at  $x=h$ ) more than by 10÷15% everywhere within the mentioned region.

From these results it is possible to make a rough estimate of the electric field strength  $E_r$  in the most part of the gap as this strength on the plane:

$$E_r = (3/2)(U_r/h). \quad (5)$$

Hence  $k=3/2$  in Eq.(3) is well suited to the requirement above, and there is not only a spot, but a vast region within the gap where the electric field strength approximately satisfied Eq.(5).

Now the plots of  $f_r$  versus  $E_r$  can be constructed. They are presented in Fig.5 and really show the above-mentioned same slope at their initial portion which can be described by linear relationship

$$f_r = \gamma_E(E_r - E_0), \quad (6)$$

where  $E_0$  is some strength value, proportional to initial voltage and also satisfying Eq.(5), and  $\gamma_E$  is the sought-for proportionality factor. First of all, the same slope of these curves means that the main processes responsible for this slope are localized within an outer region of the negative corona, perhaps in the vicinity of the plane, because Eq.(5) describes an electric field just there. From experimental results presented in Fig.5 it follows that

$$\gamma_E = (1.0 \pm 0.2) \text{ Hz m/V}. \quad (7)$$

(The error includes both systematic and random components). An estimation based on the half-width of resonance curves, taken from similar curves to those of Figures 2,3 and 4, gives a  $\gamma_E$ -value of the same order, but with much more error.

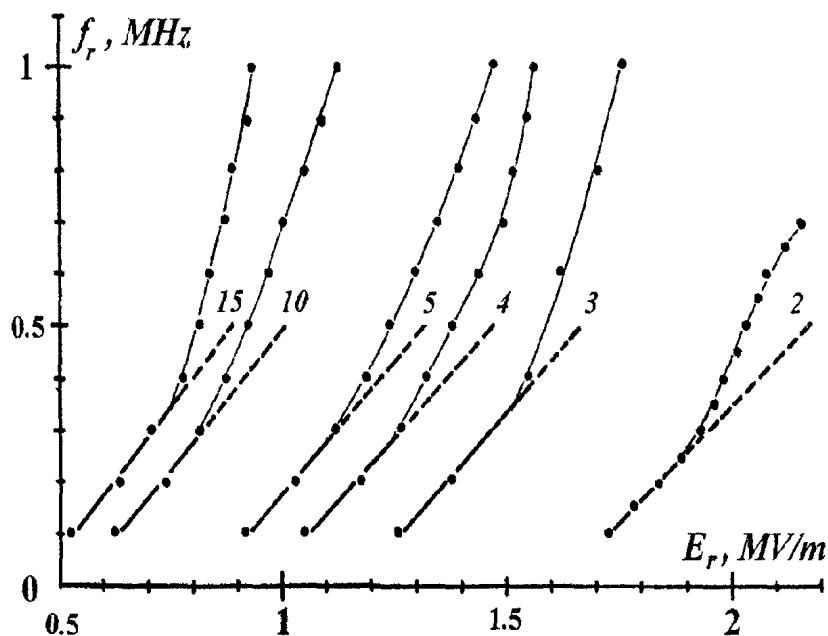


Fig. 5. Resonance frequency  $f_r$  vs resonance electrostatic field strength  $E_r$  on the plane against the point for different gap lengths. Denoted in mm near the each curve

Thus the described phenomenon of resonance absorption of  $rf$  energy in an electrostatic field in its main features may be regarded as an electrical analogy to the well-known phenomena of magnetic resonance. Just as a gyromagnetic ratio reflects the ability of Zeeman sublevels to absorb  $rf$  magnetic field energy under certain conditions [3,4], the existence of the single factor of proportionality  $\gamma_E$  may bear witness to the similar fundamental property exhibited by a substance confining the space charge of a negative corona. It suggests that a ground energy state of this substance in the dc electric field becomes capable of splitting up into some peculiar set of discrete sublevels whose populations can be equalized by the resonance absorption of the  $rf$  electric field energy at the frequency corresponding to an energy difference between adjacent sublevels. Incidentally, this point of view makes more understandable and explainable

- a sudden change of Trichel pulses frequency between different oscillation modes [5];
- the existence of the two-mode oscillation regime [5] of Trichel pulses, when two modes of different frequency were presented simultaneously;

• in particular almost the same slope of current-voltage curves for different modes as can be seen in the Figures 4 and 5 in [5].

This also raises the question of whether  $\gamma_E$ -value is responsible for some rotary motions caused by the dc electric field much like the gyromagnetic ratio is connected with precessional motions of magnetic moments round the direction of the dc magnetic field [3,4]. Does not this point of view give us some reason for believing that periodic electron avalanches, forming the Trichel pulses, can originate from an inverse population in this substance and represent a self-oscillation followed by destruction of some structural products of negative corona and liberation of electrons bound in these products (regarding to Eq.(1))? In any case the exact relation, expressed by Eq.(2), between the frequencies of two different phenomena – the resonance absorption of *rf* energy and the Trichel pulses–cannot be accidental and points to their deep interconnection and common origin. Hence, among possible unexpected applications, the discovered phenomenon may become the promising approach to studying the negative corona since the shape and half-width of a resonance curve apparently reflect kinetics of formation and decay of the space charge.

Of course, many questions still remain to be answered, so that further investigations are of doubtless interest.

The author is most grateful to Mrs. Jean Dauber and Ms. Megan Bick for their help in the preparation of this paper.

### References

1. G. W. Trichel, Phys. Rev. **54**, 1078 (1938).
2. L. B. Loeb. Electrical Coronas. Their Basic Physical Mechanism. University of California Press (1965).
3. B. I. Bleaney and B. Bleaney. Electricity and Magnetism. Third Edition. Oxford University Press (1976).
4. A. Abragam. The principles of Nuclear magnetism. Clarendon Press, Oxford (1961).
5. W. N. English, Phys. Rev. **74**, 170 (1948).
6. I. P. Vereshchagin. Corona discharge in apparatus of electronic-ionic technology.(In Russian). Moscow, Energoatomizdat (1985).

*Поступила в редакцию 2 апреля 2003 г.*

## DIRECT PAIRING OF ELECTRONS

B.A. Andrianov

The pairing occurs when electrons tunnel through the Coulomb barrier to the region of the dominant values of their spin-spin interaction energy. In an external electrostatic field the pair rotates in the plane orthogonal to the field strength vector and its centre-of-mass tends to be pushed out from the field along this plane. Applying an *rf* electric field causes an experimentally observed resonance absorption of its energy at a frequency equal to that of the pair's rotation, and is linear in the electrostatic field strength.

About hundred years ago Prof. N.P. Myshkin [1, 2] performed a simple and clear experiment which appeared to challenge Coulomb's law. He discovered an abnormal movement of the stream of several particles issuing from the tip of a solitary metallic point connected to the negative pole of an electrostatic machine (the collinear positive point was separated by a distance of 50 cm). For a distance of up to four metres these particles left in the air a strong trace in the form of a free negative charge which remained on different bodies, i.e. these particles carried this charge. In spite of this they did not obey Coulomb's forces since they moved not along the vector of the electrostatic field strength at the tip, i.e. not along the point axis, but perpendicular to it, along any radial direction within the narrow space region containing the tangent plane orthogonal to the point axis (Fig.1).

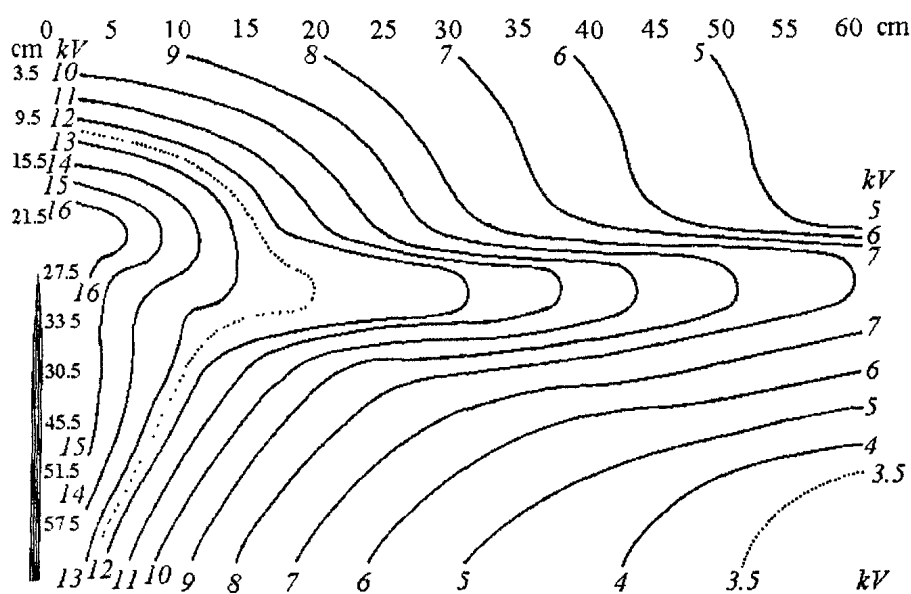


Fig. 1. Potential distribution of a metallic probe in a vertical plane containing the point (from [1])

Only in these directions did the stream cause different mechanical, luminescent and photochemical effects: it set in rapid rotation a light plastic disc, initiated luminosity of a fluorescent screen, and produced blackening of a photoplate. N.P. Myshkin verified that the stream was not caused by air motion, i.e. it was not in any way related to such a well known phenomenon as an electric wind. Nevertheless the thought of an electrical object devoid of its main principle to interact duly with an electric field, appears so absurd that even these easily reproduced experimental observations have remained without worthy attention. The question why the particles carrying a negative charge can move orthogonally to the lines of electric force has been left open for many years.

The answer to this question can be found by the extremely unexpected supposition that these particles are directly paired electrons. Such a pairing occurs due to the attraction of their spin magnetic moments and exceeds Coulomb's repulsion at a short distances between the electrons. The interaction of two electrons separated by a distance  $r$  from one another can be described by the potential energy  $V(\mathbf{r})$  taken from Hamiltonian of a charged particle possessing spin [3]

$$V(\mathbf{r}) = e^2 A^2 / (2M) (\mu_e \cdot \mathbf{B}) + e\varphi \quad (1)$$

where  $M \approx m/2$  is the equivalent mass of two-electron system;  $e$ ,  $m$ ,  $\mu_e$  are charge, rest mass, and magnetic moment of an electron;  $\mathbf{A}$  and  $\mathbf{B}$  are vector potential and magnetic flux density of the field created by one electron in the location of another one (we suppose  $\text{div } \mathbf{A} = 0$ );  $\varphi = e/(4\pi\epsilon_0 r)$  is the potential of electric field in that place. In this case [4]  $\mathbf{A} = \mu_0[\mu_e \times \mathbf{r}]/(4\pi r^3)$  ( $\epsilon_0$  and  $\mu_0$  are the permittivity and the permeability of a vacuum).

In the singlet state magnetic moments of electrons are antiparallel, therefore the second term of Eq.(1) becomes

$$-(\mu_e \cdot \mathbf{B}) = -\mu_0\mu_e^2/(4\pi r^3) + 3\mu_0(\mu_e \cdot \mathbf{r})^2/(2\pi r^5). \tag{2}$$

As long as the system aspires to be at the minimum energy, the second term in Eq.(2) disappears. This corresponds to the mutual orthogonality of vectors  $\mu_e$  and  $\mathbf{r}$ , hence we can regard all forces as central ones:  $A = \mu_0\mu_e/(4\pi r^2)$ ,  $B = \mu_0\mu_e/(4\pi r^3)$ . This can be used to express Eq.(1) in the form

$$V(r) = e^2\mu_0^2\mu_e^2/(16\pi^2 m r^4) - \mu_0\mu_e^2/(4\pi r^3) + e^2/(4\pi\epsilon_0 r). \tag{3}$$

The graph of this function looks like a potential well (Fig.1) with a solid repulsive core of radius

$$r_c = \mu_0 e^2 / (4\pi m) \tag{4}$$

which is obtained by equating the first and the second terms of Eq.(3) and coincides with a classic electron radius, whence the possibility of the existence of bound states follows.

Before we convince ourselves of the reality of this possibility it should be noted that Eq.(3) does not include a term describing exchange interaction. For the considered system this term would be determined by exchange integral  $J$  [3] Owing to the symmetry of the system we can be sure that the sign of  $J$  is obviously determined by the sign of Eq.(3) and coincides with it. Since the sign of  $V(r)$  is negative within the potential well so  $J$  is negative too, and therefore the exchange forces between paired electrons are the ones attractive, i.e. these forces cannot prevent pairing, but quite the reverse, promote it. This spares us the necessity of taking the exchange interaction into account on the first approaching the problem and attempting to see whether the potential well would appear at all.

Now we can use the method of phase functions [5,6] and solve the equation for the arc tangent of the modified partial scattering amplitude of Dirac's radial equation included Eq. (3) as the potential energy:

$$dY/dX = -(U/L)\{\sinh P \cos Y + \exp P \sin Y\}^2 - UL\{(P^{-1}\sinh P - \cosh P)\cos Y + (1+P^{-1})\exp(-P) \sin Y\}^2. \tag{5}$$

Here  $U=V(r)/(Mc^2)$ ,  $X=rMc/\hbar$ ,  $P=\kappa r$ ,  $Y=\text{arctang}_0(r,\kappa)$ ,  $L=\{(1-W^2)/(1+W^2)\}^{1/2}$ ,  $\kappa=(Mc/\hbar)(1+W^2)^{1/2}$ ,  $W=W_0/Mc^2$ ,  $g_0(r,\kappa) = -if_0(r,\kappa)$ ,  $k=i\kappa$ ,  $i=(-1)^{1/2}$ ;  $W_0$  is the bound state energy of the system when the motion of its centre-of-mass was separated;  $f_0(r,\kappa)$  is the partial scattering amplitude without a multiplier  $1/k$ ;  $\hbar$  is Plank constant divided by  $2\pi$ ;  $c$  is the velocity of light. One difficulty connected with singularity of potential  $V(r)$  in this case can be avoided by choosing  $Y(r_c)=0$  as the initial condition. From the view of  $V(r)$  it is clear that the basic change of the phase function can only be within the potential well. As our calculation has an estimated character we can cut the potential at a certain distance  $G$ :  $V(r>G)=0$ .

For the formation of only one bound state it is enough that function  $Y$  reaches the value of  $\pi/2$  within the potential well. We can obtain the numerical solution of Eq. (5) at values  $W \leq 1$ ,  $G=10^{-11}$ m using the Runge-Kutta-Felberg calculational techniques [7]. This solution is shown in Fig. 3a.

The possibility of the coupling becomes clear from the stepped character of the graph. By approximately halving  $V(r)$  we can choose the conditions when only one bound state exists (see Fig. 3b). Parameters of the potential well are thus quite enough to bind electrons at the bond energy close to the rest energy in the centre-of-mass frame. It should be noted that none of the above calculations were created to find wave functions and energies of bound states: this purpose cannot be achieved at the potential energy shown in Fig. 2. These calculations are provided only to answer whether any bound states do exist or not, and the method of phase functions can just do it.

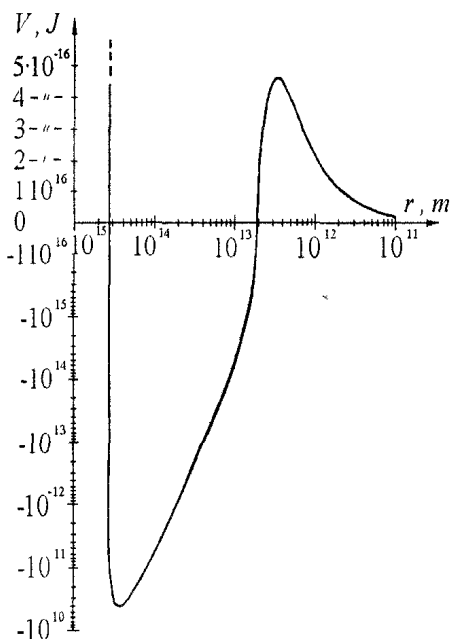


Fig. 2. Potential energy of two electrons with antiparallel spins as a function of a distance between them

Owing to the strong coupling we may expect that electron interaction forces undergo saturation like nuclear ones: paired electrons cannot interact with other charged particles in an ordinary manner. Hence, a proper electric field distribution of the pair must differ from that of free electrons, so that this field seems to be concentrated only into the pair's volume and reduces to vanishing values outside of it.

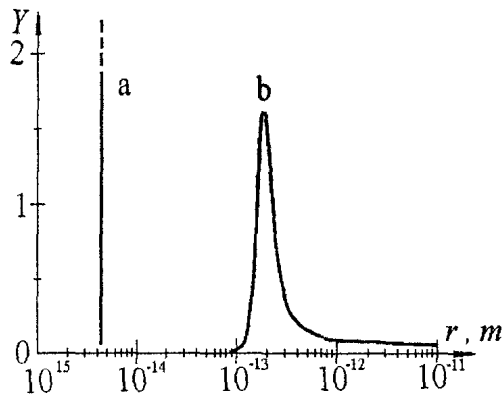


Fig. 3. Results of the solution of Eq. (5) at  $W = 0.999999$ :  
 a) for the initial defined value  $V(r)$ ;  
 b) for the value  $V(r)$  multiplied by 0.4690731335

Since the energy of the pair can change only discretely, the pair loses its normal sensitivity to an external electric field, but does not remain entirely unaffected it. In order to sustain the conditions of existence of the bound state in the presence of the external electric field  $E_e$  this field must be completely compensated near each electron. Compensation can be executed by the intrinsic electric field  $E_i$ , appearing due to the rotation of the pair around its centre-of-mass in the plane orthogonal to the vector  $E_e$  with the angular frequency  $\omega$ , so that  $E_e \perp \omega$ , and also due to the slope of the vectors  $\mu_{e1}$  and  $\mu_{e2}$  to the rotation axis at the angle  $\gamma$ . The velocities of paired electrons are antiparallel at any moment, thus, their fields in the locations of each other have only transversal components. According to the Lorentz transformation at  $v \ll c$ , the magnetostatic field  $B_1'$  (or  $B_2'$ ) produced by the spin magnetic moment  $\mu_{e1}$  (or  $\mu_{e2}$ ) of each electron

in the location of another one is seen by this electron as an additional electric field  $E_{i1} = [v_2 \times B_1'] = [v_1 \times B_2'] = E_{i2} = E_i$  having the same direction for each paired electron ( $v_1 = -v_2$  is the velocity of one electron relative to another one). We can imagine this pair as a rigid system and suppose that all vectors  $\mu_{e1}$ ,  $\mu_{e2}$ ,  $B_1'$ ,  $B_2'$ , and  $E_i$  are situated in the same rotating plane shown in Fig. 4, where  $\omega \uparrow \downarrow E_e$ .

It is worth noting that the question of the sense of rotation (Is  $\omega$  aligned with the external field  $E_e$  or opposed to it) remains open. Perhaps this question can be cleared up in future by using a circularly polarized *rf* electric field. Nevertheless, all results described above and below remain valid at either sense of rotation relative to  $E_e$ .

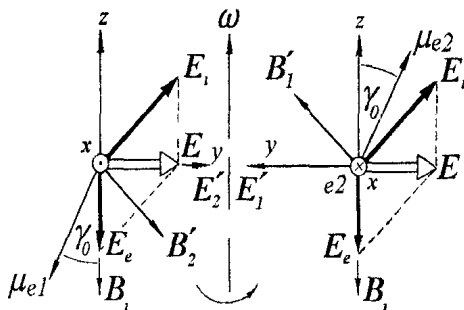


Fig. 4. Intrinsic compensation of the external electric field by the rotation of an electron pair

This rotation may also look like the equivalent precession of the spin magnetic moments  $\mu_{e1}$  and  $\mu_{e2}$  in the additional magnetic field  $B_1 = B_{11} = -c^{-2}[v_2 \times E_1'] = c^{-2}[v_1 \times E_2'] = B_{12}$  created by the electrostatic fields  $E_1'$  and  $E_2'$  of each electron in the location of another one, the more so as the gyromagnetic ratio of this precession is the well known value  $\omega/B_1 = e/m$ .

Consequently each electron is acted upon by the additional electric field  $E = E_i + E_e$ . Assuming the distance between electrons is equal  $r_e$  and using explicit expressions for  $r_e$ ,  $B_{y'}$ , and  $B_{z'}$  one can obtain  $E_{iz} = 2E_{iy} \tan \gamma$ ,

$$E_{iy} = \mu_0 \mu_e \omega \cos \gamma / (4\pi r_e^2) = 4\pi \mu_e m^2 \omega \cos \gamma / (\mu_0 e^4).$$

To compensate the external field  $E_e$  by the component  $E_{iz}$  and to conserve volume energy density it is necessary that  $E_e = E_{iz} = E_{iy} = E$ . It can be achieved at  $\gamma = \arctan(1/2) = \gamma_0$  and

$$\omega = \mu_0 e^4 E_e / (4\pi \mu_e m^2 \cos \gamma_0) \approx 5,50 E_e. \tag{6}$$

So as

$$\gamma_E^{\text{theor}} = \omega / (2\pi E_e) \approx 0,88 \text{ Hz m/V}. \tag{7}$$

This means that the stipulation  $v = \omega r_e \ll c$  is satisfied in a whole range of practically achieved values of  $E_e$ . As a result the external electric field is completely compensated, all forces due to the fields  $B'$ ,  $E'$ ,  $B_1$  are balanced relative to the centre-of-mass, and both paired electrons are only acted upon by the translational force  $eE$ , which causes their equally probable movement in all radial directions lying on the equipotential surface orthogonal to the vector  $E_e$ . Therefore paired electrons push themselves out from the external electric field and at long last seek to occupy such areas where the electric field strength is minimized and best suited to their own stability. This phenomenon can be regarded as an electrical



analogy to the Meissner – Ochsenfeld effect. This particular movement was detected by N.P. Myshkin from observations of decaying electron pairs in the air.

The decay happens under collisions with normal charged particles when paired electrons can find themselves in fields which are capable of influencing the bound state. Then an outer part of the interaction potential may change so that there appears the possibility of a pair tunnelling through the potential barrier, shown in Fig. 1, «from left to right». A reverse tunnelling «from right to left» forms a pair, this becomes possible at high enough values of volume or surface charge density enriched, of course, on metallic points.

Thus, the concept of directly paired electrons gives us the agreed qualitative description of formation, decay, and the strange movement of these structural objects. Besides that it predicts a new resonance phenomenon which can be expected from the above described rotation of a pair in an external electric field. If together with this permanent field one also applies to paired electrons a weak alternating electric field, whose frequency is about the value satisfied in Eq. (7) they cannot remain unaffected by this subjection. Experiments [8] performed on corona discharge in the negative point-to-plane gap clearly show the resonance absorption of *rf* electric field energy at the frequency equal to, or divisible to that of Trichel pulses. Moreover, the initial portion of dependence between resonance values of frequency and of electrostatic field strength in the greater part of the gap is linear, and although it is displaced from zero (this displacement is apt to be caused by space charge and depends on the gap length) it has the same factor of proportionality for different gap lengths. This factor is estimated as

$$\gamma_E^{\text{experim}} = (1,0 \pm 0,2) \text{ Hz m/V} \quad (8)$$

and by analogy with well-known magnetic resonance phenomena can be named as «gyroelectric ratio». This value of Eq. (8) is so close to that predicted by Eq. (7) that it cannot be accidental, so the theory developed above should be treated as being in perfect agreement with the experiment.

Furthermore this experiment also showed the possible multiplicity of energy levels of the pair, because it was found that not only a single resonance with the frequency obeyed to Eq. (6) exists but also the family of resonances whose frequencies were multiples of it.

Because of their unexpectedly subtle properties, bound electrons have been beyond an understandable reality threshold up until now, in spite of numerous observations of them in their indirect manifestations. The considerable complex of such manifestations was investigated by N.P. Myshkin, who could not suspect this, and his work was ahead of its time.

### Conclusions

1. Two electrons with opposing spins are capable of direct pairing by tunnelling through the Coulomb barrier to the region of the dominant values of their spin-spin interaction energy. The most favourable conditions for this pairing are obtained at high surface densities of the negative charge, particularly on metallic points at high negative potentials. The pair dimensions are determined by the geometry of the potential well in electron-electron interaction energy and are about classical electron radius, i.e.  $2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ .

2. The response of the pair to an external permanent electric field is that the pair executes a rotation in the plane which is orthogonal to the vector of the electric field strength. The factor of proportionality («gyroelectric ratio») between the pair rotation frequency and the electric field strength is theoretically estimated by Eq. (7). The rotation of the electron spin magnetic moments brings into existence the additional internal electric field, which completely compensates the external field and causes the translational movement of the centre-of-mass of the pair at right angles to the external electric field, so that the pair tends to be pushed out from this field along the equipotential surface. Such movement is an electrical analogy of the Meissner – Ochsenfeld effect and its indirect evidence was first observed by N.P. Myshkin in 1899.

3. The fundamental experimental proof of the concept of directly paired electrons (DPE) is the phenomenon of resonance absorption of alternating electric field energy by structural products of the corona discharge on the negative point, revealed recently. It occurs at the frequency connected with the permanent electric field strength (at its low values) by the linear dependence. The factor of proportionality in this linear dependence (Eq. (8)) was found to be almost equal to that in Eq. (7). Consequently, experimentally measured frequency of the resonance absorption of the alternating electric field energy is very close to the theoretical frequency of the electron pair rotation in the applied permanent electric field. The

proximity between theoretical and experimental  $\gamma_E$ -values is strong evidence in favour of the presented theory. It means, on the one hand, that directly paired electrons do exist among the structural products formed by the negative corona and on the other hand, that the developed theory describing their behaviour is proved by this experiment.

4. It seems reasonable to say that «selfconcealment» of directly paired electrons impedes estimation of their possible importance in a lot of natural processes and phenomena. Among them first of all appears to be ball lightning whose electrical peculiarities and, in particular, charge confinement, can acquire the most uncontradicted explanation. Inasmuch as the size of the pair is the same order with those of nuclei it will not be unexpected if further studies show the ability of directly paired electrons to take part in «cold» nuclear reactions, which can occur slow and unnoticed in different media, including, possibly, even living matter.

The author is most grateful to Mrs Jean Dauber and Ms. Megan Bick for their help in the preparation of this paper

### References

1. N.P. Myshkin. A Stream of Electricity in the Field of an Electrified Point and Its Action on Dielectric (S. Orgelbrand & Sons Joint-Stock Company Press, Warsaw, 1900). (In Russian).
2. N.P. Myshkin, Zh. Russ. Phys. Khim. Obch. V.31, p.53; p.159; p.241 (1899).
3. L.D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics (Nauka, Moscow, 1979), V.2.
4. A. Messiah, Quantum Mechanics (Nauka, Moscow, 1979), V.2.
5. V.V. Babikov, Method of Phase Functions in Quantum Mechanics (Nauka, Moscow, 1988).
6. F. Calojero, Variable Phase Approach to Potential Scattering (Academic, New York and London, 1967).
7. V.P. Diakonov, Reference Book of Algorithms and Programs on BASIC for Personal Computers (Nauka, Moscow, 1987).
8. B.A. Andrianov, Electric analog of magnetic resonance. Technical Physics Letters – 2000, V.26, issue 3, p.p. 228–230.

*Поступила в редакции 3 апреля 2003 г.*

## SOUND WAVE PROPAGATION ALONG THE WEDGE EDGE

Kh. B. Tolipov

There is given a theoretical research of Rayleigh wave's propagation in an elastic wedge. The dependencies of propagation coefficient got are in good correlation with well-known experimental data. There is given a theoretical research of Rayleigh wave's transformation of surface waves in an elastic wedge. The dependencies of transformation coefficient got are in good correlation with well-known experimental data.

**Formulation.** Let's assume that an elastic media characterized by Lamé constants  $\lambda$ ,  $\mu$  and density  $\rho_0$  fills infinite wedge shaped domain  $\Omega(-\theta_0, \theta_0) = (r \geq 0, -\theta_0 \leq \theta \leq \theta_0, z > 0)$ , where  $z$  – is directed along the wedge edge. Differential equation of particles' movement in absence of volume forces in the form of a vector could be represented in the form:

$$(\lambda + \mu)\text{grad div}U + \mu\Delta U = \rho_0 U'' . \quad (1)$$

Expressing vector potential in terms of 2 scalar functions  $\psi_1$  and  $\psi_2$ , let's express a displacement vector in the form:

$$U = \text{grad } \varphi + \text{rot } \psi_1 k + \text{rot rot } \psi_2 k \quad (2)$$

where  $\varphi$  – scalar potential;  $k$  – unit vector along the  $z$ -axis.

In this case, solution of a vector wave equation is separated for each function  $\psi_1$  and  $\psi_2$ :

$$\Delta \varphi + K_j \varphi = 0, \quad \Delta \psi_j + K_j \psi_j = 0, \quad j = 1, 2, \quad (3)$$

where

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad K_h = \frac{\omega}{C_h},$$

here  $C_l, (C_t)$  – propagation speed of longitudinal and transverse waves,  $\omega$  – angular frequency.

No density condition  $\sigma_{\rho\rho} = \sigma_{\theta z} = \sigma_{\theta\theta} = 0$  is observed on free wedge boundaries  $\theta = \pm\theta_0$ . Let's also assume, that particles' movement starts from a state at rest.

It should be noted that to formulate a problem to a motion equation correctly, there should be boundary conditions, radiation conditions as well as a condition, regulating the behavior of the unknown functions in the vicinity of singular points, close to the edge.

This condition is equivalent to the requirement to observe the law of conservation of energy, and can be given in the following form:

$$U = O(\rho^p), \quad \rho \rightarrow 0$$

**2. Solution of the problem.** Let's study the solutions, corresponding to the harmonic waves running towards axis  $z$  in the form:

$$\varphi = (A_0 \text{ch } \nu_1 \theta + C_0 \text{sh } \nu_1 \theta) H_{\nu_1}^{(1)}(\rho \alpha) \exp i(pz - \omega t), \quad (4)$$

$$\psi_1 = (A_1 \text{ch } \nu_2 \theta + C_1 \text{sh } \nu_2 \theta) H_{\nu_2}^{(1)}(\rho \beta) \exp i(pz - \omega t),$$

where

$$\alpha = \sqrt{p^2 - K_l^2}, \quad \beta = \sqrt{p^2 - K_t^2}, \quad p > 0,$$

here  $p$  – wave number,  $\nu_1$  and  $\nu_2$  – angular wave numbers,  $J_{\nu_1}$  and  $J_{\nu_2}$  – Bessel functions.

Further, factor  $i(z - \omega t)$  is dropped.

Using (2) and Hook's Law for an isotrope body, it better to give tensor tensions' components in terms of wave potentials:

$$\frac{\sigma_{\theta\rho}}{\mu} = \frac{2}{\rho} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \rho \partial \theta} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi_1}{\partial \rho} - \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \theta^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial^3 \psi_2}{\partial \rho \partial \theta \partial z} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \theta \partial z},$$

$$\frac{\sigma_{\alpha z}}{\mu} = \frac{2}{\rho} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta \partial z} - \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \rho \partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^3 \psi_2}{\partial z^2 \partial \theta} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \rho \partial \theta} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^3 \psi_2}{\partial \theta^3} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial^3 \psi_2}{\partial \theta \partial \rho^2}, \quad (5)$$

$$\frac{\sigma_{\theta\theta}}{2\mu} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{K_t^2}{2} \varphi - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \rho^2} - \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \rho \partial z} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^3 \psi_2}{\partial \theta^2 \partial z}$$

Substituting expressions (4) with six constants  $A_0, A_1, A_2, C_0, C_1$  and  $C_2$  into (5) we obtain an algebraic system of six uniform equations to bind  $A_0, A_1, A_2, C_0, C_1$  and  $C_2$ .

This system has solutions corresponding to symmetric and antisymmetric with respect to plane  $\theta = 0$  waves.

A condition of existence of nontrivial solutions of this equation system is that determinant, which is represented in the form of a product  $\Delta_s \cdot \Delta_{as}$ , where  $\Delta_{as}$  corresponds to antisymmetric, and  $\Delta_s$  – to symmetric waves, is equal to zero. This equation has a solution at two independent conditions  $\Delta_s = 0$  and  $\Delta_{as} = 0$ , which determine two different kinds of surface waves. Let's consider the first kind of waves.

**3. Antisymmetric case.** Let's assume, that there are no disturbance oscillations in the vicinity of wave' propagation along  $\rho$  axis. Then, neglecting the derivatives of  $\rho$  coordinate, the equation for this case will have the following form:

$$\frac{(p^2 + \beta^2)^2}{4\alpha\beta p^2} - \left[ \frac{th v_2 \theta}{th v_1 \theta} \right]^b = 0, \quad (6)$$

$$v_1 = \sqrt{p^2 - K_t^2} \cdot \rho, \quad v_2 = \sqrt{p^2 - K_t^2} \cdot \rho$$

It's not difficult to see, that at big values of a wedge angle or a distance to its edge equation (6) transfers into the known Rayleigh equation.

For a complete solution in the boundary angular vicinity, it is necessary to include the condition on the edge:

$$U_\rho = \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \rho \partial z} = const = A, \quad \rho \rightarrow \alpha, \quad (7)$$

where  $A$  – is constant.

Using the result of [5], it's possible to determine the value of displacements' amplitudes.

We'll use Fourier transformation on  $\rho$  coordinate for equation (3) and (5).

Then, the solution of the wave equation, simultaneously satisfying the solution on the edge and boundary conditions, can be given in the form:

$$\tilde{\varphi}(k_r) = \frac{AJ_{v_1}(K_t \rho)}{BJ'_{v_1}(K_t \rho) + iCJ'_{v_2}(K_t \rho)p}, \quad \tilde{\psi}(k_r) = \frac{AJ_{v_2}(K_t \rho)}{BJ'_{v_1}(K_t \rho) + iCJ'_{v_2}(K_t \rho)p},$$

where  $J_\nu(x)$  – Bessel function of the first kind,  $A, B, C$  – constants,  $B$  and  $C$  are interconnected by boundary conditions on the wedge surface, and primes denote derivatives of  $\rho$  coordinate.

Transferring inverse Fourier transformation into a complex plane, we obtain solutions, corresponding to residues in  $p_n$  poles of an integrand expression.

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{ip_n z}, \quad \psi = \sum_{n=0}^{\infty} B_n e^{ip_n z}, \quad (8)$$

where

$$A_n = \frac{J_{v_1}(K_t \rho)}{\left(\frac{\partial^2 J_{v_2}}{\partial \rho \partial p}\right)_{p=p_n}}, \quad B_n = \frac{J_{v_2}(K_t \rho)}{\left(\frac{\partial^2 J_{v_2}}{\partial \rho \partial p}\right)_{p=p_n}}.$$

This solution, called waveguide solution, forms a discrete field spectrum. Values of  $K_t \rho$  roots from the denominator in equation (6) could be called «width» of the waveguide. Values of phase velocity also depend on this parameter and are found from equation (8). Fig. 1 shows distributions of amplitudes of normal waves of the second and sixth order, correspondingly, with wedge angle  $\theta = 15^\circ$ .

Fig. 2 gives angular dependencies of antisymmetric wave's velocity of the second and sixth order.

Discussion of result as the analysis shows, disturbances with a very low velocity can propagate along the wedge edge. With an increase of a wedge angle, the velocity of these disturbances increases, and it's

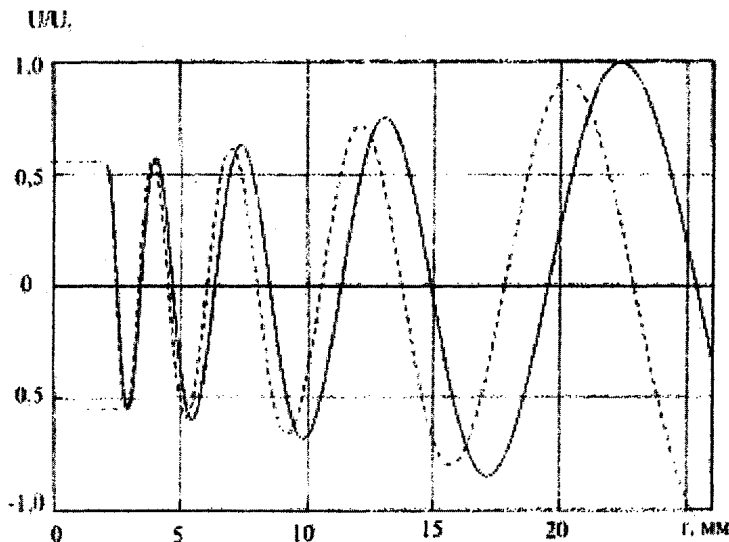


Fig. 1. Amplitudes of normal waves of the second and sixth order, correspondingly, with wedge angle  $\theta = 15^\circ$

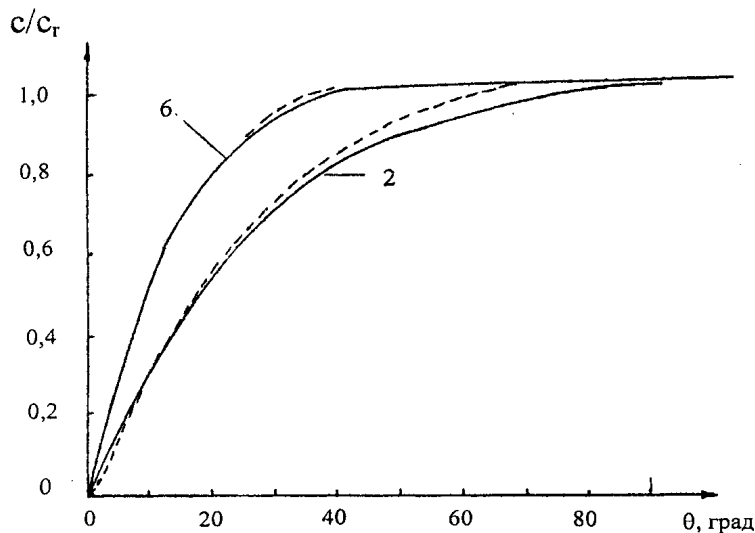


Fig. 2. Angular dependencies of antisymmetric wave's velocity

equal to velocity of Rayleigh wave at angles  $2\theta \geq 90^\circ$ . An increase of velocity of a wave with a wedge angle speaks about an increase of media's toughness, corresponding to a big local wedge thickness.

Propagation of an anti-symmetric wave along the edge takes place in a narrow wave channel. When disturbance diverge from the route of wave propagation into the media there happens a refraction of an antisymmetric wave because of a velocity decrease. As a result, there's observed a turn of rays towards the top of the wedge and, a return of waves to the wave channel. That's why this wave is acoustically stable in a narrow wave channel.

Propagation of a symmetric wave is of another character. Disturbance velocity of wedge media's particles, when approaching the edge increases monotonically up to the velocity of volume waves (see [6]). At a small divergence from the wave's propagation route the velocity of the wave decreases, and the path of disturbances is curving into the media. Thus, this wave is acoustically instable in a wave channel.

### References

1. Kane J., Spence J. Rayleigh wave transmission in elastic wedge // *Geophysics*. – 1963. – V. 28, № 5, pt. 1. – P. 715–723.
2. Budaev B.V., Bogy D.B. Rayleigh wave scattering a wedge // *Wave Motion*, Nov 1996.
3. Budaev B.V., Bogy D.B. Scattering of Rayleigh and Stoneley waves by two adhering elastic wedges // *Wave Motion*, Apr 2001.
4. Budaev B.V., Bogy D.B. Errata to the paper Rayleigh wave scattering by a wedge // *Wave Motion*, Mar 2002.
5. Viktorov I.A. *Physical Principles of the Applications of Rayleigh and Lamb Ultrasonic Waves in Technology*. – Moscow: Nauka, 1966.
6. Tolipov Kh.B. A dynamical problem of the theory of elasticity for angular domains with homogeneous boundary conditions // *J. Appl. Maths Mechs*. – Vol. 57, №.5. – P. 879–885, 1993.

Поступила в редакцию 4 апреля 2003 г

# ЛАЗЕРНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В ФЕРРОМАГНЕТИКЕ ПРИ ТЕПЛОВОМ МЕХАНИЗМЕ

С.Ю. Гуревич, Е.В. Голубев

Дано теоретическое описание процесса лазерной генерации импульсов поверхностных акустических волн в ферромагнетике. Методами численного интегрирования рассчитаны параметры акустических импульсов. Учтена температурная зависимость коэффициента теплового расширения ферромагнетика и конечное значение скорости распространения тепла. Теоретические выводы подтверждаются результатами эксперимента.

При поглощении короткого лазерного импульса в металле возникают акустические волны, которые при малых плотностях энергии обусловлены тепловым расширением [1]. Основные закономерности явления оптической генерации звука при умеренных интенсивностях света хорошо описываются в рамках теории линейной термоупругости [2–4].

В случае, когда в среде происходит фазовый переход или плотность вводимой энергии велика, изменение параметров среды в процессе возбуждения сильно отражается на параметрах всех возбуждаемых акустических волн [5]. Для описания основных особенностей возбуждения в жидкости достаточно учесть температурную зависимость коэффициента теплового расширения (КТР) среды, что приводит к неоднородному волновому уравнению [6, 7].

В ферромагнитных металлах учет изменения КТР позволяет описать зависимость спектра объемных волн от температуры среды [8, 9].

В ограниченных твердых телах, кроме объемных, возбуждаются и поверхностные волны (здесь и далее волны Рэлея, ПАВ). Как показано в [10], доля энергии ПАВ при лазерном возбуждении составляет более половины от энергии всех акустических волн. Кроме того, слабое затухание и малая дисперсия делают их весьма привлекательным средством ультразвукового контроля.

Учет температурной зависимости КТР в расчете параметров акустического поля при термооптическом возбуждении в литературе получил название «тепловая нелинейность» [4]. У ферромагнетиков наибольшее изменение КТР происходит в окрестности точки Кюри. Связано это с фазовым превращением «ферро–парамагнетик». Так, например, у железа при магнитном фазовом переходе коэффициент теплового расширения изменяется в пять раз и более [11, 12].

Данная работа посвящена теоретическому исследованию влияния магнитного фазового перехода на параметры импульсов ПАВ, возбуждаемых в ферромагнетике импульсным лазерным излучением.

Будем предполагать, что поглощение оптического импульса не приводит к фазовым превращениям в материале, сопровождающихся выделением или поглощением энергии. Для описания процесса возбуждения воспользуемся моделью однородного упругого изотропного полупространства с учетом температурной зависимости КТР, изменением остальных параметров с температурой будем пренебрегать.

Степень проявления тепловой нелинейности будем описывать безразмерным параметром

$$q = \max_{0 \leq T \leq \theta} |\alpha_T(T_0 + T) - \alpha_T(T_0)| / \alpha_T(T_0), \quad (1)$$

где  $T$  – отклонение температуры от равновесного значения  $T_0$ ,  $\theta$  – максимальный скачок температуры в полупространстве, обусловленный действием лазерного импульса. При  $q \ll 1$  коэффициент теплового расширения в процессе возбуждения звука практически не меняется и можно пользоваться подходом [2, 13], а при  $q \geq 1$  необходимо учитывать  $\alpha_T(T)$  – температурную зависимость КТР.

Лазерный импульс будем характеризовать распределением интенсивности  $I(r, t)$ , энергией  $W$ , временной  $I_t(t)$  и пространственной  $I_r(r)$  формами:

$$I(r, t) = W I_r(r) I_t(t), \quad (2)$$

где

$$I_r(r) = \exp(-r^2/R_0^2) / \pi R_0^2, \quad I_t(t) = \exp(-t^2/t_0^2) / \sqrt{\pi} t_0.$$

Здесь предполагается, что ось  $z$  направлена по нормали к поверхности вглубь среды,  $r$  – расстояние от оси цилиндрической системы координат,  $t_0$  – длительность лазерного импульса (по критерию  $1/e$ ),  $R_0$  – радиус лазерного пятна на поверхности.

Первый этап задачи о генерации импульсов ПАВ сводится к расчету температурного поля в ферромагнетике. Процесс нагрева в полупространстве при поглощении лазерного импульса является высокоинтенсивным и нестационарным, следовательно, необходимо учесть конечное значение скорости распространения тепла [14, 15]:

$$c_q = \sqrt{\frac{a}{t_r}}, \quad (3)$$

где  $a$  – коэффициент температуропроводности,  $t_r \approx 10^{-11}$  с – время релаксации теплового потока.

Распределение температуры в полупространстве удовлетворяет уравнению [14]

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{c_q^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, \quad (4)$$

где  $T = T(r, z, t)$  – отклонение температуры от равновесного значения.

Будем считать, что поглощение энергии происходит на поверхности полупространства. Решаем уравнение (4) с учетом граничного условия

$$-\lambda_q \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = A \left( I(r, t) + t_r \frac{\partial I(r, t)}{\partial t} \right), \quad (5)$$

где  $A$  – коэффициент поглощения света,  $\lambda_q$  – теплопроводность.

В результате прямого интегрального преобразования Фурье–Бесселя получаем трансформанту температуры в виде

$$\tilde{T}^*(\lambda, z, \omega) = \frac{A \tilde{I}^*(\lambda, \omega)}{2\pi \lambda_q \sqrt{\lambda^2 + i\omega/a - \omega^2/c_q^2}} \exp\left(-z \sqrt{\lambda^2 + i\omega/a - \omega^2/c_q^2}\right), \quad (6)$$

где знак « $\sim$ » означает преобразование Бесселя по пространственной координате  $r$ , а знак « $*$ » – преобразование Фурье по времени  $t$ ;  $\lambda, \omega$  – параметры преобразований.

Обратное преобразование Фурье–Бесселя дает выражение для распределения температуры в полупространстве в виде квадратур:

$$T(r, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \int_0^{\infty} \tilde{T}^*(\lambda, z, \omega) J_0(\lambda r) d\lambda \right] \exp(i\omega t) d\omega, \quad (7)$$

где  $J_0(\lambda r)$  – функция Бесселя первого рода нулевого порядка.

В результате поглощения импульса в ферромагнетике возникают термические источники акустических волн, интенсивность излучения которых зависит от температуры нелинейно. Уравнения акустических волн можно записать через потенциалы [16]:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - \frac{1}{c_1^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = f(r, z, t), \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\Psi}{r^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{1}{c_2^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0, \quad (9)$$

где  $f(r, z, t) = (3-4\gamma^2)\alpha_T(T_0+T) \cdot T(r, z, t)$ ,  $\gamma = c_2/c_1$ ,  $c_1, c_2$  – скорости распространения продольных и поперечных волн соответственно.

Решаем уравнения (8) и (9) методом интегральных преобразований Фурье–Бесселя. Потенциалы  $\Phi$  и  $\Psi$  преобразуются по функциям Бесселя нулевого и первого порядков соответственно.

Выражения для трансформант потенциалов получаем в виде:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}^*(\lambda, z, \omega) = & \left[ B_1 + \int_0^z \tilde{f}^*(\lambda, z, \omega) \exp(-\beta_1 z) dz \right] \exp(\beta_1 z) + \\ & + \left[ B_2 + \int_0^z \tilde{f}^*(\lambda, z, \omega) \exp(\beta_1 z) dz \right] \exp(-\beta_1 z), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\tilde{\Psi}^*(\lambda, z, \omega) = B_3 \exp(-\beta_2 z) + B_4 \exp(\beta_2 z), \quad (11)$$

где  $\beta_1 = \sqrt{\lambda^2 - \omega^2/c_1^2}$ ,  $\beta_2 = \sqrt{\lambda^2 - \omega^2/c_2^2}$ .

Для определения коэффициентов  $B_1, B_2, B_3, B_4$  следует воспользоваться граничными условиями для механических напряжений и условием ограниченности потенциалов на бесконечности:

$$\sigma_{zz}|_{z=0} = \sigma_{rz}|_{z=0} = 0, \quad \Phi|_{z \rightarrow \infty} = \Psi|_{z \rightarrow \infty} = 0. \quad (12)$$

Образы проекций вектора деформации выражаются через преобразованные потенциалы следующим образом:

$$U_r^* = -\lambda \Phi^* - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z}, \quad U_z^* = \frac{\partial \Phi^*}{\partial z} + \lambda \Psi^*. \quad (13)$$

Поверхностные волны определяются деформациями при  $z = 0$ :

$$\tilde{U}_r^*(\lambda, \omega) = -\frac{2\lambda\beta_2(\lambda^2 - \beta_2^2)}{(\lambda^2 + \beta_2^2)^2 - 4\lambda^2\beta_1\beta_2} \int_0^\infty \tilde{f}^*(\lambda, z, \omega) \exp(-\beta_1 z) dz, \quad (14)$$

$$\tilde{U}_z^*(\lambda, \omega) = -\frac{\beta_2^4 - \lambda^4}{(\lambda^2 + \beta_2^2)^2 - 4\lambda^2\beta_1\beta_2} \int_0^\infty \tilde{f}^*(\lambda, z, \omega) \exp(-\beta_1 z) dz. \quad (15)$$

Произведем переход к проекциям вектора деформации с помощью формул обратного преобразования:

$$U_r(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \left[ \int_0^\infty \tilde{U}_r^*(\lambda, \omega) J_1(\lambda r) d\lambda \right] \exp(i\omega t) d\omega, \quad (16)$$

$$U_z(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \left[ \int_0^\infty \tilde{U}_z^*(\lambda, \omega) J_0(\lambda r) d\lambda \right] \exp(i\omega t) d\omega. \quad (17)$$

В точке  $\lambda = \omega/c_R$ , где  $c_R$  – скорость распространения волн Рэлея, трансформанты компонент вектора смещения имеют особенность: полюс первого порядка. Вычет в этой точке [17] определяет поле вектора деформации в волне Рэлея:

$$U_r(r, t) = -\frac{\sqrt{c_2^2 - c_R^2}}{\pi c_2^3 c_R^3 R'} \int_{-\infty}^\infty [J_1(\omega r/c_R) S(\omega)] \exp(i\omega t) d\omega, \quad (18)$$

$$U_z(r, t) = -\frac{(c_2^{-2} - c_R^{-2})^2 - c_R^{-4}}{2\pi R' c_R} \int_{-\infty}^\infty [J_0(\omega r/c_R) S(\omega)] \exp(i\omega t) d\omega, \quad (19)$$

где

$$R' = \frac{1}{\omega^3} \frac{d}{d\lambda} \left[ (\lambda^2 + \beta_2^2)^2 - 4\lambda^2\beta_1\beta_2 \right] \Big|_{\lambda=\omega/c_R} = \text{const},$$

и

$$S(\omega) = \omega^2 \int_0^\infty \tilde{f}^*(\omega/c_R, z, \omega) \exp(-z \frac{\omega}{c_R} \sqrt{1 - c_R^2/c_1^2}) dz \quad (20)$$

– функция, связывающая спектр ПАВ с временной и пространственной формами оптического импульса.

Расчеты по формулам (7), (18), (19) проводили методом численного интегрирования для ферромагнетика – железоникелевого сплава инварного состава 32НКД (точка Кюри 220°C) [18, 19]. На рис. 1 приведена температурная зависимость КТР для данного вещества, полученная экспериментально на dilatометре системы Шевенарда DP №288. В расчетах предполагалось, что длительность лазерного импульса  $t_0 = 15$  нс, энергия оптического импульса полностью поглощается поверхностью ферромагнетика ( $A = 1$ ).

На рис. 2 приведены спектры акустических импульсов для энергии оптического импульса 5 мДж при температуре 27 °C ( $q = 8,8$ ) и 300 °C ( $q = 0,2$ ). Из рисунка видно, что учет тепловой нелинейности приводит к существенному изменению величины спектральных компонент вектора деформации и перераспределению энергии по спектру. Смещение максимума спектра в сторону



больших частот соответствует уменьшению длительности акустического импульса и увеличению эффективности генерации поверхностных акустических волн.

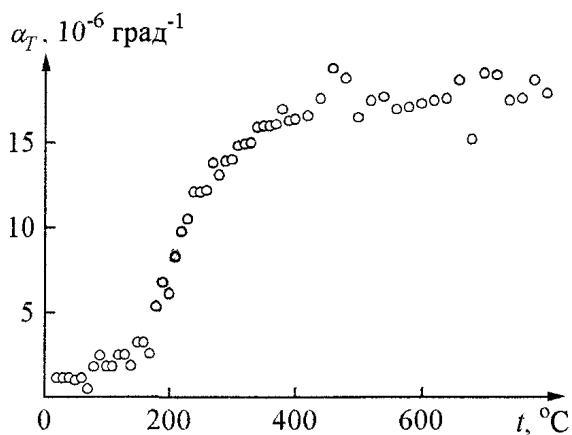


Рис. 1. Зависимость коэффициента теплового расширения сплава 32НҚД от температуры

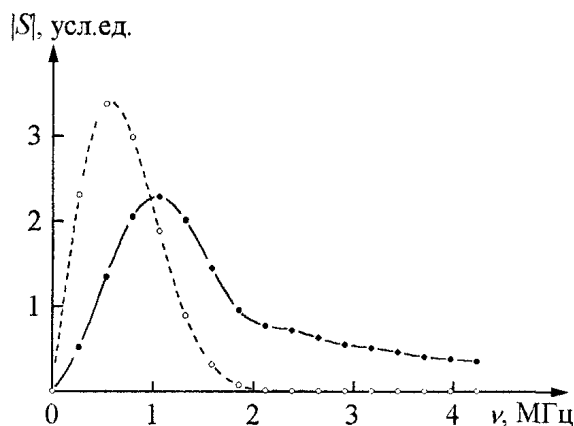


Рис. 2. Спектры смещений в акустическом импульсе при 27 °С (сплошная линия) и 300 °С (пунктир)

Зависимость амплитуды  $U_z$  от величины поглощенного теплового потока при равновесной температуре среды 27 °С представлена на рис. 3. Амплитуда акустического импульса при увеличении поглощенной энергии растет нелинейно и эффективность возбуждения возрастает при уменьшении радиуса лазерного пучка. Форма спектра изменяется от показанной пунктиром на рис. 2 до формы, представленной сплошной линией. Для данных параметров лазерного пучка форма импульсов  $U_r$  от энергии не зависит, амплитуда мала по сравнению с  $U_z$  и прямо пропорциональна энергии оптического импульса.

Температурные зависимости амплитуды, отнесенной к амплитуде при 27 °С, для различных значений интенсивности лазерного излучения представлены на рис. 4. Следует отметить, что уменьшение темпа роста амплитуды с увеличением поглощенной энергии невозможно описать в рамках теории, пренебрегающей изменением параметров среды в процессе лазерного возбуждения акустических импульсов.

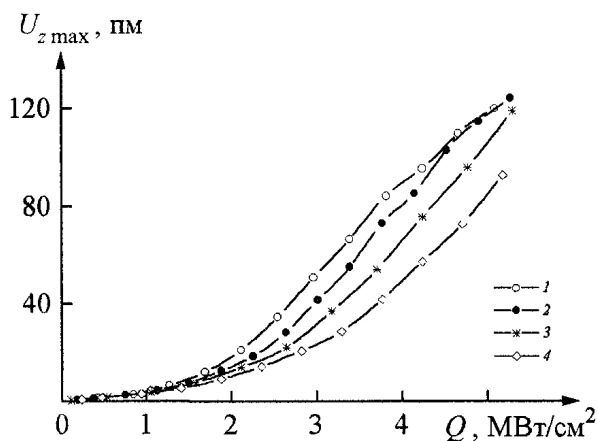


Рис. 3. Зависимость амплитуды нормальной составляющей вектора деформации от интенсивности падающего излучения при различных радиусах лазерного пучка: 1 – 0,5 мм; 2 – 0,75 мм; 3 – 1,0 мм; 4 – 1,5 мм

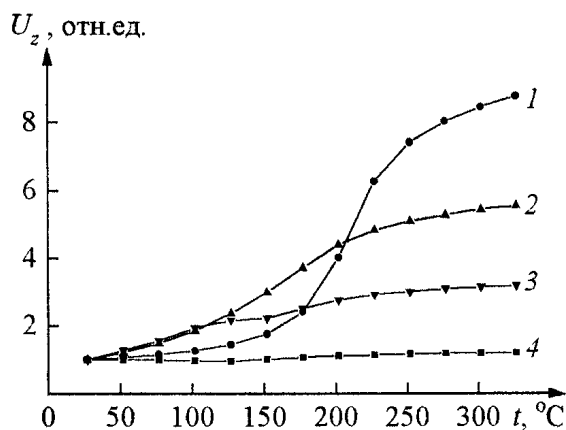


Рис. 4. Зависимость относительной амплитуды от температуры ферромагнетика при различных значениях интенсивности лазерного излучения: 1 – 0,1 МВт/см<sup>2</sup>; 2 – 1,5 МВт/см<sup>2</sup>; 3 – 2,5 МВт/см<sup>2</sup>; 4 – 5 МВт/см<sup>2</sup>

На основе методики численного интегрирования полученных нелинейных уравнений лазерной термооптической генерации звука в твердом теле, рассчитаны временные и спектральные параметры

импульсов ПАВ, возбуждаемых в ферромагнетике инвар. Установлено, что учет изменения КТР в процессе возбуждения приводит к зависимости формы, длительности и спектра импульсов z-составляющих смещений в ПАВ. Проведенные ранее эксперименты [20] подтверждают это. Результаты расчета изменения амплитуды смещений в ПАВ при увеличении температуры образца также подтверждаются экспериментально. В [20] наблюдалось увеличение амплитуды более чем в 3 раза при интенсивности света  $1.2 \text{ МВт/см}^2$  и отсутствие изменения при интенсивности  $50 \text{ МВт/см}^2$ .

Некоторое расхождение теоретических предсказаний формы акустического импульса с наблюдаемой экспериментально связано, возможно, с тем, что не было учтено в расчетах изменение остальных параметров с изменением температуры и со сложностью разрешения в эксперименте временной формы акустического импульса малой амплитуды. Также не были учтены затухание акустических волн в ферромагнетике и дисперсия ПАВ. Изменение коэффициента поглощения оптического излучения в процессе генерации акустических волн также влияет на форму и амплитуду акустических импульсов [21].

В ферромагнетике при увеличении температуры все теплофизические параметры претерпевают изменения. Полученные результаты показывают, что учет только температурной зависимости коэффициента теплового расширения позволяет описать основные особенности лазерного возбуждения импульсов ПАВ.

Авторы благодарны С.В. Рущицу и Д.А. Мирзаеву за полезные замечания, Л.Г. Журавлеву – за помощь в снятии температурной зависимости коэффициента теплового расширения, а также Ю.В. Петрову за помощь при подготовке рукописи статьи к печати.

*Работа выполнена по техническому заданию Министерства образования РФ, номер государственной регистрации 01.200207640 (01.0802Ф), а также при финансовой поддержке Правительства Челябинской области.*

### Литература

1. Лямшев Л.М. Оптико-акустические источники звука // Успехи физических наук. – 1981. – Т.135. – Вып. 4. – С. 637–669.
2. Коломенский Ал.А. Лазерное возбуждение акустических волн в твердом теле при тепловом механизме // Акуст. журн. – 1988. – Т.34. – № 5. – С. 871–878.
3. Лямшев Л.М. Лазерное термооптическое возбуждение звука. – М.: Наука, 1989. – 240 с.
4. Гусев В.Э., Карабутов А.А. Лазерная оптоакустика. – М.: Наука, 1991. – 304 с.
5. Лямшев Л.М., Наугольных К.А. Оптическая генерация звука. Нелинейные эффекты (обзор) // Акуст. журн. – 1981. – № 5. – С.641–668.
6. Бурмистрова Л.В., Карабутов А.А., Руденко О.В., Черепецкая Е.Б. О влиянии тепловой нелинейности на термооптическую генерацию звука // Акуст. журн. – 1979. – № 4. – С.616–619.
7. Дунина Т.А., Егерев С.В., Лямшев Л.М., Наугольных К.А. К нелинейной теории теплового механизма генерации звука лазерным излучением // Акуст. журн. – 1979. – № 4. – С.622–625.
8. Гуревич С.Ю., Петров Ю.В., Прокопьев К.В., Шульгинов А.А. Исследование влияния магнитного фазового перехода на спектр акустических импульсов, возбуждаемых лазерным импульсом в ферромагнетике // Акуст. журн. – 1999. – Т.45. – № 4. – С. 497–501.
9. Гуревич С.Ю., Петров Ю.В., Прокопьев К.В., Шульгинов А.А. Исследование температурной зависимости спектров акустических импульсов, возбуждаемых лучом лазера в ферромагнитных металлах // Дефектоскопия. – 2000. – № 5. – С. 31–35.
10. Крылов В.В., Павлов В.И. Термооптическое возбуждение поверхностных акустических волн в твердом теле // Акуст. журн. – 1982. – Т. 28. – № 6. – С. 836–837.
11. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах: Справочник. – М.:Металлургия, 1989. – 382 с.
12. Новикова С.И. Тепловое расширение твердых тел. – М.: Наука, 1974. 292 с.
13. Коломенский Ал.А., Мазнев А.А. Поверхностные отклики при лазерном воздействии на твердое тело: рэлеевские волны и предвестники // Акуст. журн. – 1990. – Т. 36. – № 3. – С.463–469.
14. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. 599 с.
15. Миркин Л.И. Физические основы обработки материалов лучами лазера. – М: Издательство Московского университета, 1975. – 384 с.
16. Новацкий В. Теория упругости. – М: Мир, 1975. – 872 с.

17. Викторов И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Релея и Лэмба в технике. – М.: Наука, 1966. – 168 с.
18. Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1005 с.
19. Захаров А.И. Физика прецизионных сплавов с особыми тепловыми свойствами. – М.: Металлургия, 1986. – 256 с.
20. Гуревич С.Ю., Петров Ю.В., Голубев Е.В., Хабиров К.Б. Исследование поверхностных акустических волн, возбуждаемых лазерным импульсом в ферромагнетиках при температуре магнитного фазового перехода // Вестник ЮУрГУ. – 2002. – № 3(12). Серия «Математика, физика, химия». – Вып. 2. – С. 71–73.
21. Бондаренко А.Н., Вологдин В.К., Кондратьев А.И. Влияние температурной зависимости коэффициента поглощения на форму акустического импульса при лазерном возбуждении // Акуст. журн. – 1980. – № 6. – С. 828–832.

*Поступила в редакцию 15 апреля 2003 г.*

# ТЕРМООПТИЧЕСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ УПРУГИХ КОЛЕБАНИЙ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛАСТИНАХ

*С.Ю. Гуревич, К.Б. Хабиров*

**В данной работе рассматривается математическая модель, описывающая процесс лазерной генерации волн Лэмба в ферромагнитной металлической пластине. Приведена система уравнений термоупругости с учетом конечного времени релаксации теплового потока.**

Ультразвуковые акустические волны имеют широкий спектр применений: неразрушающий контроль [1] и оценка остаточного ресурса готовых изделий, определение упругих постоянных и других физических характеристик материалов [2, 3]. Ферромагнитные металлы составляют значительную часть материалов, используемых в производстве и научных исследованиях. Большинство изучаемых объектов обладают поверхностями, что позволяет использовать поверхностные акустические волны (волны Рэлея, Лэмба и др.) для получения новых научных данных и выявления дефектов [4]. В настоящее время сильно возросла роль ресурсосберегающих технологий, которые требуют оценки качества изделия на стадии производства. Горячий передел металла осуществляется, в основном, при температуре магнитного фазового перехода (точка Кюри), когда происходит резкое изменение физических параметров металла. При высоких температурах одним из эффективных способов возбуждения ультразвука является бесконтактный метод лазерной генерации. Поверхностные акустические волны возможно возбуждать и принимать на произвольном участке поверхности образца, распределением интенсивности в падающем лазерном пучке можно управлять видом спектра возбуждаемого акустического поля [5], что позволяет получать информацию о разнообразных приповерхностных дефектах [6] и о структуре ферромагнетика.

При поглощении короткого лазерного импульса поверхностным слоем металла, за счет быстрого повышения температуры в зоне облучения, возникают акустические волны. Нагрев металла может быть настолько существенным, что вызовет изменение теплофизических параметров среды, которые определяют характеристики возбуждаемых акустических импульсов. Процесс термоакустического преобразования, в этом случае, становится нелинейным. Решение задачи о термоупругом возбуждении акустических волн в металлах лазерным импульсом хорошо известно [7, 8]. Линейное приближение теории теплового возбуждения звука в твердых телах достаточно хорошо описывает явление для обычных металлов. Особенность задачи о термооптической генерации акустических волн в ферромагнетике состоит в том, что при температуре магнитного фазового перехода (точка Кюри) происходит резкое изменение физических свойств. Как показано в работах [9, 10], учет изменения температурного коэффициента линейного расширения (ТКЛР) ферромагнетика дает определяющий вклад в параметры возбуждаемых объемных акустических волн и волн Рэлея, если температура ферромагнетика близка к точке Кюри. Если ферромагнитный образец представляет собой достаточно тонкую пластину (толщина не более длины акустической волны), то в ней возникает сложное акустическое поле, представляющее собой сумму нормальных колебаний (или мод) - волн Лэмба. Данная работа посвящена построению теоретической модели лазерной генерации волн Лэмба в ферромагнитной пластинке, учитывающей изменение коэффициента линейного расширения в процессе возбуждения акустического поля.

Для определения распределения температуры в неограниченной пластине толщиной  $R$ , рассмотрим симметричную задачу о нагреве пластины толщиной  $2R$ . Согласно [11], уравнение теплопроводности имеет вид:

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} + \frac{a}{c_q^2} \frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial t^2} = a \frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial z^2} \quad (0 < z < 2R), \quad (1)$$

где  $T(z, t)$  – отклонение температуры от равновесного значения,  $a$  – коэффициент температуропроводности,  $c_q$  – скорость распространения тепла.

Граничные условия зададим в виде теплового потока  $q(t)$ , действующего по обе стороны пластины, в приближении  $c_q \rightarrow \infty$

$$\lambda \frac{\partial T(R, t)}{\partial z} + q(t) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T(R, 0)}{\partial z} = 0. \quad (3)$$

Для решения задачи воспользуемся интегральным косинус-преобразованием Фурье:

$$T_c(n, t) = \int_0^R T(z, t) \cos \frac{n\pi z}{R} dz, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

где  $T_c(n, t)$  – образ функции  $T(z, t)$ , удовлетворяющий условию Дирихле.

Переход от образа функции к оригиналу осуществляется по формуле

$$T(z, t) = \frac{1}{R} T_c(0, t) + \frac{2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} T_c(n, t) \cos \frac{n\pi z}{R}. \quad (5)$$

Умножим обе части уравнения (1) на  $\cos \frac{n\pi z}{R}$  и, проинтегрировав от 0 до  $R$ , получим

$$\int_0^R \frac{\partial T(z, t)}{\partial t} \cos \frac{n\pi z}{R} dz = \int_0^R a \frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} \cos \frac{n\pi z}{R} dz. \quad (6)$$

Выражение для частной производной второго порядка выглядит следующим образом

$$\int_0^R \frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} \cos \frac{n\pi z}{R} dz = (-1)^n \frac{dT(R, t)}{dz} - \frac{dT(0, t)}{dz} - \frac{n^2 \pi^2}{R^2} T_c(n, t). \quad (7)$$

Используя граничные условия (2) и (3), получим неоднородное дифференциальное уравнение для определения  $T_c(n, t)$ :

$$\frac{dT_c(n, t)}{dt} + \frac{an^2 \pi^2}{R^2} T_c(n, t) = (-1)^n \frac{a}{\lambda} q(t). \quad (8)$$

Решение этого уравнения имеет вид:

$$T_c(n, t) = \exp\left(-\frac{an^2 \pi^2 t}{R^2}\right) \left[ C(n) + (-1)^n \frac{a}{\lambda} \int_0^t q(\theta) \exp\left(\frac{an^2 \pi^2 \theta}{R^2}\right) d\theta \right]. \quad (9)$$

Для определения постоянной  $C(n)$  воспользуемся начальным условием  $T(z, 0) = f(z)$ :

$$T_c(n, 0) = C(n) = \int_0^R T(z, 0) \cos \frac{n\pi z}{R} dz = \int_0^R f(z) \cos \frac{n\pi z}{R} dz. \quad (10)$$

Следовательно, решение для образа будет иметь вид

$$T_c(n, t) = (-1)^n \frac{a}{\lambda} \int_0^t q(\theta) \exp\left[-\frac{an^2 \pi^2}{R^2}(t - \theta)\right] d\theta + \exp\left(-\frac{an^2 \pi^2 t}{R^2}\right) \int_0^R f(z) \cos \frac{n\pi z}{R} dz. \quad (11)$$

Для удобства перехода к оригиналу по формуле (5) решение (11) перепишем в виде

$$T_c(n, t) = T(0, t) + T_n(n, t), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12)$$

Тогда имеем

$$T_c(n, t) = \int_0^R f(z) dz + \frac{a}{\lambda} \int_0^t q(\theta) d\theta + \exp\left(-\frac{an^2 \pi^2 t}{R^2}\right) \int_0^R f(z) \cos \frac{n\pi z}{R} dz + (-1)^n \frac{a}{\lambda} \int_0^t q(\theta) \exp\left[-\frac{an^2 \pi^2}{R^2}(t - \theta)\right] d\theta. \quad (13)$$

Перейдем от образа функции к ее оригиналу в соответствии с формулой (5)

$$\begin{aligned}
 T(z, t) = & \frac{1}{R} \left\{ \int_0^R f(z) dz + \frac{a}{\lambda} \int_0^t q(\theta) d\theta \right\} + \\
 & + \frac{2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{an^2\pi^2 t}{R^2}\right) \cos\frac{n\pi z}{R} \int_0^R f(z) \cos\frac{n\pi z}{R} dz + \\
 & + \frac{2a}{R\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \cos\frac{n\pi z}{R} \int_0^t q(\theta) \exp\left[-\frac{an^2\pi^2}{R^2}(t-\theta)\right] d\theta.
 \end{aligned} \tag{14}$$

где  $q$  – зависимость теплового потока от времени, которая пропорциональна временной форме распределения интенсивности падающего лазерного импульса.

В результате поглощения оптического импульса в ферромагнетике возникают термические источники акустических волн, интенсивность излучения которых зависит от температуры нелинейно. Составим систему уравнений упругих волн в потенциалах [12]:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - \frac{1}{c_1^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = f(r, z, t), \tag{15}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\Psi}{r^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{1}{c_2^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0, \tag{16}$$

где  $f(r, z, t) = (3 - 4\gamma^2)\alpha_T(T_0 + T) \cdot T(r, z, t)$ ,  $\gamma = c_2/c_1$ ,  $c_1, c_2$  – скорости распространения продольных и поперечных волн соответственно,  $T_0$  – равновесная температура,  $\alpha_T(T)$  – ТКЛР.

Решаем уравнения (15) и (16) методом интегральных преобразований Бесселя. С учетом граничных условий для механических напряжений и условием ограниченности потенциалов на бесконечности:

$$\sigma_{zz}|_{z=0} = \sigma_{rz}|_{z=0} = \sigma_{zz}|_{z=2R} = \sigma_{rz}|_{z=2R} = 0, \Phi|_{r \rightarrow \infty} = \Psi|_{r \rightarrow \infty} = 0. \tag{17}$$

Данная работа посвящена вопросу о нелинейном лазерном возбуждении акустических волн. Поскольку более нагретые участки среды интенсивнее излучают звук, в спектре результирующего акустического поля происходит перераспределение энергии [9, 10]. Так как объемные и поверхностные волны описываются одной системой уравнений динамической термоупругости, следует ожидать для нормальных мод колебаний в ферромагнитной пластине наблюдение подобного эффекта – перераспределение энергии между различными модами при изменении температуры ферромагнетика или при увеличении интенсивности воздействия.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ и Правительства Челябинской области, грант А2003285.*

### Литература

1. Bhardwaj Mahesh C., Stead Gary F. High frequency non – contact ultrasonic analysis of materials: introduction and applications // Proc. SPIE. – 2001. – 4336. – P. 117–128.
2. Dubuis Mark, Moreau Andre, Bussiere Jean F. Ultrasonics velocity measurements during phase transformations in steel using laser ultrasonics // J. Appl. Phys. – 2001. – 89. – № 11. – Pt 1. – P. 6487–6495.
3. Ермолов И.Н. Теория и практика ультразвукового контроля. – М.: Машиностроение, 1981. – 240 с.
4. Викторов И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Рэлея и Лэмба в технике. – М.: Наука, 1966. – 168 с.
5. Clark M., Sharples S.D., Somekh Michael G. Diffractive acoustic elements for laser ultrasonics // J. Acoust. Soc. Amer. – 2000. – 107. – № 6. – P. 3179–3185.
6. Liu Y.-U., Wu T.-T., Lee C.-K. Application of narrow band laser ultrasonics to the nondestructive evaluation of thin bonding layers // J. Acoust. Soc. Amer. – 2002. – 111. – № 6. – P. 2638–2643.
7. Лямшев Л.М. Лазерное термооптическое возбуждение звука. – М.: Наука, 1989. – 240 с.
8. Гусев В.Э., Карабутов А.А. Лазерная оптоакустика. – М.: Наука, 1991. – 304 с.

9. Гуревич С.Ю., Петров Ю.В., Прокопьев К.В., Шульгинов А.А. Исследование влияния магнитного фазового перехода на спектр акустических импульсов, возбуждаемых лазерным импульсом в ферромагнетике // Акуст. журн. – 1999. – Т. 45. – № 4. – С. 497–501.

10. Гуревич С.Ю., Петров Ю.В., Голубев Е.В. Лазерная генерация поверхностных акустических волн в ферромагнетиках вблизи магнитного фазового перехода // Тезисы докладов XXIII Российской школы по проблемам науки и технологий. – Миасс: МСНТ, 2003. – 126 с.

11. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. – 599 с.

12. Новацкий В. Теория упругости. – М: Мир, 1975. – 872 с.

*Поступила в редакцию 20 мая 2003 г.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЗАРЯЖЕННОСТИ ОЗОНИРОВАННОГО ГАЗА ПРИ ТУРБУЛЕНТНОМ РЕЖИМЕ РАБОТЫ ОЗОНАТОРА

*И.М. Курко, В.А. Кузнецов*

В статье предлагается и обосновывается способ использования струи озонированного в барьерном электрическом разряде газа в качестве транспортера зарядов для электростатического генератора Ван-де-Граафа [1].

Экспериментально нами установлено [3], что озонированный в барьерном электрическом разряде газ является носителем отрицательного электричества. Особенно это ощутимо при турбулентном режиме течения газа через разрядный промежуток озонатора. Оценим причины и величину электрического тока из озонатора.

Основным источником электронов в разрядный промежуток барьерного электрического озонатора является обусловленная высокой напряженностью электрического поля автоэлектронная эмиссия в него из металлического электрода.

Напряженность  $E$  электрического поля в разрядном промежутке озонатора изменяется в соответствии с фазами его периодической работы (разряд горит или не горит). Когда разряд не горит,  $E$  во всех точках разрядного промежутка может быть вычислена как  $E=U/d$ , где  $U$  – приложенное напряжение,  $d$  – ширина разрядного промежутка. Эта формула годится при напряженности поля  $E < E_r$ , где  $E_r$  – напряженность пробоя газа. Подсчитанная по методике Фаулера – Нордгейма для таких напряженностей плотность тока автоэлектронной эмиссии ничтожно мала (при традиционных для озонаторов напряжении – порядка 10 кВ и ширине разрядного промежутка – 3 мм).

Поскольку эксперимент показывает у озонированного газа наличие заряда, и формулы для описания автоэлектронной эмиссии считаются проверенными, то приходится предположить, что реально в разрядном промежутке озонатора у поверхности металлического электрода напряженность электрического поля в какие-то моменты времени значительно больше чем  $E_r$ . Когда загорается корона барьерного разряда, разрядный промежуток заполняется низкотемпературной плазмой, проводимость которой практически бесконечна. Падение же напряжения происходит в приэлектродных слоях Дебая (рис. 1), толщина  $L_D$  которых может быть оценена по формуле [2]

$$L_D = \sqrt{\varepsilon_0 k \frac{T}{e^2 n}}, \quad (1)$$

$\varepsilon_0$  – электрическая постоянная;  $T$  – температура газа по Кельвину;  $e$  – заряд электрона;  $k$  – постоянная Больцмана;  $n$  – количество молекул в единице объема газа. При напряжении в 10 кВ толщина слоя Дебая равна  $5,01 \cdot 10^{-7}$  м. При этом напряженность электрического поля в слое Дебая у металлического электрода получается равной  $9,9 \cdot 10^6$  кВ/м. При такой большой электрической напряженности поля в слое Дебая в то время, когда металлический электрод озонатора имеет отрицательный потенциал, автоэлектронная эмиссия будет главной причиной заряжения плазмы отрицательным электричеством. Причем утечка электронов на положительный электрод будет невозможна, так как он защищен стеклянным барьером. Таким образом, наиболее вероятным источником отрицательного заряжения плазменного «тела» является слой Дебая, или ему подобное образование двойного электрического слоя на поверхности металлического электрода озонатора при отрицательном на нем знаке приложенного переменного напряжения.

Так как неизвестны исследования о закономерностях автоэлектронной эмиссии в неравновесную плазму коронного разряда, то для оценки порядка величины плотности электрического тока эмиссии применяем методику Фаулера–Нордгейма. Возможно, применение этих закономерностей при дальнейших исследованиях оправдает себя, так как полученная выше толщина слоя Дебая соизмерима с длиной свободного пробега молекул, то есть условия в нем для эмитируемых электронов можно сравнить с вакуумом.



Расчеты показывают, что плотность тока здесь имеет порядок  $10^{18}$  А/м<sup>2</sup>. Такой большой ток не сохраняется в течение всего времени существования короны, так как приводит к практически мгновенному заряданию плазменного тела отрицательным зарядом и, тем самым, ликвидации слоя Дебая на металлической поверхности 1 (рис. 1) и соответственного возрастания этого слоя на поверхности стеклянного барьера 3 (рис. 1). Этот процесс происходит в самый начальный момент зажигания короны. Заряд же, который получит плазменное тело, может быть определен без расчета тока автоэлектронной эмиссии, а непосредственно как заряд слоя Дебая, то есть как заряд конденсатора с первоначальным значением толщины слоя Дебая. Он же и отдаст затем свой заряд в плазму. Емкость такого конденсатора будет равна

$$C_{Deb} = \frac{\varepsilon_0 S}{L_D}, \quad (2)$$

где  $S$  – площадь электродов озонатора. Заряд слоя Дебая  $q_{Deb}$  находим по формуле

$$q_{Deb} = \frac{U_r C_{Deb}}{2}, \quad (3)$$

где  $U_r$  – напряжение горения разряда в данном разрядном промежутке. Этот заряд уходит в плазму за одно зажигание разряда. В секунду таких порций заряда при частоте переменного тока 50 Гц будет 50. Выноситься же заряда из разрядного промежутка будет только половина. Таким образом, получается, что ток с газом из разрядного промежутка будет равен

$$I = \frac{V_{turb} q_{Deb}}{2L_{can}}, \quad (4)$$

где  $V_{turb}$  – скорость турбулентного потока газа,  $L_{can}$  – длина канала разрядного промежутка. Подсчет по формулам (3) и (4) при скорости потока газа  $V_{turb} = 10$  м/с, и площади электродов озонатора –  $0,1$  м<sup>2</sup> и  $L_{can} = 1,5$  м дает плотность электрического заряда в разрядном промежутке озонатора в отрицательный полупериод работы его металлического электрода равную  $5,69 \cdot 10^{-3}$  к/м<sup>3</sup>, а ток из озонатора 5,5 мА. Это очень существенный ток, поэтому, действительно, барьерные электрические озонаторы с турбулентным режимом течения озонируемого газа можно использовать в качестве источников отрицательного электричества и в качестве транспортера зарядов в генератор статического электричества (генератор Ван-де-Граафа [1]) и для коагуляции аэрозольных положительно заряженных частиц в воздухе.

Предлагается следующая схема применения барьерного электрического озонатора в качестве источника ионов для высоковольтного генератора постоянного тока (рис. 2).

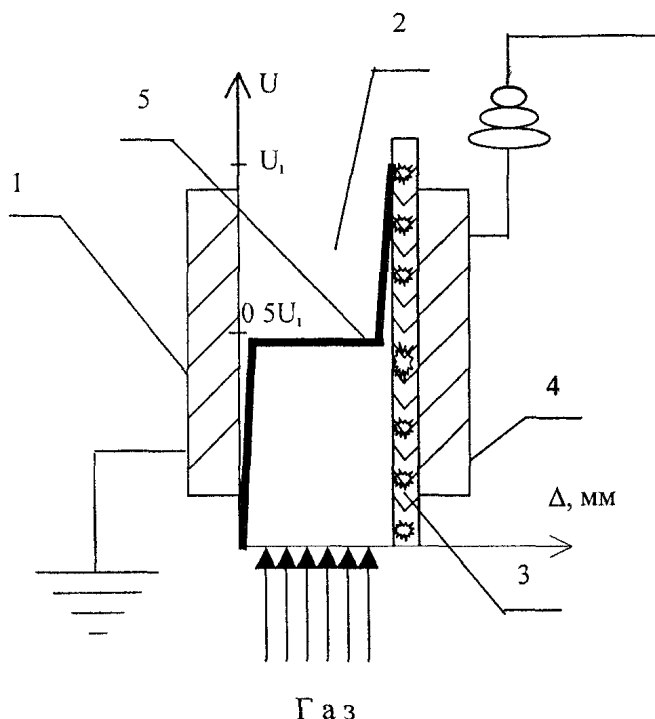


Рис. 1. Изменение потенциала в разрядном промежутке озонатора во время горения разряда:  
1, 4 – металлические электроды;  
2 – разрядный промежуток;  
3 – диэлектрический барьер;  
5 – изменение потенциала по толщине разрядного промежутка

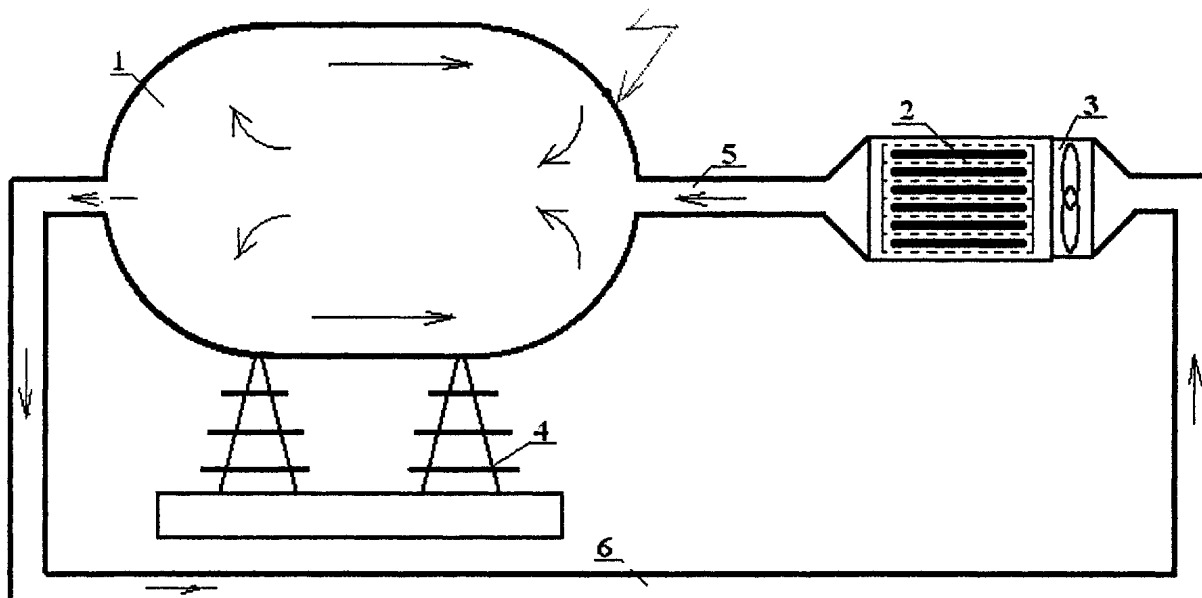


Рис. 2. Генератор Ван-де-Граафа с озонным источником ионов:  
 1 – заряжаемый корпус; 2 – озонатор; 3 – вентилятор высокого давления;  
 4 – изоляторы; 5, 6 – трубы из изоляционного материала

При геометрических размерах установки, соответствующих характерному радиусу корпуса 1 (рис. 2) – 1,4 м, площади электродов озонатора – 0,1 м<sup>2</sup>, толщине разрядного промежутка 3 мм, мощности вентилятора 14 кВт, обеспечивающей скорость течения газа 10 м/с, на корпусе 1 (рис. 2) будет создан рабочий потенциал генератора постоянного тока в 2,5 МВ.

#### Литература

1. Ardenne M. Tabellen der Elektronenphysik, Ionenphysik und Übermikroskopie. – Berlin II, 1956. – 544 s.
2. Физический энциклопедический словарь / Под ред. А.М. Прохорова. – М: Сов. энциклопедия, 1984. – 944 с.
3. Кирко И.М., Кузнецов В.А. Ламинарный и турбулентный режим течения в плазме коронного разряда // Восьмой всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Пермь 23–29 августа 2001 г.): Аннотации докладов. – Екатеринбург: УрО РАН, 2001. – С. 322.

*Поступила в редакцию 25 февраля 2003 г.*

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДВУХФАЗНЫХ СРЕД

О.С. Садаков, С.И. Шульженко

Поведение некоторых двухфазных неупругих сред при повторно-переменном неизотермическом нагружении обладает специфическими особенностями, математическое описание которых феноменологическим путем представляется практически недостижимым. Ниже предложено использовать для этой цели подход, лежащий на грани с онтологическим: формальное моделирование микронеоднородности среды. Этот подход позволяет получить эффективное средство для неупругих расчетов.

1. Известно, что реальные материалы реономны, а наблюдаемые деформации (и вычисляемые напряжения) представляют собой среднее по деформациям и напряжениям в микрообъемах материала. Однако в расчетах принято использовать феноменологическое допущение о сплошной однородной среде, и это вполне оправдывается в большинстве практических задач. Но при моделировании реологических свойств (пластичность, ползучесть), выявляемых опытами при повторно-переменном, непропорциональном, неизотермическом нагружении такой феноменологический подход приводит к непреодоленным пока трудностям. Более реален путь моделирования микронеоднородности, например, на основе структурных моделей, в которых это делается формально, подобно использованию пакета параллельно деформируемых идеально пластических стержней (модель Мазинга).

Простейшее развитие подхода – замена свойства идеальной пластичности на свойство идеальной вязкости. Более того, при моделировании металлов вполне достаточным оказалось принять определяющие функции всех стержней подобными. Это привело к еще большему упрощению анализа и идентификации модели.

Однако названное подобие не оправдывается, если в среде выделяются две (или чуть больше) различных составляющих (например, фаз) с отчетливо различающимися свойствами. К таким средам относятся многие композиционные материалы, пластмассы, некоторые сплавы металлов. Ниже мы постараемся показать, что и эти трудности могут быть преодолены с использованием соответственно модифицированной структурной модели. Для двухфазной среды может использоваться просто параллельное соединение двух базовых моделей с различающимися свойствами. Но для описания особенностей неизотермического нагружения придется ввести дополнительную возможность перехода части структурных составляющих из одного фазового состояния в другое. Это позволит описать не только обычный спектр эффектов деформационной анизотропии, но и хорошо известный эффект температурной памяти материала о предыстории.

2. Расширяющееся применение новых материалов и технологий вызывает необходимость разработки моделей, позволяющих отразить весьма многообразные деформационные свойства различных сред. Как показывает опыт, один из перспективных путей для такого моделирования открывают структурные модели среды. В их основе лежат идея о важной, иногда главной роли микронеоднородности в наблюдаемых сложных эффектах неупругого деформирования конструкционных материалов и идея о том, что эта неоднородность может быть формально отражена в виде конструкционной неоднородности независимо от тех особенностей структуры среды, с которыми она связана. Поведение элементарного объема тела отображается деформированием некоторой конструкции из связанных между собой *подэлементов*. Последние наделяются (феноменологически) весьма простыми реологическими свойствами, но их совместное неодинаковое деформирование образует комплекс существенно более сложных явлений, которые могут быть объединены понятием «деформационная анизотропия». Все они связаны с образованием и эволюцией микронапряжений, вызываемых микропластическими деформациями, являющимися материальными носителями памяти материала о предыстории нагружения. Сюда относятся анизотропное упрочнение при быстром нагружении и при выдержках, циклическая ползучесть и циклическая релаксация, взаимное влияние процессов быстрого неупругого деформирования и пол-

зучести, многие особенности, связанные с непропорциональным и неизотермическим нагружением, и другие. Опыт работы с такими моделями показывает, что они вполне адекватно описывают поведение *металлов*.

3. В модели, разработанной на кафедре ПМиДПМ ЮУрГУ [3] и называемой ниже базовой, предполагается, что элемент объема материала работает подобно набору из  $N$  подэлементов (ПЭ), имеющих одинаковую историю деформирования и температуры, но обладающих различающимися реологическими свойствами и, соответственно, имеющих различные истории напряжений и неупругих деформаций. Напряжение  $\sigma$  элемента объема определяется как среднее по подэлементам (с «весами»):

$$\sigma = \langle \sigma \rangle \equiv \sum \sigma_k g_k, \quad (1)$$

где  $k$  – номер подэлемента,  $g_k$  – его «вес». Деформации подэлементов  $\varepsilon_k$ , равные деформации элемента  $\varepsilon$ , складываются из упругих, неупругих  $p_k$  и тепловых  $\theta_k$  составляющих:

$$\varepsilon = \varepsilon_k = r_k + p_k + \theta_k, \quad (2)$$

причем  $r_k \equiv \sigma_k / E$ ,  $E$  – модуль упругости; неупругая деформация подэлемента  $p_k$  определяется законом идеальной вязкости

$$\dot{p}_k \equiv \frac{dp}{dt} = \Phi_k(r_k, T). \quad (3)$$

Здесь  $\dot{p}_k$  – скорость ползучести подэлемента,  $\Phi_k$  – реологическая функция подэлемента,  $t$  – время,  $T$  – температура. В базовой модели принято подобие реологических функций:

$$\Phi_k(r_k, T) = \Phi(r_k / z_k), \quad (4)$$

где  $\Phi$  – реологическая функция материала,  $z_k$  – коэффициент «прочности». Подэлемент, у которого значение  $z_k = 2$ , в среднем имеет вдвое большее напряжение, чем «средний» (ПЭ, имеющий значение  $z_k$ , равное единице).

Из подобия (4) следует подобие диаграмм деформирования подэлементов (при нагружении с постоянной скоростью деформации  $\dot{\varepsilon} = c$ ) для различных ПЭ и при различных значениях скорости  $c$ . С этим связано и подобие диаграмм деформирования материала при различных значениях скорости деформации. Более того, из независимости от температуры постоянных  $g_k, z_k$  (определяющих в совокупности плотность распределения параметров «прочности» между ПЭ) следует, что диаграммы деформирования материала практически подобны при различных значениях температуры. Таким образом, осуществляется так называемая «слабая» зависимость реологических свойств от температуры – через температурную зависимость характеристик материала. Названное подобие реологических функций ПЭ обусловило предельную простоту базовой модели и удобство работы с ней.

Однако при переходе к другим конструкционным материалам, в частности, к пластмассам, обнаруживается необходимость отказа от упомянутого подобия. Анализ экспериментов [1, 2] показывает, что, например, термопласты обладают весьма выраженной неоднородностью реологических свойств своих составляющих и для их моделирования следует использовать как минимум две неподобные реологические функции.

Заметим, что реологические модели пластмасс пока совершенно недостаточно разработаны. Технические теории ползучести непригодны для циклического неизотермического нагружения; модели наследственного типа идеализируют забывание предыстории нагружения и температуры, что совершенно не отвечает свойствам термопластов, обладающих, в частности, известным свойством: температурной памятью формы.

4. В случае *изотермического* нагружения простейший путь моделирования двухфазной среды – использовать параллельное деформирование двух базовых моделей, реологические функции которых существенно различаются. Будем считать, что каждый подэлемент относится к одной из двух фаз,  $I$  или  $II$ ; относительные «веса» фаз равны  $G_I$  и  $G_{II}$ . Осреднение по подэлементам производится по формуле

$$\sigma = \langle \sigma_k \rangle \equiv \sigma_I G_I + \sigma_{II} G_{II}; \quad \sigma_I \equiv \sum \sigma_k g_k, \quad \sigma_{II} \equiv \sum \sigma_m g_m, \quad G_I + G_{II} = 1, \quad (5)$$

индексы  $k$  относятся к подэлементам фазы  $I$ ,  $m$  – фазы  $II$ .

5. Наиболее контрастной и, соответственно, удобной для анализа является ситуация, когда одна из фаз реономна, другая – склерономна, то есть состоит из идеально пластических подэлементов. Такая модель обнаруживает специфический комплекс свойств, не присущих ни вязкой, ни склерономной базовой модели.

Пусть реологическая функция первой (вязкой) фазы описывается законом Нортон ( $\Phi(x) = Ax^n$ ); тогда диаграммы начального деформирования этой фазы  $\sigma_I(\varepsilon)$  при различных значениях постоянной скорости деформации  $\dot{\varepsilon} = c_i$  являются центрально подобными:

$$\sigma_I = f_{I1}(\varepsilon) = k_{y1} f_{I1}(\varepsilon/k_{y1}), \quad k_{y1} = (c_i/c_j)^{1/n}. \quad (6)$$

Для второй, пластической, фазы скорость деформирования не играет роли; диаграмма деформирования при любой скорости одинакова:

$$\sigma_{II} = f_{II}(\varepsilon). \quad (7)$$

Диаграмма деформирования модели в целом при  $\dot{\varepsilon} = c_i$  представляет сумму (5) диаграмм каждой из фаз:

$$\sigma = f_i(\varepsilon) = G_I f_{I1}(\varepsilon) + G_{II} f_{II}(\varepsilon). \quad (8)$$

Естественно, подобия диаграмм с различными значениями  $\dot{\varepsilon}$  здесь нет. Ползучесть и релаксация протекают только в ПЭ I фазы и являются ограниченными: напряжение в этой фазе может релаксировать до нуля, но  $\sigma_{II}$  не изменяется во времени, а зависит только от деформации.

6. Сказанное позволяет решить проблему идентификации двухфазной модели. Экстраполируя кривые деформирования двухфазной среды при постоянных значениях скорости  $\dot{\varepsilon}$  на нулевое значение  $\dot{\varepsilon}$ , можно получить диаграмму  $G_{II} f_{II}(\varepsilon)$  и, вычитая ее из исходных кривых, выделить серию диаграмм вязкой фазы (6), умноженных на вес  $G_I$ . Для примера на рис. 1 для гипотетического материала ( $n=2, G_I=0,4$ ) показаны диаграммы деформирования (1, 2, 3)  $f_i(\varepsilon)$ . Кривая 4 – диаграмма деформирования пластической фазы (7). Здесь скорости деформирования равны  $c, 4c, 9c$  (коэффициенты подобия – 2 и 3). На рис. 2 показаны диаграммы деформирования вязкой фазы. Как видим, сопоставляя диаграммы (5), можно определить показатель функции Нортон. Множитель  $A$  этой функции для «среднего» подэлемента ( $z_c = 1$ ) найдется по асимптотическому значению напряжения  $\sigma_I$ . Определение параметров  $z_k, g_k$  для пластической фазы производится по кривой  $f_{II}(\varepsilon)$  стандартным для базовой модели образом. Определение параметров  $z_k, g_k$  (удовлетворяющих нормирующим требованиям  $\sum g_k = 1, \sum z_k g_k = 1$ ) при невысоких показателях степени  $n$  в отличие от работы с металлическими сплавами представляет существенно более трудную задачу. Если, как чаще всего бывает, высокая точность не нужна, эти параметры можно найти обычным подбором.

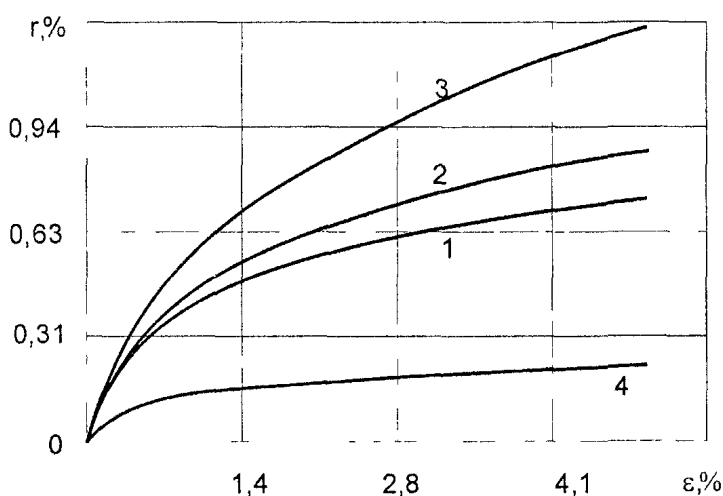


Рис. 1. Диаграммы деформирования (1, 2, 3) материала с различными скоростями  $c$ .  
4 – диаграмма деформирования пластической фазы

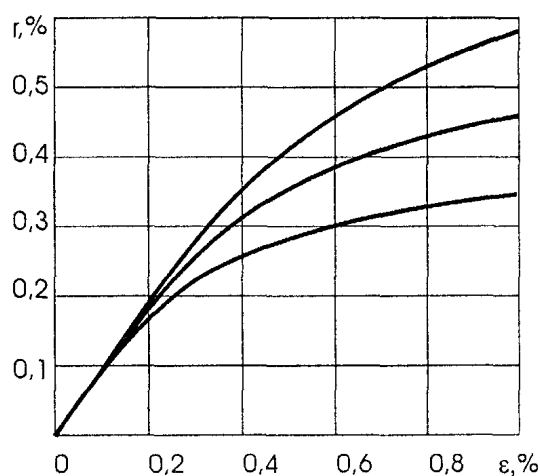


Рис. 2. Диаграммы деформирования пластической фазы при различных скоростях  $\varepsilon$ :  
1)  $\dot{\varepsilon} = c$ , 2)  $\dot{\varepsilon} = 4c$ , 3)  $\dot{\varepsilon} = 9c$ .

7. Наиболее актуальным для двухфазных сред является моделирование особенностей неизо-термического нагружения, и здесь ситуация оказывается существенно сложнее, чем в базовой модели. Для моделирования «сильного» влияния температуры на реологические свойства среды и, в частности, для отражения эффекта температурной памяти формы в модель следует ввести возможность перехода подэлементов из одной фазы в другую. Впервые подобная модель была предложена в работе [2], где использовалась структурная модель с «температурными тормозами». Каждый ПЭ имеет свою константу – «температуру стеклования»  $T_{ck}$ ; те ПЭ, у которых она выше текущего значения температуры, имеют нулевую скорость ползучести. Изменение деформации в них сопровождается изменением напряжения ( $\Delta\sigma_k = E\Delta\varepsilon$ ). Остальные ПЭ не сопротивляются деформированию, напряжение в них равно нулю, а неупругая деформация равна полной  $\varepsilon$ . Количество подэлементов, находящихся в первой и второй фазах изменяется при изменении текущей температуры  $T$ . В работе [1] иллюстрируется эффект памяти формы, отражаемый такой моделью. Однако в остальном (в частности, при изотермическом нагружении) деформационные свойства такой модели довольно примитивны (линейная упругость с модулем, зависящим от температуры).

Очевидно, более корректна модель, сочетающая названные свойства, связанные с переходом ПЭ из одной фазы в другую, и свойства изотермической двухфазной модели, описанной в п.3. В частности, в первом приближении можно использовать контрастную модель с идеально пластической и идеально вязкой фазами (п.4). Модель упростится, если считать что «веса» и коэффициенты «прочности» не изменяются при фазовом переходе.

8. Итак, полагаем, что элементарный объем среды работает подобно пакету подэлементов, имеющих одинаковые истории деформации и температуры. Деформацию делим на упругую, неупругую и тепловую составляющие; последние в первом приближении примем одинаковыми во всех ПЭ. Модуль упругости примем также одинаковым во всех ПЭ и зависящим от температуры. Каждый ПЭ имеет свой индивидуальный набор двух констант: температуры «стеклования»  $T_c$  и параметра «прочности»  $z$ .

Реологические свойства  $k$ -го подэлемента имеют вид

$$\dot{\rho}_k = \begin{cases} A(T)(r_k / z_k)^{n(T)} & \text{при } T_{ck} < T \\ \dot{\varepsilon}_F H(|r_k| - r_{Tk}) H(r_k \dot{\varepsilon}_F) & \text{при } T_{ck} > T. \end{cases} \quad (9)$$

Здесь  $\varepsilon_p = \varepsilon - \alpha T$  – «силовая» деформация (сумма упругой и неупругой),  $\alpha$  – коэффициент теплового расширения,  $H$  – функция Хевисайда ( $H(x) = 0$  при  $x < 0$ , иначе  $H(x) = 1$ );  $r_k = \sigma_k / E(T)$ ;  $r_{Tk}$  – предельная упругая деформация в склерономном состоянии ПЭ. При любом значении температуры часть ПЭ являются пластическими ( $T_{ck} > T$ ), остальные – вязкими ( $T_{ck} < T$ ). С ростом температуры пластичных ПЭ становится меньше, так как часть ПЭ первой группы переходит во вторую и материал становится более вязким. Полагаем, что более «прочные» ПЭ и после перехода в другую группу останутся такими же «прочными», поэтому принимаем  $r_{Tk} = z_k r_b(T)$ . Для определенности в качестве реологической функции здесь принимаем закон Нортон. Напряжения элемента объема определяем, используя обычное осреднение (1).

9. Характеристическими функциями материала в данной модели являются функции одного аргумента  $E(T)$ ,  $r_b(T)$ ,  $\alpha(T)$ ,  $A(T)$ ,  $n(T)$  и функция плотности распределения параметров разброса свойств ПЭ  $\gamma(z, T_c)$ . Эта функция двух аргументов, с одной стороны, сильнее всего влияет на качественные закономерности поведения модели и, с другой стороны, в наибольшей степени затрудняет идентификацию модели. Если остальные характеристические функции можно найти из изотермических испытаний при ряде значений температур (модель при этом практически не отличается от рассмотренной в п. 4), то для этой функции пока остается лишь путь подбора. Как для любой феноменологической модели, следует ввести гипотезу о характере функции и затем ее проверить экспериментально.

10. Если речь идет о термопластах, то ситуация несколько упрощается тем, что диапазон рабочих температур  $T_c \leq T \leq T_b$  для этих материалов достаточно узок, а значения  $T_c$ , выходящие за этот диапазон, не играют роли (достаточно знать, что  $T_c > T_b$  и ПЭ никогда не становится вязким

или, наоборот,  $T_c < T_a$  и ПЭ всегда реономен). Поэтому линии уровня плотности распределения  $y(z, T_c)$  на множестве аргументов  $z, T_c$  могут быть приняты в первом приближении прямыми и, для простоты, параллельными (рис.3, штриховые линии). Функция плотности распределения имеет вид

$$y(z, T_c) = f(x_1), \quad x_1 = z - k_1 T_c, \quad (10)$$

где  $k_1$  – константа материала. На рис. 4 показан возможный характер этой функции.

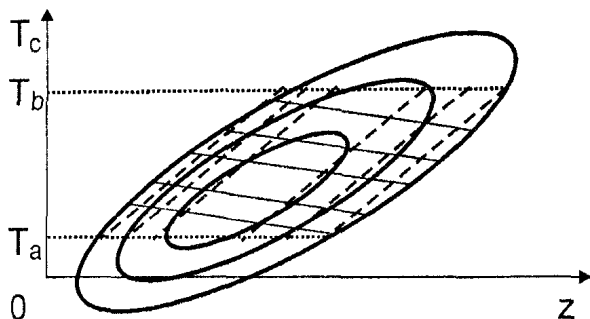


Рис. 3. Линии уровня функции распределения  $y(z, T_c)$ .

Пунктирные линии –  $z - k_1 T_c = \text{const}$ ,  
сплошные линии –  $T_c - k_2 z = \text{const}$

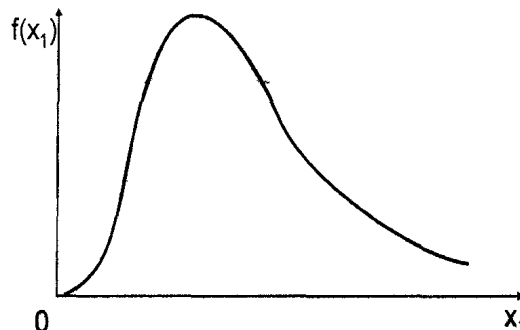


Рис. 4. Функция распределения параметров разброса свойств подэлементов

11. Расчеты удобно вести для каждого ПЭ в отдельности, для чего функция (10) должна быть дискретизирована. На плоскости  $\{z, T_c\}$  выбираем  $N$  точек – например, на пересечении двух семейств линий  $z - k_1 T_c = \text{const}$  и  $T_c - k_2 z = \text{const}$ . Коэффициент  $k_2$  выбирают так, чтобы при возрастании температуры ПЭ переходили в вязкую фазу поодиночке (при  $k_2 = 0$   $x_2 = T_c$  и группы ПЭ, имеющие одинаковые значения  $T_c$ , меняют фазу одновременно); каждая точка определяет параметры  $z_k, T_{ck}$  одного ПЭ, а его «вес»  $g_k$  зависит от значения  $z - k_1 T_c$  в соответствии с выбранной функцией (10). Значения  $g_k$  нормируются таким образом, чтобы сумма всех «весов» была равна единице. Тогда, в частности, модуль Юнга  $E(T)$  может определяться по начальному наклону кривой деформирования при данной температуре.

12. Отметим в заключение, что сказанное не решает проблему идентификации предлагаемой «неизотермической» модели, а лишь обрисовывает возможные подходы к этой проблеме. Идентификация и верификация модели могут быть произведены только в сочетании расчетов и экспериментов.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 01-01-96416).*

#### Литература

1. Асташкин В.М., Ершов А.Л., Пазушан В.А., Садаков О.С. Моделирование реологических свойств полимеров на основе структурной модели среды // Известия вузов. Строительство. – 1995. – № 11. – С. 48–53.
2. Асташкин В.М., Лихолетов В.В. Формирование остаточных напряжений в пластмассовых элементах конструкций при теплосменах в условиях стесненной деформации // Известия вузов. Строительство и архитектура. – 1985. – № 10. – С. 128–131.
3. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Пластичность и ползучесть элементов конструкций при повторных нагружениях. – М.: Машиностроение. – 1984. – 256 с.
4. Асташкин В.М., Ершов А.Л., Садаков О.С. Структурная модель деформационных свойств поливинилхлорида при повторно-переменном неизотермическом нагружении // Известия вузов. Строительство. – 1997. – № 6. – С. 143–148.

Поступила в редакцию 17 апреля 2003 г.

## О КОРРЕКТНОСТИ РЕШЕНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ ПАКЕТОМ МКЭ

О.С. Садаков, А.А. Шапиро

Концепция пренебрежимой малости смещений, поворотов и деформаций, которая позволяет ограничиться геометрически линейной постановкой задачи, значительно облегчает расчеты в механике деформируемого тела, но в ряде актуальных задач ведет к серьезным ошибкам. Так, учет геометрической нелинейности необходим для описания деформирования конструкций из высокоэластичных материалов, конструкций из тонких оболочек, для расчета процессов, связанных с большими пластическими деформациями.

Во многих интенсивно развивающихся в последнее время пакетах программ, основанных на методе конечных элементов, заявлена возможность решения геометрически нелинейных задач. Однако известно, что далеко не всегда решение оказывается корректным. В силу значительной сложности проблемы теорию конечных деформаций нельзя назвать законченной; используемые в пакетах теоретические работы, посвященные учету геометрической нелинейности, как правило, корректны лишь в частных случаях, хотя в документации часто декларируются их более широкие возможности.

Ниже предлагается простая тестовая задача, позволяющая оценить корректность соотношений, используемых тем или иным пакетом для геометрически нелинейной задачи. С ее помощью расчетчик может проверить используемый им программный продукт. Приведен иллюстративный пример с пакетом ANSYS.

1. Рассмотрим состояние однородной деформации (дисторсии). При этом любое семейство прямых равноотстоящих параллельных волокон переходит в новое положение, оставаясь семейством прямых равноотстоящих параллельных волокон. Это преобразование линейно и характеризуется тензором дисторсии  $F$ :

$$l = F \cdot l_0. \quad (1)$$

Здесь вектор  $l$  определяет текущее положение произвольного волокна,  $l_0$  – его начальное положение, точкой здесь и далее обозначено скалярное произведение.

Иногда удобнее работать с другим тензором, также характеризующим дисторсию:

$$D = F - I, \quad (2)$$

где  $I$  – тензор тождественного преобразования (единичный). Тензор  $D$  определяет линейную зависимость «изменения» волокна от  $l_0$ :

$$\Delta l \equiv l - l_0 = D \cdot l_0. \quad (3)$$

Ограничимся для простоты рассмотрением плоского деформированного состояния. Тензор однородной плоской дисторсии однозначно определяется относительным смещением трех точек. Поэтому для анализа кинетики деформированного состояния удобно рассмотреть треугольный изопараметрический конечный элемент (рис. 1).

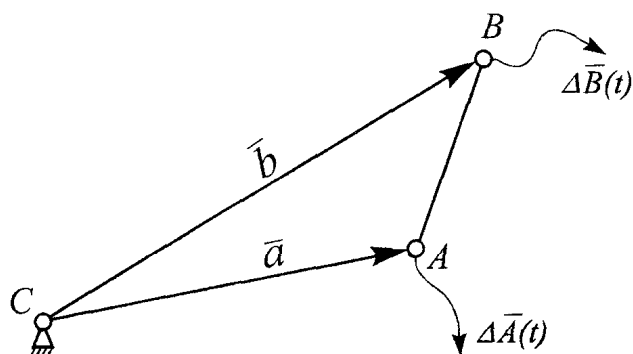


Рис. 1. Эволюция треугольного элемента

Закрепив узел  $C$ , будем задавать перемещения узлов  $A$  и  $B$  и тем самым деформировать треугольник, сохраняя следующее свойство: обход вершин  $A, B, C$  должен в любой момент времени  $t$  осуществляться против часовой стрелки. В конечный момент деформирования возвратим треугольник в исходное положение; конечная деформация будет нулевой.

2. Для определения текущей дисторсии достаточно, кроме начального положения двух волокон (сторон треугольника  $a_0, b_0$ ),



знать их текущее положение  $(a, b)$ . Тензор  $D$  линейно связан с изменениями  $\Delta a = a - a_0$  и  $\Delta b = b - b_0$ . Если  $\Delta b = 0$ , то тензор  $D$  представляет собой диаду (обозначим ее  $cd$ ), при этом

$$D \cdot b_0 = cd \cdot b_0 = 0. \quad (4)$$

Введем векторы  $a' = \mathcal{E} \cdot a_0$ ,  $b' = \mathcal{E} \cdot b_0$ , где  $\mathcal{E}$  – тензор поворота на угол  $\pi/2$ ; в декартовом базисе с ортами  $e_1, e_2$  он равен  $e_2 e_1 - e_1 e_2$ . Из условия (4) вектор  $d$  можно принять равным  $b'$ . Второй вектор диады  $c$  найдем из условия

$$D \cdot a_0 = cd \cdot a_0 = \Delta a. \quad (5)$$

Получим  $D = \Delta a b' / b' \cdot a_0$ . Из упомянутой линейности найдем, что в общем случае, когда  $\Delta b \neq 0$ ,

$$D = \frac{\Delta b a' - \Delta a b'}{a_0 \cdot \mathcal{E} \cdot b_0} \quad (6)$$

(здесь учтено, что  $x \cdot \mathcal{E} \cdot y = -y \cdot \mathcal{E} \cdot x$ ).

Зная тензор  $F = I + D$ , нетрудно решить, например, следующую задачу факторизации:

$$F = R \cdot U, \quad (7)$$

где  $U$  – симметричный, а  $R$  – ортогональный тензоры.

В соответствии с выражением (7) предполагается (вполне произвольно), что переход конечного элемента в текущее состояние производился вначале деформированием (тензор  $U$ ), а затем жестким поворотом, характеризуемым тензором  $R$ . Тензор  $U$  называют тензором коэффициентов длины, он равен  $I + \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  – обычный тензор деформации, определяющий  $\Delta l = \varepsilon \cdot l_0$  при отсутствии поворота как жесткого целого, то есть при неподвижных главных волокнах. Зная тензор  $U$ , нетрудно найти тензор логарифмической деформации (тензор Генки)  $e$ :

$$e = \ln U. \quad (8)$$

Таким образом, задав кинематическое нагружение конечного элемента с помощью двух замкнутых траекторий  $\Delta \bar{A}(t)$  и  $\Delta \bar{B}(t)$ , в любой момент истории нагружения и в любом порядке (не обязательно хронологическом) можно найти тензоры  $R, U, \varepsilon, e$ . В рассматриваемом случае плоского деформирования по  $R$  нетрудно найти и угол  $\varphi$  поворота элемента как жесткого целого. Для этого достаточно знать две координаты:  $R_{11} = \cos \varphi$  и  $R_{21} = \sin \varphi$ .

3. Для примера было произведено тестирование пакета ANSYS 6.1 (разработчик – ANSYS Inc). Данный программный продукт является бесспорным лидером, как по количеству зарегистрированных пользователей, так и по заявленным возможностям. Открытая архитектура ANSYS и достаточно полная документация [1], содержащая теоретическое описание используемых методов [2, 3] делает этот пакет удобным объектом для проведения такого теста.

Процедура расчета кинетики деформирования треугольника Triangle представлена на листинге 1. Описание алгоритма расчета выполнено при помощи так называемого алгоритмического «языка» – псевдокода, который легко переводится на любой язык программирования.

Здесь использована некоторая модификация псевдокода, предложенного Дэвидом Роджерсом [4]. Описанная процедура была реализована авторами статьи в пакетах компьютерной алгебры Maple и MathCAD.

Была рассмотрена замкнутая траектория деформирования треугольника, имеющая три этапа (рис. 2): 0–1, 1–2 и 2–0. Каждый этап разбит на 10...100 шагов, и тензоры деформации вычисляли на каждом шаге. Их сравнивали с данными, полученными из аналогичного расчета в пакете ANSYS (листинг 2). На рис. 3, 4 показаны результаты сравнения величин максимальной логарифмической деформации  $e_1$  и разности  $e_1 - e_2$ , в какой-то

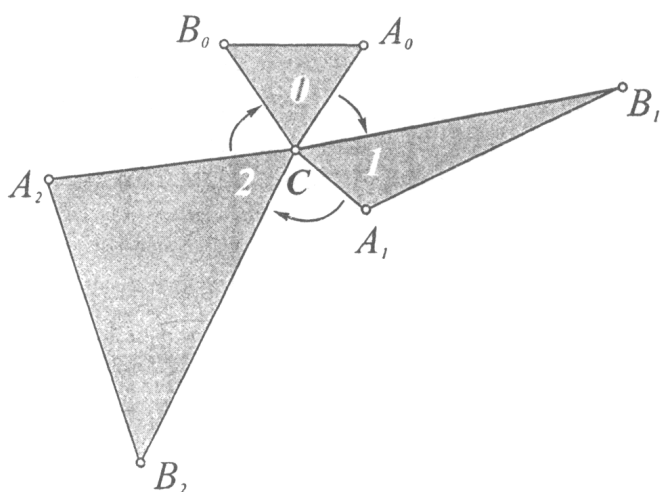


Рис. 2. История деформирования конечного элемента. Конфигурации в моменты времени 0 и 3 совпадают

мере характеризующей интенсивность сдвига. Видно, что лишь в течение четверти первого этапа результаты совпадают, далее ANSYS сильно завышает деформации и при возвращении элемента в начальное положение (дисторсия становится нулевой) накопленная ошибка не исчезает.

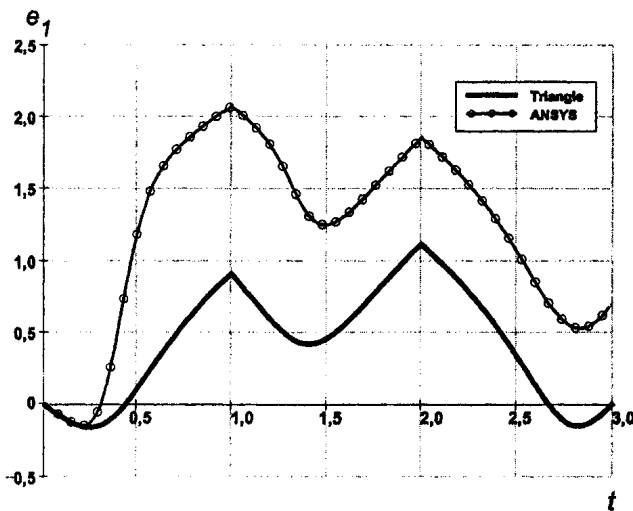


Рис. 3. Зависимость первой главной логарифмической деформации от времени, рассчитанная при помощи процедуры Triangle и пакета ANSYS

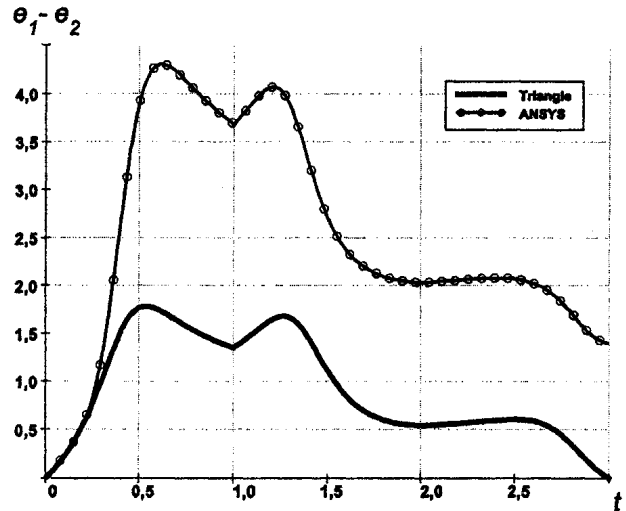


Рис. 4. Зависимость разности главных логарифмических деформаций от времени, рассчитанная при помощи процедуры Triangle и пакета ANSYS

В заключение сделаем два замечания. Во-первых, предложенный пример довольно жесткий: элемент испытывает одновременно большие сдвиговые деформации и поворот на 360 градусов. Известно, что такой случай рассчитывается имеющимися на сегодняшний день методами с наибольшей погрешностью. Во-вторых, авторы статьи не готовы предложить корректный алгоритм для решения краевых задач в терминах конечных деформаций и не хотели бы заниматься неконструктивной критикой используемых методов расчета. Надеемся, что предложенная схема может оказаться полезной расчетчикам для оценки достоверности получаемых ими результатов. По-видимому, более детальный анализ по предложенной схеме может помочь определить примерные границы области корректного применения тех или иных пакетов.

Листинг 1

Псевдокод процедуры расчета кинетики деформирования Triangle

$N$  – число моментов времени, в которые производится расчет текущего состояния.

$\{a\}_k, \{b\}_k^*$  – векторы, задающие положение узлов A и B на плоскости в каждый момент времени  $k$ . Координаты векторов определяются в предположении, что декартовый базис имеет начало координат в неподвижном узле C.

Формирование векторов  $\{a\}_k$  и  $\{b\}_k$ , описывающих конфигурацию треугольника во времени, легче запрограммировать, имея несколько (1..10) характерных положений его узлов и задавшись числом подшагов, за которые происходит переход от одной конфигурации к другой. Узел переходит в новое состояние из предыдущего по прямой линии. Таким образом, движение узла характеризуется кусочно-линейной траекторией.

Дисторсия( $\{a\}_k, \{b\}_k, \{a\}_0, \{b\}_0$ ) – функция вычисляет тензор дисторсии по двум волокнам в исходном ( $\{a\}_0, \{b\}_0$ ) и деформированном ( $\{a\}_k, \{b\}_k$ ) состояниях

КореньT( $[X]$ ) – операция взятия квадратного корня от тензора  $[X]$

ЛогарифмT( $[X]$ ) – операция взятия натурального логарифма от тензора  $[X]$

Поворот( $\{x\}$ ) – функция поворачивает вектор на 90 градусов в 2D-пространстве против часовой стрелки

Eigenvals( $[X]$ ) – функция возвращает вектор собственных значений тензора  $[X]$

Lsolve( $[A], \{b\}$ ) – функция возвращает решение  $\{x\}$  СЛАУ вида  $[A] \cdot \{x\} = \{b\}$ .

**begin****for** k = 1 to N[F]<sub>k</sub> = Дисторсия({a}<sub>k</sub>, {b}<sub>k</sub>, {a}<sub>0</sub>, {b}<sub>0</sub>)[U]<sub>k</sub> = КореньТ([F]<sup>T</sup><sub>k</sub>[F]<sub>k</sub>)[ε]<sub>k</sub> = [U]<sub>k</sub> - [I][e]<sub>k</sub> = ЛогарифмТ([U]<sub>k</sub>)[R]<sub>k</sub> = [F]<sub>k</sub>[U]<sub>k</sub><sup>-1</sup>**next** k

Визуализация результатов

**end****function** Дисторсия ({a}, {b}, {a0}, {b0})*Функция вычисляет тензор дисторсии по двум волокнам в исходном и деформированном состояниях*

{a'} = Поворот({a0})

{b'} = Поворот({b0})

[F] = ({a} - {a0})·{b'}<sup>T</sup> / ({b'}·{a0}) + ({b} - {b0})·{a'}<sup>T</sup> / ({a'}·{b0}) + [I]**return** [F]**function** Поворот ({x})
$$\{y\} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \{x\}$$
**return** {y}**function** КореньТ ([X])*Операция взятия квадратного корня от тензора*
$$\begin{Bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \end{Bmatrix} = \text{Eigenvals}([X])$$
**if** ( λ<sub>0</sub> <> λ<sub>1</sub> ) **then**
$$\begin{Bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{Bmatrix} = \text{Lsolve} \left( \begin{bmatrix} 1 & \lambda_0 \\ 1 & \lambda_1 \end{bmatrix}, \begin{Bmatrix} \sqrt{\lambda_0} \\ \sqrt{\lambda_1} \end{Bmatrix} \right)$$
[Y] = α<sub>0</sub>·[I] + α<sub>1</sub>·[X]**else**[Y] = √λ<sub>0</sub>·[I]**end if****return** [Y]**function** ЛогарифмТ ([X])*Операция взятия натурального логарифма от тензора*
$$\begin{Bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \end{Bmatrix} = \text{Eigenvals}([X])$$
**if** ( λ<sub>0</sub> <> λ<sub>1</sub> ) **then**
$$\begin{Bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{Bmatrix} = \text{Lsolve} \left( \begin{bmatrix} 1 & \lambda_0 \\ 1 & \lambda_1 \end{bmatrix}, \begin{Bmatrix} \ln(\lambda_0) \\ \ln(\lambda_1) \end{Bmatrix} \right)$$
[Y] = α<sub>0</sub>·[I] + α<sub>1</sub>·[X]

else

$$[Y] = \ln(\lambda_0) \cdot [I]$$

end if

return [Y]

\*Замечания о нотации:

- Векторные и тензорные величины отображаются координатами в выбранном декартовом базисе.
- Квадратными скобками обозначены квадратные матрицы (2×2). Фигурным скобкам соответствуют векторы-столбцы (2×1).

## Листинг 2

### Командный файл расчета для пакета ANSYS

```

/преп7                                ! включили препроцессор
len = 2*sqrt(3)
Ax0 = 2      $      Ay0 = len          ! Начальное положение узлов А и В;
Bx0 = -2     $      By0 = len
lsnum = 3                                          ! Число шагов нагружения;
ssnum = 100                                       ! Число подшагов;
*dim,action,array,4,lsnum
!           Ax   Ay   Bx   By                ! История нагружения:
!-----
action(1,1) = 2, -2, 9, 2                    ! координаты узлов в каждый
action(1,2) = -7, 1, -4, -10                ! момент времени;
action(1,3) = 2, len, -2, len
!-----
et,1,PLANE2                                     ! протестировано и для элементов VISCO106;
keyopt,1,3,2                                   ! плоское деформированное состояние;
mptemp,                                         ! свойства материала (не имеет значения):
mptemp,1,0
mpdata,ex,1,,2e5                               ! E = 2e5 МПа
mpdata,prxy,1,,0.3                             ! v = 0.3
n,1,0,0,
n,2,Ax0,Ay0, $      n,3,Bx0,By0,
e,1,2,3                                         ! элемент по 3 узлам
d,1,UX,0, $      d,1,UY,0,                    ! начальные граничные условия
/solu                                          ! включили решатель
antype,0                                       ! тип задачи - статический прочностной расчет
nropt,,off
nlgeom,on                                       ! расчет с учетом геометрической нелинейности

*do,i,1,lsnum                                  ! цикл по моментам времени от 1 до lsnum
  time,i                                       ! время i
  *get,ax,node,2,loc,x                         ! узнаем текущее положение узлов
  *get,ay,node,2,loc,y
  *get,bx,node,3,loc,x
  *get,by,node,3,loc,y
  dcum,repl,
  d,2,UX,action(1,i)-ax                       ! задаем новые граничные условия
  d,2,UY,action(2,i)-ay
  d,3,UX,action(3,i)-bx
  d,3,UY,action(4,i)-by
  nsubst,ssnum,,ssnum,off                     ! число подшагов = ssnum

```

```

outres,all,all,
solve
*enddo

/post26
xvar,1
esol,2,1,2,EPEL,x,ex
esol,3,1,2,EPEL,y,ey
esol,4,1,2,EPEL,xy,exy
/axlab,x,time
/axlab,y,strain
/GRID,1
plvar,2,3,4
finish

```

! сохранять всю информацию на каждом подшаге  
! решаем задачу  
! конец цикла

! включить time-history постпроцессор  
! по оси абсцисс время  
! переменная 2 - упругая деформация  $e_x$   
! переменная 3 - упругая деформация  $e_y$   
! переменная 4 - упругая деформация  $e_{xy}$   
! надписи по осям  
!  
! сетка на графике  
! отобразить переменные 2,3,4 на графике

### Литература

1. ANSYS, Inc. Theory Reference, Chapter 3. Structures with Geometric Nonlinearities.
2. Huges T.J.R. Numerical implementation of constitutive models: rate-independent deviatoric plasticity. // Theoretical foundation for large-scale computations for nonlinear material behavior. – Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, Netherlands. – 1984.
3. Weber G.G., Lush A.M., Zavaliangos A. An objective time-integration procedure for isotropic rate-independent elastic-plastic constitutive equations // International journal of plasticity. – Vol. 6, 1990. – P. 701–749.
4. Роджерс Д. Алгоритмические основы машинной графики. – М.: Мир, 1989. – 512 с.

*Поступила в редакцию 27 апреля 2003 г.*

## РАЗВИТИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СИСТЕМ ТРЕЩИН ПРИ МЕХАНИЧЕСКОЙ НАГРУЗКЕ

*А.О. Чернявский*

Показано, что сетки поверхностных трещин в деталях могут образовываться и устойчиво развиваться не только при тепловом, но и при механическом нагружении. При этом поведение трещин при тепловом и механическом воздействиях качественно различно: при тепловом вначале образуется сетка мелких и частых трещин, по мере роста часть их останавливается, что приводит к образованию сетки более редких и более глубоких трещин; при механическом нагружении (подвижной нагрузкой) вначале образуются редкие трещины, и лишь после достижения ими определенной глубины образуются промежуточные трещины, причем взаимодействие между трещинами приводит к увеличению коэффициентов интенсивности напряжений. Процесс проиллюстрирован численными расчетами кинетики трещин.

Интенсивные поверхностные воздействия на элементы конструкций нередко приводят к образованию поверхностных трещин – одиночных или целых систем. Образование систем трещин чаще наблюдается при дилатационном нагружении (объемном расширении или усадке материала конструкции вследствие нагрева, облучения, диффузии вещества из внешней среды или в нее) [1]. В этих случаях появление одиночной трещины может не приводить к разгрузке (снижению напряжений) в областях, удаленных от трещины; образующиеся новые трещины могут взаимодействовать друг с другом, что сказывается на скорости и направлении их роста. Такое разрушение характерно для ряда конструкций металлургического, химического, энергетического оборудования. При механическом нагружении образование систем трещин встречается реже, поскольку, в отличие от дилатационного нагружения, появление трещины не вызывает снижения номинальных напряжений и с учетом того, что зародившаяся трещина является мощным концентратором напряжений, естественно ожидать, что только эта трещина и будет развиваться. Однако и при механической нагрузке в ряде случаев встречается разрушение с образованием сеток трещин:

- при наличии конструктивных концентраторов напряжений типа отверстий или пазов возможна ситуация, когда зародившаяся в зоне концентрации трещина, развиваясь, попадет в зону с меньшими напряжениями – меньшими настолько, что более выгодным с энергетической точки зрения окажется зарождение новых трещин. Пример такого разрушения приведен на рис. 1а;
- перераспределение напряжений вследствие ползучести или пластичности материала может также способствовать торможению существующих трещин (и зарождению новых) – см., например, рис. 1б;
- подвижные нагрузки (например, в парах качения) приводят к появлению множественных трещин (рис. 1в);
- наконец, фактором, способствующим появлению систем трещин, может являться агрессивная внешняя среда, примером могут служить сетки трещин коррозионного растрескивания под напряжением в трубопроводах (рис. 1г.)

Анализ распространения трещин предусматривает решение нескольких задач, являющихся, по существу, задачами устойчивости: устойчивости неподвижного состояния трещины (отсутствие ее подрастания при заданных нагрузках), устойчивости прямолинейного распространения трещины (отсутствия поворотов, способных привести к отделению фрагментов от тела – выкрашиванию; отсутствия ветвления), устойчивости сеток трещин (возможность развития периодической системы трещин с сохранением периодичности или вырождение этой системы с образованием одной магистральной трещины). Некоторые аспекты этих задач рассмотрены в данной работе с помощью математического моделирования в рамках механики сплошной среды.

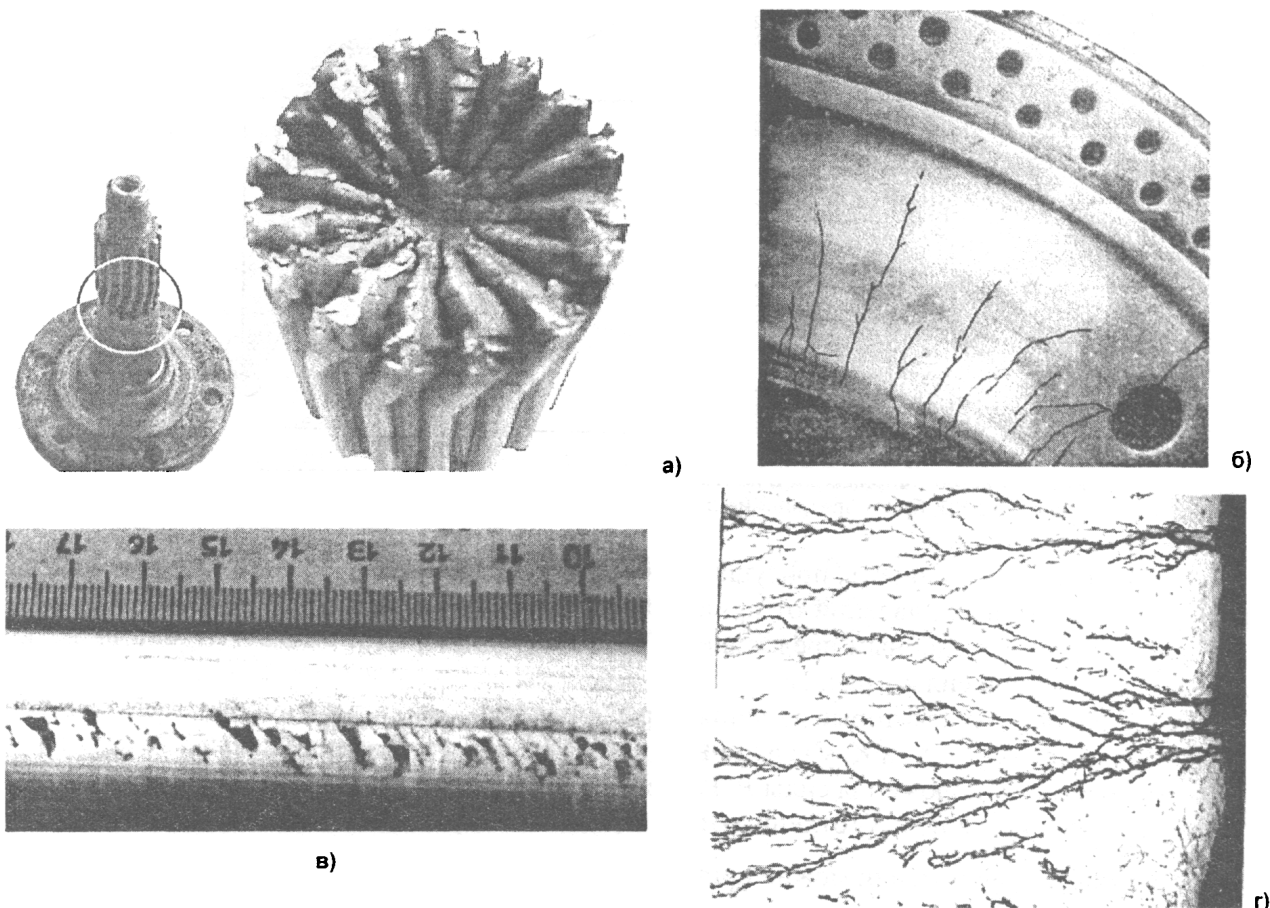


Рис. 1. Развитие систем трещин при механическом нагружении:

- а) шлицевое соединение: система осевых трещин, возникших в результате циклического кручения;  
 б) трещины в полотне диска паровой турбины [2];  
 в) трещины в рельсах (поверхностный слой рельса удален механической обработкой);  
 г) коррозионное растрескивание стенки трубы, длина трещин – до 50 мм

Для контактирующих деталей с перемещающейся зоной контакта разрушение путем образования сетки приповерхностных трещин и последующего выкрашивания достаточно характерно: широко известно разрушение дорожек подшипников, поверхности зубьев тяжело нагруженных шестерен. В большинстве случаев образующиеся трещины имеют достаточно маленькие размеры, сопоставимые с размером зерна материала, что делает невозможным применение подходов классической механики разрушения. Однако при достаточно больших размерах контактирующих деталей – и, соответственно, размерах трещин – эти подходы могут быть применены. Примером такой детали могут служить рельсы: наблюдения, выполненные в РСП-17 (ст. Полтаво Южно-Уральской железной дороги), показали, что у поверхности рельсов после достаточно большой наработки (порядка  $10^8$  циклов, соответствующих проходам колеса), часто отмечаются сетки трещин с размерами, заметно превосходящими размеры зерна материала (см. рис. 1в).

В качестве методического примера рассмотрим контакт бесконечного цилиндра с полупространством (плоское деформированное состояние). Решение задачи о сетке трещин в таких условиях можно получить, по-видимому, только численно; пример расчета, выполненного методом конечных элементов, показан на рис. 2. При вычислениях использовались 3 типа конечных элементов: 6-узловые треугольные (с узлами на серединах сторон); сингулярные – для описания области вокруг вершины трещины (на рис. 2а эти элементы выделены, они представляют собой 6-узловые треугольные элементы со смещенными узлами на двух сторонах, отражающие особенность в напряжениях вида  $r^{-1/2}$ ); контактные элементы для исключения взаимного проникновения цилиндра в полупространство и берегов трещины друг в друга. Коэффициенты интенсивности напряжений  $K_1$  и  $K_2$  определялись путем сравнения формы берегов трещины у ее вершины с известными аналитическими решениями (поскольку точность определения перемещений в МКЭ при обычном подходе выше точности определения напряжений).

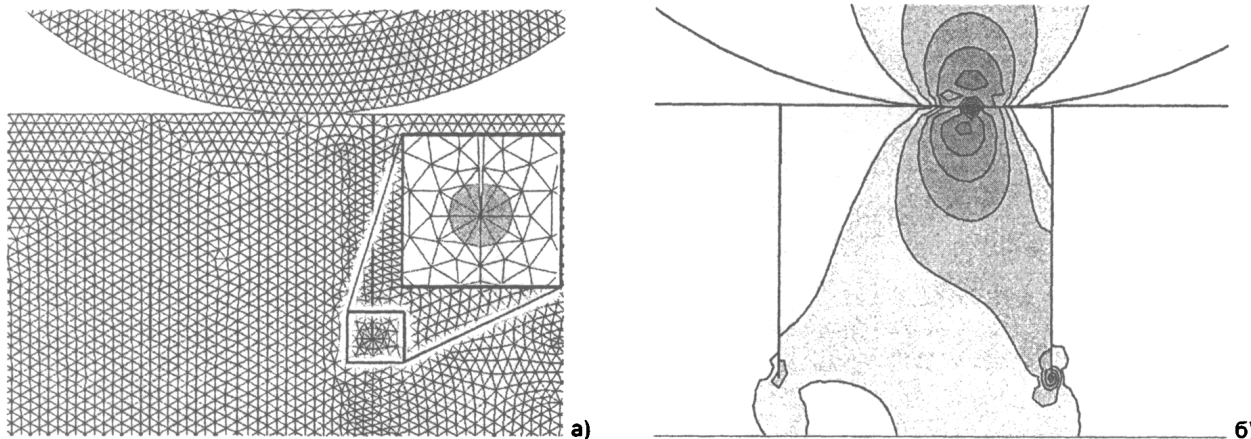


Рис. 2. Расчет напряжений в контактной задаче при наличии сетки трещин: а) сетка КЭ, б) распределение эквивалентных (по Мизесу) напряжений

Геометрическая нелинейность, присущая контактным задачам (зависимость зоны контакта и распределения контактных давлений от приложенной нагрузки) осложняет поиск закономерностей в этой задаче. Более удобным представляется начать рассмотрение с задачи о действии единичной сосредоточенной силы – рис. 3а.

На рис. 3б приведены некоторые результаты расчета – зависимости значений коэффициентов интенсивности напряжений  $K_1$  и  $K_2$  у вершины одной из трещин (отмеченной на рис. 3а кружком) периодической сетки от положения силы  $P$ . Расчеты выявили следующие закономерности.

1. Оба коэффициента  $K_1$  и  $K_2$  отличны от нуля. Условие страгивания трещины в изотропном материале в первом приближении можно принять в виде  $K_{\Sigma} = \sqrt{K_1^2 + K_2^2} = K_{Ic}$  [3,4] (значения  $K_{\Sigma}$  показаны на рис. 3б жирными линиями). С увеличением глубины трещин (при неизменных прочих размерах)  $K_{\Sigma}$  возрастает.

2. При пропорциональном увеличении всех размеров (и глубины трещин  $l$ , и расстояния между ними  $c$ ) и при неизменном значении нагрузки коэффициенты интенсивности напряжений падают пропорционально квадрату размеров (как и следовало ожидать, учитывая вид решения для напряжений в подобной задаче без трещин).

3. Соотношение  $K_1/K_2$  для различных геометрических параметров сетки лежит в диапазоне  $1/5 \dots 1/2$ .

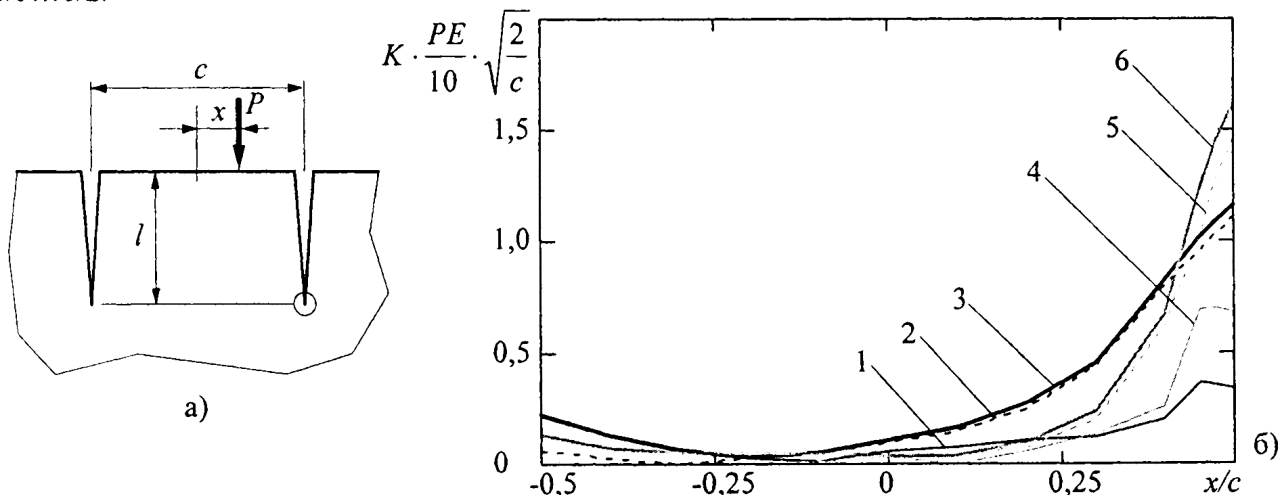


Рис. 3. Нагружение единичной силой: а) схема; б) результаты расчета (кривые 1,2,3 –  $l/c = 0,125$ ; 4,5,6 –  $l/c = 0,5$ ; 1 и 4 –  $K_1$ ; 2 и 5 –  $K_2$ ; 3 и 6 –  $K_{\Sigma}$ )

Из результатов 1 и 2 можно заключить, и численные эксперименты подтверждают это заключение, что уменьшение расстояния между трещинами при неизменной их глубине приведет к увеличению  $K_{\Sigma}$ . Таким образом, сетка трещин в данной задаче будет развиваться быстрее, чем одиночная трещина.



Преобладание  $K_2$  (результат 3) приводит к тому, что трещина должна стартовать под углом около  $60^\circ$  к первоначальному направлению. Однако появление у вершины трещины участка, повернутого по отношению к первоначальному направлению, меняет ситуацию. Вычисление направления дальнейшего развития трещины по критерию  $\max \sigma_\theta$  [3] дает значение угла  $\alpha \approx 30^\circ$ , а после продвижения силы за трещину –  $\beta \approx 70^\circ$  (рис. 4; при расчетах полагалось, что берега трещины взаимодействуют без трения). Таким образом, несмотря на преобладание  $K_2$  при старте трещины, система трещин растет в глубину детали.

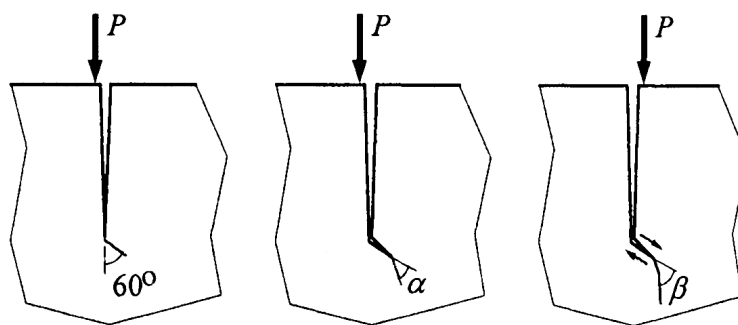


Рис. 4. Направление роста трещины

При произвольном распределении нагрузки по поверхности детали в линейной задаче мог бы быть применен метод суперпозиции, позволяющий получать решения путем соответствующего комбинирования решений для единичной силы. Рассматриваемая задача, строго говоря, не является линейной (из-за возможного контактного взаимодействия берегов трещины), хотя различия между линейным и нелинейным решениями для случая малых перемещений и отсутствия трения между берегами трещины не слишком велики. В приведенном ниже анализе использованы решения нелинейных задач (МКЭ).

Расчеты показали, что при переходе от сосредоточенной нагрузки к распределенной (при сохранении величины равнодействующей и всех геометрических размеров) коэффициенты интенсивности напряжений снижаются, причем тем сильнее, чем больше поверхность, по которой распределена нагрузка.

На рис. 5 приведены значения максимального (по всем положениям нагрузки) коэффициента интенсивности напряжений  $K_\Sigma$  для различных расстояний между трещинами  $c$  при одной и той же глубине трещин  $l$ . С изменением  $d$  меняется и характер зависимости  $K_\Sigma(c)$ : для больших значений  $d$  наибольшие значения КИН соответствуют далеким друг от друга трещинам, а при малых  $d$  – близким (сетка трещин). При неизменном размере  $d$  (что соответствует, например, примерному постоянству размера зоны контакта колеса вагона с рельсом) это приводит к следующим выводам (рис. 6): при развитии трещин до глубины примерно  $10d$  наибольший коэффициент интенсивности напряжений возникает у вершин одиночных (удаленных друг от друга) трещин. Если при этом не происходит катастрофического разрушения конструкции (трещины медленно подрастают с числом циклов), то для более глубоких трещин начинает проявляться взаимодействие между ними, и энергетически

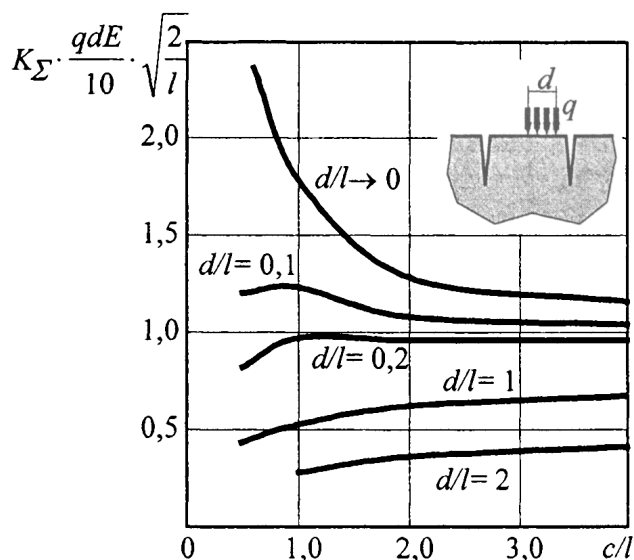


Рис. 5. Зависимость КИН от расстояния между трещинами

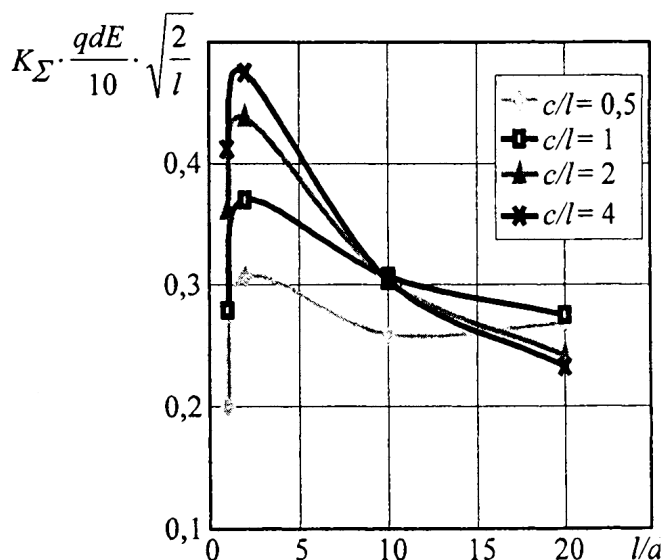


Рис. 6. Зависимость КИН от длины трещин

выгодным становится рост сетки трещин. При этом за счет зависимости КИН от расстояния между трещинами – величина КИН с ростом трещины в глубину уменьшается медленнее, чем для одиночной трещины, то есть сетка трещин оказывается **опаснее** (в смысле скорости роста) одиночной трещины.

Интересно отметить, что такое поведение качественно отличается от поведения сетки трещин, возникающей при тепловом нагружении [1]: при действии подвижной механической нагрузки после достижения трещинами некоторой глубины начинает возрастать «частота» трещин, в то время как при тепловой нагрузке по мере развития сетки трещин в глубину часть трещин останавливается, образуя сетку все более редких трещин

Полученные результаты справедливы лишь для равномерного распределения нагрузки по некоторой площадке. При неравномерном распределении, характерном для контактных задач, количественные результаты, видимо, будут несколько отличаться от приведенных, но качественные закономерности сохранятся. Сравнение с наблюдениями на реальной конструкции (см. рис. 1в) показало качественное правдоподобие результатов расчета. Для достижения количественного соответствия необходимо выполнение более точных расчетов для конкретной конструкции, в частности в задаче о рельсе и колесе – оценка пятна контакта (и распределения контактных давлений) с учетом реальной формы рельса и колеса.

### *Литература*

- 1 Чернявский А.О. Анализ систем взаимодействующих поверхностных трещин //ISSN 0235-7119 Российская академия наук. Проблемы машиностроения и надежности машин. – М.: Наука, – 1995. – № 3. – С.47–52.
2. Исследование изломов. Методические рекомендации и атлас поврежденных деталей прочной части турбины / В.Ф. Резинских, Э.С. Гинзбург, А.М. Клыпина и др.– М.: Всероссийский теплотехнический научно-исследовательский институт. – 1993. – 132 с.
3. Пестриков В.М., Морозов Е.М. Механика разрушения твердых тел. – СПб.: Профессия, 2002. – 320 с.
4. Проблемы разрушения, ресурса и безопасности технических систем. – Красноярск: КОДАС-СибЭРА, 1997. – 520 с.

*Поступила в редакцию 22 апреля 2003 г.*

# КИНЕТИКА ДЕФОРМИРОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ МОНОСЛОЯ АРМИРОВАННОГО ПЛАСТИКА В ТРАНСВЕРСАЛЬНОМ НАПРАВЛЕНИИ С УЧЕТОМ ДИЛАТАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

*С.Б. Сапожников, А.О. Щербакова*

В работе приведены результаты исследования деформирования и разрушения монослоя стеклопластика с учетом влажностной дилатации матрицы. В расчетах учтены микронапряжения, возникающие на границе раздела фаз композита в результате набухания матрицы. Установлено, что влияние внезапного изменения влажности среды на трансверсальную прочность однонаправленного стеклопластика толщиной до 1 мм наиболее интенсивно проявляется в течение последующих двух–трех недель. Выработаны рекомендации по установлению минимального периода экспозиции во влажной среде для ответственных тонколистовых изделий из стеклопластика.

## **Введение**

Воздействие на элементы конструкций факторов внешней среды (изменение температуры, влажности и др.) можно обозначить одним термином – дилатационные воздействия, которые сопровождаются изменением объема материала и, как следствие, размеров деталей. Применительно к армированным волокнами пластикам, которые даже на микроуровне нельзя считать однородными, дилатационные воздействия приводят к возникновению системы самоуравновешенных микронапряжений на границах раздела волокон и матрицы. Эти напряжения оказывают существенное влияние на кинетику деформирования и механические характеристики материала в целом и должны учитываться. В литературе имеется значительное количество экспериментальных данных по снижению механических характеристик композитов в различных средах, при температурных воздействиях на большой временной базе и соответствующих эмпирических моделей [1–8]. Однако из спектра этих работ по существу выпал начальный период (до одного месяца), в течение которого отмечаются наиболее интенсивные изменения механических свойств композитов, связанные в основном с воздействием влаги (явления набухания – влажностной дилатации). Сложность и многообразие механизмов разрушения компонентов композитных материалов не позволяют построить простые аналитические подходы к прогнозированию изменения механических свойств этих материалов при дилатационных воздействиях. Поэтому предлагаемая статья посвящена разработке численного метода исследования кинетики деформирования и разрушения монослоя армированного пластика (на примере стеклопластика) с учетом влажностной дилатации матрицы. В расчетах учтены микронапряжения [10], возникающие на границе раздела волокно–матрица композита в результате влажностной дилатации.

## **Методика исследования**

Для расчета трансверсального предела прочности однонаправленного монослоя армированного пластика использована модель пучка волокон (параллельно работающих ячеек) при малых деформациях [9]. Согласно этой модели реальная хаотичная укладка волокон заменена квазирегулярной (рис. 1), в которой каждая ячейка не связана с соседней, и все ячейки испытывают одинаковые перемещения  $U$ .

В расчет диаграммы деформирования монослоя поперек волокон заложена модель локального хрупкого разрушения ячеек. Согласно этой модели разрушение каждой ячейки происходит от действия микронапряжений на границе раздела волокно–матрица, причем, местные напряжения выше средних в  $\alpha$  раз, где  $\alpha$  – коэффициент концентрации трансверсальных напряжений [9]. Ячейка материала считается разрушившейся, если указанные местные напряжения в ней достигли предела прочности, при дальнейшем деформировании жесткость такой ячейки приравнивается к нулю.

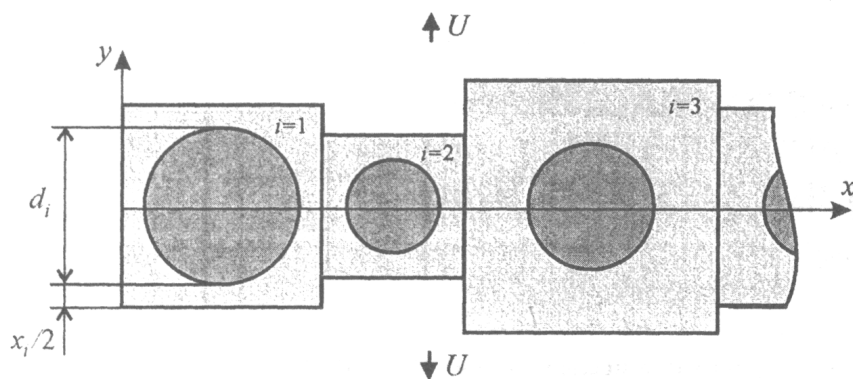


Рис. 1. Модель монослоя однонаправленного армированного пластика для расчета кривой деформирования при трансверсальном нагружении

Расчеты диаграмм деформирования проведены в двух случаях:

- а) расчет без учета средних радиальных напряжений, возникающих на границе волокно–матрица, что соответствует материалу, не насыщенному влагой;
- б) расчет с учетом радиальных микронапряжений (в качестве примера рассмотрен случай предельного насыщения влагой идеально упругого композита).

Моделирование деформирования разрушения армированных пластиков при нагружении поперек волокон осуществлено по следующему алгоритму:

- задание исходных данных для расчета;
- расчет напряжений и деформаций каждой ячейки монослоя в зависимости от перемещения  $U_j$  на  $j$ -м шаге нагружения;
- оценка состояния ячеек по критерию локальной прочности;
- расчет средних напряжений и деформаций монослоя для построения диаграммы деформирования.

Рассмотрим первый пункт алгоритма более подробно. Неизменные в расчете исходные данные приведены в табл. 1. В качестве примера использованы физико-механические характеристики, соответствующие типовому стеклопластику с эпоксидной (эпоксидно-фенольной) матрицей. Количество ячеек в расчете принято достаточно большим, чтобы обеспечить представительность выборки. Варьируемые в расчете параметры приведены в табл. 2.

Таблица 1

Таблица неизменных в расчете исходных данных

Наименование параметра	Обозначение	Значение
Модуль упругости матрицы, МПа	$E_m$	$3 \cdot 10^3$
Модуль упругости волокон, МПа	$E_f$	$7 \cdot 10^4$
Количество ячеек	$N$	800
Коэффициент разбухания матрицы	$\beta_m$	0,5
Коэффициент разбухания волокон	$\beta_f$	0
Предельное влагосодержание матрицы, %	$w_m^\infty$	5
Предельное влагосодержание волокон, %	$w_f^\infty$	0
Среднее значение диаметра волокон, м	$M_d$	$1 \cdot 10^{-5}$
Среднее значение объемного коэффициента армирования	$M_v$	0,5
Среднее значение предела прочности границы раздела волокно–матрица, МПа	$M_f$	50

В табл. 2  $k_d$ ,  $k_v$  и  $k_f$  – коэффициенты вариации соответственно диаметра волокон, объемного коэффициента армирования и предела прочности границы раздела волокно–матрица.

Далее для выбранного варианта расчета (см. табл.2) в соответствии с усеченным нормальным законом распределения были заданы значения диаметров волокон  $d_i$ , (здесь и в дальнейшем  $i$  – номер ячейки), объемных коэффициентов армирования  $v_i$  и пределов прочности поверхности раздела  $\sigma_{\sigma_i}$  в каждой ячейке.

Таблица варьируемых исходных данных

№ варианта	Расчеты с учетом дилатации					Расчеты без учета дилатации				
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$k_d$	0,2	0,0	0,2	0,2	0,0	0,2	0,0	0,2	0,2	0,0
$k_v$	0,2	0,2	0,0	0,2	0,0	0,2	0,2	0,0	0,2	0,0
$k_f$	0,2	0,2	0,2	0,0	0,2	0,2	0,2	0,2	0,0	0,4

Рассмотрим второй пункт алгоритма. По заданному полю перемещений  $U_j$  ( $j$  – номер шага нагружения) было вычислено соответствующее поле средних деформаций ячейки в направлении нагружения:

$$\varepsilon_{i,j} = \frac{U_j}{d_i + x_i}; \quad x_i = \left( \sqrt{\frac{\pi}{4v_i}} - 1 \right) \cdot d_i.$$

Здесь  $x_i$  – величина зазора (рис. 1), определяемая через диаметр волокна  $d_i$  и объемный коэффициент армирования  $v_i$ . Максимальные напряжения в ячейках, соответствующие найденному полю  $\varepsilon_{i,j}$ , были определены следующим образом:

$$\sigma_{i,j} = \varepsilon_{i,j} \cdot E_T(v_i) \cdot \alpha_i + \bar{\sigma}_{ri}, \quad \alpha_i = 1,5 - 0,5 \frac{E_m}{E_f} + 0,5 v_i \left( 1 - \frac{E_m}{E_f} \right),$$

где  $\bar{\sigma}_{ri}$  – величины радиальных микронапряжений с учетом локальной объемной доли волокна в ячейке;  $E_T(v_i)$  – трансверсальный модуль упругости ячейки, вычисленный следующим образом:

$$E_T(v_i) = \left[ 2 \sqrt{\frac{v_i}{\pi}} \cdot I(v_i) + \left( 1 - 2 \sqrt{\frac{v_i}{\pi}} \right) \cdot \frac{1}{1 - \mu_m^2} \right] \cdot E_m;$$

$$I(v_i) = \frac{1}{b_T(v_i) \cdot E_m} \left[ \frac{\pi}{2} - \frac{2a \cdot \arctg \left( \frac{a - b_T(v_i)}{\sqrt{a^2 - (b_T(v_i))^2}} \right)}{\sqrt{a^2 - (b_T(v_i))^2}} \right], \quad b_T(v_i) = 2 \sqrt{\frac{v_i}{\pi}} \left( \frac{1 - \mu_f^2}{E_f} - a \right); \quad a = \frac{1 - \mu_m^2}{E_m}.$$

Далее (третий пункт алгоритма) на основе полученных данных о величинах напряжений  $\sigma_{i,j}$  производилась оценка прочности ячеек: если напряжения в ячейке превышали величину локального предела прочности  $F_i$ , то ячейка считалась разрушившейся и ее жесткость приравнялась нулю:

$$E_{i,j} = \begin{cases} E_T(v_i), & \sigma_{i,j} \leq F_i \\ 0, & \sigma_{i,j} > F_i \end{cases}.$$

Затем (четвертый пункт алгоритма) были вычислены средние напряжения и деформации в монослое для построения диаграммы деформирования:

$$H' = \sum_i (d_i + x_i), \quad E_J^c = \sum_i E_{i,j} \frac{d_i + x_i}{H'}, \quad \bar{\varepsilon}_j = \frac{U_j N}{H'}, \quad \bar{\sigma}_j = \bar{\varepsilon}_j E_J^c.$$

## Результаты

Результаты расчетов показаны на рис. 2.

Анализ результатов показал, что в случае рассмотрения насыщенного влагой стеклопластика наибольшее влияние деформирование поперек волокон оказывает рассеяние локальной прочности матрицы, а в случае исследования сухого композита – рассеяние объемных долей ячеек. В плане упрощения модели вполне оправданной представляется рекомендация о пренебрежении рассеянием двух параметров модели (диаметра волокон и коэффициента армирования) и замена

коэффициента вариации третьего параметра (предела прочности границы раздела) эквивалентной величиной, что соответствует расчетам по вариантам 5 и 10. Таким образом, двухпараметрический закон распределения прочности границы раздела может вполне адекватно описывать деформирование модели, косвенно учитывая изменение других параметров.

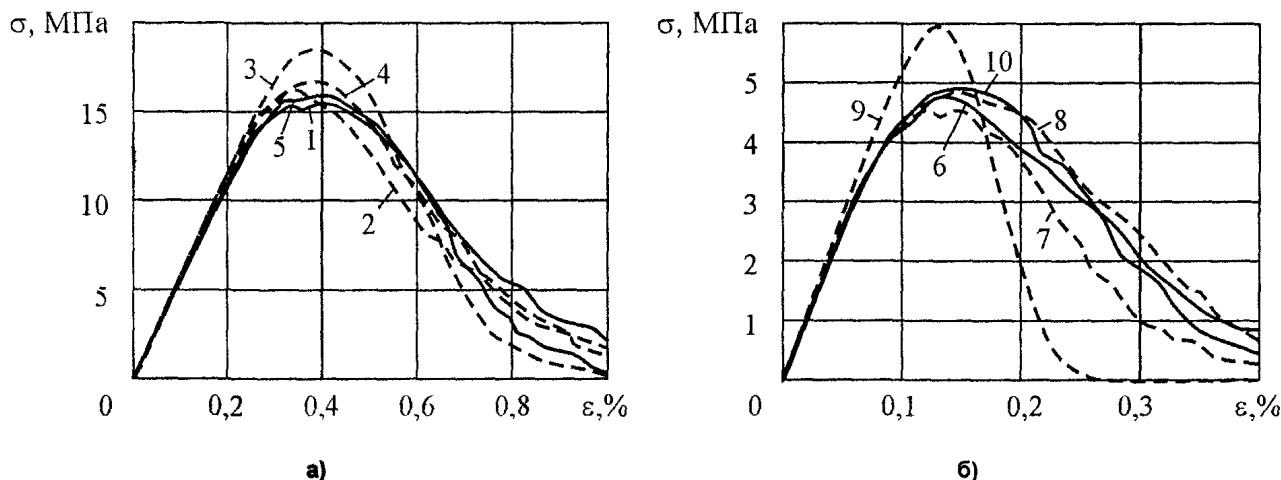


Рис. 2. Диаграммы деформирования материала поперек волокон в исходном и предельно насыщенном влагой состоянии (варианты расчета в табл. 2): а) сухой материал; б) увлажненный материал

Далее рассчитано изменение трансверсального предела прочности стеклопластика в процессе влагонасыщения. Величины средних радиальных напряжений на границе раздела волокно–матрица  $\bar{\sigma}_r$  по толщине материала с учетом реологических свойств матрицы вычислены методом конечных элементов [10]. В расчете использован алгоритм Эйлера при условии малости деформаций ползучести по сравнению с полными деформациями. Считали, что скорость ползучести на каждом шаге интегрирования является линейной функцией величины эквивалентного напряжения. Реологические характеристики матрицы определены на основе известных экспериментальных данных А.Н. Анискевича [11]. В результате предельного влагонасыщения эпоксидная матрица набухает с изменением размеров до 1,6%, генерируя на поверхности раздела волокно–матрица средние растягивающие напряжения до 20 МПа. Это приводит к разрушению части наиболее слабых ячеек и общему снижению механических характеристик.

Листовые армированные пластики для средненагруженных конструкций авиационного назначения имеют типовые толщины в пределах от 0,5 до 1 мм. Поэтому расчеты были проведены для двух крайних вариантов толщин. В первом случае толщина материала была принята минимальной ( $2h=0,5$  мм), во втором – максимальной ( $2h=1$  мм).

На рис. 3а приведены графики, отражающие зависимость пределов прочности стеклопластикового монослоя при трансверсальном нагружении от времени влагонасыщения. Введены следующие обозначения:  $\sigma_{\sigma T}^0$  – трансверсальный предел прочности материала в начальном (ненасыщенном) состоянии (для рассматриваемого стеклопластика  $\sigma_{\sigma T}^0=30,1$  МПа);  $\sigma_{\sigma T}$  – предел прочности, изменяющийся в зависимости от влагонасыщения материала. Кинетика влагопоглощения материалов показана на рис. 3б.

Расчеты показали, что поглощение влаги стеклопластиком приводит к снижению его прочностных свойств. Наиболее интенсивно прочность материала снижается на начальном этапе влагонасыщения, затем можно наблюдать некоторое восстановление прочности, что связано, по всей видимости, с перераспределением микронапряжений вследствие их релаксации.

### Заключение

На основании разработанных моделей показано, что влияние внезапного изменения влажности среды на трансверсальные механические характеристики однонаправленного стеклопластика толщиной до 1 мм наиболее интенсивно проявляется в течение последующих двух–трех недель и может приводить к трехкратному снижению предела прочности. В связи с этим рекомендуется

начинать эксплуатацию ответственных изделий не ранее прошедшего указанного времени. В противном случае возможно нарушение герметичности конструкций или даже ее разрушение.

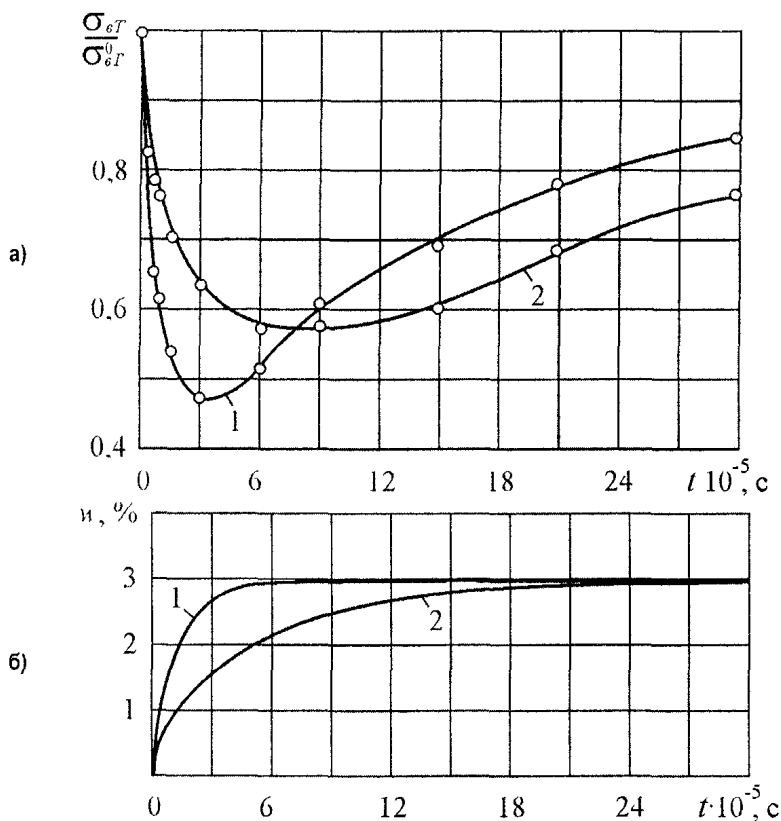


Рис. 3. Изменение прочностных и сорбционных характеристик стеклопластикового монослоя в зависимости от времени влагонасыщения (1 – монослой толщиной 0,5 мм; 2 – толщиной 1 мм): а) изменение трансверсального предела прочности; б) сорбционные кривые

#### Литература

1. Кружкова Е.Ю., Перов Ю.Ю., Локтин В.А., Мельников П.В. Исследование свойств эпоксидных органоуглепластиков в условиях термовлажностного старения // *Механика композитных материалов.* – 1990. – № 2. – С. 279–285.
2. Анискевич К.К., Курземниекс А.Х., Янсон Ю.О. Исследование влияния длительного воздействия температуры и влаги на упругие свойства и структуру органопластика // *Механика композитных материалов.* – 1985. – № 4. – С. 620–623.
3. Курземниекс А.Х. Влияние влаги на структуру и свойства органопластика // *Механика композитных материалов.* – 1980. – № 5. – с. 919–922.
4. Wright W.W. The effects of diffusion of water into epoxy resin their carbon-fibre reinforced composites // *Composites.* – 1981. – July. – P. 201–205.
5. Om K. Joshi. The effects of moisture on the shear properties on carbon-fibre composite s// *Composites.* – 1983. – № 3. – P. 196–200.
6. Скудра А.М., Бертулис Д.Р. Зависимость упругих характеристик армированных пластиков от температуры и влаги // *Механика композитных материалов.* – 1991. – № 1. – С. 105–109.
7. Delasi R., Whiteside J.B. Effect of moisture on epoxy resins and composites // *Advanced composite materials – environmental effects.* – Philadelphia: ASTM, 1977. – P. 2–20.
8. Chamis C.C. Simplified composite micromechanics equations for hydal, thermal and mechanical properties // *SAMPLE Quarterly.* – 1984. – № 3. – P. 14–23.
9. Сапожников С.Б. Дефекты и прочность армированных пластиков.– Челябинск: Изд-во ЧГТУ, 1994.– 161 с.
10. Щербакова А.О. Прогнозирование механических характеристик стеклопластиков с учетом дилатационных эффектов, обусловленных изменением влажности: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. – Челябинск: Изд-во ЧГАУ, 2001.
11. Анискевич А.Н., Янсон Ю.О., Анискевич Н.И. Ползучесть эпоксидного связующего во влажной атмосфере // *Механика композитных материалов.* – 1992. – № 1. – С. 17–24.

Поступила в редакцию 16 апреля 2003 г.

## СТРУКТУРНАЯ МОДЕЛЬ В РЕОЛОГИИ КОНСТРУКЦИЙ

О.С. Садаков

Приведен сжатый обзор развития одного из научных направлений кафедры «Прикладная механика, динамика и прочность машин» ЮУрГУ. Это – моделирование микронеоднородного неупругого деформирования и разрушения конструкционных материалов и макро моделирование на этой основе неупругого деформирования конструкций (неоднородное напряженно-деформированное состояние). В связи со спецификой обзорной работы мы здесь избегаем подробностей, которые при желании можно найти в прилагаемом списке литературы (выполненном в хронологическом порядке и включающем более ранние обзоры [21, 24, 34, 35]).

## 1. Прочностные расчеты неупругих конструкций

Актуальность проблемы связана с необходимостью разработки грамотных методов расчетной оценки прочности конструкций, выполненных из пластичных материалов. До сих пор такие расчеты ведутся чаще всего по условию не превышения максимальным напряжением в конструкции допускаемой величины. Естественно, эта величина – и для хрупкой, и для пластичной конструкции – не выходит за предел упругости и расчеты достаточно просты. Однако разрушение конструкции из пластичного материала обычно происходит при значительных пластических деформациях. Исключение составляют потеря жесткости (в частности, устойчивости) и усталость материала при большом числе повторяющихся воздействий, не выходящих за предел упругости.

Правильнее в таких случаях, по-видимому, использовать *основной* критерий прочности – не по напряжениям (вычисляемой реакции конструкции), а по внешнему задаваемому при эксплуатации воздействию. Например, при действии нагрузки  $P$  вводят понятие коэффициента запаса прочности  $n = P_0/P$  ( $P_0$  – расчетное значение разрушающей нагрузки) и условие прочности записывают в виде  $n \geq [n]$ , где  $[n]$  – нормативный коэффициент, призванный компенсировать неизбежные ошибки расчета. На это условие прочности полезно взглянуть с другой стороны: оно эквивалентно условию

$$[n] P \geq P_0. \quad (1)$$

Оно означает, что в прочностном расчете нагрузка на конструкцию должна быть задана в  $[n]$  раз больше действительной эксплуатационной нагрузки; конструкция прочна только в случае, когда и эта нагрузка (по расчету) не разрушит конструкцию. Таким образом, величина  $[n]$  устанавливает соответствие между расчетным и действительным значением разрушающей нагрузки; она обычно заметно выше единицы, что говорит о неоправданном оптимизме расчетчиков, который компенсируется выражением (1).

Условие прочности по максимальным напряжениям, о котором мы упоминали вначале, следует из данного при выполнении в расчетной модели двух условий:

- а) максимальное напряжение пропорционально нагрузке;
- б) принято, что конструкция разрушится, если в ее единственной точке напряжение достигнет предельного значения.

Первое условие отвечает идеально упругой или статически определимой задаче, второе – только статически определимой ферме. В других случаях такой расчет не оправдан. Заметим, что сама техника *опытного* установления значения  $[n]$  не позволяет говорить, что расчет по упругим напряжениям идет «в запас прочности».

Разрушение статически неопределимой неупругой конструкции определяется всей историей развития неупругих деформаций и обычно требует расчета их эволюции. Для проведения такого расчета требуется решить следующие основные проблемы:

- Моделирование деформационного поведения неупругого материала (при изотермическом и неизотермическом нагружении, простом и сложном напряженном состоянии, пропорциональном и непропорционально, с выдержками или без).
- Моделирование поведения неупругих конструкций.



- Моделирование накопления повреждений и образования трещин малоциклового усталости.
- Моделирование развития трещины (стадия живучести).
- Моделирование разрушения детали (оценка критической длины трещины).

Все эти проблемы не только существенно усложняют задачу оценки прочности конструкции, но и пока еще далеко не до конца решены. Не удивительно стремление расчетчиков обойти эти трудности.

## 2. Модели среды

2.1. Различают три подхода к математическому моделированию: эмпирический (непосредственное описание данных эксперимента), феноменологический (формулировка гипотез о свойствах объекта и их последующая проверка) и онтологический (предположение о скрытых механизмах явления и моделирование этих механизмов).

При моделировании поведения *упругого* материала вполне удобен эмпирический путь, но для неупругого тела он ведет к практически непреодолимым трудностям в связи со сложностью и многоплановостью явления. Феноменологический путь (например, модель идеально пластической или идеально вязкой среды) позволяет получить приблизительное описание неупругих свойств материала, но в большом числе ситуаций модель оказывается чрезмерно примитивной. Наконец, онтологический путь обещает существенно лучшие результаты, но настолько громоздок, что эти прогнозы пока остаются обещаниями.

2.2. Ряд работ русских и зарубежных исследователей подсказал еще одну возможность моделирования реологических свойств материалов, лежащую на границе между феноменологией и онтологией и сочетающую лучшие стороны той и другой. Этот подход, связанный с моделированием *микронеоднородности* среды, дал серию реологических моделей, которые впоследствии были названы структурными.

Гипотеза *однородности* лежит в основе современной механики сплошной среды и в большинстве разделов механики совершенно необременительна, однако в процессах *неупругого* деформирования, как показывают исследования, реальная неоднородность среды (микронеоднородность) оказывается одним из наиболее значащих факторов.

Структурные модели, в отличие от онтологических, моделируют микронеоднородность *формализованно*, в предположении, что она по своей природе не отличается от конструкционной неоднородности. Считается, что элементарный объем однородной сплошной среды работает подобно некоторой конструкции, составленной из подэлементов (ПЭ), как-то связанных между собой и наделенных (феноменологически) некоторыми достаточно простыми реологическими свойствами. Эти связи и эти свойства и отличают одну структурную модель от другой.

2.3. Исходный вариант структурной модели [1–5], предложенный в наших работах (в дальнейшем эта модель называется *базовой*), построен по принципу максимальной простоты. При ее построении нами вначале ставилась задача только очертить круг *свойств* среды, которые могут быть описаны таким образом. Предполагалось сопоставить эти свойства с реальными (в лаборатории кафедры производились испытания многих металлов, большей частью жаропрочных сплавов) и лишь затем определить пути совершенствования модели. В базовой модели, подобно модели Бесселинга [6], тензоры деформаций ПЭ считаются одинаковыми и равными тензору деформации элемента объема. Напряжение последнего вычисляется как среднее по ПЭ. Свойства ПЭ полагаются идеальными (идеальная пластичность, установившаяся ползучесть) и изотропными в девиаторном пространстве. Тем самым свойства каждого ПЭ характеризуются его реологической функцией

$$p'_k = F_k(\sigma_k) \quad (2)$$

– зависимостью интенсивности скорости неупругой деформации от интенсивности напряжения. Здесь  $k$  – номер ПЭ. В отличие от модели [6], реологическая функция ПЭ не ограничивается степенным законом. Нам удалось разработать технику идентификации модели при произвольном виде  $F_k$  – если считать эти функции подобными:

$$F_k = F(\sigma_k/z_k). \quad (3)$$

Здесь  $F$  – «реологическая функция материала» (РФ), коэффициенты  $z_k$  – «параметры прочности ПЭ» – идентифицирующие ПЭ константы. Подобие (3) принято в базовой модели. От вида функции  $F$  зависит, является материал склерономным или реономным, или неупругая деформация

представляет сумму пластической деформации и деформации ползучести. Произвольность РФ сыграла важную роль в дальнейшей эволюции теории – не только для описания деформационных, но и прочностных свойств.

2.4. Расчетный и теоретический анализ показали, что *предельные* характеристики однородной (идеальной) модели и неоднородной (базовой) при одной и той же РФ одинаковы: при выдержках с постоянным напряжением скорости установившейся ползучести одинаковы, при деформировании с постоянной скоростью предельные напряжения одинаковы (в обоих случаях напряжение и скорость деформации определяются РФ). Но в остальном (при нестационарном нагружении, то есть практически всегда) это две различные среды: с *памятью* о предыстории и без. Ввиду предельной простоты базовой модели она представляет, по сути, полный отчет о том, как на поведение среды влияет ее неоднородность.

В общих чертах это влияние характеризуется зависимостью текущего значения предела текучести от предыстории – и от пластической, и от вязкой деформаций, а также зависимостью текущей скорости ползучести (кроме текущего значения напряжения) от предыстории – и от пластической, и от вязкой деформации. И пластическое, и вязкое неупругое деформирование «упрочняет» среду (уменьшается скорость ползучести, возрастает предел текучести), но это упрочнение анизотропно: смена знака нагрузки обнаружит, что скорость ползучести увеличилась, а предел текучести уменьшился. Подобные эффекты характеризуют термином «анизотропное упрочнение» (его же называют *деформационным*). Таким образом, известная первая стадия на кривой ползучести относится к этой же группе эффектов. Структурная модель позволяет отчетливо увидеть, что эти эффекты, называемые также эффектами памяти материала от предыстории нагружения, связаны с перераспределением микронапряжений в среде в связи с неоднородностью микропластических деформаций (термин «микро» здесь относится не к величине напряжений или деформаций, а к «величине» ПЭ).

2.5. Сопоставление с экспериментами показало, что для адекватного описания и диаграмм повторно-переменного деформирования, и кривых ползучести при практически произвольной истории нагружения во времени *достаточно* базовой модели – если материал циклически стабилен, то есть отсутствуют *изотропное* упрочнение или разупрочнение [8]. Адекватность модели до сих пор превышает известные феноменологические подходы. Это позволяет полагать, что микронеоднородность не просто влияет на деформационные свойства материалов, но ее роль оказывается определяющей в основных эффектах памяти среды о предыстории нагружения. Материальным носителем этой памяти являются микропластические деформации. Заметим сразу, что совершенно аналогичные свойства обнаруживаются и у конструкций и по совершенно аналогичным причинам.

2.6. Важная роль микронапряжений в реологических свойствах особенно заметно проявляется в эффектах *непропорционального* нагружения – при задании ПЭ простейшего свойства идеальной пластичности с поверхностью текучести Мизеса [9], [10]. Обнаруживается изменение «поверхности текучести» – ее формы и размеров, неортогональность приращения неупругой деформации к этой поверхности (при сохранении устойчивости материала), кросс-эффект Баушингера и другие закономерности, наблюдаемые в испытаниях и практически не поддающиеся феноменологическому описанию.

2.7. Использование модели позволяет определять РФ материалов не только по данным установившейся ползучести, но и по кривым неустановившейся ползучести, кривым деформирования, кривым релаксации [18]. Естественно, диапазон аргументов при этом оказывается значительно шире, чем в стандартных испытаниях на установившуюся ползучесть. Было обнаружено, что практически во всех сталях отчетливо различаются два (в доступном для наших экспериментальных установок диапазоне скоростей) механизма ползучести [22], что можно отразить выражениями

$$F = A_1 \sigma^{n_1} + A_2 \sigma^{n_2} \quad \text{или} \quad F = A_1 \exp(B_1 \sigma) + A_2 \exp(B_2 \sigma) \quad (4)$$

– в зависимости от того, в какой шкале – полулогарифмической или двойной логарифмической – данные опытов лучше ложатся на билинейную кривую. Оба механизма имеют отчетливо *реономный* характер, то есть это два вида ползучести. Мы полагаем, что неупругая деформация всегда реономна, а склерономная деформация представляет лишь идеализацию (часто весьма удобную) реального поведения материала. Это становится почти очевидным при рассмотрении термофлуктуационного механизма неупругой деформации.

Даже при нормальной температуре материалы реономны, хотя здесь удобнее ввести предельное значение напряжения и ограничить ползучесть (соответствующим выбором РФ) лишь небольшим диапазоном в окрестности этого значения. Это относится к ПЭ; для модели в целом мы обнаруживаем ограниченную реономность практически при любом напряжении. Таким образом весьма адекватно отражается явление циклической ползучести (и циклической релаксации) при несимметричном мягком (жестком) циклическом нагружении [7].

2.8. Важнейшим этапом развития подхода было обобщение модели на *неизотермическое* нагружение. И здесь простейшее допущение о том, что с температурой изменяется лишь реологическая функция (и константы упругости) привело к получению относительно простой, но вполне адекватной для металлических сплавов (со стабильной структурой) модели [12]. Выяснилось, что в выражениях (4) от температуры существенно сильнее зависят множители  $A_n$ , чем остальные. Это, на наш взгляд, подтверждает, что слагаемые в (4) соответствуют физически различающимся механизмам неупругого деформирования (возможно, внутризеренному или межзеренному смещению атомов) и участки реологической функции с различными наклонами отвечают преобладанию одного механизма над другим. Позже для описания накопления поврежденности, приводящей к малоцикловой усталости, была построена модель, в которой фигурируют два вида поврежденности, отвечающие этим двум механизмам. Экспериментальная проверка показала хорошую адекватность модели [16, 20]. Добавим, что неизотермическое неупругое деформирование, как и непропорциональное, феноменологически не удается описать сколько-нибудь корректно.

2.9. При анализе распределения напряжений в ПЭ при *пропорциональном* нагружении базовой модели было обнаружено его подобие распределению при начальном нагружении. Отсюда следуют принцип Мазинга и его обобщение на неизотермическое нагружение вязкого материала [14, 28]. Это обобщение представляет уравнение состояния (УС) в параметрах всего ансамбля ПЭ. Оно потребовало введения двух новых параметров состояния материала ( $S$  – относительный суммарный вес ПЭ, вошедших в существенно неупругое деформирование и  $s$  – их относительная нагруженность) и специальных правил памяти о предыстории, определяемых значениями этих параметров и позволяющих найти  $\{S, s\}$  по диаграммам деформирования на плоскости  $\{\varepsilon, \sigma\}$ . Оказалось, что текущее значение скорости неупругой деформации однозначно определяется этими параметрами и текущим значением температуры – если пренебречь их небольшими отклонениями от УС, приводящими к циклической ползучести. Из одного уравнения состояния с единых позиций мы получаем кривые деформирования и кривые ползучести при произвольных программах повторно-переменного нагружения, включая неизотермическое. Сопоставление этих кривых между собой выявило систему закономерностей, связывающих быстрое неупругое деформирование и ползучесть при выдержках, характеризующих определенное *подобие* кривых, названную принципом подобия (ПП). Именно с помощью ПП удается для идентификации модели конкретного материала использовать неустановившуюся ползучесть или релаксацию, или нагружение с постоянной скоростью деформации или напряжения. Это позволило расширить диапазон аргументов РФ, выявляемой экспериментально и, в частности, обнаружить два механизма ползучести (п.2.7).

2.10. Структурная модель оказалась исключительно удобным инструментом для решения проблемы описания неупругого деформирования *физически анизотропных* сред. Для обычного феноменологического подхода (с введением внутренних параметров состояния и определяющих функций для них) задача описания деформационной анизотропии на фоне физической практически неразрешима. Но в структурной модели подэлементы не обладают деформационной анизотропией. Следовательно, достаточно отказаться от постулата изотропии для ПЭ и ввести соответствующие поверхность текучести – для склерономных свойств и потенциал ползучести – для реономных. Тем самым вводится физическая анизотропия, а деформационная получается автоматически, благодаря совместной работе пакета ПЭ с различающимися значениями коэффициента прочности  $z$ . Разработаны конкретные варианты потенциалов пластичности и ползучести в шестимерном пространстве напряжений для материалов ортоизотропных (соответствующих симметрии куба – если изотропию сравнивать с симметрией сферы), трансверсально изотропных (цилиндрическая симметрия), ортотропных (симметрия спичечного коробка). Идеология построения потенциалов наследует *постулат изотропии* А.А.Ильюшина, который в анизотропных телах переходит в постулаты *симметрии*: потенциалы пластичности и ползучести обладают той же симметрией, что и потенциал *упругости* [29, 31].

К сожалению, отсутствие экспериментальных данных не позволило верифицировать модель. Полагаем все же, что такой подход позволит получить разумные результаты при минимальном усложнении модели.

2.11. Для описания *изотропного упрочнения*, существенно влияющего на свойства некоторых материалов на первых циклах нагружения, базовая модель была усложнена введением зависимости  $F_k$  от параметра Удквиста подэлемента (и позднее еще от времени – для отражения снятия изотропного упрочнения при выдержках)[11]. Проверки показали, что такое описание корректнее, чем введение зависимости диаграммы деформирования от номера цикла.

2.12. Интересен пример использования структурной модели для моделирования конструкционного *графита*, который долгое время считался хрупким. Деформация, при которой графит разрушается, действительно довольно мала, но упругая и пластическая деформации при этом имеют один порядок, и модель линейной упругости совершенно не адекватна. Была разработана структурная модель графита, которая обладала следующими особенностями: разнсопротивляемость на растяжение и сжатие; нелинейность упругих свойств; влияние накапливаемого повреждения на деформационные свойства; квазистатический критерий разрушения; физическая анизотропия (трансверсальная изотропия, то есть цилиндрическая симметрия деформационных свойств, связанная с особенностями технологии изготовления графита и, в отличие от обычной трансверсальной изотропии, характеризующаяся одинаковыми свойствами при сдвигах вдоль и поперек оси цилиндра). Экспериментальное определение критерия статического разрушения показало, что соответствующее эквивалентное напряжение при сложном нагружении, кроме квадратичного, содержит и линейное по напряжению слагаемое [41].

2.13. Принципиально новое решение пришлось принять при моделировании *термопластов* [42]. Если раньше разброс свойств между ПЭ характеризовался одним параметром «прочности»  $z_k$ , то здесь мы вынуждены были добавить температурный параметр  $T_{ck}$ . Это было связано с обнаруженными при анализе экспериментальных данных двумя обстоятельствами. Во-первых, оказалось, что свойством подобия (3) здесь не обойтись; подэлементы пришлось разделить на две группы с заметно отличающимися РФ (двухфазная среда). Для контрастности одну из фаз мы считаем склерономной. Во-вторых, с ростом температуры соотношение «весов» фаз меняется, материал становится все более вязким. Для описания этого была введена своя для каждого ПЭ величина  $T_{ck}$  – температура, при которой ПЭ переходит в другую фазу. При поисках путей идентификации модели возникла серьезная проблема определения функции плотности распределения с двумя аргументами. Для ее решения необходимы подробные экспериментальные исследования при повторно-переменном неизотермическом нагружении с проверкой гипотез относительно характера этой функции. Имеющихся пока данных совершенно недостаточно даже для приближенных качественных прогнозов.

### 3. Модели конструкций

3.1. Параллельно с моделированием материала (и постепенно его вытесняя) мы вели работы по моделированию *конструкций*, то есть тел, находящихся в неоднородном напряженно-деформированном состоянии. При анализе различных путей решения краевой задачи неупругого деформирования (вначале – в геометрически линейной постановке) нам показалось возможным свести численные методы к одной схеме: матричной модели конструкции, в которой все переменные и константы формулируются в виде матриц. Для построения такой модели по разным причинам выбран метод смещений: геометрические соотношения строятся на основании кинематических гипотез, условия равновесия – на основе принципа возможных перемещений, матричные «физические» уравнения основаны на искусственном разделении деформации  $\epsilon$  на слагаемые  $\mathcal{J}$ ,  $p$ ,  $r$  – тепловые, неупругие и упругие. Расчеты ведутся шагами по времени нагружения, но искомыми являются не *приращения* напряжений и деформаций, а их *текущие значения*; только неупругая деформация определяется как сумма приращений. Для расчета последней используется в основном базовая структурная модель [15].

3.2. Как отмечалось, практическому использованию прочностных расчетов, основанных на моделях неупругой среды, мешает их относительно высокая трудоемкость. Естественно, это относится и к данной модели конструкции. Однако существуют уже и еще отыскиваются пути ускорения таких расчетов. Этот процесс можно назвать *макромоделированием* – моделированием модели. В качестве оригинала для моделирования мы используем матричную модель. Макромо-

делирование, как и обычное моделирование, может быть эмпирическим, феноменологическим или онтологическим, требует анализа моделируемого объекта и экспериментальных исследований, но эксперименты производятся не в лаборатории, а на компьютере.

3.3. Для анализа поведения конструкции была разработана *векторная интерпретация* матричной конструкции – представление матриц-столбцов деформаций  $\varepsilon$ ,  $r$ ,  $\mathcal{Q}$ ,  $p$  в виде векторов  $n$ -мерного евклидова пространства  $D$ , метрика которого имеет энергетический смысл ( $r \cdot \varepsilon$  – работа напряжений, отвечающих упругим деформациям  $r$ , на деформациях  $\varepsilon$ ). Условие совместности деформаций означает принадлежность вектора  $\varepsilon$   $m$ -мерному подпространству  $C$  ( $m < n$ ). Остальные векторы могут быть несовместными; они раскладываются на ортогональные «совместные» и «самоуравновешенные» составляющие (например,  $r = r_c + r_y$ ). Из условий равновесия следует однозначная зависимость вектора  $r_c$  от текущих значений обобщенных сил  $Q_i$ . Конструкция из идеально вязких ПЭ может рассматриваться как более сложная идеально вязкая конструкция; полагаем, что скорость неупругой деформации зависит от  $r$  и нормальна поверхностям равных потенциалов ползучести. Потенциал центрально симметричен и является выпуклым.

3.4. Анализ поведения конструкции выявил те же свойства деформационного анизотропного упрочнения, что наблюдались и в структурной модели; они связаны с эволюцией вектора  $r_y = -\mathcal{Q}_y - p_y$ , неупругая составляющая которого зависит от предыстории и определяет «память» конструкции. Любое несовместное изменение вектора  $p$  ведет к такому изменению  $r_y$ , которое отвечает *уменьшению потенциала* ползучести. С этим, в частности, связаны переход из нестационарной ползучести в стационарную и стабилизация поведения конструкции при циклическом нагружении. Если в структурной модели материала имеется *идеально упругий* ПЭ (а именно к такому выводу мы приходим, анализируя экспериментальные кривые деформирования и ползучести на участках до начала заметного накопления поврежденности или потери устойчивости), то стационарный циклический процесс (СЦП) при регулярном нагружении всегда представляет *знакопеременное* неупругое деформирование (возможно, с исчезающе малым размахом  $p$ ) на фоне односторонне *накопленной* деформации, рост которой прекратился (возможно, через очень большое число циклов). При малых изменениях модуля упругости с изменением температуры размахи неупругой деформации в объемах конструкции («циклическая» часть реакции конструкции) мало зависят от постоянных составляющих нагрузки и температуры; это может быть использовано для упрощения расчетов.

3.5. Названные и другие выявленные особенности поведения конструкций, в том числе в ряде частных ситуаций, подсказали несколько *направлений* макро моделирования. Одно из них связано с уменьшением *степени подвижности* конструкции  $m$ . В инженерных расчетах основную роль играет деформирование по нескольким наиболее актуальным формам деформационной подвижности, тогда как желание подробнее описать эволюцию неупругих деформаций заставляет увеличивать размерность  $n$  полей деформации. При использовании метода конечных элементов (МКЭ) эти две величины обычно тесно связаны. Однако в матричной модели кинематические гипотезы формулируются независимо от дискретизации полей напряжений и при сохранении размера  $n$  число  $m$  может быть сильно снижено [13, 19]. Та же идея используется в модификации МКЭ [17]: произведя серию пробных расчетов, находим несколько наиболее существенных для данной конструкции и для данного вида нагружения полей деформаций, и основные расчеты ведем в сильно сокращенном совместном пространстве ( $m=3-6$ ). Более того, возможно предварительное ортонормирование базиса этого пространства, тогда матрица жесткости конструкции становится единичной и решение краевой задачи не требует решения системы алгебраических уравнений.

3.6. Другой путь упрощения расчетов связан со снижением *размерности* матриц-столбцов переменных напряжений и деформаций  $n$ . Довольно типична ситуация, когда деталь работает упруго, кроме некоторой зоны повышенных напряжений. Матричный анализ показывает, что вместо всей конструкции достаточно рассмотреть эту зону, причем в качестве внешнего воздействия выступает история *фиктивных* напряжений в этой зоне (так в теории приспособляемости называют напряжения в линейно-упругой конструкции той же геометрии при той же программе изменения нагрузок и температур). Решив предварительно термоупругую задачу (историю фиктивных деформаций во всей конструкции), выделяем часть ее, относящуюся к *неупругой* зоне, и с использованием предварительно найденной матрицы влияния неупругой деформации рассчитываем кинетику деформирования неупругой зоны. Практическая реализация методики варьирует-

ся в зависимости от конкретной задачи. Предельным ее случаем является подход Нейбера расчета по фиктивному напряжению в *одной* – опасной – точке конструкции.

3.7. Большая часть неупругих расчетов относится к циклическому нагружению. Разбивая каждый цикл на сотни шагов, просчитывают эволюцию неупругих деформаций, изменяющихся от цикла к циклу до тех пор, пока эти изменения перестанут быть существенными (достижение СЦП) – иногда в течение сотен циклов. Однако в ряде случаев из анализа модели среды можно получить *физические уравнения*, характеризующие поведение материала в *стабилизированном* цикле. Если их дополнить статическими и геометрическими, то можно получить полную систему уравнений для *прямого расчета*, минуя начальные, переходные циклы [27, 37]. Для простейшего случая быстрого циклического неизотермического нагружения между двумя экстремальными состояниями нагрузки и температуры из анализа структурной модели получены такие физические уравнения. Расчет СЦП с их помощью сводится к решению краевой задачи для двух экстремальных моментов цикла итерациями по одновременному определению двух полей неупругой деформации в экстремальных состояниях конструкции (метод двух состояний). Если же пренебречь влиянием температуры на упругие свойства или изменение температуры в цикле не существенно, то расчет еще проще. Это два последовательных расчета: для размахов напряжений и деформаций – по заданным размахам нагрузки – и затем для односторонне накопленных деформаций – по статическому воздействию и по размахам, найденным в предыдущем расчете (метод двух расчетов). При вполне корректном описании петель пластического гистерезиса расчет ускоряется на порядки.

3.8. Если нагружение близко к пропорциональному  $Q_i = F(t)Q^*$ , ( $Q^*$  – константы,  $t$  – время) или к циклически пропорциональному, когда пропорционально изменяется только переменная составляющая воздействия), то для конструкции выполняются соотношения подобия, частный случай которых представляет принцип подобия, обнаруженный при анализе поведения структурной модели (ПП, п.2.9). Изменения поля напряжений после реверса практически подобно одному из полей напряжений при базисном начальном нагружении. В структурной модели это позволило перейти от уравнений состояния для подэлементов к уравнениям состояния для элемента объема. В конструкции также возможна интеграция: вместо расчета полей напряжений и деформаций можно использовать уравнение состояния, формулируемое в параметрах обобщенных сил и обобщенных координат. С его помощью могут быть описаны процессы деформирования конструкции при разгрузках, новых нагружениях, выдержках и т.д. В публикации на эту тему [32] были предложены два варианта УС – для мягкого (силового) и для жесткого нагружения. Последующие исследования показали, что более актуальный вариант – для силового нагружения – в приведенном виде, к сожалению, некорректен. Правильная формулировка УС требует введения условного кинематического параметра  $w$  – например,  $w = q_i Q^*$ , где  $q_i$  – обобщенные координаты конструкции. Эта обобщенная «обобщенная координата» позволяет вычислять работу внешних сил  $dA$  по формуле  $dA = F dw$ . Базисная кривая деформирования  $F = f(w)$  должна быть получена при выбранном постоянном значении  $dw/dt = v_b$ . Естественно, это требует специального расчета конструкции; в этом и состоит идентификация обобщенной модели. Далее для заданной истории нагружения  $F(t)$  используется УС:

$$dw_p/dt = \Phi(s)(K - f(w_*/k))v_b/K, \quad w_p \equiv w - F/K, \quad K \equiv f(0), \quad f(x) \equiv df/dx, \quad w_* \equiv w - w_1, \quad s \equiv \kappa + s_r, \quad (5)$$

где  $\Phi(s)$  – РФ материала, приведенная к безразмерному виду, индекс  $r$  отмечает значение параметра в момент последнего реверса,  $\kappa$  – параметр, определяемый текущими значениями изменений  $w_*$  и  $F_* \equiv F - F$ , (из выражения  $F_* = \kappa f(w_*/k)$ ) и правилами памяти – такими же, как и для УС материала [21].

3.9. Приведенное УС и правила памяти отличаются только обозначениями от соответствующих соотношений для материала. Это подсказывает новую возможность: чтобы не программировать УС и сложные правила памяти, в интеграции можно сделать шаг назад и снова ввести ПЭ – но уже для получения структурной модели конструкции (СМК). Она отличается от базовой модели только обозначениями ( $w \sim \varepsilon$ ,  $F \sim \sigma$ ,  $w_p \sim p$ ,  $K \sim E$ ). Ее идентификация производится по кривой  $F = f(w)$  так же, как идентификация базовой модели по кривой деформирования. Но если модель материала годится для любого расчета конструкции из этого материала, то СМК годится только для данной конструкции при данном виде нагружения ( $Q^*$ ). При изменении ситуации необходим новый идентификационный расчет – однократное нагружение – для получения новой кривой  $f$ .

3.10. Несколько иная структурная модель конструкции может быть получена следующим образом. Если каждый элемент объема детали моделируется пакетом из  $N$  ПЭ с весами  $g_k$  и параметрами «прочности»  $z_k$ , то ПЭ можно объединить не по элементам объема, а по номерам  $k$ . Тогда конструкция предстанет в виде параллельного пакета из  $N$  подконструкций (ПК) из идеального материала, занимающего весь объем детали. Рассчитав поведение одной ПК (например, со значением коэффициента прочности, равным 1), из соображений подобия можно предсказать поведение остальных (при нагрузке, в  $z_k$  раз более высокой, деформации во всех точках ПК в  $z_k$  раз выше). Этот прием мы использовали при расчетах с помощью пакетов МКЭ, в которые не удается включить структурную модель [43]. В частности, таким путем можно получать диаграмму деформирования материала не из испытаний образцов, а из испытаний конструкции (например, изгиб балки: диаграмма деформирования идеально пластической балки в координатах «момент – кривизна» хорошо известна). Это позволяет, например, оценивать влияние технологии изготовления детали на свойства материала.

3.11. Сразу несколько путей макро моделирования пересекаются на задаче о расчете детали с зоной концентрации напряжений (макромодель слабой точки конструкции – МСТ). С одной стороны, ввиду локализации неупругой деформации в окрестности опасной точки детали  $x_0$ , можно использовать подход Нейбера (п. 3.6), в котором внешнее воздействие сводится к фиктивному напряжению в точке  $x_0$ . С другой стороны, по той же причине малости зоны неупругих деформаций при достаточно произвольной истории внешних нагрузок (и температурных полей) история фиктивных напряжений в точке  $x_0$  близка к пропорциональной. Это означает возможность перехода к обобщенным координатам (п. 3.8). В качестве параметра нагрузки  $F$ , таким образом, должна выступить скалярная мера фиктивного напряжения в  $x_0$ , (или, чтобы временно опустить зависимость модуля упругости от температуры, скалярная мера упругой деформации) – интенсивность тензора, умноженная на знак наиболее существенной координаты тензора. В качестве кинематического параметра  $w$  мы обычно брали скалярную меру упругопластической деформации в опасной точке [23, 26, 36, 38]. Используя кривую деформирования, с помощью формулы Нейбера (или ее модификаций) получали диаграмму  $F=f(w)$  и далее для заданного внешнего воздействия, пересчитанного в историю  $F(t)$ , находили историю деформации  $w(t)$  из УС (5). Зная кривую деформирования материала и историю деформаций, повторным расчетом находили историю неупругих деформаций, необходимую для оценки работоспособности детали.

Однако, пользуясь принципом подобия (п. 3.8), можно процедуру еще упростить. Вместо деформации в опасной точке в качестве кинематического параметра можно взять сумму  $w=F+P$ , где  $P$  – скалярная мера неупругой деформации в точке  $x_0$ . Зная кривую деформирования материала и используя формулу Нейбера, нетрудно получить этот вариант кривой деформирования конструкции. Далее в расчете по УС величина  $w_p$  сразу представляет искомую неупругую деформацию (модуль  $K$  при этом равен единице).

Заметим, что при наличии пакета МКЭ использовать формулу Нейбера нет необходимости. Для определения кривой  $F=f(w)$  можно использовать МКЭ, задав материал нелинейно-упругим с нужной диаграммой деформирования. Ряд расчетов с возрастающей нагрузкой определит кривую  $f$  более надежно, чем известные модификации.

Естественно, имея кривую  $f$ , можно вместо УС использовать структурную модель конструкции; расчет опять сведется к расчету по базовой модели. В случае неизотермического деформирования, когда кроме истории  $F(t)$  задается история температуры  $T(x_0, t)$ , расчет по базовой модели заметно более удобен. Наконец, если число опасных точек больше одной, то для данной детали можно построить несколько независимых макромоделей, чтобы оценить прочность каждой опасной зоны в отдельности. Однако если неупругие деформации в разных зонах влияют друг на друга, то предлагаемая модель может оказаться неверной.

#### 4. Малоцикловая усталость и живучесть

Мы отмечали, что структурная модель в отличие от онтологических моделей не отображает реальные механизмы деформирования поликристаллических материалов, она лишь помогает увидеть некоторые среднестатистические закономерности. Когда было получено весьма универсальное уравнение состояния, характеризующее пластичность и ползучесть при повторно-переменном нагружении, с выдержками и без (п. 2.9), стало очевидно, что выявленные таким образом параметры состояния  $S$  и  $s$ , являющиеся аргументами в УС, действительно имеют отноше-

ние к наиболее важным средним характеристикам, определяющим состояние материала. Возникла надежда, что эти параметры могут определять не только ползучесть, но и накопление повреждений в материале. Более того, после выявления двух механизмов (п. 2.7) неупругого деформирования (и в связи с имеющейся в литературе информацией) мы предположили, что каждому механизму ползучести соответствует определенная поврежденность. Механизму, приближающемуся к склероному деформированию (для краткости мы его называем пластическим) соответствует необратимое накопление повреждений, более вязкому – частично обратимое («залечивание» при ползучести в сжатие). Была разработана техника идентификации модели, проведены экспериментальные исследования при малоцикловой усталости (МЦУ) – в том числе неизотермические, с выдержками; адекватность модели (за разрушение принималось появление трещины длиной 1...1,5 мм) оказалась вполне удовлетворительной [25, 30].

В связи с использованием параметров состояния, характерных для пропорционального нагружения, модель МЦУ ориентирована на пропорциональное нагружение. В последнее время ведется работа по обобщению модели МЦУ на непропорциональное нагружение и на большое число циклов. Вместо пластических деформаций мы анализируем гипотетические микропластические деформации (неупругие деформации, возникающие при напряжениях, существенно меньших предела текучести); идеология модели в определенной мере наследуется из модели МЦУ.

Ту же модель МЦУ мы предполагаем использовать и для оценки живучести конструкции [33, 39]. Почти очевидно, что в момент образования усталостной трещины материал в ее окрестности также заметно поврежден, и при последующем циклическом нагружении его поврежденность продолжает расти (тем более что в устье трещины возникает заметная концентрация напряжений и, главное, неупругих деформаций). Можно предположить, что продвижение устья трещины до новой точки детали определяется тем же, что и для МЦУ, критерием: поврежденность материала (определяемая тем же, что и ранее, уравнением состояния) в этой точке достигает (возможно, того же) критического значения. В этом случае для расчета скорости роста трещины необходимо просчитывать эволюцию неупругих деформаций и накопления повреждений на всей предполагаемой траектории развития трещины. Это весьма громоздкая процедура, она еще более, чем расчет МЦУ, нуждается в макромоделировании; последняя работа еще впереди. Здесь необходимы теоретический анализ, расчетные исследования, соответствующий анализ экспериментальных данных и, возможно, использование для сокращения трудоемкости расчетов соотношений автосимilarity и подобия полей НДС в окрестности растущей трещины. Можно надеяться, что и в этой работе будет полезна структурная модель среды.

### Литература

1. Иванов И.А., Садаков О.С. Моделирование неоднородности при описании неизотермического деформирования реальных материалов // Тепловые напряжения в элементах конструкций. – Киев: Наук. думка, 1970. – № 10. – С. 42–46.
2. Садаков О.С. К описанию некоторых реономных свойств конструкционных материалов при нормальной температуре // Вопросы прочности и динамики конструкции: Труды ЧПИ. – Челябинск, ЧПИ, 1971. – № 92. – С. 33–38.
3. Кононов К.М., Ребяков Ю.Н., Садаков О.С. Экспериментальная проверка возможности использования структурной модели для описания переменного нагружения конструкционного материала при повышенной температуре // Тепловые напряжения в элементах конструкций. – Киев: Наук. думка, 1971. – № 11. – С. 140–143.
4. Gokhsfeld D.A., Kononov K.M., Sadakov O.S. Behaviour features of metals under cyclic deformation at high temperatures and the possibility of their mathematical interpretation // Proc. 4th Conf. on Dimensioning and Strength Calc. – Budapest: Akademiai Kiado, 1973. – P.47–61.
5. Садаков О.С. Анализ напряженно-деформированного состояния элементов конструкций при циклических неизотермических нагружениях на основе структурной модели среды // Всесоюзный симпозиум по малоцикловой усталости при повышенных температурах. – Челябинск, 1974. – Вып.3. – С. 95–126.
6. Бесселинг Дж.Ф. Теория упруго-пластических деформаций и деформаций ползучести первоначально изотропного материала, обнаруживающего анизотропию деформационного упрочнения, последствия и ползучести // Иностран. лит. Механика, сб. переводов. – 1959. – № 5. – С. 57–73.



7. Мартыненко М.Е., Садаков О.С. О циклической ползучести конструкционных материалов при нормальной температуре // Сб. науч. тр. ЧПИ. – Челябинск, 1974. – № 151. – С. 108–112.
8. Исследование некоторых особенностей взаимного влияния пластической деформации и ползучести стали X18H9T / К.М. Кононов, Е.Т. Кульчихин, Ю.Н. Ребяков, О.С. Садаков // Машиноведение. – 1975. – № 2. – С. 59–61.
9. Гохфельд Д.А., Иванов И.А., Садаков О.С. Описание эффектов сложного нагружения на основе структурной модели среды // Успехи механики деформируемых сред. – М.: Наука, 1975. – С. 171–183.
10. Gokhfeld D.A., Sadakov O.S. A mathematical model of medium for analysing the inelastic deforming of structures subjected to repeated actions of load and temperature // Trans. 3rd Int. Conf. Str. Mech. React. Techn. – London, 1975. – V. 5. – P.L5.7/1–L5.7/10.
11. Мадудин В.Н., Садаков О.С. К использованию структурной модели для отражения деформационных свойств циклически нестабильной реономной среды // Сб. науч. тр. ЧПИ. – Челябинск, 1977. – № 201. – С. 46–48.
12. Gokhfeld D.A., Martynenko M.E., Sadakov O.S. On the adequacy of the structural model of elasto-visco-plastic medium under variable repeated nonisothermal loading // Proc. 4th Int. Conf. on Struct. Mech. in Reactor Techn. – San Francisco, 1977. – V. L. – P.L5.7/1–L5.7/8.
13. Садаков О.С. Использование базисных функций в расчетах кинетики деформирования конструкций // Прочность машиностроительных конструкций при переменных нагружениях: Сб. науч. тр. ЧПИ. – Челябинск, 1979. – № 236. – С. 49–58.
14. Кульчихин Е.Т., Мартыненко М.Е., Садаков О.С. Расширенный принцип Мазинга для описания кривых неизотермического деформирования при испытаниях с выдержками // Проблемы прочности. – 1979. – № 11. – С. 46–48.
15. Порошин В.Б., Садаков О.С. Матричный метод расчета кинетики неупругого деформирования диска газовой турбины // Проблемы прочности. – 1982. – № 8. – С. 18–22.
16. Кононов К.М., Порошин В.Б., Садаков О.С. К описанию усталостного повреждения материала при неупругом нагружении с выдержками // Проблемы прочности. – 1982. – № 7. – С. 23–26.
17. Мадудин В.Н., Садаков О.С. Модификация метода конечных элементов применительно к расчету неупругого деформирования конструкций // Прикладные проблемы прочности и пластичности, вып. 20. – Горький: ГГУ, 1982. – С. 24–29.
18. Расчеты и испытания на прочность. Расчетные методы определения несущей способности элементов машин и конструкций. МР 60-82. Метод определения параметров кривых ползучести и накопления повреждений при одноосном нагружении / Д.А. Гохфельд, Е.Т. Кульчихин, О.С. Садаков и др. // Методические рекомендации ВНИИМАШ. – М, 1982. – 91 с.
19. Несмеянов А.С., Садаков О.С. Векторный метод расчета кинетики неупругого деформирования конструкций с применением структурной модели среды // Прочность машин и аппаратов при переменных нагружениях: Сб. тр. ЧПИ. – Челябинск, 1983. – С. 75–81.
20. К оценке долговечности при неизотермическом малоцикловом нагружении с выдержками / Д.А. Гохфельд, К.М. Кононов, В.Б. Порошин, О.С. Садаков // Машиноведение. – 1983. – № 4. – С. 72–77.
21. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Пластичность и ползучесть элементов конструкций при повторных нагружениях. – М.: Машиностроение, 1984. – 256 с.
22. Кульчихин Е.Т., Садаков О.С. О двух механизмах неупругого деформирования конструкционных материалов // Проблемы прочности. – 1985. – № 6. – С. 25–28.
23. Кульчихин Е.Т., Садаков О.С. К построению номограмм для определения размаха неупругой деформации в зоне концентрации напряжений // Прочность машин и аппаратов при переменных нагружениях: Тематический сборник научных трудов. – Челябинск: ЧПИ, 1986. – С. 22–25.
24. Садаков О.С. Анализ общих закономерностей поведения неупругих конструкций и методы расчета // Прочность, пластичность и вязкоупругость материалов и конструкций: Сб. науч. трудов. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1986. – С. 124–129.
25. К описанию малоциклового усталости при сложном напряженном состоянии с учетом ползучести / Д.А. Гохфельд, К.М. Кононов, В.Б. Порошин, О.С. Садаков // Прочность материалов и элементов конструкций при сложном напряженном состоянии. – Киев: Наук. думка, 1986. – С. 89–93.

26. Гохфельд Д.А., Кульчихин Е.Т., Садаков О.С. Повторно-переменное неупругое деформирование в зоне концентрации напряжений // *Машиноведение*. – 1987. – № 2. – С. 37–43.
27. Апайчев М.В., Садаков О.С. Прямой расчет стационарного циклического состояния трубки теплообменника// *Прикладные проблемы прочности и пластичности. Численное моделирование физико-механических процессов: Всесоюзн. межвуз. сб.* – Горьк. ун-т, 1989. – С.12–16.
28. Гохфельд Д.А., Кульчихин Е.Т., Садаков О.С. Закономерности подобия в реологических свойствах материалов при повторно-переменных нагружениях // *Проблемы прочности*. – 1989. – № 3. – С. 21–25.
29. Apajchev M.V., Madudin V.N., Sadakov O.S. On mathematical modelling of inelastic deformation behavior of anisotropic media// *Trans. 10th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology*. – Anaheim, USA, 1989. – Vol. L. – P.25–29.
30. Gokhfeld D.A., Kononov K.M., Poroshin V.B., Sadakov O.S. Coupled mathematical models for cyclic inelastic deformation and damage accumulation processes// *Trans. 10th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology*. – Anaheim, USA, 1989. – Vol. L. – P. 19–24.
31. Sadakov O.S., Madudin V.N., Apajchev M.V. On the state equations for anisotropic elasto-visco-plastic bodies// *Creep in Structures: IUTAM Simp.: Cracow, Poland, 1990.* – Springer-Verlag; Berlin; Heidelberg, 1991. – P.179–185.
32. Gokhfeld D.A., Sadakov O.S. Generalized similarity principle for plasticity and creep analyses of structural elements// *Trans. 11th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology (August 1991)*. – Tokyo, Japan, 1991. – Vol. L. – P. 581–592.
33. Gokhfeld D.A., Poroshin V.B., Sadakov O.S. Plasticity and creep, LCF and crack propagation processes: related state equation// *Trans. 11th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology (August 1991)*. – Tokyo, Japan, 1991. – Vol. L. – P. 283–288.
34. Садаков О.С., Гохфельд Д.А. Концепция микронеоднородности в реологии конструкций // *Динамика, прочность и износостойкость машин (Международный журнал на электронных носителях)*. – 1995. – Апрель. – Вып. 1. – С. 16–21.
35. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Семейство структурных моделей для описания деформирования и разрушения материалов различного типа// *Динамика, прочность и износостойкость машин (Международный журнал на электронных носителях)*. – 1995. – Апрель. – Вып. 1. – С.9–15.
36. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Анализ неупругого деформирования в области концентрации напряжений при повторных нагружениях// *Сборник трудов ЦКТИ им. Ползунова (Специальный выпуск, посвященный памяти проф. Л.М. Качанова)*. – СПб: Машиностроение, 1995.
37. Gokhfeld D.A., Sadakov O.S. Steady cyclic state of a structure: methods of its direct determination// *Inelastic Behavior of Structures under Variable Loads*. – Kluwer acad.pub., 1995. – P.449–461.
38. Gokhfeld D.A., Poroshin V.B., Sadakov O.S. On LCF Lifetime Prediction in the Case of Stress Concentration Zone// *Trans. IV Int. Conf. on Computational Plasticity. Fundamentals and Applications (COMPLAS)*. – Barcelona: Spain, 1995. Pineridge Press, Swansea, U.K. – 6 p.
39. Садаков О.С., Порошин В.Б. Математическое моделирование процессов накопления повреждения и роста трещины при малоцикловом нагружении // *Динамика, прочность и износостойкость машин: Междунар. журн. на электрон. носителях*. – 1996. – Вып. 2. – С. 46–53.
40. Механические свойства сталей и сплавов при нестационарном нагружении (Справочник)/ Д.А. Гохфельд, Л.Б. Гецов, К.М. Кононов и др. – Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 1996.– 408 с.
41. Ивашков И.А., Мартыненко М.Е., Садаков О.С. Экспериментальное определение и математическое описание поверхности разрушения графита при непропорциональном нагружении // *Динамика, прочность и износостойкость машин: Междунар. журнал на электронных носителях*. – 1996. – Вып. 2. – С.24–28.
42. Асташкин В.М., Ершов А.Л., Садаков О.С. Структурная модель деформационных свойств поливинилхлорида при повторно-переменном неизотермическом нагружении // *Известия вузов. Строительство*. – 1997. – № 6. – С.144–148.
43. Малоцикловое разрушение в зонах концентрации напряжений: расчет и эксперимент/ Д.А. Гохфельд, А.Н. Петров, В.Б. Порошин и др. // *II-я международная конференция «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности металлоконструкций и методы их решения»: Сб. докладов*. – СПб: Изд. СПбГТУ, 1997. – С. 28–30.

*Поступила в редакцию 15 апреля 2003 г.*

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРБИТ КОМЕТ

Н.Ю. Емельяненко

В работе исследуется кинематика касательного сближения малого тела с Юпитером. В рамках парной задачи двух тел (Солнце – Юпитер, Солнце – комета) предлагаются две модели комет, у которых точки низкоскоростного касания их орбит с орбитой Юпитера совпадают с апсидальными точками. Рассматривается возможность и определяются условия длительного сближения этих комет с Юпитером. Анализируются особенности сближений модельных и реальных комет, орбиты которых близки к предложенным моделям. Работа поддержана грантом РФФИ № 01-02-16006.

## Введение

Эта работа продолжает исследование кинематики низкоскоростных сближений с Юпитером комет, удовлетворяющих условию

$$T_j \geq 2,9, \quad (1)$$

где  $T_j$  – постоянная Тиссерана кометы относительно Юпитера.

В работах [1, 2] введены понятия точек низкоскоростного касания орбит кометы и Юпитера, точки минимальной йовицентрической скорости и низкоскоростного касательного участка на орбите кометы. На плоскости  $(a, e)$  выделена область орбит комет с особенностями в сближениях с Юпитером – область  $\omega$  (рис. 1).

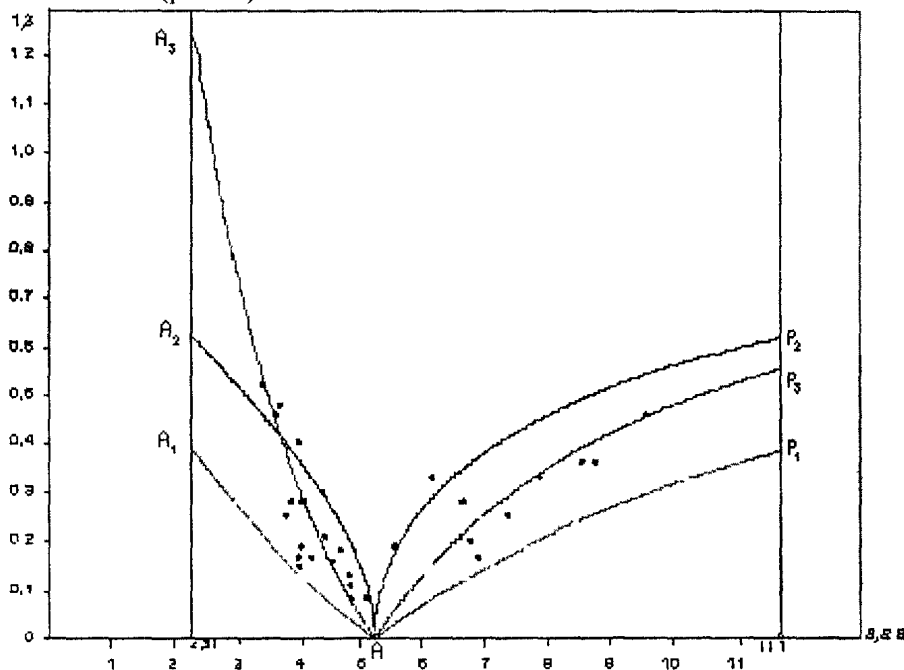


Рис. 1. Невозмущенные орбиты всех наблюдаемых комет с особенностями в сближениях с Юпитером в расширенной области  $\omega$

## Основные задачи исследования

В работе изучаются модельные кометы, орбиты которых расположены на нижней линии области  $\omega$  – линии  $A_1AP_1$ .

1. Рассматривается эволюция орбит при продвижении вдоль линии  $A_1AP_1$  (изменение элементов, характеризующих размеры и форму орбиты).

2. Оценивается возможность и определяются условия синхронного движения Юпитера и кометы по афелийной (перигелийной) части орбиты.

3. Выделяются и описываются возможные особенности сближения с Юпитером модельных комет.

Так как модели комет из области  $\omega$  выбираются по расположению точек низкоскоростного касания их орбит и орбиты Юпитера и неоднократно упоминаются в последующем изложении материала, повторим определения точек низкоскоростного касания орбит.

Пусть в момент времени  $t_M$  комета находится в точке орбиты  $M$ , а Юпитер – в точке  $M'$ . Пусть  $\vec{V}_k, \vec{V}_{ю}$  – векторы гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера;  $\vec{V}_j$  – вектор йовицентрической скорости кометы;  $V_k, V_{ю}, V_j$  – абсолютные величины векторов  $\vec{V}_k, \vec{V}_{ю}, \vec{V}_j$ .

Точки  $M$  и  $M'$  назовем точками низкоскоростного касания орбит, если в момент времени  $t_M$  векторы гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера равны:

$$\vec{V}_k \parallel \vec{V}_{ю}; \quad (2)$$

$$V_k = V_{ю}. \quad (3)$$

Равенство (2) означает коллинеарность и одинаковую направленность векторов.

### 1. Модель $A_1$ (невозмущенная орбита до и после сближения)

Это кометы, орбиты которых удовлетворяют условию

$$e_k = \frac{a_{ю} - a_k}{a_{ю} + a_k}. \quad (1.1)$$

Они расположены на нижней левой границе области  $\omega$ , линии  $AA_1$  (рис. 1). В дальнейшем изложении все эти кометы называются кометой  $A_1$ . Для кометы  $A_1$  выполнено равенство:

$$Q_k = r_M = \frac{2a_k a_{ю}}{a_k + a_{ю}}, \quad (1.2)$$

то есть на орбите этой кометы имеется всего одна точка низкоскоростного касания –  $M$ , совпадающая с афелием.

Оценим элементы, характеризующие размеры орбиты кометы  $A_1$ , на линии орбит  $AA_1$ , где точка  $A$  соответствует орбите Юпитера (в рассматриваемых моделях это круговая орбита:  $a_{ю} = 5,2043$  а.е.,  $e = 0$ ), точка  $A_1$  на плоскости  $(a, e)$  имеет координаты:  $a = 3,52$  а.е.,  $e = 0,19$ . Выразим элементы  $a, Q, q$  орбиты кометы  $A_1$  через эксцентриситет  $e_k$  и большую полуось орбиты Юпитера  $a_{ю}$ :

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1 - e_k}{1 + e_k} a_{ю}; \\ Q_k &= (1 - e_k) a_{ю}; \\ q_k &= \frac{(1 - e_k)^2}{1 + e_k} a_{ю}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Исследование функций  $a_k = a_k(e)$ ,  $Q_k = Q_k(e)$ ,  $q_k = q_k(e)$  показало, что при продвижении вдоль линии орбит  $AA_1$  области  $\omega$  размеры орбиты кометы  $A_1$  непрерывно убывают от орбиты Юпитера до наименьшей  $A_1^{min}$ , изображенной на рис. 2.

$$\begin{aligned} a &= 3,52 \text{ а.е.} \\ A_1^{min}: Q &= 4,20 \text{ а.е.} \\ q &= 2,84 \text{ а.е.} \\ e &= 0,19. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Найдем условия, необходимые для длительного низкоскоростного сближения кометы  $A_1$  и Юпитера.

Рассмотрим синхронные движения Юпитера и кометы  $A_1$  по афелийной части ее орбиты  $I_1 Q I_2$ ; точки  $I_1, I_2$  образуют хорду, проходящую через мнимый фокус эллиптической орбиты кометы симметрично относительно линии апсид. Пусть в момент прохождения

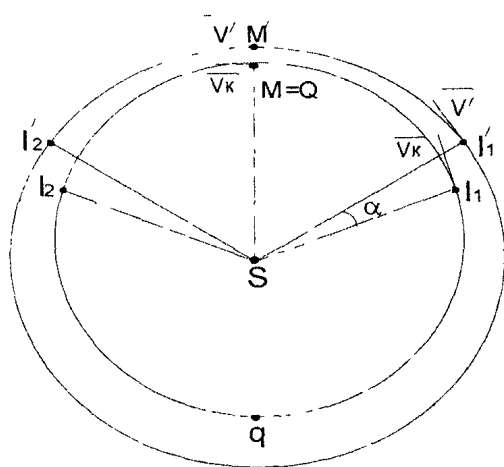


Рис. 2. Наименьшая орбита кометы  $A_1$  в области  $\omega$  ( $e = 0,1927$ )

кометой  $A_1$  точки афелия (момент времени  $T_Q$ ) комета и Юпитер находятся на одном радиусе-векторе (напомним, что точки  $Q$  и  $M'$  – это точки низкоскоростного касания орбит кометы  $A_1$  и

Юпитера;  $T_Q = T_M$ ). Синхронные движения  $I_1' M' I_2'$  Юпитера и  $I_1 Q I_2$  кометы действительно возможны, так как в рассматриваемых моделях комета и Юпитер движутся по законам Кеплера (см. рис. 2):

$$E_k + e_k \sin E_k = M_k = x a_k^{3/2} (t_f - T_Q), \tag{1.5}$$

$$E_{ю} = M_{ю} = v_{ю} = x a_{ю}^{-3/2} (t_f - T_Q),$$

где  $t_f$  – момент прохождения кометой точки  $I_2$  и Юпитером – точки  $I_2'$  (ввиду симметрии движения тел относительно точки афелия рассмотрим дуги орбит  $Q I_2$  и  $M' I_2'$ ).

Так как орбитальная скорость кометы  $A_1$  выше орбитальной скорости Юпитера, в момент времени  $t_f$  выполнено равенство

$$M_{ю} = v_k - \alpha_f, \tag{1.6}$$

где  $\alpha_f$  – угол между направлением на комету  $A_1$  и Юпитер в момент времени  $t_f$ .

Из уравнений Кеплера (1.5) с учетом равенства (1.6) определяем угол  $\alpha_f$ :

$$\alpha_f = v_k - (E_k + e_k \sin E_k) \left( \frac{a_k}{a_{ю}} \right)^{3/2} \tag{1.7}$$

(величины  $E, M, v$  отсчитываем от точки афелия).

Для кометы  $A_1$

$$\cos E_k = e_k, \cos v_k = \frac{2e_k}{1 + e_k^2}. \tag{1.8}$$

Выражения для косинусов получены с учетом того, что в момент времени  $t_f$  радиус-вектор кометы  $A_1$  находится по формуле

$$r_f = a_k (1 + e_k^2). \tag{1.9}$$

Решение уравнения (1.7) относительно  $\alpha_f$  для кометы  $A_1$  дает нам значение угла между направлением на Юпитер и на комету в момент времени  $t_f$  для различных значений эксцентриситета (см. табл. 1). Положение кометы  $I_1$  и Юпитера  $I_1'$  (см. рис. 2) с углом  $\alpha_f$  между направлением на эти объекты, соответствующим табличному значению, назовем начальными условиями низкоскоростного касательного сближения кометы  $A_1$ .

Таблица 1

Значения угла  $\alpha_f$  в момент времени  $t_f$  как функция эксцентриситета орбиты кометы  $A_1$

$e_k$	$\alpha_f$ , град	$v_k$ , град	$E_k$ , град	$r_f$ , а.е.	$\Delta_f^I$ , а.е.	$v_k / v_{ю}$	$\Delta_f^Q$ , а.е.
0,05	6,83	84,3	87,1	4,72	0,76	1,05	0,26
0,06	7,98	83,1	86,6	4,63	0,89	1,06	0,31
0,07	9,07	82,0	86,0	4,55	1,01	1,07	0,36
0,08	10,11	80,9	85,4	4,46	1,13	1,08	0,42
0,09	11,08	79,7	84,8	4,38	1,24	1,08	0,47
0,10	12,00	78,6	84,3	4,30	1,34	1,09	0,52
0,11	12,87	77,4	83,7	4,22	1,44	1,10	0,57
0,12	13,68	76,3	83,1	4,15	1,53	1,11	0,62
0,13	14,44	75,2	82,5	4,07	1,62	1,12	0,68
0,14	15,16	74,1	82,0	4,00	1,70	1,13	0,73
0,15	15,83	72,9	81,4	3,93	1,78	1,14	0,78
0,16	16,46	71,8	80,8	3,87	1,86	1,14	0,83
0,17	17,04	70,7	80,2	3,80	1,92	1,15	0,89
0,18	17,59	69,6	79,6	3,73	1,99	1,16	0,94
0,19	18,09	68,5	79,0	3,67	2,06	1,17	0,99

Примечание В третьем – восьмом столбцах таблицы для кометы  $A_1$  последовательно указываются истинная аномалия  $v$ , эксцентрисическая аномалия  $E_k$ , радиус-вектор  $r_k$  и расстояние до Юпитера в точке  $I$ , отношение модулей гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера в момент времени  $t_f$ , минимальное йовицентрическое расстояние на афелийной части орбиты (в точке афелия).

Проанализируем изменение каждого элемента табл. 1 по вертикали.

Угол  $\alpha_i$ , величины  $\Delta_j^I, \Delta_j^Q, V_K/V_{Ю}$  непрерывно увеличиваются – область сближения единичного радиуса охватывает все меньшую дугу афелийной части орбиты. В точке  $A_1$  линии  $AA_1$  (см. рис. 1) область сближения стянется в одну-единственную точку афелия  $Q$ . Величины  $v_K, E_{Ю}, r_I$  непрерывно уменьшаются – сама афелийная часть орбиты уменьшается. С увеличением эксцентриситета кометной орбиты условия для длительного низкоскоростного сближения ухудшаются. Динамику процесса отражает рис. 3, на котором представлены графики изменения йовицентрического расстояния кометы  $A_1$  на афелийной части орбиты в зависимости от истинной аномалии  $v_K$ . Так как угол  $\alpha$  мал ( $0,95 \leq \cos \alpha \leq 0,99$ ), на участке траектории  $I_1Q$  изменяем его равномерно.

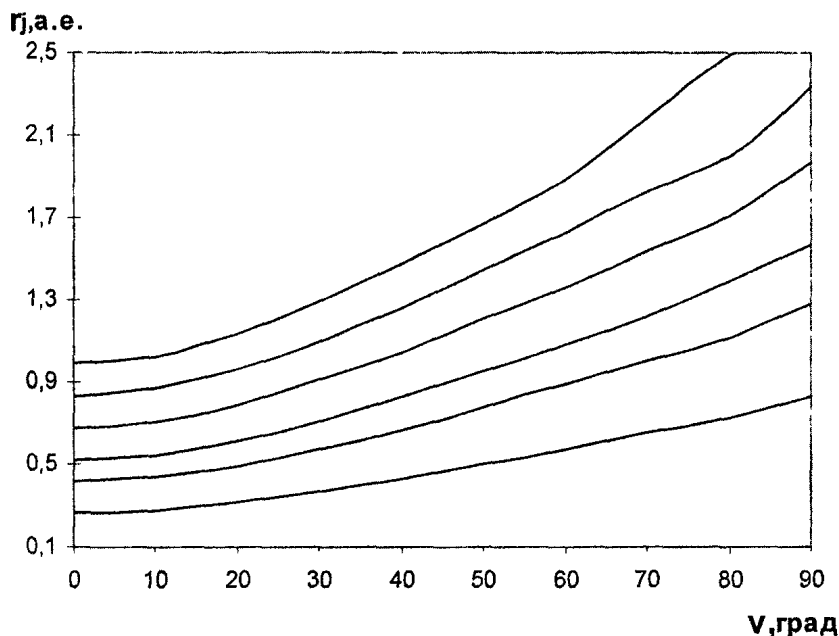


Рис. 3. Графики изменения йовицентрического расстояния кометы  $A_1$  на афелийной части орбиты

Остановимся более подробно на возможных особенностях сближения кометы  $A_1$  и Юпитера.

Совершенно очевидно, что для орбит  $A_1$  в точке  $Q(M)$  выполнены оба условия (2), (3) (см. введение), если в момент времени  $T_Q$  комета и Юпитер находятся на одном радиусе-векторе. В этом случае в точке  $Q(M)$  йовицентрическая скорость кометы  $A_1$  равна нулю и в ее окрестности с неизбежностью будет фиксироваться ВСЗ – временный спутниковый захват кометы Юпитером в смысле Эверхарта ( $e_j < 1$ ).

Непосредственный анализ предпоследнего столбца табл. 1 и рис. 2 позволяет сделать вывод о возможности длительного захвата, не связанного с гравитационным взаимодействием с Юпитером, так как на всем афелийном участке орбиты приблизительно выполняются условия (2), (3), описанные выше.

Оценим изменение йовицентрического расстояния кометы  $A_1$  на афелийном участке орбиты. По теореме косинусов с учетом первого из равенств (1.3)

$$\Delta_j = \sqrt{1 + \frac{(1-e_K)^4}{(1-e_K \cos v_K)^2} - \frac{2(1-e_K)^2}{1-e_K \cos v_K} \cos \alpha} \cdot a_{Ю} \quad (1.10)$$

Исследование функции  $\Delta_j = \Delta_j(v_K, \alpha)$  показало, что она имеет единственный экстремум – минимум

$$\Delta_j^{\min} = \Delta_j^Q = a_{Ю} - Q_K = e_K a_{Ю} \quad (1.11)$$

достигаемый при выполнении равенств:  $v_K = 0$ ;  $\alpha = 0$ , то есть когда комета проходит точку афелия. Эта точка одновременно является точкой низкоскоростного касания орбит и точкой минимума  $S$ .

Итак, сближение кометы  $A_1$  и Юпитера, удовлетворяющее начальным условиям, рассмотренным выше, – это низкоскоростное касательное сближение. Особенности сближения:

1. Это длительное сближение, охватывающее всю афелийную часть орбиты. Для наименьшей из орбит (1.4), изображенной на рис. 2, расстояния до Юпитера в точках  $I_1, I_2$  совпадают с радиусом низкоскоростного сближения [3].

2. Функция йовицентрического расстояния кометы  $A_1$  имеет единственный минимум  $\rho$ , точка минимума  $C$  на орбите кометы совпадает с точкой афелия:  $C \equiv Q$ .

3. Точка афелия одновременно является точкой низкоскоростного касания орбит:  $Q \equiv M$ .

4. Точка афелия – центр длинного низкоскоростного касательного участка, на котором с неизбежностью возникает временный спутниковый захват в смысле Эверхарта.

**2. Модель  $P_1$  (невозмущенная орбита до и после сближения)**

Это кометы, орбиты которых удовлетворяют условию

$$e_k = \frac{a_k - a_{ю}}{a_{ю} + a_k} \tag{2.1}$$

Они расположены на нижней правой границе области  $\omega$ , линии  $AP_1$  (см. рис.1). В дальнейшем изложении все эти кометы называются кометой  $P_1$ . Для кометы  $P_1$  выполнено равенство

$$q_k = r_M = \frac{2a_k a_{ю}}{a_k + a_{ю}}, \tag{2.2}$$

на орбите этой кометы имеется одна точка низкоскоростного касания  $M$ , совпадающая с перигелием.

Оценим элементы, характеризующие размеры орбиты кометы  $P_1$ , на линии орбит  $AP_1$ , где точка  $A$  соответствует орбите Юпитера, точка  $P_1$  на плоскости  $(a, e)$  имеет координаты:  $a = 7,68$  а.е.,  $e = 0,19$ . Выразим элементы  $a, Q, q$  орбиты кометы  $P_1$  через эксцентриситет  $e_k$  и большую полуось орбиты Юпитера  $a_{ю}$ :

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1 + e_k}{1 - e_k} a_{ю}; \\ Q_k &= \frac{(1 + e_k)^2}{1 - e_k} a_{ю}; \\ q_k &= (1 + e_k) a_{ю}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

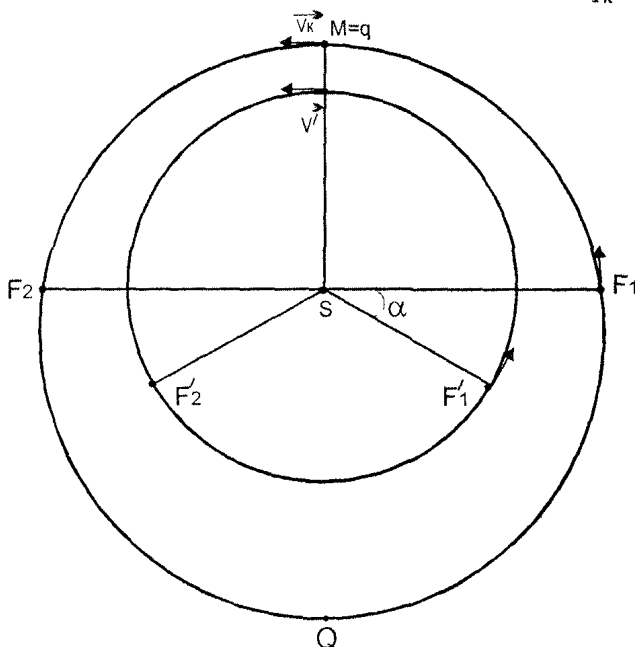


Рис. 4. Наибольшая орбита кометы  $P_1$  в области  $\omega$  ( $e = 0,1925$ )

Исследование функций  $a_k = a_k(e), Q_k = Q_k(e), q_k = q_k(e)$  показало, что при продвижении вдоль линии орбит  $AP_1$  области  $\omega$  размеры орбиты кометы  $P_1$  непрерывно возрастают от орбиты Юпитера до наибольшей  $P_1^{max}$ , изображенной на рис. 4:

$$\begin{aligned} a &= 7,68 \text{ а.е.}; \\ P_1^{max}: Q &= 9,16 \text{ а.е.}; \\ q &= 6,20 \text{ а.е.}; \\ e &= 0,19. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Найдем условия, необходимые для длительного низкоскоростного сближения кометы  $P_1$  и Юпитера.

Рассмотрим синхронные движения Юпитера и кометы  $P_1$  по перигелийной части ее орбиты  $F_1qF_2$ ; точки  $F_1, F_2$  образуют хорду, проходящую через Солнце симметрично относительно линии апсид. Пусть в момент прохождения кометой  $P_1$  точки перигелия (момент времени  $T_q$ ) комета и Юпитер находятся на одном радиусе-векторе (точки  $q$  и  $M'$  – это точки

низкоскоростного касания орбит кометы  $P_1$  и Юпитера:  $T_q = T_M$ ). Запишем уравнения Кеплера для кометы  $P_1$  и Юпитера (см. рис. 4):

$$\begin{aligned} E_k - e_k \sin E_k &= M_k = x a_k^{-3/2} (t_F - T_q), \\ E_{ю} = M_{ю} = v_{ю} &= x a_{ю}^{-3/2} (t_F - T_q), \end{aligned} \tag{2.5}$$

где  $t_F$  – момент прохождения кометы точки  $F_2$  и Юпитером – точки  $F_2'$  (рассмотрим дуги орбит  $qF_2$  и  $M'F_2'$ ). Так как орбитальная скорость кометы  $P_1$  ниже орбитальной скорости Юпитера, в момент времени  $t_F$  выполнено равенство

$$M_{Ю} = v_k + \alpha_F, \quad (2.6)$$

где  $\alpha_F$  – угол между направлением на комету  $P_1$  и Юпитер в момент времени  $t_F$ .

Из уравнений Кеплера (2.5) с учетом равенства (2.6) определяем угол  $\alpha_F$ :

$$\alpha_F = (E_k - e_k \sin E_k) \left( \frac{a_k}{a_{Ю}} \right)^{3/2} - v_k \quad (2.7)$$

(величины  $E, M, v$  отсчитываем от точки перигелия).

Для кометы  $P_1$

$$\cos E_k = e_k, \cos v_k = 0; v_k = \frac{\pi}{2}. \quad (2.8)$$

Выражения для косинусов получены с учетом того, что в момент времени  $t_F$  радиус-вектор кометы  $P_1$  находится по формуле

$$r_F = a_k (1 - e_k^2). \quad (2.9)$$

Решение уравнения (2.7) относительно  $\alpha_F$  для кометы  $P_1$  дает нам значение угла между направлением на Юпитер и на комету в момент времени  $t_F$  для различных значений эксцентриситета (табл. 2). Положение кометы  $F_1$  и Юпитера  $F_1'$  (см. рис. 4) с углом  $\alpha_F$  между направлением на эти объекты, соответствующим табличному значению, назовем начальными условиями низкоскоростного касательного сближения кометы  $P_1$ .

Таблица 2

Значения угла  $\alpha_F$  в момент времени  $t_F$  как функция эксцентриситета орбиты кометы  $P_1$

$e_k$	$\alpha_F$ , град	$E_k$ , град	$r_F$ , а.е.	$\Delta_J^F$ , а.е.	$v_k/v_{Ю}$	$\Delta_J^q$ , а.е.
0,05	7,92	87,1	5,74	0,92	0,95	0,26
0,06	9,54	86,6	5,85	1,12	0,95	0,31
0,07	11,18	86,0	5,96	1,32	0,94	0,36
0,08	12,82	85,4	6,07	1,53	0,93	0,42
0,09	14,48	84,8	6,18	1,73	0,92	0,47
0,10	16,15	84,3	6,30	1,94	0,91	0,52
0,11	17,83	83,7	6,41	2,16	0,91	0,57
0,12	19,53	83,1	6,53	2,38	0,90	0,62
0,13	21,23	82,5	6,65	2,60	0,89	0,68
0,14	22,95	82,0	6,76	2,83	0,88	0,73
0,15	24,68	81,4	6,88	3,06	0,88	0,78
0,16	26,43	80,8	7,00	3,29	0,87	0,83
0,17	28,18	80,2	7,12	3,53	0,87	0,89
0,18	29,95	79,6	7,25	3,77	0,86	0,94
0,19	31,73	79,0	7,37	4,02	0,85	0,99

Примечание В третьем – седьмом столбцах таблицы для кометы  $P_1$  последовательно указываются: эксцентриситетная аномалия  $E$ , радиус-вектор  $r_F$  и расстояние до Юпитера  $\Delta_J^F$  в точке  $F$ , отношение модулей гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера в момент времени  $t_F$ ; минимальное ювицентрическое расстояние до Юпитера на перигелийной части орбиты (в точке перигелия)

Проанализируем изменение каждого элемента табл. 2 по вертикали.

Угол  $\alpha_F$ , величины  $r_F$ ,  $\Delta_J^F$ ,  $\Delta_J^q$  непрерывно увеличиваются. Только для кругообразных орбит ( $e \leq 0,6$ ) комета будет находиться в сфере единичного радиуса на всей перигелийной части орбиты; при увеличении эксцентриситета область сближения будет охватывать все меньшую и меньшую дугу перигелийной части орбиты. В точке  $P_1$  линии  $AP_1$  (см. рис. 1) область сближения единичного радиуса стянется в одну-единственную точку перигелия  $q$ . Величина  $E_F$  непрерывно уменьшается – дуга орбиты  $F_1qF_2$  составляет все меньшую часть полного орбитального эллипса



кометы  $P_1$ . С увеличением эксцентриситета кометной орбиты условия для длительного низкоскоростного сближения кометы  $P_1$  быстро ухудшаются.

Динамику процесса отражает рис. 5. Угол  $\alpha$  для кометы  $P_1$  изменяется в более широких пределах ( $0,85 \leq \cos \alpha \leq 0,99$ ), но при построении всех графиков мы изменяли его равномерно. Из графиков следует, что при равномерном изменении угла  $\alpha$  на участке орбиты  $F_1qF_2$  функция йовицентрического расстояния кометы  $P_1$  (величина  $\Delta_j$ ) имеет единственный экстремум-минимум, который достигается в точке перигелия.

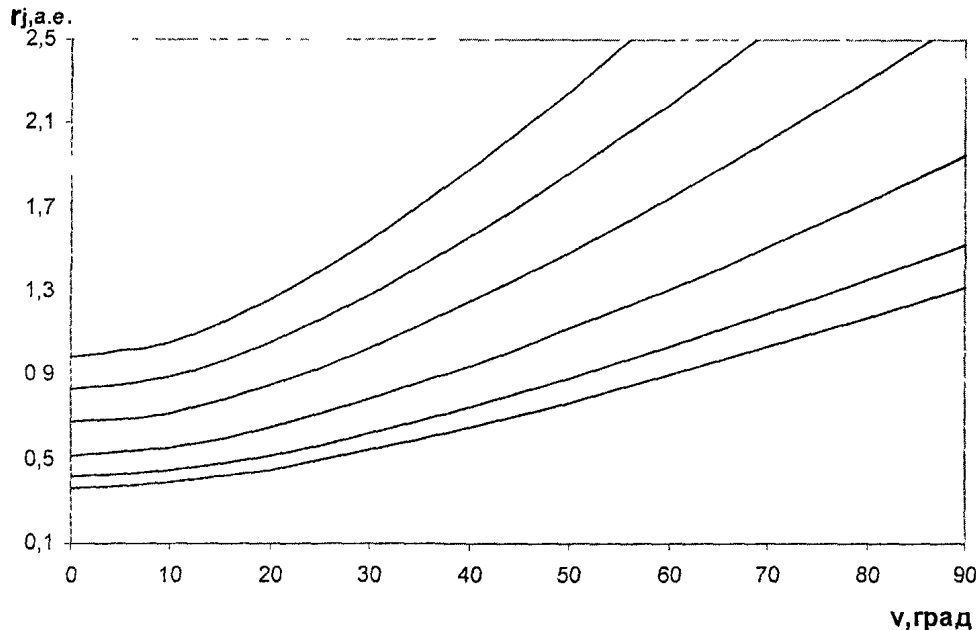


Рис. 5. Графики изменения йовицентрического расстояния кометы  $P_1$  на перигелийной части орбиты

Остановимся более подробно на возможных особенностях сближения кометы  $P_1$  и Юпитера.

Совершенно очевидно, что для орбит  $P_1$  в точке  $q(M)$  выполнены оба условия (2), (3), если в момент времени  $T_q$  комета и Юпитер находятся на одном радиусе-векторе.

В этом случае в точке  $q(M)$  йовицентрическая скорость кометы  $P_1$  равна нулю и в ее окрестности с неизбежностью будет фиксироваться временный спутниковый захват, не связанный с гравитационным взаимодействием с Юпитером. Но из анализа рис. 4 видно, что ВСЗ в смысле Эверхарта невозможен на всей перигелийной части орбиты даже для комет с кругообразными орбитами, так как в точках  $F_1, F_2$  заведомо нарушается условие (2) (параллельности векторов гелиоцентрических скоростей кометы  $P_1$  и Юпитера). Благоприятные для ВСЗ положения планеты и кометы появляются только после пересечения Юпитером линии  $F_1 F_2$ .

Оценим изменение йовицентрического расстояния кометы  $P_1$  на перигелийном участке орбиты. По теореме косинусов с учетом первого из равенств (2.3):

$$\Delta_j = \sqrt{1 + \frac{(1+e_k)^4}{(1+e_k \cos v_k)^2} - \frac{2(1+e_k)^2}{1+e_k \cos v_k} \cos \alpha \cdot a_{ю}} \quad (2.10)$$

Исследование функции  $\Delta_j = \Delta_j(v_k, \alpha)$  показало, что она имеет единственный экстремум-минимум

$$\Delta_j^{\text{min}} = \Delta_j^q = q_k - a_{ю} = e_k a_{ю}, \quad (2.11)$$

достигаемый при выполнении равенств:  $v_k=0$ ;  $\alpha=0$ , то есть когда комета проходит точку перигелия. Эта точка одновременно является точкой низкоскоростного касания орбит и точкой минимума  $C$ .

Итак, сближение кометы  $P_1$  и Юпитера, удовлетворяющее начальным условиям, рассмотренным выше – это низкоскоростное касательное сближение. Особенности сближения:

1. Это длительное сближение. Для комет, орбиты которых удовлетворяют условию:  $e_k \leq 0,11$ , вся перигелийная часть орбиты принадлежит области сближения с радиусом в 2 а.е. Для остальных орбит линии  $AP_1$  области  $\omega$  длительность сближения обеспечивается большой длиной дуги орбиты, принадлежащей области сближения (см. рис. 3, 4).

2. Функция йовицентрического расстояния кометы  $P_1$  имеет единственный минимум  $\rho$ , точка минимума  $C$  на орбите кометы совпадает с точкой перигелия:  $C \equiv q$ .

3. Точка перигелия одновременно является точкой низкоскоростного касания орбит:  $q \equiv M$ .

4. Точка перигелия – центр низкоскоростного касательного участка, на котором с неизбежностью возникает временный спутниковый захват в смысле Эверхарта. Но для кометы  $P_1$  ВСЗ не может охватить всю перигелийную часть орбиты.

Пусть орбиту  $A_1$  или  $P_1$  на периоде обращения, отмеченном минимумом, имеет реальная комета. Приведенные выше геометрические результаты будут искажаться, в основном, по двум причинам. Во-первых, Юпитер движется по эллиптической орбите. От того, в какой части этой орбиты произойдет сближение, зависит расположение точек низкоскоростного касания  $M_i$  [см. условия (1.2); (2.2)]. Несовпадение точек  $M_i$  и апсидальных точек приводит к несовпадению моментов времени  $T$  ( $T = T_Q \cup T = T_q$ ) и  $T_M$  (момент касания орбит). Во-вторых, неизбежно нарушаются начальные условия, необходимые для синхронного движения, что приводит к несовпадению моментов времени  $T$  и  $T_\rho$  (момент минимума). Обе причины приведут к отсутствию точки низкоскоростного касания орбит кометы и Юпитера. Вместо нее появится точка минимальной йовицентрической скорости  $\underline{M}$ , момент прохождения которой принадлежит промежутку  $[T_M, T_\rho]$ . Высокая эффективность сближения реальной кометы обеспечивается не только величиной  $\rho$ , но и тем, что в окрестности точки минимума находится точка минимальной йовицентрической скорости  $\underline{M}$ . Окрестности точки  $\underline{M}$  образуют низкоскоростной касательный участок, на котором фиксируется ВСЗ ( $e_j < 1$ ). Этот участок может охватывать всю афелийную часть орбиты кометы  $A_1$ , включая точку минимума  $C$ , но для перигелийной части орбиты кометы  $P_1$  это невозможно по причине, изложенной выше. Гравитация Юпитера непрерывно возмущает орбиту кометы. Если величины  $\Delta_j^M$ ,  $\rho$  окажутся менее радиуса сферы действия Юпитера, комета испытает временный гравитационный захват (ВГЗ) с возможным выходом на спутниковую (по форме) орбиту, так как на низкоскоростном касательном участке орбиты тангенциальная составляющая йовицентрического ускорения мала. ВГЗ будет увеличивать йовицентрическую скорость кометы в окрестности точки минимума. У функции  $V_j$  возможно появление экстремума – максимума в момент времени  $T_\rho$  и нарушение условия ВСЗ в окрестности точки  $C$ . С другой стороны, гравитационный захват при некоторых дополнительных условиях, наложенных, например, на величину  $\rho$ , по-видимому, может перевести комету на орбиту временного спутника Юпитера. Примеры комет, совершивших несколько обращений вокруг планеты, в настоящее время известны. Это кометы Герельс 3 [4–6], Шумейкер-Леви 9 [7], Хелин-Роман-Крокет [8] и некоторые другие кометы.

#### Литература

1. Emel'yanenko N. Yu. Kinematics of the comets low-velocity encounters with Jupiter // Proceeding of the International conference SAMMAC. – 2000. – P. 35–40.
2. Емельяненко Н.Ю. Короткопериодические кометы с высоким значением постоянной Тиссерана. 3. Кинематика низкоскоростных сближений // Астрон. вест. – 2003. – Т. 37.1. – С. 66–73.
3. Емельяненко Н.Ю. Динамика орбит комет при тесном сближении с Юпитером. Анализ длительности сближений // Астрон. вест. – 2003. – Т. 37.2. – С. 153–160.
4. Казимирчак-Полонская Е.И. Захват комет Юпитером и некоторые закономерности в вековой эволюции кометных орбит // Проблемы исследования Вселенной. Астрометрия и небесная механика. – М.–Л.; 1978. – Вып. 7. – С. 340–383.
5. Rickman H., Malmort A.M. Variations of the Orbit of Comet p/Gehrels 3: Temporary Satellite Captures by Jupiter // Astronomy and Astroph. – 1981. – V. 102. – P. 165–170.
6. Емельяненко Н.Ю. Сближение кометы Герельс 3 с Юпитером // Кометн. цирк.– 1985. – № 341. – С. 3.
7. Sekanina Z. Tidal breakup of the nucleus of comet Shoemaker-Levy 9 // The collision of comet P/ Shoemaker-Levy 9 and Jupiter eds. K.S.Nol, H.A.IWeaver and P.D.Feldman. Cambridge University Press. – 1994.– P. 1–23.
8. Rickman H. Physico-dynamical evolution of aging comet. // Phis-Dyn. Minor Bodies (Goutelas 91). – 1992. – P. 197–263.

Поступила в редакцию 26 апреля 2003 г.

# МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В ЗАДАЧАХ ПРЕДЕЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ И ПРИСПОСОБЛЯЕМОСТИ ПЛАСТИН И ОБОЛОЧЕК

О.Ф. Чернявский

Задачи определения условий предельного равновесия и прогрессирующего формоизменения сформулированы в терминах метода конечных элементов для полей скоростей перемещений, непрерывных внутри каждого элемента и разрывных на границах элементов. На основе соответствующих кинематических теорем получены системы линейных ограничений и формы минимизируемых функционалов при условиях текучести Мизеса и Треска–Сен-Венана.

Предложенные решения позволяют избежать систематических ошибок, возникающих при анализе предельных состояний на основе расчетов кинетики деформирования при последовательно возрастающей нагрузке, и сократить объем вычислений.

Метод конечных элементов стал в настоящее время основным при расчетах кинетики неупругого деформирования. Он позволяет определить напряжения, деформации и перемещения при заданных внешних воздействиях (механических, тепловых и др.). В задачах расчета предельных состояний, то есть прямого определения нагрузок, соответствующих заданным кинематическим признакам процесса деформирования, метод конечных элементов развит пока недостаточно и не находит широкого практического применения.

Теоретически возможно определение предельной нагрузки путем последовательных расчетов кинетики деформирования с помощью МКЭ при возрастающих заданных воздействиях. Практически реализовать эту идею трудно, поскольку поля скоростей перемещений в предельных состояниях, как правило, оказываются разрывными и обычные процедуры численного интегрирования в МКЭ могут давать при этом значительные погрешности, которые не обнаруживаются без специального анализа. В связи с этим развитие метода конечных элементов в задачах предельного анализа представляется необходимым. МКЭ в задачах предельного равновесия и приспособляемости может базироваться на статической или кинематической теоремах [1, 2], соответствующих методам сил и перемещений при расчетах кинетики деформирования. В трехмерных задачах эти подходы, по-видимому, практически равноценны. При расчетах пластин и оболочек кинематический метод позволяет непосредственно ввести гипотезы Коши или Кирхгофа–Лява и не требует построения поверхности текучести в пространстве обобщенных переменных.

В соответствии с кинематической теоремой теории предельного равновесия [1] предельной является минимальная из всех нагрузок, при которых

$$\int X_i \dot{u}_i dV + \int_{S_p} p_i \dot{u}_i dS \geq \int \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} dV + \sum_{\mu} \int_{S_{\mu}} \sigma_{ij} n_j \Delta \dot{u}_i dS. \quad (1)$$

Здесь  $X_i$ ,  $p_i$  – массовые и поверхностные нагрузки;  $\dot{u}_i$ ,  $\dot{\epsilon}_{ij}$  – скорости остаточных перемещений и пластических деформаций;  $i, j = 1, 2, 3$ ;  $S_{\mu}$  – поверхность разрыва скоростей перемещений на величину  $\Delta \dot{u}_i$ ,  $n_j$  – единичный вектор нормали к этой поверхности;  $V$  – объем тела;  $\sigma_{ij}$  – напряжения на поверхности текучести.

Скорости остаточных перемещений и пластических деформаций в (1) связаны условием совместности, имеющим при малых перемещениях вид

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} (\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{j,i}) \quad (2)$$

при соответствующих граничных условиях.

Скорости пластических деформаций связаны с напряжениями на поверхности текучести  $\sigma_{ij}$  ассоциированным законом течения:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \sigma_{ij}}, \quad \lambda_{\alpha} \geq 0, \quad (3)$$

где  $f_{\alpha}(\sigma_{ij}) = 0$  – поверхность текучести.

Соотношения (1)–(3) определяют величины скоростей деформаций и перемещений с точностью до общего множителя. При использовании любого численного метода решения, в том числе МКЭ, этот множитель необходимо задавать. С этой целью можно, например, задать скорость пе-

ремещения  $u_i$  одной из точек конструкции. Расчет предельной нагрузки в этом случае будет корректным, только если в действительном механизме разрушения скорость перемещения этой точки является ненулевой и направлена так же, как заданная. В противном случае будет получена верхняя оценка предельной нагрузки, не совпадающая с точным решением. Другой, менее удобный в счете, но более универсальный вариант задания общего множителя основан на задании заведомо ненулевой и положительной работы нагрузок [3]. Если, например, поверхностные нагрузки  $p_i$  в предельном состоянии связаны с заданными эксплуатационными нагрузками  $\bar{p}_i$  соотношением  $p_i = n_p \bar{p}_i$ , то можно принять, что

$$\int_{S_p} p_i \dot{u}_i dS = n_p \int_{S_p} \bar{p}_i \dot{u}_i dS = n_p, \quad \text{то есть} \quad \int_{S_p} \bar{p}_i \dot{u}_i dS = 1. \quad (4)$$

Минимизация параметра нагрузки при ограничениях (1)–(3) является в общем случае задачей математической теории оптимальных процессов [4]; ее решение требует возможности разрывов поля скоростей перемещений при непрерывных и дифференцируемых скоростях в остальной части тела. Метод конечных элементов предъявляет менее жесткие требования. Можно ограничиться, как это было сделано впервые в работе [3], чисто разрывным решением, считая, что пластические деформации сосредоточены по границам абсолютно жестких элементов. Можно искать решение в классе непрерывных и непрерывно дифференцируемых функций  $\dot{u}_i$ , заменяя разрывы скоростей зонами быстрого, но непрерывного изменения. Оба эти подхода ведут к получению верхней оценки предельной нагрузки, теоретически сходящейся к точному решению только при бесконечном уменьшении размеров элементов и абсолютной точности вычислений. Очевидно, что оптимальным является сочетание непрерывных решений в пределах каждого элемента и разрывных на границах.

Соотношение (1) для плоского напряженного состояния ( $\sigma_z = \tau_{zx} = \tau_{zy} = 0$ ) с учетом дополнительного условия типа (4) в частном случае, когда поверхности разрывов скоростей перемещений  $S_{\mu x}$  и  $S_{\mu y}$  параллельны осям  $x$  и  $y$  (учет произвольной ориентации этих поверхностей в соответствии с (1) не вызывает принципиальных трудностей) принимает вид

$$n_p = \int_V (\sigma_x \dot{\epsilon}_x + \sigma_y \dot{\epsilon}_y + \tau_{xy} \dot{\gamma}_{xy}) dV + \sum_{\mu} \int_{S_{\mu}} (\sigma_x \Delta \dot{u}_x + \sigma_y \Delta \dot{u}_y + \tau_{xy} \Delta \dot{u}_{xy}) dS. \quad (5)$$

Примем условие текучести Мизеса–Хубера–Генки

$$f(\sigma_{ij}) = \sigma_x^2 - \sigma_x \sigma_y + \sigma_y^2 + 3\tau_{xy}^2 - \sigma_S^2 = 0. \quad (6)$$

В соответствии с ассоциированным законом течения (3)

$$\dot{\epsilon}_x = \lambda(2\sigma_x - \sigma_y); \quad \dot{\epsilon}_y = \lambda(2\sigma_y - \sigma_x); \quad \dot{\gamma}_{xy} = 6\lambda\tau_{xy}; \quad \lambda \geq 0. \quad (7)$$

Соотношение (5) с учетом уравнений (6) и (7) можно тогда представить в виде

$$n_p = \int_V \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S \sqrt{\dot{\epsilon}_x^2 + \dot{\epsilon}_x \dot{\epsilon}_y + \dot{\epsilon}_y^2 + \frac{1}{4} \dot{\gamma}_{xy}^2} dV + \quad (8)$$

$$+ \sum_{\mu} \int_{S_{\mu x}} \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S \sqrt{(\Delta \dot{u}_x)^2 + \frac{1}{4} (\Delta \dot{u}_{xy})^2} dS + \sum_{\mu} \int_{S_{\mu y}} \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S \sqrt{(\Delta \dot{u}_y)^2 + \frac{1}{4} (\Delta \dot{u}_{yx})^2} dS,$$

$$\text{где} \quad \sqrt{\dot{\epsilon}_x^2 + \dot{\epsilon}_x \dot{\epsilon}_y + \dot{\epsilon}_y^2 + \frac{1}{4} \dot{\gamma}_{xy}^2} \geq 0, \quad \sqrt{(\Delta \dot{u}_x)^2 + \frac{1}{4} (\Delta \dot{u}_{xy})^2} \geq 0, \quad \sqrt{(\Delta \dot{u}_y)^2 + \frac{1}{4} (\Delta \dot{u}_{yx})^2} \geq 0. \quad (9)$$

В соответствии с гипотезой Кирхгофа–Лява для пластин и оболочек

$$\dot{\epsilon}_x = \dot{e}_x + z\dot{\kappa}_x; \quad \dot{\epsilon}_y = \dot{e}_y + z\dot{\kappa}_y; \quad \dot{\gamma}_{xy} = \dot{e}_{xy} + z\dot{\kappa}_{xy}. \quad (10)$$

Скорости перемещений в уравнении (4) связаны со скоростями деформаций условиями совместности и соответствующими им граничными условиями закрепления тела. Например, при изгибе пластины

$$\dot{e}_x = \dot{e}_y = \dot{e}_{xy} \equiv 0; \quad \dot{\kappa}_x = -\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}; \quad \dot{\kappa}_y = -\frac{\partial^2 w}{\partial y^2}; \quad \dot{\kappa}_{xy} = -\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y}, \quad (11)$$

где  $w(x, y)$  – скорости прогибов.

Для пластин произвольного очертания, нагруженных нормальным к поверхности давлением  $\bar{p}(x, y)$ , при отсутствии сдвиговых разрывов и постоянном по толщине пределе текучести  $\sigma_S$  минимизируемый функционал (8) принимает вид

$$n_p = \int_S \left[ \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S h^2 \sqrt{\left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right)^2 + \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) \left( \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \left( \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} \right)^2} \right] dS +$$

$$+ \sum_{\mu} \int_{l_{\mu x}} \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S h^2 \left| \Delta \left( \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right| dl + \sum_{\mu} \int_{l_{\mu y}} \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S h^2 \left| \Delta \left( \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right| dl. \quad (12)$$

Здесь  $S$  – срединная поверхность пластины;  $l_{\mu}$  – длина линии разрыва скоростей углов поворота.

Переход к конечноэлементной модели выполняется аналогично задачам упругости и расчетам кинетики неупругого деформирования: выбирается сетка конечных элементов и для каждого элемента скорости перемещений представляются в виде

$$w = \sum_i C_i w_i(x, y), \quad i = 1, \dots, N, \quad (13)$$

где  $w_i(x, y)$  – базисные функции,  $C_i$  – неизвестные постоянные. Примем, что разрывы скоростей перемещений и (или) их производных могут иметь место только на границах элементов.

В качестве примера запишем вид функционала (12) для конечноэлементной модели:

$$n_p = \int_S \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S h^2 \left[ \sum_i \sum_j C_j C_i \left( \frac{\partial^2 w_i}{\partial x^2} \right) \left( \frac{\partial^2 w_j}{\partial x^2} \right) + \sum_i \sum_j C_j C_i \left( \frac{\partial^2 w_i}{\partial x^2} \right) \left( \frac{\partial^2 w_j}{\partial y^2} \right) + \right.$$

$$\left. + \sum_i \sum_j C_j C_i \left( \frac{\partial^2 w_i}{\partial y^2} \right) \left( \frac{\partial^2 w_j}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{4} \sum_i \sum_j C_j C_i \left( \frac{\partial^2 w_i}{\partial x \partial y} \right) \left( \frac{\partial^2 w_j}{\partial x \partial y} \right) \right]^{0,5} dS +$$

$$+ \sum_k \int_{l_{kx}} \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S h^2 \left| \sum_i C_{ik} \frac{\partial w_{ik}}{\partial x} - \sum_i C_{ik-1} \frac{\partial w_{ik-1}}{\partial x} \right| dl + \sum_k \int_{l_{ky}} \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_S h^2 \left| \sum_i C_{ik} \frac{\partial w_{ik}}{\partial y} - \sum_i C_{ik-1} \frac{\partial w_{ik-1}}{\partial y} \right| dl. \quad (14)$$

Здесь  $k$  – номер элемента.

В отличие от расчетов упругих тел и кинетики неупругого деформирования при нагрузках, меньших предельной, при минимизации функционала (8) в конечноэлементной модели отсутствуют требования непрерывности перемещений и их производных по границам элементов. Система ограничений задачи включает лишь условия типа (4), (9) и условия закрепления конструкции, записанные с учетом уравнения (13).

С целью уменьшения количества переменных, по которым ведется минимизация функционала, можно «запретить» разрывы тех или иных перемещений (сдвиговых, или нормальных к поверхности разрыва, или углов поворота нормалей и т.д.), как это было сделано, например, при записи функционала (12). Последствия такого шага очевидны: в результате будет получена верхняя оценка предельной нагрузки, не совпадающая с точным решением, если «запрещенные» разрывы реализуются в действительном механизме разрушения. Отличие верхней оценки от точного решения будет зависеть от двух факторов: размеров конечных элементов (с уменьшением размера уменьшается погрешность схематизации разрыва зоной быстрого, но непрерывного изменения) и точности численного интегрирования, уменьшающейся по мере приближения к разрывному решению.

Приспособляемость конструкций лимитируется предельными состояниями двух принципиально различных типов: знакопеременным неупругим деформированием и прогрессирующим с числом циклов формоизменением, то есть накоплением остаточных перемещений (частным случаем последнего является состояние предельного равновесия). Знакопеременное деформирование в предельном цикле является локальным процессом [2]. Определение условий его возникновения в опасной точке не требует решения вариационной задачи и выполняется с помощью достаточно простого критерия [2].

Прогрессирующее формоизменение реализуется, если в соответствии с преобразованной теоремой Койтера, обобщенной на случай произвольных внешних воздействий [2],

$$\int_{S_p} X_i^{\circ} \Delta u_i dV + \int p_i^{\circ} \Delta u_i dS \geq \int_0^T d\tau \int (\sigma_{ij} - \sigma_{ij}^{(e)}) \dot{\epsilon}_{ij} dV + \sum_{\mu} \int_0^T d\tau \int_{S_{\mu}} (\sigma_{ij} - \sigma_{ij}^{(e)}) n_j \Delta \dot{u}_i dS. \quad (15)$$

Здесь  $X_i^{\circ}$ ,  $p_i^{\circ}$  – не зависящие от времени составляющие массовых и поверхностных нагрузок;  $\sigma_{ij}^{(e)}$  – напряжения от переменных составляющих внешних воздействий, вычисленные в предположении

идеальной упругости материала;  $\tau$  – текущее время цикла ( $0 \leq \tau \leq T$ );  $\Delta \dot{u}_i$  – разрывы скоростей перемещений за цикл;  $\Delta u_i$  – приращения остаточных перемещений за цикл, связанные с приращениями неупругих деформаций  $\Delta \varepsilon_{ij}$  условиями совместности

$$\Delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\Delta u_{i,j} + \Delta u_{j,i}), \Delta \varepsilon_{ij} = \int_0^T \dot{\varepsilon}_{ij} d\tau, \Delta u_i = \int_0^T \dot{u}_i d\tau \quad (16)$$

и соответствующими граничными условиями. Скорости неупругих деформаций  $\dot{\varepsilon}_{ij}$  связаны с напряжениями на поверхности текучести  $\sigma_{ij}$  ассоциированным законом течения (3).

Учитывая, что скорости неупругих деформаций в предельном цикле отличны от нуля лишь в отдельные моменты времени, ограничимся рассмотрением конечного числа дискретных моментов времени цикла  $\tau_\beta$  ( $\beta = 1, \dots, n$ ). Число  $n$  рассматриваемых моментов времени должно соответствовать реальному числу моментов, в которые  $\dot{\varepsilon}_{ij} \neq 0$ . Оно равно двум при однопараметрических переменных воздействиях и постоянных свойствах материала. С ростом «неупорядоченности» процесса  $n$  возрастает и теоретически может стать любым, но практически точное решение не требует рассмотрения большого числа моментов времени. Условие (15) можно теперь записать в виде

$$\int_{S_p} X_i^o \Delta u_i dV + \int_{S_p} p_i^o \Delta u_i dS \geq \min_{\beta} \left[ \sum_{\beta} \int (\sigma_{ij\beta} - \sigma_{ij\beta}^{(e)}) \Delta \varepsilon_{ij\beta} dV + \sum_{\beta} \sum_{\mu} \int_{S_{\mu}} (\sigma_{ij\beta} - \sigma_{ij\beta}^{(e)}) n_j \Delta u'_{i\beta} dS \right], \quad (17)$$

$$\Delta \varepsilon_{ij} = \sum_{\beta} \Delta \varepsilon_{ij\beta}, \Delta u'_i = \sum_{\beta} \Delta u'_{i\beta} \quad (18)$$

( $\Delta u'_i$  – приращение разрыва перемещений за цикл).

В каждый момент времени  $f(\sigma_{ij\beta}) = 0$ , при этом в общем случае (при наличии, например, температурной зависимости свойств материала и ползучести) каждому моменту времени соответствует свое значение предела текучести  $\sigma_S$  идеализированной диаграммы деформирования. Приращения деформаций  $\Delta \varepsilon_{ij\beta}$  связаны с напряжениями  $\sigma_{ij\beta}$  ассоциированным законом, поскольку в предельном цикле скорости деформаций отличны от нуля лишь в течение сколь угодно малых интервалов времени.

Для плоского напряженного состояния ( $\tau_{xz} = \tau_{yz} = \sigma_z = 0$ ) неравенство (17) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \int_{S_p} X_i^o \Delta u_i dV + \int_{S_p} p_i^o \Delta u_i dS \geq \min_{\beta} \left\{ \sum_{\beta} \int \left[ (\sigma_{x\beta} - \sigma_{x\beta}^{(e)}) \Delta \varepsilon_{x\beta} + (\sigma_{y\beta} - \sigma_{y\beta}^{(e)}) \Delta \varepsilon_{y\beta} + \right. \right. \\ \left. \left. + (\tau_{xy\beta} - \tau_{xy\beta}^{(e)}) \Delta \gamma_{xy\beta} \right] dV + \sum_{\beta} \sum_{\mu} \int_{S_{\mu}} \left[ (\sigma_{x\beta} - \sigma_{x\beta}^{(e)}) \Delta u'_{x\beta} + (\sigma_{y\beta} - \sigma_{y\beta}^{(e)}) \Delta u'_{y\beta} + \right. \right. \\ \left. \left. + (\tau_{xy\beta} - \tau_{xy\beta}^{(e)}) \Delta u'_{xy\beta} + (\tau_{yx\beta} - \tau_{yx\beta}^{(e)}) \Delta u'_{yx\beta} \right] dS \right\}. \quad (19) \end{aligned}$$

Для сокращения записи в условии (19) принято, что поверхности разрывов параллельны осям  $x$  и  $y$ ; произвольная ориентация учитывается в соответствии с уравнением (1).

При условии текучести Мизеса с учетом ассоциированного закона течения правая часть этого неравенства принимает вид

$$\begin{aligned} \min_{\beta} \left\{ \sum_{\beta} \int \left[ \frac{2}{\sqrt{3}} \sigma_{S\beta} \sqrt{\Delta \varepsilon_{x\beta}^2 + \Delta \varepsilon_{x\beta} \Delta \varepsilon_{y\beta} + \Delta \varepsilon_{y\beta}^2 + \frac{1}{4} \gamma_{xy\beta}^2} - \sigma_{x\beta}^{(e)} \Delta \varepsilon_{x\beta} - \right. \right. \\ \left. \left. - \sigma_{y\beta}^{(e)} \Delta \varepsilon_{y\beta} - \tau_{xy\beta}^{(e)} \Delta \gamma_{xy\beta} \right] dV + \sum_{\beta} \sum_{\mu} \int_{S_{\mu}} \frac{2}{\sqrt{3}} \left[ \sigma_{S\beta} \left( \sqrt{(\Delta u'_{x\beta})^2 + \frac{1}{4} (\Delta u'_{xy\beta})^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{(\Delta u'_{y\beta})^2 + \frac{1}{4} (\Delta u'_{yx\beta})^2} \right) - \sigma_{x\beta}^{(e)} \Delta u'_{x\beta} - \sigma_{y\beta}^{(e)} \Delta u'_{y\beta} - \tau_{xy\beta}^{(e)} (\Delta u'_{xy\beta} + \Delta u'_{yx\beta}) \right] dS \right\}. \quad (20) \end{aligned}$$

Здесь корни из соответствующих сумм неотрицательны согласно ассоциированному закону течения ( $\lambda \geq 0$ ).

Соответственно при условии текучести Треска–Сен-Венана применительно к осесимметричным пластинам и оболочкам ( $\tau_{xy} = 0$ )

$$\min_{\beta} \left\{ \sum_{\beta} \int \left[ 0,5\sigma_S \left( |\Delta\varepsilon_{x\beta}| + |\Delta\varepsilon_{y\beta}| + |\Delta\varepsilon_{x\beta} + \Delta\varepsilon_{y\beta}| \right) - \sigma_{x\beta}^{(e)}\Delta\varepsilon_{x\beta} - \sigma_{y\beta}^{(e)}\Delta\varepsilon_{y\beta} \right] dV + \sum_{\beta} \sum_{\mu} \left[ \sigma_{S\beta} \left( |\Delta u_{x\beta}| + |\Delta u_{y\beta}| \right) - \sigma_{x\beta}^{(e)}\Delta u_{x\beta} - \sigma_{y\beta}^{(e)}\Delta u_{y\beta} \right] dS \right\}. \quad (21)$$

Переход к конечноэлементной модели выполняется теперь так же, как в задачах предельного равновесия:

- Приращение перемещения одной точки или множитель при коэффициенте запаса в выражении для работы внешних сил типа (4) приравнивается к единице;
- приращения перемещений в пределах каждого конечного элемента задаются с помощью базисных функций и неизвестных постоянных в виде (13);
- приращения деформаций в пределах каждого элемента выражаются через коэффициенты при базисных функциях с помощью условий совместности (16), включающих для пластин и оболочек гипотезы Коши или Кирхгофа–Лева в явном виде;
- коэффициент запаса по прогрессирующему формоизменению соответствует минимальному значению функционала (20) или (21).

Таким образом, система ограничений вариационной задачи включает:

- уравнение, конкретизирующее численные значения приращений перемещений (определяемые теоремой Койтера лишь с точностью до множителя);
- кинематические граничные условия задачи (условия закрепления конструкции);
- условия неотрицательности подинтегральных выражений в минимизируемом функционале в каждый момент времени.

При условии Треска–Сен-Венана они обеспечиваются автоматически; при условии Мизеса сводятся к неотрицательности корней в функционале (20).

Система ограничений не содержит – в отличие от упругих и неупругих расчетов при заданной нагрузке – требований непрерывности перемещений и их производных на границах элементов. Такие требования могут быть искусственно включены в систему ограничений с целью уменьшения количества переменных в минимизируемом функционале, но это ведет к получению верхней оценки предельной нагрузки, не совпадающей с точным решением, если исключенные возможные разрывы реализуются в действительном механизме разрушения.

### Литература

1. Койтер В.Т. Общие теоремы теории упруго-пластических сред. – М.: ИЛ, 1961. – 79 с.
2. Гохфельд Д.А., Чернявский О.Ф. Несущая способность конструкций при повторных нагрузках. – М.: Машиностроение, 1979. – 263 с.
3. Ржаницын А.Р. Расчет оболочек методом предельного равновесия при помощи линейного программирования// Труды VI Всесоюзной конференции по теории оболочек и пластинок. – М.: Наука, 1966. – С. 656–665.
4. Математическая теория оптимальных процессов / Л.С. Понтрягин, В.Г. Болтянский, Р.В. Гамкрелидзе, Е.Ф. Мищенко. – М.: Физматгиз, 1961. – 301 с.
5. Чернявский А.О. Практическое применение метода конечных элементов в задачах расчета на прочность. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2001. – 89 с.

Поступила в редакцию 17 апреля 2003 г.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

*А.В. Каравеев, В.П. Бескачко*

Описан программный комплекс для моделирования методом молекулярной динамики углеродных наноструктур, пригодный для использования в распределенных вычислительных средах. Выполнены расчеты колебательных и механических свойств ряда легких фуллеренов и нанотрубок.

## Введение

Углерод и его соединения известны разнообразием структур и свойств и служат объектами интенсивных исследований с незапамятных времен и по сегодняшний день. С появлением инструментов, позволяющих исследовать микроскопическое строение вещества с одной стороны и созданием фундаментальных теоретических методов ее интерпретации – с другой, были установлены основные закономерности в поведении этих систем, так что к концу истекшего столетия особенных сюрпризов в этой области не ожидалось. Однако в 1985 году был вдруг открыт представитель нового класса углеродных структур – каркасная молекула  $C_{60}$  (фуллерен), а вслед за ней в 1991 году – протяженные каркасные структуры, называемые тубуленами или нанотрубками. Необычность физико-химических свойства этих объектов вызвала настоящий бум в их исследовании, поддерживаемый не только и не столько академическим интересом, сколько перспективами их разнообразных применений, начиная от создания сверхминиатюрных электронных устройств и до молекулярных роботов.

Осуществление этих перспектив и создание соответствующих технологий – нанотехнологий – требует детального знания свойств наноструктур, которое ввиду предельной малости изучаемых объектов весьма затруднительно добыть, располагая одними только экспериментальными средствами. В связи с этим интенсивно развиваются теоретические методы их исследования, значительную часть которых составляют уже зарекомендовавшие себя в изучении свойств макроскопических систем методы прямого компьютерного моделирования атомной структуры и динамики, такие как метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло. Их применение к моделированию нанообъектов имеет, однако, некоторые особенности. Во-первых, при моделировании конденсированных фаз обычно не возникает проблем с удержанием системы: применение периодических граничных условий гарантирует сохранение ее плотности независимо от характера межчастичного взаимодействия. Наоборот, нанообъекты удерживаются в данном структурном состоянии только силами взаимодействия между атомами, которые, очевидно, должны быть достаточно специфичны, чтобы такое состояние было механически устойчивым. Последнее означает, что при моделировании наноструктур межчастичное взаимодействие должно определяться более тщательно, нежели в случае объемных макроскопических тел. Во-вторых, потенциал атом-атомного взаимодействия в наноструктурах не является сферически симметричным, ненасыщаемым и парным, как это полагается при моделировании, например, простых жидкостей. В нем существенны многочастичные эффекты и направленный характер связей, что делает подсчет сил, действующих на атом, более громоздким по сравнению с тем же случаем простых жидкостей. В третьих, процессы структурных изменений, происходящих в нанообъектах в качестве отклика на возмущения разного рода, имеют тем большие временные масштабы, чем более массивен объект. Поэтому движения нанообъектов, содержащих число атомов порядка  $10^3$  (массивные фуллерены, нанотрубки), уже оказываются весьма медленными с точки зрения метода молекулярной динамики, где характерная величина временного шага составляет  $10^{-15}$  с. Это означает, что изучение подобных движений потребует большого объема вычислений, трудно реализуемого за разумное время с помощью обычных вычислительных средств. Целью настоящей работы является реализация метода молекулярной динамики для систем с ковалентным характером межчастичного взаимодействия, основанная на технологии параллельных вычислений. В качестве первых приложений реализованного нами метода рассмотрим колебательные спектры ряда фуллеренов и тубуленов, влияние дефектов на устойчивость и механические свойства нанотрубок.



### Методика моделирования

Метод молекулярной динамики (МД) состоит в прямом численном интегрировании системы дифференциальных уравнений движения всех атомов, составляющих интересующую нас наноструктуру. Алгоритм интегрирования должен отвечать двум противоречивым требованиям – обеспечивать высокую точность при возможно меньшем объеме вычислений. Этим требованиям лучше всего, по-видимому, удовлетворяет модифицированный алгоритм Беемана [5, 6], разработанный специально для метода МД. Он обеспечивает точность порядка  $O(\delta t^4)$ , требуя при этом в 2 раза меньше вычислений, чем, скажем, метод Рунге-Кутты соответствующего порядка. В качестве уравнений движения используются классические уравнения ньютоновской динамики, релятивистскими и квантовыми эффектами пренебрегается ввиду достаточно большой массы атомов и малой скорости их движения в интересующих нас системах и состояниях. Силы, действующие на атомы, вычисляются с помощью эмпирического потенциала Терзоффа [8, 9], предложенного для описания энергии связей в ковалентных системах, состоящих из атомов кремния или углерода. Силы находятся численным дифференцированием потенциальной энергии системы как функции координат интересующего нас атома:

$$\vec{F}_i = \left\{ -\frac{\partial \Phi_T}{\partial x_i}; -\frac{\partial \Phi_T}{\partial y_i}; -\frac{\partial \Phi_T}{\partial z_i} \right\}.$$

Для построения начальной конфигурации системы создана специальная программа, генерирующая координаты атомов для легких фуллеренов или произвольных однослойных нанотрубок. Если есть необходимость, эту начальную конфигурацию можно затем подвергнуть процедуре градиентной минимизации с целью получения равновесной структуры при 0 К. Далее эту (идеальную) конфигурацию можно изменить, например, внедрить в нее дефект или подвергнуть деформации.

Начальные скорости атомов задаются либо случайным образом – с распределением Максвелла, отвечающего данной температуре, либо искусственно – с заданием поля скоростей для моделирования необходимых свойств. Например, для моделирования центрально-симметричных мод колебаний фуллеренов удобно использовать центрально-симметричное же распределение начальных скоростей.

### Алгоритм параллельных вычислений

При разработке алгоритма и параллельной программы для моделирования углеродных наноструктур методом молекулярной динамики была использована технология MPICH. MPICH – является одной из универсальных реализаций MPI-модели (Message Passing Interface – Интерфейс передачи сообщений) и представляет собой набор специальных библиотек для языков Fortran и C. Благодаря тому, что MPICH распространяется в исходных кодах, она может быть установлен практически на любой вычислительной системе, начиная с PC под управлением Linux или Windows NT/2000 и заканчивая суперкомпьютерами Cray. Вследствие также универсальности MPICH и языков Fortran и C программа, написанная с применением MPICH, может быть перенесена на различные платформы практически без изменений.

В модели MPI параллельная программа представляет собой набор последовательных программ, обрабатываемых одновременно. Обычно каждая из них выполняется на своем процессоре и имеет доступ к своей, локальной, памяти. При запуске нескольких программ одновременно на одном или нескольких процессорах требуется механизм, обеспечивающий согласованную работу частей параллельной программы. Эту задачу и выполняет MPI. Основой для разрабатываемого параллельного алгоритма послужил алгоритм ранее написанной программы для последовательных ЭВМ. Его необходимо было разделить на максимально независимые друг от друга подзадачи, которые можно было бы выполнять параллельно в одно и то же время. Самой трудоемкой задачей в МД является процесс нахождения сил, действующих на атомы в каждый момент времени. Именно эта задача была «распараллелена» в нашем варианте МД. Для этого мы разделили множество атомов на равные или «почти равные» группы, каждая из которых обслуживается отдельным процессом из параллельной программы, обрабатывающим массив координат всех атомов в данный момент времени. После вычисления сил данные от всех процессов передаются «родительскому» процессу, который выполняет интегрирование уравнений методом Беемана. Схема работы программы приведена на рис. 1.

В начале работы параллельной программы с помощью MPICN создается глобальный коммуникатор – специальная структура, включающая в себя все процессы с их локальной памятью. В рамках глобального коммуникатора можно создавать свои специальные коммуникаторы, включающие в себя определенные процессы в зависимости от необходимости. В рамках коммуникатора каждый процесс имеет свой ранг (целое число – номер), служащий идентификатором данного процесса. Основной процесс, порождающий коммуникатор называется корневым или родительским и имеет ранг 0.

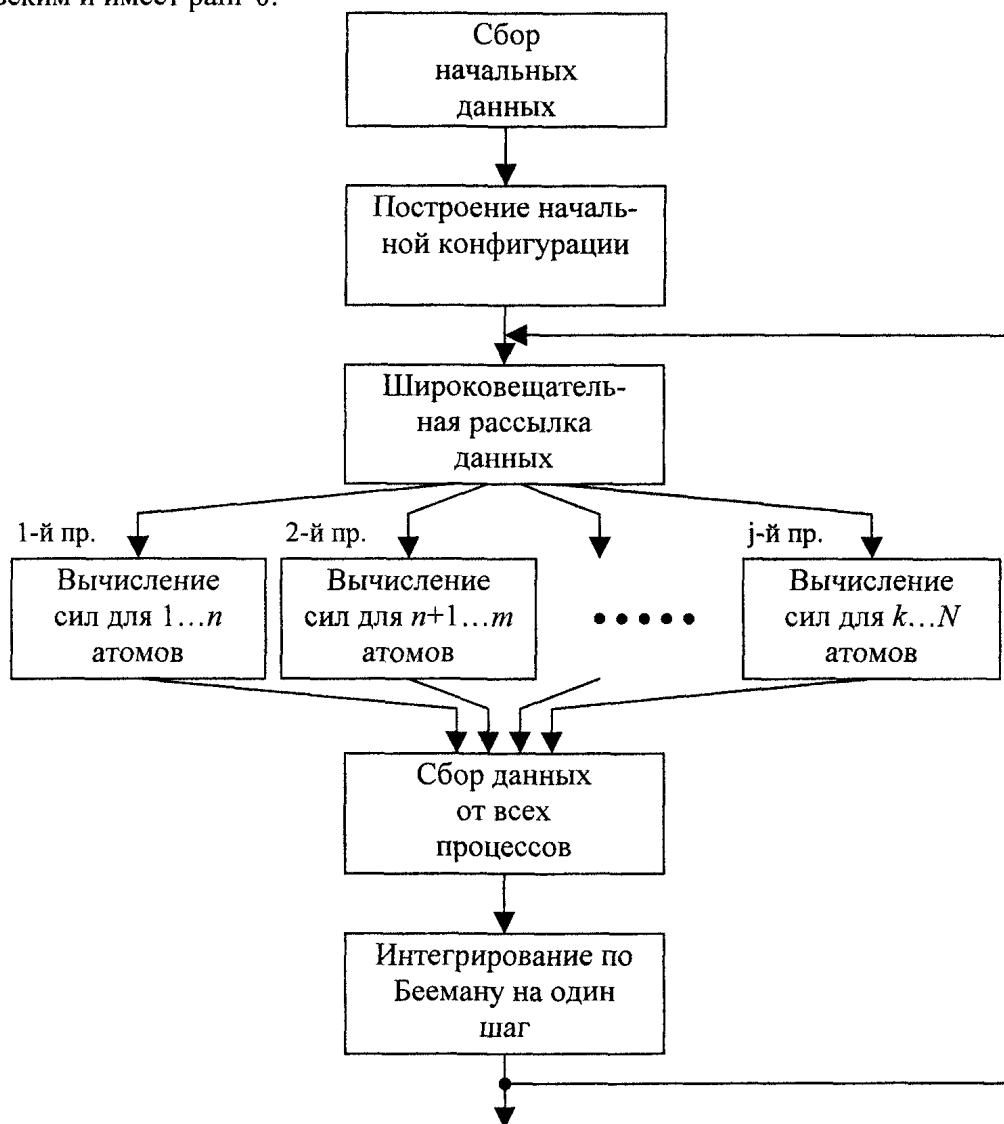


Рис. 1. Схема работы программы параллельных вычислений

Широковещательная рассылка данных производится с помощью стандартной функции MPI\_Bcast, которая передает массив данных всем процессам коммуникатора от корневого или родительского процесса. В разработанной программе таким массивом является набор координат всех атомов в текущий момент времени. Сбор данных от всех процессов производится с помощью стандартной функции MPI\_Gather, которая работает следующим образом: в каждом процессе коммуникатора предварительно формируется массив данных, который будет в дальнейшем частью массива получаемого корневым процессом; затем корневой процесс получает от каждого процесса в коммуникаторе (в том числе и от самого себя) свою часть массива, причем в порядке возрастания ранга. В разработанной программе так собирается массив, содержащий компоненты векторов сил, действующих на каждый атом системы.

С использованием изложенного алгоритма была написана программа параллельных вычислений для моделирования методом МД ковалентных систем размерностью до 10 000 атомов. Тестирование проводилось на вычислительном кластере кафедры Общей и теоретической физики

ЮУрГУ, состоящем из восьми процессоров и работающем под управлением операционной системы Linux. Были выполнены численные эксперименты для того, чтобы выяснить, как зависит производительность кластера от числа процессов (или процессоров), участвующих в решении данной задачи. Результаты показаны на рис. 2, где по оси абсцисс отложена производительность кластера по отношению к производительности одного процессора, а по оси ординат число процессоров в кластере. Ответ оказался сильно зависящим от того, каково число степеней свободы исследуемой системы. Для моделей с небольшим числом степеней свободы (меньше 60) максимальное ускорение вычислений достигается при двух параллельно идущих процессах, а при дальнейшем увеличении числа процессов скорость вычислений падает и мало отличается от скорости обычных, последовательных, вычислений.

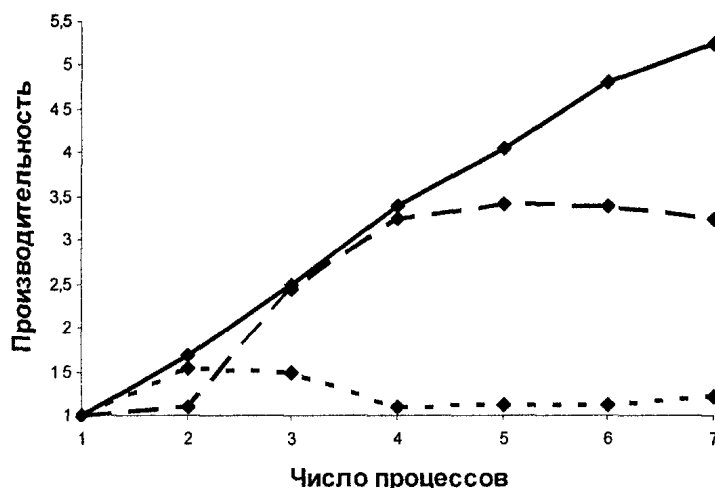


Рис. 2. Зависимость производительности вычислений от количества используемых процессоров:  
 - - - - - 60 степеней свободы  
 - - - - - 180 степеней свободы  
 ————— 600 степеней свободы

Это связано с тем, что при сравнительно маленьком количестве атомов в исследуемой системе время, необходимое для передачи данных дочерним процессам и от дочерних родительскому, становится сравнимым или даже превышает время вычислений каждым процессом своей части множества сил, действующих на атомы. Некоторое снижение эффективности вычислений для 180 степеней свободы связано с тем, что при количестве процессов  $n = 6$  каждый из них обрабатывает 10 атомов, а при  $n = 7-9$  атомов, что отличается на 10%. При этом объем коммуникаций возрастает на 1/6 или 16,7%. По этой причине общая скорость работы программы снижается. Однако для большого количества атомов наблюдается устойчивая тенденция к росту производительности вычислений. Видно, что наибольшее ускорение вычислений на упомянутом кластере достигается, когда число степеней свободы становится не менее 600, то есть, начиная с 200 атомов в системе.

### Результаты моделирования

Для тестирования программы проводились опыты по моделированию основной моды колебаний фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$  и  $C_{60}$ . Основной модой колебаний сферически симметричной молекулы является такое колебание, при котором происходит равномерное радиальное расширение и сжатие молекулы в целом. Для моделирования такого колебания начальное состояние задавалось путем равномерного сжатия или растяжения конфигурации, равновесной при 0 К. Начальное распределение по скоростям задавалось либо сферически симметричным и однородным, либо же все атомы в начальный момент времени считались покоящимися.

Результаты расчета частоты основной моды колебаний фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$  и  $C_{60}$  приведены в таблице в сравнении с известными экспериментальными данными.

Частота основной моды колебаний легких фуллеренов

Фуллерен	Средний период колебаний атомов, пс	Частота первой моды (расчет), см <sup>-1</sup>	Частота первой моды (эксперимент), см <sup>-1</sup>
C <sub>20</sub>	4,64·10 <sup>-2</sup>	718	–
C <sub>36</sub>	6,19·10 <sup>-2</sup>	539	510
C <sub>60</sub>	7,64·10 <sup>-2</sup>	436	498

Видно, что совпадение с экспериментом только качественное: по экспериментальным данным частоты колебаний C<sub>36</sub> и C<sub>60</sub> отличаются примерно на 2%, тогда как предсказываемая с помощью модели разница частот на порядок больше – порядка 20%.

Далее было проведено исследование влияния некоторых видов дефектов на механические свойства нанотрубок. В качестве объекта исследования была выбрана конечная закрытая нанотрубка с индексами хиральности (5,5). Это зеркальная кресловидная нанотрубка, концы которой закрыты крышечками, напоминающими по структуре половинки фуллеренов C<sub>60</sub>. Исследуемая нанотрубка состояла из 460 атомов. В её средней части были искусственно смоделированы дефекты типа 5775 с различной ориентацией напряженной связи относительно продольной оси трубки (рис. 3, 4). Данный дефект не является дефектом вакансии или лишнего атома, а образуется в результате «разворота» одной из С–С связей на угол близкий к 90°, в результате чего вместо четырех идеальных шестиугольников образуются пара пяти и пара семиугольников (отсюда название дефекта). Так как углы в пятиугольнике меньше 120°, а в семиугольнике – больше, то все С–С связи в пятиугольнике удлиняются, а в семиугольнике – напротив, сокращаются. По этой причине происходит изменение всей структуры нанотрубки в целом далеко за пределами первой координационной сферы атомов, образующих дефект. Так, например, при расположении напряженной связи вдоль оси трубки происходит значительное поперечное изгибание всей нанотрубки в целом в сторону противоположную дефекту. При расположении напряженной связи под углом к оси происходит закручивание относительно продольной оси. Энергия образования такого дефекта весьма велика и составляет ~ 4,5–6 эВ в зависимости от структуры объекта. По этой причине данный дефект может быть образован только в результате значительных механических деформаций или же в процессе образования наноструктур. Однако и энергетический порог разрушения данного дефекта также велик и сравним с энергией связи, поэтому данный тип дефекта стабилен. Так как нанотрубка (5,5) является зеркальной, возможны только две различных ориентации напряженной связи относительно ее продольной оси (в общем случае их три).

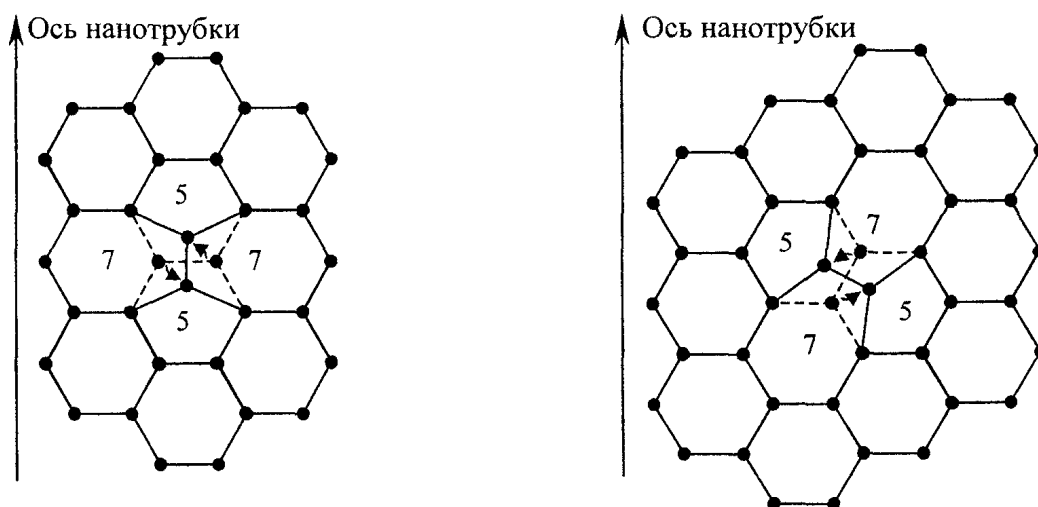


Рис. 3. Схема образования дефектов типа 5775 различной ориентации относительно продольной оси нанотрубки

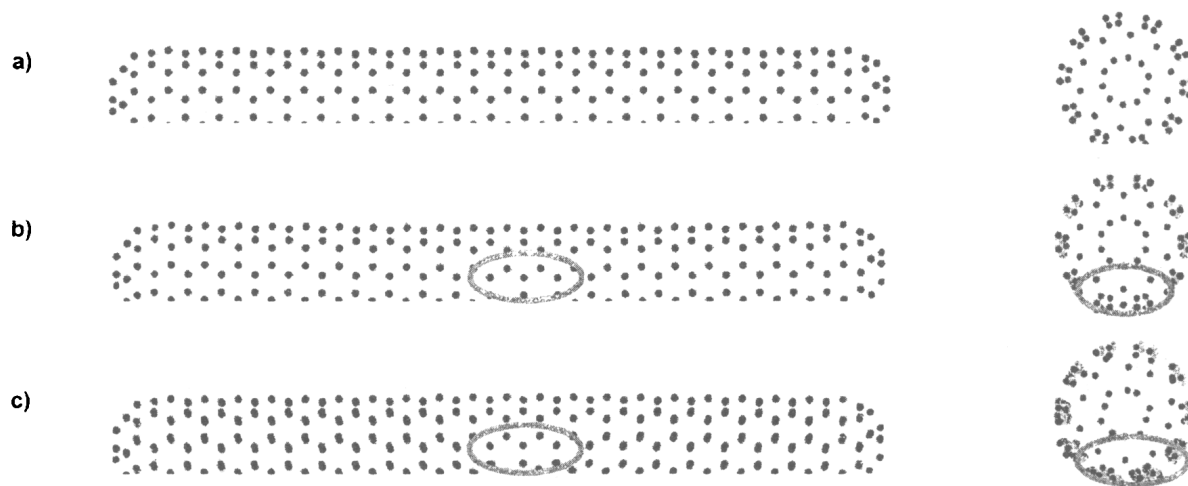


Рис. 4. Идеальная (а) и дефектные нанотрубки с расположением напряженной связи вдоль оси (b) и под углом 60° к ней (с)

В качестве первого этапа были проведены исследования силовых и энергетических характеристик идеальной и дефектных нанотрубок при 0 К. Сначала они были подвергнуты релаксации с целью получения равновесных структур. Далее из них были вырезаны средние части с содержащимися в них дефектами, которые были в дальнейшем подвергнуты осевым деформациям различной величины (рис. 5).

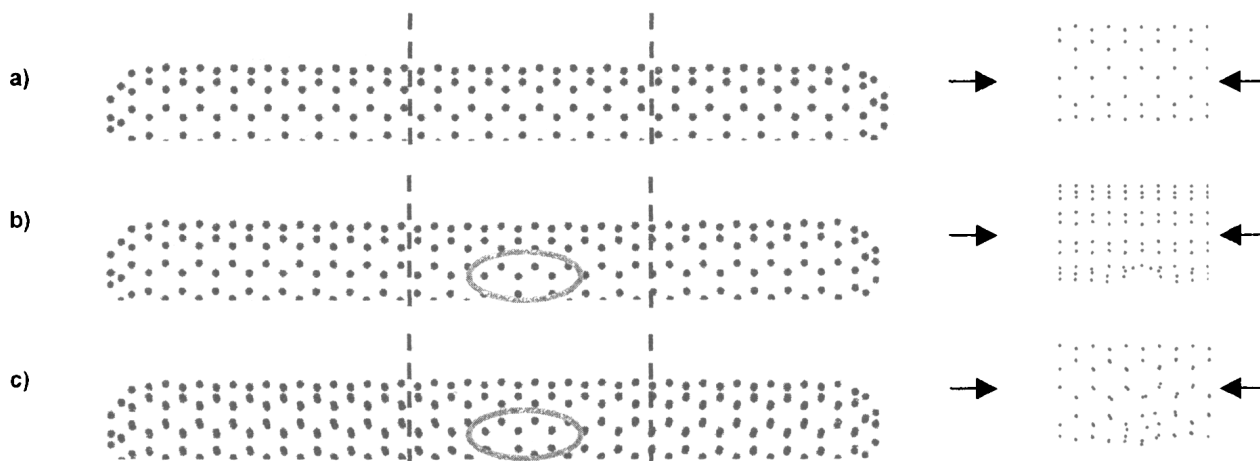


Рис. 5. Область моделирования идеальной (а) и дефектных нанотрубок с расположением напряженной связи вдоль оси (b) и под углом 60° к ней (с)

На рис. 6 показаны результаты вычисления упругих сил и энергии при продольной осевой деформации  $\epsilon$  в пределах от  $\epsilon = -0,16$  до  $\epsilon = 0,3$ . Резкое возрастание всех трех графиков на рис. 6а, наблюдаемое при  $\epsilon \geq 0,25$ , связано с конструкцией используемого нами эмпирического потенциала Терзоффа и физического смысла не имеет. На рис. 7 показана в увеличенном масштабе часть рис. 6а, отвечающая достаточно малым, «квазиупругим» деформациям. Значительное отклонение левых ветвей графиков на рис. 6 для дефектных нанотрубок от идеальной при деформациях меньше  $\epsilon = -0,10$  связано с общей потерей устойчивости (рис. 8).

С помощью полученных диаграмм деформирования вычислены модули упругости нанотрубок при малых деформациях:  $k_1 = 1,66 \cdot 10^{-6}$  Н – для идеальной нанотрубки,  $k_2 = 1,549 \cdot 10^{-6}$  Н – для нанотрубки с напряженной связью, направленной вдоль продольной оси,  $k_3 = 1,526 \cdot 10^{-6}$  Н – для нанотрубки с напряженной связью, направленной под углом к оси. Исходя из этих данных, можно предсказать изменение частоты продольной моды колебаний в зависимости от направления дефекта. Так как частота упругих колебаний пропорциональна корню из упругой постоянной, то изменение частоты должно составить  $-3,4\%$  для дефекта вдоль оси и  $-4,1\%$  – для дефекта под углом к оси.

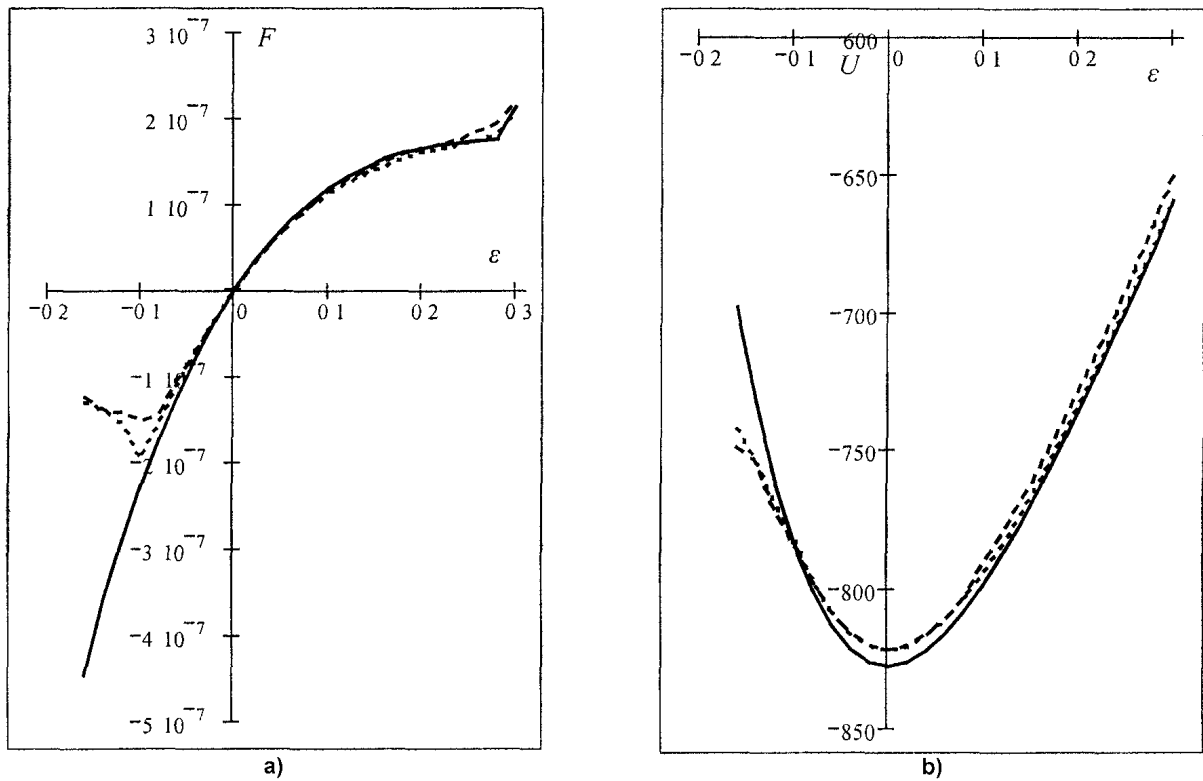


Рис. 6. а) зависимость силы упругости ( $F$ , Н) и б) потенциальной энергии системы ( $U$ , эВ) от величины относительной деформации  $\epsilon$   
 — идеальная нанотрубка;  
 ..... — напряженная связь направлена вдоль оси нанотрубки;  
 - - - - - — напряженная связь направлена под углом  $60^\circ$  к оси нанотрубки

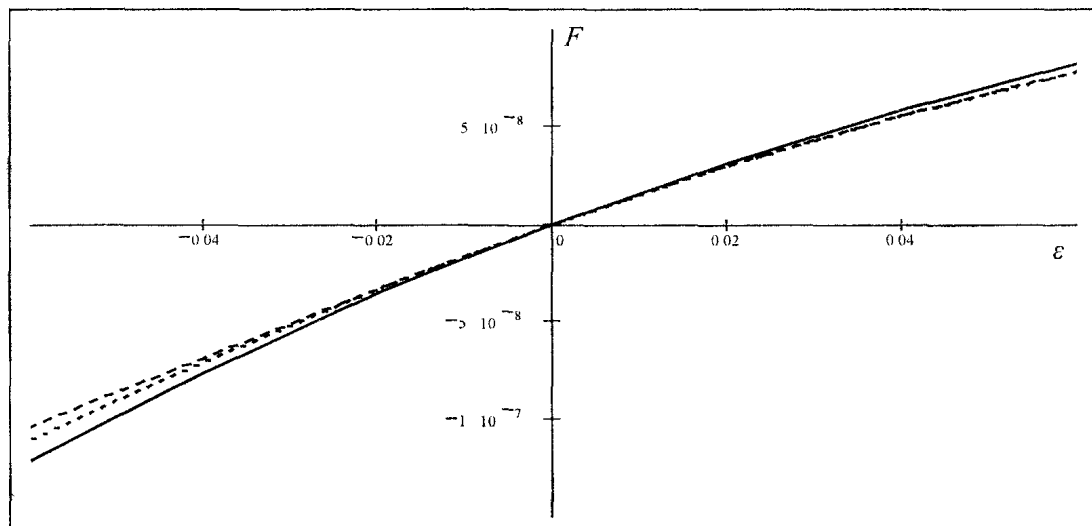


Рис. 7. Зависимость силы упругости ( $F$ , Н) от величины  $\epsilon$  в области малых деформаций. Обозначения те же, что и на рис. 6

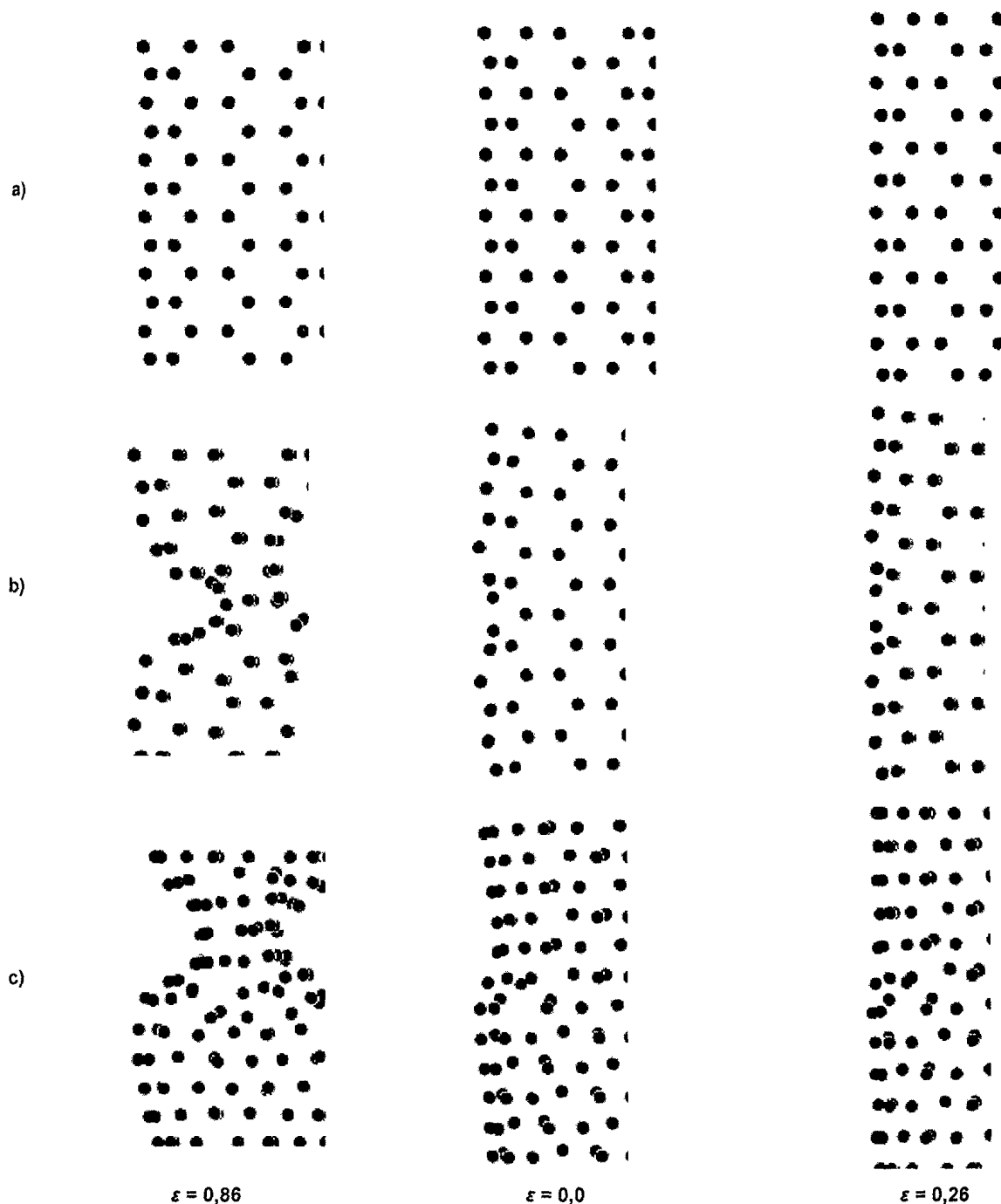


Рис. 8. Внешний вид идеальной (а) и дефектных нанотрубок (б, с) при различных деформациях

Было проведено также МД-моделирование идеальной и дефектных нанотрубок с целью получения спектра их колебаний (рис. 9–11). Для частоты продольной колебательной моды получены следующие результаты:

$$\omega_1 = 1,580 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1} \text{ – для идеальной нанотрубки;}$$

$$\omega_2 = 1,544 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1} \text{ – для нанотрубки с продольным дефектом;}$$

$$\omega_3 = 1,542 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1} \text{ – для нанотрубки с дефектом под углом к продольной оси.}$$

Как видно, полученная выше оценка для сдвига частоты продольной моды колебаний идеальной и дефектных нанотрубок оказывается качественно верной и вполне наблюдаемым экспериментально.

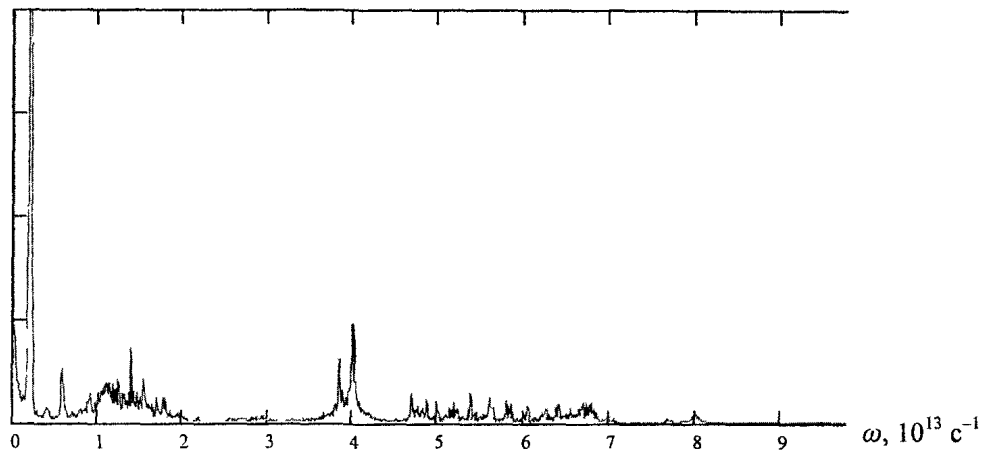


Рис. 9. Спектр колебаний идеальной нанотрубки

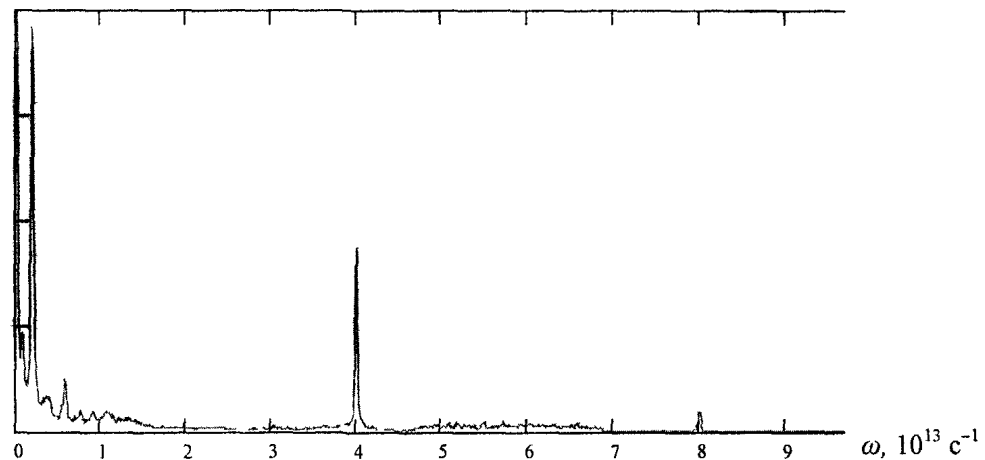


Рис. 10. Спектр колебаний нанотрубки с напряженной связью, расположенной параллельно продольной оси

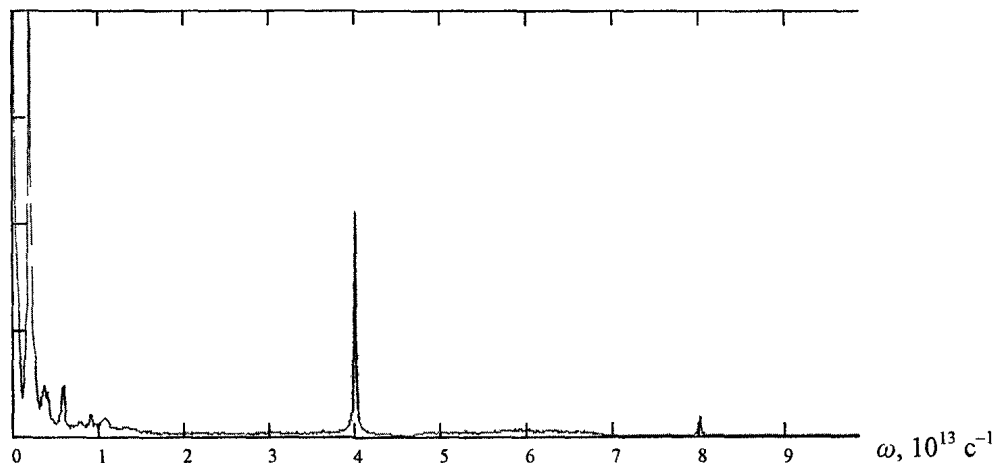


Рис. 11. Спектр колебаний нанотрубки с напряженной связью, расположенной под углом 60° к продольной оси

### Заключение

Таким образом, в настоящей работе реализован программный пакет для моделирования углеродных наноструктур методом молекулярной динамики, пригодный для эксплуатации на определенных вычислительных устройствах. Созданы методики генерации идеальных и дефектных каркасных углеродных структур (фуллеренов и тубуленов) с произвольным молекулярным весом и симметрией. Вычислены частоты основной моды колебаний легких фуллеренов и моды продольных колебаний идеальных и дефектных нанотрубок. Оценены сдвиги частот продольной моды, обусловленные присутствием дефектов.



*Литература*

1. Iijima S. Helical Microtubules of Graphitic Carbon. // Nature (London). – 1991. – V.354. – P.56–58.
2. Rubio A. // Condensed Matter News. 1997. – Vol. 6, № 1. – P. 6–18.
3. Saito R., Fujita M., Dresselhaus G. et al. Electronic Structure of Graphene Tubules Based on  $C_{60}$ . // Phys. Rev. B. – 1992. – V.46. – P.1804–1811.
4. Sten S. Sarman, Denis J. Evans, Peter T. Cummings. Recent Developments in Non-Newtonian Molecular Dynamics. // Phys. Rep. 305 (1998). – P. 1–92.
5. Keith Refson. Moldy User's Manual. Oxford. – 1999.
6. D. Beeman. Some Multistep Methods for Use in Molecular Dynamics Calculations. // J. Comp. Phys. 20 (1976). – P. 130–139.
7. D.W. Brenner // Mater. Res. Soc. Symp. Proc. – 141 (1989). – P. 59.
8. J. Tersoff. New Empirical Approach for the Structure and Energy of Covalent Systems. // Phys. Rev. B 37 (1988). – P. 6991–7000.
9. J. Tersoff. Empirical Interatomic Potential for Silicon with Improved Elastic Properties. // Phys. Rev. B 38 (1988). – P. 9902–9905.
10. J. Tersoff. Empirical Interatomic Potential Function for Carbon, with Application to Amorphous Carbon. // Phys. Rev. Lett. 61 (1988). – 2879.
11. Şakir Erkoç. Empirical Many-Body Potential Energy Functions Used in Computer Simulation of Condensed Matter Properties. // Phys. Rep. 278 (1997). – P. 79–105.
12. R.A. Jishi, M.S. Dresselhaus. Vibrational frequencies in  $C_{36}$ . // Chem. Phys. Lett. 302 (1999) p. 533–537.
13. Toshiki Hara, Jun Onoe, Kazuo Takeuchi. Normal vibrational analysis of the triplet state of  $C_{60}$ . // Phys. Rev. 63. 115412.
14. Jishi R. A., Dresselhaus M. S. Vibrational frequencies in  $C_{36}$  // Chem. Phys. Lett. 302 (1999). – P. 533–537.
15. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
16. Немнюгин С.А., Стесик О.Л. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
17. William Gropp, Ewing Lusk. Installation and user's Guide to MPICH, a portable implementation of MPI. – University of Chicago, Mathematic and Computer Science Division.
18. Шулепов С.В. Физика углеродных материалов. – Челябинск: Metallургия, Челябинское отделение, 1990.
19. Кунин С. Вычислительная физика. – М.: Мир, 1992.
20. Ашкрофт Дж., Элдридж Р., Полсон Р. Программирование на Фортране 77. – М.: Радио и связь, 1990.

*Поступила в редакцию 15 сентября 2003 г.*

## ОСОБЕННОСТИ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ $\text{FeSO}_4$ И (ИЛИ) СУСПЕНЗИЙ $\text{Fe}(\text{OH})_2$ КИСЛОРОДОМ ВОЗДУХА

*Р.Р. Клещева, М.А. Попов, Д.Г. Клещев, А.В. Толчев*

В широких интервалах значений рН, температуры, суммарной концентрации железа (II) и скорости подачи воздуха исследованы закономерности фазообразования при окислении в квазистационарных условиях водных растворов  $\text{FeSO}_4$  и (или) суспензий  $\text{Fe}(\text{OH})_2$  кислородом воздуха. Установлены зависимости средней скорости окисления, фазового и дисперсного состава формирующегося осадка от вышеуказанных параметров.

### Введение

Реакция окисления водных растворов солей железа (II) и (или) суспензий гидроксида железа (II) кислородом воздуха лежит в основе технологических процессов синтеза неорганических пигментов, ионообменных материалов, катализаторов химических реакций и др. на основе оксидных, в том числе гидратированных, соединений железа (III) [1–4]. Установлено [2–11], что фазовый (ФС) и дисперсный (ДС) составы образующихся продуктов зависят как от термодинамических (температуры и рН реакционной среды, концентрации ионов железа (II) в растворе и (или)  $\text{Fe}(\text{OH})_2$  в суспензии и др.), так и кинетических (средней скорости реакции окисления  $\tilde{V}$ ) параметров синтеза. Показано [4–6], что при  $\tilde{V} \approx \text{const}$  ФС с ростом температуры  $t$  изменяется в последовательности  $\gamma(\delta)\text{-FeOOH} \rightarrow \alpha\text{-FeOOH} \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4$ , причем средний размер кристаллов  $d$  этих фаз изменяется симбатно с температурой; при  $t \approx \text{const}$  зависимости ФС и ДС от  $\tilde{V}$  противоположны предыдущим [6, 11]. Из-за многопараметрической зависимости ФС и ДС вопрос о том, какие из вышеуказанных параметров играют определяющую роль, до настоящего времени остается дискуссионным [2, 4–7], что не позволяет оптимизировать синтез продуктов с воспроизводимыми свойствами.

Целью данной работы являлось уточнение закономерностей фазообразования при окислении водных растворов  $\text{FeSO}_4$  и (или) суспензий  $\text{Fe}(\text{OH})_2$  кислородом воздуха при квазипостоянных значениях температуры и рН реакционной среды.

### Экспериментальная часть

Исходными реагентами служили водные растворы сульфата железа (II) (квалификация «хч»; раствор предварительно восстанавливали железным порошком) с концентрацией 1,7 моль/л и гидроксида натрия (квалификация «хч») с концентрацией 6,2 моль/л. Окисление вели в реакторе объемом 3 дм<sup>3</sup>, снабженном барботером с распылителем для подачи воздуха, перемешивающим устройством, системами электронагрева и термостатирования ( $\pm 2$  °С), дозирования в непрерывном режиме раствора NaOH и измерения окислительно-восстановительного потенциала и рН среды. В реактор заливали расчетные количества раствора  $\text{FeSO}_4$  и дистиллированной воды, нагревали до заданной температуры и подачей раствора NaOH достигали необходимого значения рНо реакционной среды. После этого в реактор начинали с постоянной скоростью подавать воздух, а в интервале  $3,5 \leq \text{pHo} \leq 8,5$  для поддержания квазипостоянного значения рНо ( $\pm 0,25$  ед.) и раствор NaOH. Окисление заканчивали после достижения окислительно-восстановительным потенциалом постоянного положительного значения, что соответствовало полноте окисления не менее 99,6%. Суммарную концентрацию железа (II)  $C_{\text{Fe(II)}}$  в растворе  $\text{FeSO}_4$  и (или) суспензии  $\text{Fe}(\text{OH})_2$  варьировали от 0,25 до 0,8 моль/л (с учетом разбавления исходного раствора  $\text{FeSO}_4$  раствором NaOH), скорость подачи воздуха  $V_B$  – от 125 до 600 дм<sup>3</sup>/ч на 1 л раствора  $\text{FeSO}_4$  и (или)

суспензии  $Fe(OH)_2$ , температуру и величину рНо реакционной среды – от 15 до 80 °С и от 3,5 до 13 единиц, соответственно. В некоторых опытах в процессе окисления делали промежуточные отборы суспензий, в которых определяли состав жидкой и твердой фаз. Полученные образцы отделяли на воронке Бюхнера от маточного раствора, отмывали водой до отсутствия в фильтрате сульфат-ионов, высушивали до постоянной массы при ~70 °С и измельчали.

Среднюю скорость окисления  $\tilde{V}$  рассчитывали по формуле  $\tilde{V} = C_{Fe(II)}/\tau$ , где  $\tau$  – длительность процесса окисления. Фазовый и дисперсный состав образцов контролировали методами рентгенофазового анализа (рентгеновский аппарат ДРОН-3; фильтрованное  $FeK_{\alpha}$ -излучение) и трансмиссионной электронной микроскопии (электронный микроскоп УЭМВ-100К), а их химический состав – методами объемного химического анализа и термогравиметрии (дериватограф Paulik – Erdey). Средний размер кристаллов  $d$  образовавшегося осадка рассчитывали исходя из физического уширения дифракционных максимумов  $\Delta 2\Theta$  по стандартной методике.

### Результаты исследования и обсуждение

В первой серии опытов варьировали величину рНо раствора  $FeSO_4$  и (или) суспензии  $Fe(OH)_2$ , а остальные параметры поддерживали квазипостоянными:  $C_{Fe(II)} = 0,25 \pm 0,02$  моль/л;  $V_B = 600 \pm 50$   $dm^3/ч$ ; температура –  $20 \pm 2$  °С. Зависимость средней скорости окисления от величины

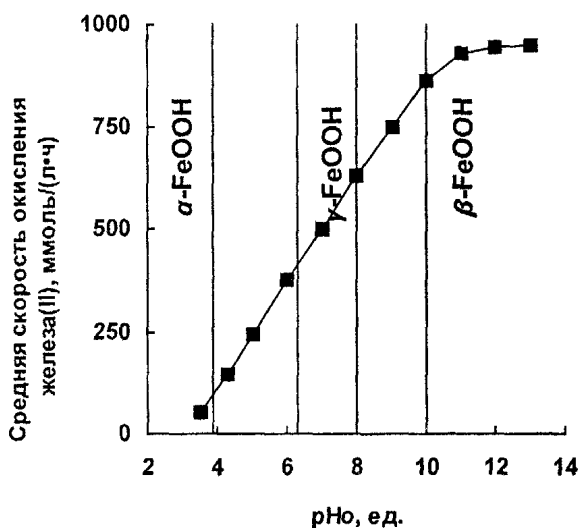


Рис. 1. Зависимость средней скорости окисления  $\tilde{V}$  раствора  $FeSO_4$  и (или) суспензии  $Fe(OH)_2$  и фазового состава формирующегося осадка от величины рНо реакционной среды:  $C_{TB} = 25$  г/ $dm^3$ ;  $V_B = 600$   $dm^3/ч$ ;  $t = 20$  °С

рНо приведена на рис. 1, из которого следует, что в интервале  $3,5 \leq p\text{Hо} \leq 10$  величина  $\tilde{V}$  практически линейно изменяется с рНо, возрастая от ~50 (рНо = 3,5) до ~950 ммоль  $[Fe(II)]/(л \cdot ч)$  при рНо = 10, а при дальнейшем повышении рНо вплоть до 13,0 средняя скорость окисления в пределах ошибки экспериментальных данных не изменяется. Полученные результаты качественно согласуются с данными [2], указывающими на увеличение константы скорости окисления с ростом рН водных растворов солей железа (II). Вместе с тем, определенная нами абсолютная величина изменения  $\tilde{V}$  на одну единицу рН раствора  $FeSO_4$  и (или) суспензии  $Fe(OH)_2$  существенно (~ в 10 раз) меньше, чем приводят авторы монографии [2], что может быть обусловлено различием в параметрах процесса окисления, например, в концентрациях ионов железа (II) в растворе.

От величины рНо зависят также ФС и ДС образующегося осадка (рис. 1). В частности, в интервалах  $3,5 \leq p\text{Hо} \leq 4$ ;  $7 \leq p\text{Hо} \leq 8$  и  $10 < p\text{Hо} \leq 13$  образуются оксигидроксиды железа (III)  $\alpha$ -,  $\gamma$ - и  $\delta$ -модификаций со средним размером кристаллов ~10, ~4 и ~9 нм соответственно. Образцы, полученные при значениях  $4 < p\text{Hо} < 7$  двухфазны ( $\alpha$ - +  $\gamma$ - $FeOOH$ ), причем по мере возрастания величины рНо в осадках симбатно изменяется массовая доля фазы  $\gamma$ - $FeOOH$ . Фазовый состав образцов, полученных вблизи рНо  $\approx 9$ , непостоянен: в этой области могут образовываться различные сочетания из оксигидроксидов железа (III)  $\alpha$ -,  $\gamma$ - и  $\delta$ -модификаций и фазы  $Fe_3O_4$ .

Во второй серии опытов варьировали температуру и величину рНо реакционной среды, скорость подачи воздуха  $V_B$  и суммарную концентрацию железа (II)  $C_{Fe(II)}$ . Зависимости средней скорости окисления, а также ФС и ДС осадка, образующегося в процессе окисления, от вышеуказанных параметров представлены в таблице. Из таблицы следует (см. опыты 1–8), что при фиксированных значениях других параметров величина  $\tilde{V}$  изменяется симбатно с ростом температуры,

причем величина относительного изменения средней скорости окисления  $\eta$  ( $\eta = \bar{V}(t_2)/\bar{V}(t_1)$ ;  $t_2 \gg t_1$ ) монотонно уменьшается с увеличением рНо от 3,0 (рНо = 3,8) до 1,4 (рНо = 7,5).

Следствием температурной зависимости  $\bar{V}$ , по-видимому, является отклонение от обнаруженной в работах [4,5] последовательности фазообразования в интервале значений  $3,8 < \text{pНо} < 5,5$  раствора  $\text{FeSO}_4$ , согласно которой при фиксированной средней скорости окисления  $\bar{V}$  фаза  $\alpha\text{-FeOOH}$  по сравнению с  $\gamma\text{-FeOOH}$  формируется при более высоких температурах. В опытах 1–3 (см. таблицу) эта зависимость нарушается, что скорее всего связано с изменением средней скорости окисления раствора сульфата железа (II). При дальнейшем увеличении рНо  $\eta$  уменьшается и последовательность фазообразования с ростом температуры приобретает обычный вид:  $\gamma \rightarrow \alpha$   $\text{FeOOH} \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4$  [4, 5], что иллюстрируется опытами 6–8 (см. таблицу).

В области растворов сульфата железа (II) (рНо < 5,5) увеличение  $C_{\text{Fe(II)}}$ , не оказывая существенного влияния на среднюю скорость окисления железа (II), приводит к возрастанию среднего размера кристаллов и увеличению массовой доли высокотемпературной фазы в бинарных смесях (опыты 12 и 13; см. таблицу). Это может быть связано с преимущественным ростом зародышей тех фаз, которые характеризуются минимумом свободной энергии.

Таблица

Зависимость средней скорости окисления  $\bar{V}$ , фазового и дисперсного состава осадка, формирующегося при окислении, от параметров процесса

№ опыта	рНо, отн. ед.	$C_{\text{Fe(II)}}$ , моль/л	$V(\text{O}_2)$ , $\text{дм}^3/(\text{л}\cdot\text{ч})$	$t$ , °С	$\bar{V}$ , ммоль/(л·ч)	Фазовый состав (размер кристаллов, нм) осадка
1	3,8	0,30	220	15	35	$\alpha\text{-FeOOH}$ (10)
2	3,8	0,30	220	30	60	$\alpha\text{-FeOOH}$ (10) > $\gamma\text{-FeOOH}$ (7)
3	3,8	0,30	220	45	95	$\alpha\text{-6FeOOH}$ (10) $\approx$ $\gamma\text{-FeOOH}$ (7)
4	4,5	0,25	600	35	120	$\alpha\text{-FeOOH}$ (8) < $\gamma\text{-FeOOH}$ (5)
5	4,5	0,25	600	55	190	$\alpha\text{-FeOOH}$ (8) $\approx$ $\gamma\text{-FeOOH}$ (5)
6	7,5	0,25	440	20	420	$\gamma\text{-FeOOH}$ (5)
7	7,5	0,25	440	45	500	$\alpha\text{-FeOOH}$ (10) > $\gamma\text{-FeOOH}$ (6)
8	7,5	0,25	440	80	630	$\alpha\text{-FeOOH}$ (15) $\gg$ $\text{Fe}_3\text{O}_4$
9	7,5	0,25	600	20	750	$\gamma\text{-FeOOH}$ (3,5)
10	7,5	0,25	470	20	600	$\alpha\text{-FeOOH}$ (8) $\ll$ $\gamma\text{-FeOOH}$
11	7,5	0,25	125	20	250	$\alpha\text{-FeOOH}$ (21) < $\gamma\text{-FeOOH}$ (17)
12	5,0	0,25	600	45	250	$\alpha\text{-FeOOH}$ (20) $\approx$ $\gamma\text{-FeOOH}$ (7)
13	5,0	0,80	600	45	240	$\alpha\text{-FeOOH}$ (20) $\gg$ $\gamma\text{-FeOOH}$
14	7,0	0,25	600	40	750	$\gamma\text{-FeOOH}$ (4)
15	7,0	0,40	600	20	400	$\alpha\text{-FeOOH}$ (11) $\approx$ $\gamma\text{-FeOOH}$ (9)
16	7,0	0,50	600	20	210	$\alpha\text{-FeOOH}$ (17) > $\gamma\text{-FeOOH}$ (14)
17	7,0	0,60	600	20	130	$\alpha\text{-FeOOH}$ (22)

Напротив, в области значений  $5,5 < \text{pНо} < 8,5$ , соответствующих частичному осаждению ионов железа (II) из раствора при  $C_{\text{Fe(II)}} > 0,3$  моль/л наблюдается резкое уменьшение  $\bar{V}$  и увеличение концентрации  $\text{Fe}(\text{OH})_2$  в суспензии (опыты 14–17; см. таблицу). Это связано с изменением в процессе окисления реологических свойств суспензий. По данным работ [12, 13] в указанном интервале рНо в качестве промежуточного соединения формируется фаза, известная в литературе как «зеленая ржавчина II», с ярко выраженной пластинчатой формой кристаллов, что приводит к резкому повышению вязкости суспензий. Вследствие этого уменьшаются, с одной стороны, растворимость и коэффициент диффузии кислорода в реакционной среде, а с другой – удельная поверхность газовой фазы из-за коалесценции пузырьков воздуха [14], что проявляется в уменьшении средней скорости окисления, увеличении среднего размера кристаллов, снижении температурной границы образования фазы  $\alpha\text{-FeOOH}$ .

Таким образом, из данных, представленных в таблице, следует, что ФС и ДС продуктов, формирующихся в процессе окисления, существенно зависят от скорости окисления  $\tilde{V}$  раствора сульфата железа (II) и (или) суспензии гидроксида железа (II), а  $\tilde{V}$ , в свою очередь, – от температуры и величины рНо реакционной среды, суммарной концентрации  $C_{Fe(II)}$  и скорости подачи воздуха. При этом во всем исследованном диапазоне изменения параметров синтеза влияние  $\tilde{V}$  на ФС и ДС оксидных соединений железа (III) противоположно тому, которое оказывает температура. Обнаруженная зависимость фазового и дисперсного состава формирующегося осадка от параметров процесса окисления в целом согласуется с результатами исследования аналогичных систем [2, 5, 6, 11]. Это свидетельствует о том, что рост кристаллов при окислении водных растворов солей железа (II) и (или) суспензий гидроксида железа (II), особенно в области низких температур, протекает в условиях высоких пересыщений. Следствием этого являются уменьшение среднего размера кристаллов, возрастание их дефектности, образование фаз с неупорядоченной кристаллической структурой, например,  $\delta-FeOOH$  (см. рис. 1).

Отметим, что при квазипостоянных значениях других параметров (опыты 1–3 и 6–8; см. таблицу) зависимости средней скорости окисления от термодинамической температуры  $T$  удовлетворительно спрямляются в координатах  $\ln \tilde{V} - 1/T$  (рис. 2). Это свидетельствует об активационном характере формирования оксидных соединений железа (III), которое сопровождается элементарными реакциями окисления гидроксиаквакомплексов (ГАК) железа (II) в растворе, последующего гидролиза ГАК железа (III) и перехода их из раствора в конденсированное состояние (встраивание комплексов в решетку формирующихся фаз). Из рис. 2 следует, что величина кажущейся энергии активации  $E_A$  уменьшается с ростом рНо от  $25 \pm 2$  (рНо = 3,8) до  $7,5 \pm 0,7$  кДж/моль (рНо = 7,5). Поскольку рН полного гидролиза ионов железа (III) в водных растворах (~2,4 по данным [1,2]) по величине много меньше значений рНо, при которых проводились эксперименты, можно предположить, что лимитирующей из вышеуказанных реакций выступает реакция окисления ГАК железа (II). В этом случае выявленные зависимости  $\tilde{V}$  (см. рис. 1) и  $E_A$  (см.

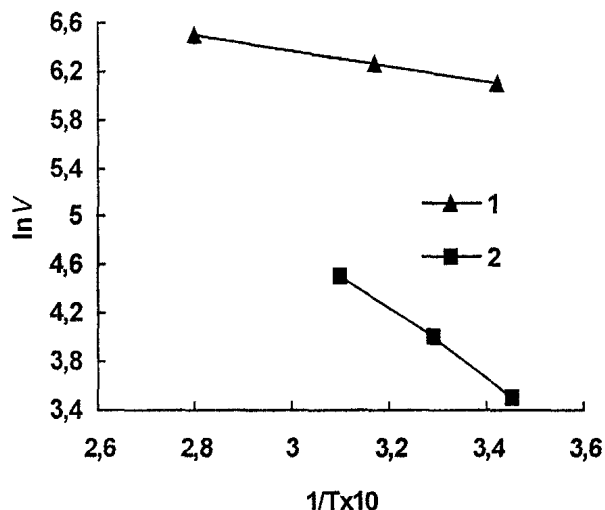


Рис. 2. Зависимости  $\ln \tilde{V}$  от обратной термодинамической температуры: 1 – рНо = 3,8;  $C_{ТВ} = 25$  г/дм<sup>3</sup>;  $V_B = 220$  дм<sup>3</sup>/ч; 2 – рНо = 7,5;  $C_{ТВ} = 25$  г/дм<sup>3</sup>;  $V_B = 440$  дм<sup>3</sup>/ч

рис. 2) от величины рНо могут быть объяснены с позиций изменения степени гидролиза (величины  $n$ ) и массовой доли в растворе различных ГАК железа (II) общего состава  $[Fe(OH)_n]^{2-n}_{aq}$  ( $0 \leq n \leq 3$ ).

Действительно, как показано в работе [15], ионы железа (II) в водных растворах в зависимости от величины рН присутствуют в виде ГАК с  $n = 0$  ( $1,5 < рН < 9$ ), с  $n = 1$  ( $4,5 < рН < 12$ ; максимум массовой доли этих ГАК достигается при  $рН \approx 7$ ), с  $n = 2$  ( $6,5 < рН < 9,5$ ; максимум при  $рН \approx 9$ ) и  $n = 3$  ( $рН > 8$ ). Следовательно, при рНо = 3,8 окислению подлежат только ГАК железа (II) с  $n = 0$ , а при рНо = 7,5 – три ГАК с  $n = 0, 1$  и  $2$ , причем максимальная концентрация достигается у ГАК состава  $[Fe(OH)]^+_{aq}$  ( $n = 1$ ). Квантовохимические расчеты, проведенные в работе [16], показали, что с увеличением  $n$  у ГАК железа (II) происходит как монотонное понижение энергии низшей вакантной

$7a_{1g}$ -подобной орбитали, так и уменьшение энергетического интервала запрещенной зоны  $\Delta E_g$ . Вследствие этого возрастает реакционная способность ГАК железа (II), что, по-видимому, и проявляется в уменьшении кажущейся энергии активации реакции окисления.

## Выводы

1. Для квазистационарного режима окисления водных растворов сульфата железа (II) и (или) суспензий гидроксида железа (II) установлены зависимости средней скорости окисления  $\bar{V}$ , фазового и дисперсного состава осадка от термодинамических (температуры, pH, суммарной концентрации  $C_{Fe(II)}$ ) и кинетических (скорости подачи воздуха) параметров синтеза. Выявлены области значений параметров, соответствующие образованию фаз  $Fe_3O_4$ ,  $\alpha$ -,  $\gamma$ - и  $\delta$ -FeOOH.

2. Показано, что в интервале  $3,5 < pH \leq 7,5$  при прочих одинаковых параметрах синтеза величины  $\bar{V}$  симбатно, а кажущейся энергии активации  $E_A$  реакции окисления антибатно изменяются с ростом pH.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № P 2001 урчел 03-03.*

## Литература

1. Реми Г. Неорганическая химия. М.: Мир, 1974. – Т. 2. – 775 с.
2. Гипергенные окислы железа / Под ред. Н.В. Петровской. – М.: Наука, 1975. – 206 с.
3. Domingo C., Rodriguez-Clemente R., Bleza M. // J. Colloid and Interface Sci. – 1994. – V. 165. – № 1. – P. 244–252.
4. Фазообразование в системе  $FeSO_4 - H_2O - H^+/OH^- - H_2O_2$ . / Р.Р. Багаутдинова, А.В. Толчев, Д.Г. Клещев, В.Ю. Первушин // ЖПХ. – 1999. – Т. 72. – Вып. 10. – С. 1588–1592.
5. Kiyama M. Conditions for the formation of  $Fe_3O_4$  by the air oxidation of  $Fe(OH)_2$  suspensions // Bull. Chem. Soc. Japan. – 1974. – V. 47. – № 7. – P. 1646.
6. Закономерности фазообразования в системе  $Fe(OH)_2 - H_2O - O_2$  / Н.Г. Краснобай, Ю.Г. Распопов, Д.Г. Клещев и др. // Журн. неорган. химии. – 1986. – Т. 31. – № 9. – С. 2215.
7. Feitknecht W. // Zs. Electrochem. – 1959. – Bd. 63. – № 1. – S. 64.
8. Das R. P., Anand S. // Hydrometallurgy. – 1995. – V. 38. – № 2. – P. 161–173.
9. T. Ishikawa, A. Ishikawa, K. Kandori, R. Orli // J. Chem. Soc. Faraday Trans. – 1994. – V. 90. – № 17. – P. 2567–2570.
10. Гидротермальный синтез антикоррозионного пигмента «железная слюдка» / А.В. Толчев, Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев и др. // Лакокрасочные материалы и их применение. – 2001. – № 1. – С. 13–15.
11. Универсальная гидротермальная технология синтеза железоокисных пигментов / Г.И. Агафонов, Д.Г. Клещев, А.В. Толчев и др. // Лакокрасочные материалы и их применение. – 1999. – № 7–8. – С. 41–46.
12. Misawa T., Hashimoto K., Shimodaria S. The mechanism of formation of iron oxides and oxyhydroxides in aqueous solutions at room temperature // Corrosion Sci. – 1974. – V. 4. – № 2. – P. 131–149.
13. Detourney V., Derie R., Chodsi M. Etude de l'oxydation par aeration de  $Fe(OH)_2$  en milieu chlorure // Zs. anorg. allgem. Chem. – 1976. – Bd. 427. – № 3–4. – S. 265–273.
14. Урьев Н.Б. Высокотцентрированные дисперсные системы. – М.: Химия, 1980. – 320 с.
15. Инцкирвели Л.Н., Колосов И.В., Варшал Г.М. Изучение гидролиза железа (II) методом ионного обмена // Журн. неорган. химии. – 1975. – Т. 20. – № 9. – С. 2388–2391.
16. Электронно-энергетические состояния гидроксоаквакомплексов  $Fe(II)$  / Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев, А.В. Толчев и др. // Физико-химические процессы в неорганических системах: Сб. науч. тр. – Екатеринбург: УрО РАН, 1996. – С. 35–39.

*Поступила в редакцию 26 апреля 2003 г.*

# КРИСТАЛЛООБРАЗУЮЩИЕ КОМПЛЕКСЫ: МЕХАНИЗМ ФАЗОВЫХ И ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ FeOОН В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

*Р.Р. Клещева, М.А. Попов, А.В. Толчев, Д.Г. Клещев*

Исследованы закономерности фазовых (в  $\alpha$ -FeOОН) и химических (в  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) превращений неравновесных FeOОН при термообработке в различных по составу водных растворах. Анализируются вопросы о возможном составе и конфигурации кристаллообразующих комплексов, реакциях, протекающих на границе «раствор – кристалл» и при встраивании кристаллообразующих комплексов в различные атомно-гладкие грани  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

## Введение

Неравновесные мелкодисперсные (МДС) оксигидроксиды железа (III)  $\gamma$ - и  $\delta$ -модификаций, формирующиеся в условиях высоких пересыщений при быстром окислении растворов солей железа (II) и (или) суспензий гидроксида железа (II), при дальнейшей термообработке в растворах могут испытывать фазовое (ФП) или химическое (ХП) превращения в равновесную для данных термодинамических условий фазу  $\alpha$ -FeOОН или  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> соответственно, а фаза  $\alpha$ -FeOОН – ХП в  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [1–3]. Из анализа литературных данных следует, что кинетика и тип превращения, а также габитус и средний размер кристаллов формирующихся фаз зависят от многочисленных факторов: температуры термообработки, фазового и дисперсного состава МДС, ионного состава (включая pH) раствора и др. [4–8]. Мнения различных авторов о том, какие из указанных факторов оказывает доминирующее влияние на превращения МДС, во многом противоречивы. Остаются дискуссионными вопросы о механизмах ФП и ХП, их лимитирующих стадиях, причинах, приводящих к зависимости габитуса кристаллов от параметров термообработки. В этой статье на основании литературных и собственных экспериментальных данных анализируются вышеперечисленные вопросы.

## Экспериментальная часть

Объектами исследования служили однофазные образцы  $\alpha$ -,  $\gamma$ - и  $\delta$ -FeOОН, которые получали по стандартным методикам [2] путем окисления кислородсодержащим агентом (воздух, кислород, раствор H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) водных растворов FeSO<sub>4</sub> и (или) суспензий Fe(OH)<sub>2</sub> при квазипостоянных значениях температуры и pH реакционной среды, а также бинарные смеси  $\alpha$ - и  $\delta$ -FeOОН. Средний размер кристаллов FeOОН варьировали путем изменения температуры и средней скорости  $\bar{V}$  реакции окисления Fe<sup>2+</sup> → Fe<sup>3+</sup> (см. таблицу).

Условия получения, габитус и средний размер кристаллов FeOОН

Таблица

Фаза	Условия получения			Габитус кристаллов	Средний размер кристаллов d, нм
	pH	$\bar{V}$ , моль/(дм <sup>3</sup> ·ч)	t, °C		
$\alpha$ -FeOОН	4...5	0,1...0,5	30...60	Игольчатый	d <sub>a</sub> от 100 до 500; форм-фактор ~ 4
$\gamma$ -FeOОН	6...7	1...3	10...30	Пластинчатый	d <sub>a</sub> от 100 до 1000; d <sub>c</sub> от 50 до 500; d <sub>b</sub> ~ 3
$\delta$ -FeOОН(I)	10,5	2	15	Эллипсоидальный	d <sub>a</sub> ~ 10; форм-фактор ~ 2
$\delta$ -FeOОН(II)	12	2	80	Таблитчатый	d <sub>a</sub> ~ 200; d <sub>c</sub> ~ 50

Полученные осадки отделяли на воронке Бюхнера от маточного раствора, отмывали дистиллированной водой до отсутствия в фильтрате сульфат-ионов и репульпировали в  $H_2O$  ( $pH \sim 7$ ), а также в водных растворах  $H_2SO_4$  ( $2 \leq pH \leq 6$ ),  $NaOH$ ,  $NiSO_4$ ,  $CoSO_4$ ,  $Fe_2(SO_4)_3$ ,  $FeSO_4$ ,  $Ti_2(SO_4)_3$  и  $SnCl_2$  различной концентрации. Эти суспензии подвергали термообработке как в реакторах открытого типа при температурах ( $t$ ) от 60 до 100 °С, так и в автоклавах в условиях повышенного парциального давления паров воды в интервале от 110 до 240 °С в течение от 0,1 до 30 ч. Время нагрева суспензии до заданной температуры составляло от 0,1 до 1 ч; точность поддержания постоянной температуры –  $\pm 3$  °С.

Фазовый и дисперсный состав образцов контролировали методами рентгенофазового анализа и трансмиссионной электронной микроскопии, а химический состав раствора – методами аналитической химии. Кинетику массообмена между твердой фазой и раствором в процессах ФП и ХП исследовали методом нейтронной активации и  $\gamma$ -спектрометрии.

### Результаты

*А. Факторы, влияющие на кинетику ФП и ХП.* Нижняя температурная граница  $t_1$  макроскопического проявления ФП и ХП зависит от фазового и дисперсного состава  $FeOOH$ , ионного состава раствора и массовой доли твердой фазы в суспензии, а кинетика и тип превращения – наряду с этим зависят еще и от температуры термообработки. Подтверждением этому являются следующие экспериментальные факты:

а) при приблизительно одинаковых условиях термообработки, включая средний размер кристаллов  $d$ , температура  $t_1$  для исследованных  $FeOOH$  изменяется в последовательности:

$$t_1(\alpha) > t_1(\gamma) \approx t_1(\delta) [9];$$

по мере увеличения  $d$  при фиксированной температуре термообработки уменьшается скорость ФП и ХП и, напротив, возрастает температура устойчивости метастабильной фазы (рис. 1);

б) температура  $t_1$  возрастает, а скорость ФП и ХП, напротив, уменьшается с увеличением массовой доли  $FeOOH$  и вязкости суспензии [9];

в) при прочих одинаковых условиях скорость ФП и ХП монотонно возрастает с увеличением температуры термообработки (рис. 2);

г) в системах  $\gamma(\delta)-FeOOH-H_2O$  при  $t < 80$  °С  $FeOOH$  испытывает ФП в  $\alpha-FeOOH$ , а при более высоких температурах – ХП в  $\alpha-Fe_2O_3$  [2]. Это согласуется с диаграммой состояния системы  $Fe_2O_3-H_2O$  [10] и свидетельствует о том, что рост кристаллов при ФП и ХП протекает в условиях, близких к равновесным;

д) все исследованные дисперсионные среды по степени иницирующего влияния на кинетику ФП и ХП  $FeOOH$ , а также в зависимости от протекающих при термообработке элементарных процессов, можно разделить на четыре группы [11,12]: первая –  $H_2O$  и растворы  $H_2SO_4$ ,  $NaOH$  ( $C_{NaOH} \leq 0,5$  моль/дм<sup>3</sup>),  $NiSO_4$ ,

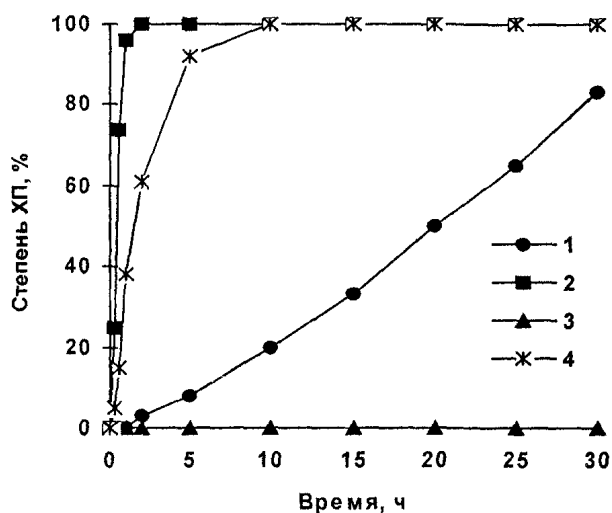


Рис. 1. Кинетика ХП ( $t = 95$  °С) образца  $\delta-FeOOH(I)$  в  $H_2O$  (1), 0,25 М растворе  $FeSO_4$  (2) и образца  $\delta-FeOOH(II)$  в  $H_2O$  (3), 0,25 М растворе  $FeSO_4$  (4)

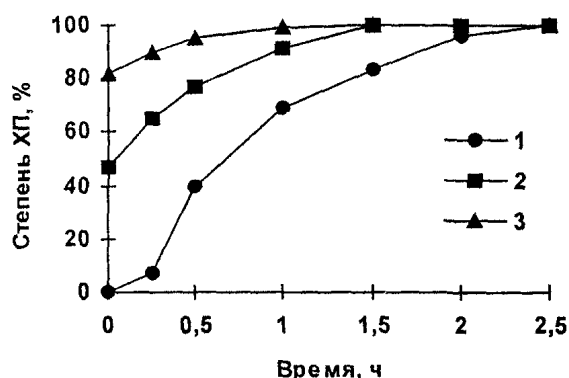


Рис. 2. Влияние температуры термообработки на кинетику химического превращения  $\delta-FeOOH(I) \rightarrow \alpha-Fe_2O_3$ : 1– 125; 2– 150; 3– 175 °С



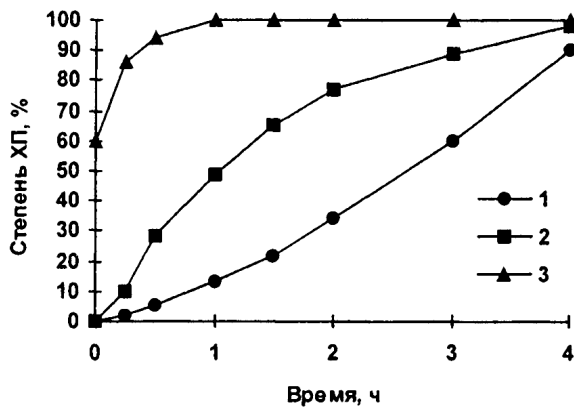


Рис. 3. Влияние ионного состава раствора на кинетику ХП  $\alpha$ -FeOOH  $\rightarrow$   $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (t = 200 °C):  
1 – H<sub>2</sub>O; 2 – 0,05 М раствор H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>;  
3 – 0,1 М раствор FeSO<sub>4</sub>

лентного количества Fe<sup>2+</sup>-ионов; на второй стадии термообработки ( $\tau > \tau_1$ ) оставшаяся часть кристаллов FeOOH испытывают ФП или ХП в фазы  $\alpha$ -FeOOH или  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> соответственно.

**Б. Факторы, влияющие на средний размер и габитус кристаллов  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.** Фаза  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, образующаяся в результате ХП FeOOH в нейтральных, слабокислых и слабощелочных средах (растворы первой, третьей и четвертой групп), характеризуется изометрической формой кристаллов. В одинаковых по составу растворах средний размер d кристаллов  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> монотонно возрастает с ростом как температуры термообработки, так и среднего размера кристаллов FeOOH. При фиксированных значениях температуры и дисперсного состава FeOOH величина d кристаллов  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, образовавшихся в растворах FeSO<sub>4</sub>, в 2...4 раза больше таковых, чем у  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, полученных при ХП FeOOH в растворах первой группы. Путем варьирования температуры, дисперсного состава FeOOH и ионного состава раствора можно целенаправленно получать практически монодисперсные порошки  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> со средним размером кристаллов от 40 до 500 нм (рис. 4а, б). У кристаллов  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с d > 150 нм проявляется огранка в виде кубических и октаэдрических морфологических форм.

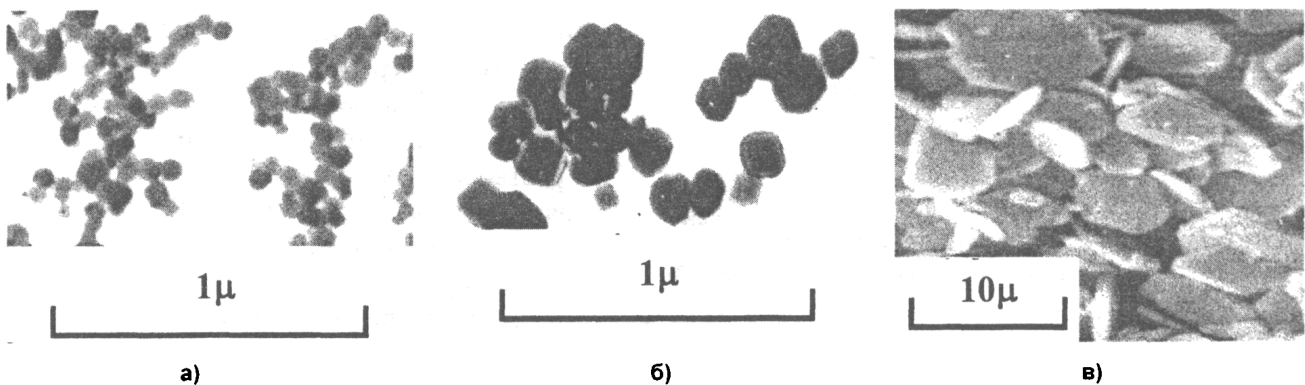


Рис. 4. Микрофотографии образцов  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, полученных при ХП  $\delta$ - (а) и  $\alpha$ -FeOOH (б) в дистиллированной воде и  $\alpha$ -FeOOH (в) в 3 М растворе NaOH (t = 210 °C)

При ХП FeOOH в сильнощелочных растворах ( $C_{\text{NaOH}} > 2$  моль/дм<sup>3</sup>) образуется  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с ярко выраженным таблитчатым габитусом кристаллов [13] (рис. 4в). Из данных рентгенографии следует, что у этих кристаллов плоскость пластины перпендикулярна кристаллографическому направлению {001}. При термообработке смесей  $\alpha$ - +  $\delta$ -FeOOH с увеличением массовой доли фазы  $\delta$ -FeOOH отмечено монотонное уменьшение средних значений толщины и линейного размера кристаллов  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (рис. 5).

**С. Кинетика массообмена между FeOOH и дисперсионной средой.** Из данных нейтронной активации и  $\gamma$ -спектрометрии (рис. 6) следует, что при термообработке  $\gamma$ ( $\delta$ )-FeOOH в растворе

$\text{FeSO}_4$  концентрация  $C_0$  ионов радионуклеида  $^{59}\text{Fe}$  с течением времени монотонно возрастает [14]. Зависимость  $C_0$  от  $\tau$  в системах  $\text{FeOOH-H}_2\text{O}$  и  $\text{FeOOH-H}_2\text{O-H}_2\text{SO}_4$  носит экстремальный характер: сначала  $C_0$  возрастает, достигает максимального значения  $C_0^{\text{max}}$ , а затем монотонно уменьшается. По своей величине  $C_0^{\text{max}}$  в  $\text{H}_2\text{O}$  и растворе  $\text{H}_2\text{SO}_4$  соответственно в 12 и 3,5 раза меньше, чем в растворе  $\text{FeSO}_4$ .

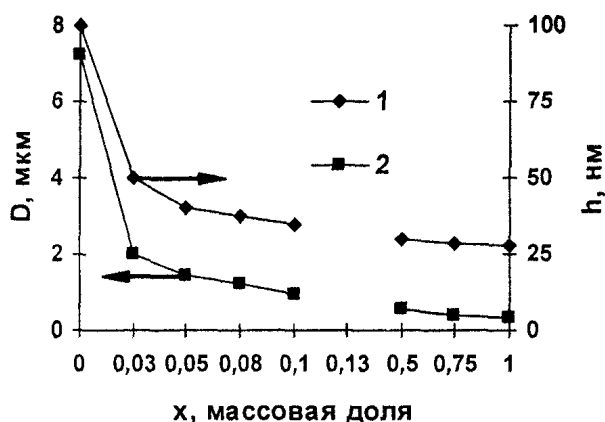


Рис. 5. Зависимости среднего линейного размера  $D$  и толщины  $h$  пластинчатых кристаллов  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , формирующихся при термообработке смеси фаз  $\alpha\text{-} + \delta\text{-FeOOH}$  ( $t = 235^\circ\text{C}$ ;  $C_{\text{NaOH}} = 6$  моль/дм<sup>3</sup>) от массовой доли  $\delta\text{-FeOOH}$

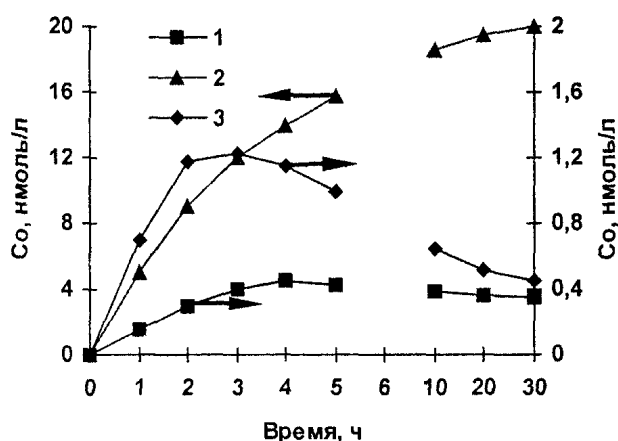


Рис. 6. Кинетика массообмена между твердой и жидкой фазами в системах  $\delta\text{-FeOOH(l)} - \text{H}_2\text{O} - \text{FeSO}_4$  (а),  $\delta\text{-FeOOH(l)} - \text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SO}_4$  (б) и  $\delta\text{-FeOOH(l)} - \text{H}_2\text{O}$  (в) ( $t = 95^\circ\text{C}$ )

б) взаимодействия между АГК с образованием зародышей новой фазы и полиядерных кристаллообразующих комплексов (КОК);

в) встраивания КОК в поверхностный слой зародыша (кристалла), осложненное реакциями дегидратации и (или) оляции, и (или) оксоляции [2].

*В. Реакции взаимодействия на границе «твердое тело – раствор».* Очевидно, что интенсивность массопереноса в МДС во многом зависит от природы дисперсионной среды. В частности, в средах, взаимодействие которых с оксидами металлов пренебрежимо мало (воздух, инертные газы), концентрация атомов, достаточная для активации в МДС процессов коалесценции и спекания, достигается при относительно высоких температурах (например, для  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  при  $\sim 500^\circ\text{C}$  [11]). Напротив, в химически активных к МДС средах теплота, выделяющаяся при химической

### Обсуждение

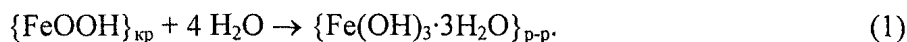
*А. Механизм ФП и ХП FeOOH в растворах.* Появление в растворе ионов  $^{59}\text{Fe}$  и изменение с течением времени их концентрации свидетельствует о наличии массообмена между твердой фазой и раствором. В системах  $\text{FeOOH-H}_2\text{O}$  и  $\text{FeOOH-H}_2\text{O-H}_2\text{SO}_4$  рост  $C_0$  обусловлен процессом растворения  $\text{FeOOH}$ , а экстремальный вид зависимости  $C_0$  от  $\tau$  объясняется меньшей величиной растворимости  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  по сравнению с  $\text{FeOOH}$  [15] и увеличением со временем массовой доли этой фазы в суспензии. Отсутствие экстремума на кривой зависимости  $C_0$  от  $\tau$  в системе  $\text{FeOOH-H}_2\text{O-FeSO}_4$ , монотонное увеличение  $C_0$ , в том числе и по окончании ХП, при практически постоянной общей концентрации  $\text{Fe}^{2+}$  в растворе связано с тем, что в данной системе наряду с процессами растворения и конденсации имеет место обмен стабильными и радиоактивными изотопами между  $\text{FeOOH}$  и раствором  $\text{FeSO}_4$ .

Совокупность экспериментальных данных о наличии массообмена между твердой фазой и раствором, взаимосвязи между его интенсивностью и кинетикой ФП и ХП, зависимости морфологии и среднего размера кристаллов равновесных фаз от состава раствора и др. позволяет сделать вывод о том, что ФП и ХП  $\text{FeOOH}$  в растворах осуществляется по механизму «растворения – осаждения» (РОМ). В качестве элементарных РОМ включает следующие процессы:

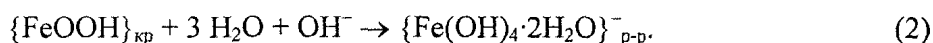
а) растворения кристаллов неравновесной фазы с образованием аквагидрокомплексов (АГК) железа (III);

реакции, приводит к локальному перегреву КОК поверхности кристалла и разрыву его связей с кристаллической решеткой и, как следствие, к снижению температуры макроскопического проявления РОМ [16].

Проанализируем возможные химические реакции между FeOOH и исследованными растворами. В растворах первой группы на поверхности кристаллов может протекать реакция гидратации иона железа (III), в результате которой Fe(III) из кристалла переходит в раствор:



В концентрированных растворах NaOH, по-видимому, протекает реакция взаимодействия FeOOH со щелочью, приводящая к увеличению концентрации АГК железа (III) в растворе и, как следствие, к ускорению ФП и ХП FeOOH по сравнению с растворами первой группы:



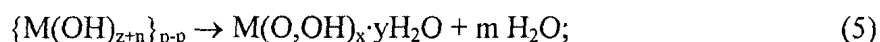
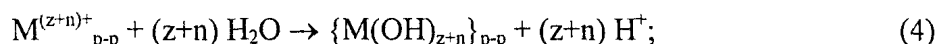
Рассмотрим возможный механизм каталитического влияния Fe<sup>2+</sup>-ионов на ФП и ХП неравновесных FeOOH. Изменение состава твердой и жидкой фаз на первой стадии термообработки FeOOH в растворах Ti<sub>2</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> и SnCl<sub>2</sub> позволяет сделать вывод о протекании в системе следующих взаимодействий:

а) окислительно-восстановительной реакции, локализованной на границе раздела кристалл – раствор:

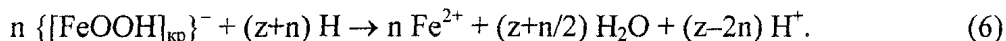


где M<sup>z+</sup> – Ti<sup>3+</sup>, Sn<sup>2+</sup>; n = 1(2) для Ti<sup>3+</sup> (Sn<sup>2+</sup>) соответственно;

б) гидролиза и поликонденсации M<sup>(z+n)+</sup>-ионов:

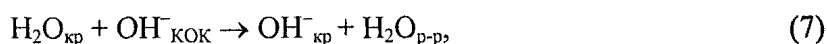


в) растворения комплексов {[\text{FeOOH}]<sub>кр</sub>}<sup>-</sup>:

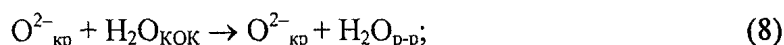


С точки зрения термодинамики реакция (3) дозволена для любых M<sup>z+</sup>-ионов, имеющих неотрицательную алгебраическую сумму окислительно-восстановительных потенциалов с ионами Fe(III)<sub>кр</sub>, а следовательно, и для Fe<sup>2+</sup>-ионов. Совокупностью реакций (3)–(6), в которых M<sup>z+</sup> = Fe<sup>2+</sup>, а n = 1, и объясняется каталитическое влияние Fe<sup>2+</sup>-ионов на ФП и ХП FeOOH в растворах.

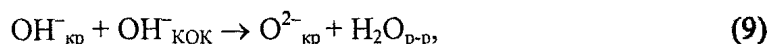
*С Структура КОК и рост кристаллов.* Согласно представлениям, разработанным в работе [17], рост кристаллов оксидных соединений железа (III) в растворах осуществляется путем встраивания в их поверхностный слой КОК, состав и структура которых определяется состоянием Fe<sup>3+</sup>-ионов в растворе. В слабокислых, нейтральных и слабощелочных растворах (3 < pH < 10) с учетом электронейтральности кристалла атомно-гладкая грань {100} α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> состоит (рис. 7а) из чередующихся слоев молекул воды (слой I) и анионов кислорода (слой II), а грань {001} – только из OH<sup>-</sup>-групп, которые образуют на ней плоскую гексагональную сетку (рис. 7б). В вышеуказанных растворах АГК железа (III) имеет состав [Fe(OH)<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O]<sup>0</sup> [18]. Согласно модели [17] из этих ФГК формируется биядерный электронейтральный КОК-1, состоящий из двух сочлененных по ребру октаэдров (рис. 7в), следующего состава: [Fe<sub>2</sub>(OH)<sub>6</sub>·4H<sub>2</sub>O]<sup>0</sup>. При встраивании КОК-1 в грань {100} в точках 1–3 протекают реакции оляции



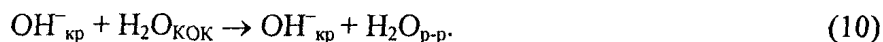
в точках 4 и 5 – реакции дегидратации



на грани {001} в точках 1–3 – реакции оксоляции



а в точках 4 и 5 – реакции оляции



При ХП FeOOH в растворах с  $3 < \text{pH} < 10$  формируются изометричные по форме кристаллы  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , что свидетельствует о близких значениях как констант скорости роста граней  $\{100\}$  и  $\{001\}$ , так и сопутствующих процессу встраивания КОК химических реакций.

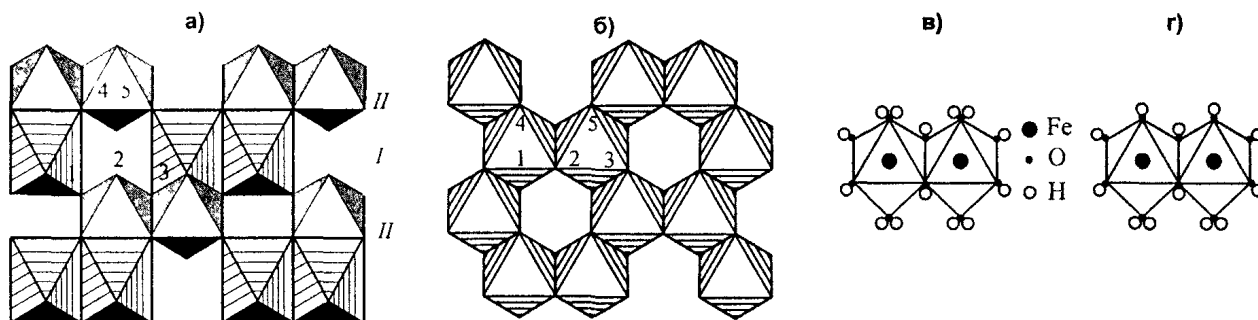
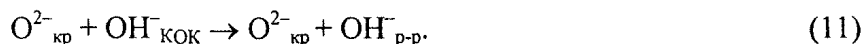


Рис 7 Фрагменты плоскостей  $\{100\}$  (а) и  $\{001\}$  (б)  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  в полиэдрической интерпретации и структура кристаллообразующих комплексов  $\text{Fe}_2(\text{OH})_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  (в) и  $\{\text{Fe}_2(\text{OH})_8 \cdot 2\text{H}_2\text{O}\}^{2-}$  (г)

В концентрированных растворах NaOH ( $\text{pH} > 10$ ) щелочь может вступать в реакцию как с поверхностью кристалла, так и с КОК. По данным работы [19] в таких растворах формируется АГК железа (III) состава  $[\text{Fe}(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]^-$ . По аналогии с работой [17] можно предположить, что в этом случае образуется биядерный КОК-1' состава  $\{\text{Fe}_2(\text{OH})_8 \cdot 2\text{H}_2\text{O}\}^{2-}$  (рис. 7г). В свою очередь на поверхности кристалла возможны следующие реакции взаимодействия со щелочью: на грани  $\{001\}$  – оксоляции с образованием мостиковых оксосвязей между ионами железа (III); на грани  $\{100\}$  – замещения молекул воды на OH-группы гидроксида натрия.

В связи с этим в растворах NaOH изменяется тип реакций, протекающих при встраивании КОК-1'. В частности, на грани  $\{100\}$  в этом случае в точках 1–3 реализуется реакция оксоляции (9), а в точках 4 и 5 – реакция дегидратации (8). На грани  $\{001\}$  в точках 4 и 5 также протекает реакция дегидратации (8), а в точках 1–3 – реакция дегидроксилирования:



Наиболее выгодными с термодинамической точки зрения являются реакции оксоляции и дегидратации, сопровождающиеся установлением прочных оксосвязей между ионами железа (III) поверхности кристалла и КОК и, как следствие, уменьшением свободной энергии системы «кристалл – КОК». Для активации реакции дегидроксилирования (11) необходимо затратить энергию на разрыв связи Fe–OH, которая по величине близка к энергии оксосвязи. Вследствие этого константа скорости реакции (11) по сравнению с реакциями (7)–(10) пренебрежимо мала. Этим объясняется преимущественный рост кристаллов  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  в сильнощелочных средах в направлениях типа  $\{100\}$ , а, следовательно, и формирование анизометричных по форме кристаллов.

### Выводы

1 Фазовые (в  $\alpha\text{-FeOOH}$ ) и химические (в  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) превращения неравновесных FeOOH при термообработке в растворах реализуются по механизму «растворение – осаждение» и сопровождаются массообменом между твердой фазой и раствором. Выявлены основные параметры (температура, ионный состав раствора, фазовый и дисперсный состав FeOOH), влияющие на кинетику и тип превращения, средний размер и габитус кристаллов равновесной фазы.

2 Рассмотрены вопросы о возможном составе и конфигурации кристаллообразующих комплексов, реакциях, протекающих на границе «раствор – кристалл» и при встраивании кристаллообразующих комплексов в различные атомно-гладкие грани  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ .

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № Р 2001 урчел 03-03, а также при финансовой поддержке Правительства Челябинской области, грант А2003287*

### Литература

1. Feitknecht W. // *Zs. Elektrochem.* – 1959. – Bd. 63. – № 1. – S. 34–43.
2. Клещев Д.Г., Шейнкман А.И., Плетнев Р.Н. Влияние среды на фазовые и химические превращения в дисперсных системах. – Свердловск: УрО АН СССР, 1990. – 248 с.
3. Bernal J.D., Dasgupta D.R., Mackay A.S. // *Clay Miner. Bull.* – 1959. – V. 4. – № 1. – P. 15–30.
4. Keller P // *Werkstoffe Korros.* – 1969. – B. 20. – № 2. – S. 102–108.
5. Гипергенные окислы железа. / Под ред. Н.В. Петровской. – М.: Наука, 1975. – 206 с.
6. Hiller J.E. // *Werkstoffe Korros.* – 1966. – B. 17. – № 11. – S. 943 – 951.
7. Bechine K., Subrt J., Hanslik T. et al. // *Z. Anorg. Allg. Chem.* – 1982. – B. 489. – № 6. – S. 186–196.
8. Krause A., Moroniowna K., Przybylski E. // *Z. Anorg. Allg. Chem.* – 1934. – B. 219. – № 1–2. – S. 203–212.
9. Факторы, влияющие на кинетику превращения  $\alpha(\delta)$ -FeOОН  $\rightarrow$   $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев, Р.Н. Плетнев и др. // *Неорган. материалы.* – 1998. – Т. 34. – № 3. – С. 584–586.
10. Langmuir D. // *Amer. J. Sci.* – 1971. – V. 271. – № 2. – P. 147–156.
11. Превращения микрокристаллического  $\delta$ -FeOОН при термообработке на воздухе и в растворах. А.В. Толчев, Д.Г. Клещев, Краснобай Н.Г. и др. // *Изв. АН СССР. Неорган. материалы.* – 1988 – Т. 24. – № 6. – С 964–968.
12. Толчев А В , Багаутдинова Р.Р., Клещев Д.Г. Кристаллохимический аспект фазообразования в системе  $\gamma$ -FeOОН–H<sub>2</sub>O–NaOH. // *Журн. прикл. химии.* – 2001. – Т. 74. – № 3. – С. 353–356.
13. Фазовые и химические превращения  $\gamma$ -FeOОН в растворах NaOH / А.В. Толчев, Р.Р. Багаутдинова, Д.Г. Клещев и др. // *Неорган. материалы.* – 1996. – Т. 32. – № 11. – С. 1377–1380.
14. Кинетика и механизм превращений оксигидроксидов железа в водных растворах / А.В. Толчев, Д.Г. Клещев, Р.Н. Плетнев и др. // *Журн. неорган. химии.* – 1993. – Т. 38. – № 4. – С. 625–630.
15. Май Л.А. // *Изв.АН Латв. ССР. Серия химическая наука.* – 1982. – № 2. – С. 292–298.
16. Клещев Д.Г., Плетнев Р.Н., Швейкин Г.П. О фазовых и химических превращениях в труднорастворимых дисперсных системах // *Докл. АН СССР.* – 1990. – Т. 309. – № 3. – С. 645–648.
17. On the mechanism of crystal formation in the FeSO<sub>4</sub> – H<sup>+</sup>/OH<sup>-</sup> – H<sub>2</sub>O – O<sub>2</sub> system. Yu.G. Raspopov, D.G. Kleschov, N.G. Krasnobai et al. // *Mat. Chem. Phys.* – 1991. – V. 30. – № 1. – P. 25–31.
18. Назаренко В.А., Антонович В.П., Невская Е.М. Гидролиз ионов металла в разбавленных растворах. – М.: Атомиздат, 1979. – 192 с.
19. Perrin D.D. The Stability of Iron Complexes // *J. Chem. Soc.* – 1959. – № 5. – P. 1710–1719.

Поступила в редакцию 23 апреля 2003 г.

## РАСЧЕТ МОЛЯРНЫХ ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ (БЕРТОЛЛИДОВ)

А.Г. Рябухин

Предложены гиперболические уравнения для расчета теплоемкостей сложных (бинарных) нестехиометрических и стехиометрических соединений по экспериментальным данным простых веществ (металлов, неметаллов и стехиометрических соединений) с учетом их кристаллических структур. Свободным членом в гиперболическом уравнении является обратная величина предложенного в работе так называемого кристаллообразующего компонента. В первой области твердых растворов – кристаллообразующим является металл. В других областях – термически устойчивое соединение с промежуточной степенью окисления металла.

Стехиометрические бинарные соединения (дальтони́ды) являются частным случаем бесчисленного множества нестехиометрических (бертоллидов), образующих твердые растворы (т.р.) внедрения. В отдельный класс выделяются твердые растворы замещения, но эти соединения состоят как минимум из трех разнородных атомов (оксикарбиды, оксинитриды, оксифториды металлов и т.д.).

Для дальтони́дов на базе атомно-молекулярной теории, законов кратных отношений и других разработаны удобные для пользования стехиометрические соотношения. Поэтому основное внимание химиков и физхимиков было обращено на синтез и изучение разнообразных дальтони́дов.

Иначе обстоит дело с бертоллидами, несмотря на их многочисленность, порой уникальные свойства, важность для теории твердого тела и практики. Имеются крайне скудные данные по их физико-химическим свойствам. Тем более актуальным является выяснение зависимостей свойств бертоллидов от их состава и структуры.

В первую очередь необходимо рассмотреть зависимость фундаментальной характеристики – стандартной молярной теплоемкости (обозначена просто  $C_p$ , Дж·моль<sup>-1</sup>К<sup>-1</sup>) от состава бертоллида  $KA_x$  (К – металл, А – элемент, играющий роль аниона).

При разработке модели мной вводятся некоторые понятия.

1. Вся диаграмма состав – свойство ( $C_p - x$ ) разбивается на области твердых растворов (т.р.) (I, II, III...), разделяемые кривыми равновесия между этими фазами.

2. Кристаллообразующий компонент (К.О.). По мере внедрения в кристаллическую решетку металла компонента А состав соединений изменяется, образуя I область т.р. В этом случае кристаллообразующим является металл. Количество А постепенно достигает стехиометрического и образуется стабильный или метастабильный дальтони́д  $KA$ , который может разместиться в этой области, попасть на границу областей или во II область т.р. Многовалентные металлы могут образовывать несколько дальтони́дов (например,  $VO$ ,  $V_2O_3$ ,  $V_2O_4$  ( $VO_2$ ),  $V_2O_5$ ). К.О. во II области т.р. является термодинамически наиболее устойчивый дальтони́д. Метастабильные в рассматриваемых условиях или летучие дальтони́ды не могут выступать, как К.О., хотя их свойства могут быть известны (например, исследованы в результате предварительной закалки). Границей диаграммы является дальтони́д с максимальной степенью окисления (например,  $TiO_2$  в системе  $Ti-O$ ).

3. Химические соединения принципиально отличаются от механических смесей, поэтому прямые аддитивные схемы с использованием свойств простых веществ или их инкрементов лишены физического смысла. Особенно наглядно это проявляется в ситуациях, когда измеряемая интегральная величина является результатом параллельных или встречных процессов. В таких случаях наблюдается гиперболическая зависимость, подтвержденная многочисленными экспериментальными результатами в физике и физической химии. Предельная молекулярная электропроводность (разбавленные растворы электролитов) равна сумме подвижностей ионов (закон

Кольрауша-Гитторфа, 1883 г.). Это – закон суммирования сопротивления разветвленной цепи в физике. Изохора Вант-Гоффа для растворимости (разбавленные растворы – разность обратных температур, 1886г.). Обратная величина коэффициента амбиполярной диффузии в растворе пропорциональна сумме обратных скоростей ионов (Нернст, 1888 г.). Гиперболические зависимости были успешно использованы мной при разработке моделей эффективных ионных радиусов [1, 2], энтальпии кристаллических решеток [2], энтальпии сольватации ионов [2], энтропии ионов в водном растворе [3] и т. д. В свете изложенного мной предлагается гиперболическая взаимосвязь между  $C_p(KA_x)$  и  $C_p(K)$ ,  $C_p(A)$ ,  $C_p(KA)$  с учетом их структурных постоянных [4] и устойчивости степеней окисления металла. Таким образом, рассматривается атомно-молекулярное, а не ионное взаимодействие. Если при рассматриваемых условиях  $A$  находится в газообразном состоянии ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $F_2$ ,  $Cl_2$  и т.д.), то в уравнении используется  $\frac{1}{2}C_p(A_2)$ , если же в кристаллическом, то  $C_p(A)$ . Введение коэффициента  $\frac{1}{2}$  связано с тем, что двухатомные газы на границе раздела фаз диссоциируют [2].

4. До сих пор в справочной и монографической литературе произвольно отображается состав бертоллидов. Например, исторически сложилось отображать состав вюстита как  $Fe_{0,947}O$ . Такая форма записи противоречит физическому смыслу. К.О. является  $Fe$  – в узлы внедряются атомы  $O$ . Поэтому содержание  $O$  меньше, чем  $Fe$  и состав должен обозначаться  $FeO_{0,947}$ . При  $x=1$  – состав  $FeO$ , то есть низший стехиометрический оксид. Далее  $x>1$  вплоть до состава с максимальной устойчивой степенью окисления металла. Для железа – это  $Fe_2O_3$  или  $FeO_{1,5}$ , так как во всех расчетах мной используется  $C_p$ , отнесенное к одному молю металла.

5. Структурные постоянные [4] представляют собой чисто геометрические величины, то есть не являются функциями температуры. Обычно они имеют численные значения:  $1$ ,  $\frac{\sqrt{2}}{2}$ ,  $\frac{\sqrt{3}}{3}$ ,  $\frac{8}{3\sqrt{3}}$  и т.д. Кроме того, необходимо учитывать возможную степень заполнения вакантных позиций в кристаллических решетках  $K$ ,  $KA_x$ . Чаще всего они имеют значения  $\frac{1}{3}$ ,  $\frac{2}{3}$ ,  $\sqrt{2}-1$ ,  $\sqrt{3}-1$ ,  $\sqrt{2}$ ,  $\sqrt{3}$  и т.д. Комбинации приведенных величин с учетом кристаллических структур дает общее значение структурной постоянной  $k$  рассматриваемых систем.

6. Для удобства использования величину, обратную молярной теплоемкости, предлагаю называть Келджи (КД или КЖ) по аналогии сопротивление – электропроводность. Размерность КД – моль·К·Дж<sup>-1</sup>, физический смысл – изменение температуры моля вещества при сообщении ему одного Джоуля тепловой энергии.

Исходя из всего изложенного, предлагаю уравнение для расчета теплоемкости соединений I области т.р. в форме:

$$\frac{1}{C_p(KA_x)} = \frac{1}{C_p(K.O.)} - \frac{1}{C_p(K.O.) + C_p(A) + kC_p(KA)} \cdot x. \quad (1)$$

В случае II области т.р. уравнение имеет тот же вид ( $K^{Z+}$ ,  $Z=3, 4, 5$ ;  $A^{2-x}$ ):

$$\frac{1}{C_p(K_2A_x)} = \frac{1}{C_p(K.O.)} - \frac{1}{C_p(K.O.) + C_p(A) + kC_p(K_2A_{\max})} \cdot \frac{x}{2}. \quad (2)$$

В этом уравнении коэффициент  $u$  в К.О. соответствует  $Z$  устойчивого соединения.

Для корректного сравнения расчетов по уравнениям (1) и (2) последнее необходимо отнести к одному молю  $K$ :

$$\frac{1}{\frac{1}{2}C_p(K_2A_x)} = \frac{1}{\frac{1}{2}C_p(K.O.)} - \frac{1}{\frac{1}{2}C_p(K.O.) + \frac{1}{2}C_p(A) + kC_p(K_2A_{\max})} \cdot \frac{x}{2}. \quad (3)$$

Таким образом, мы имеем два уравнения с двумя неизвестными, совместное решение которых дает координаты точки на кривой, разделяющей фазы I и II т.р.

Для проверки предлагаемой модели выбраны две системы (V–O и Fe–O), для которых имеются экспериментальные данные.

#### Система V–O

В I области т.р. кристаллообразующим является ванадий. Из диаграммы состояния [8, 10] следует, что низший оксид VO расположен в I области т.р. V кристаллизуется в структуре  $\alpha$ -Fe (ОЦК), VO – в структуре NaCl (ГЦК). Общая структурная постоянная в этом случае  $k = \sqrt{3} - 1$ . Уравнение (1) принимает вид:

$$\frac{1}{C_p(\text{VO}_x)} = \frac{1}{C_p(\text{V})} - \frac{1}{C_p(\text{V}) + C_p(\text{O}_2) + (\sqrt{3} - 1)C_p(\text{VO})} \cdot x. \quad (4)$$

После подстановки экспериментальных величин  $C_p(\text{V}) = 24,480 \pm 0,209$ ;  $C_p(\text{VO}) = 38,420 \pm 0,419$ ,  $C_p(\text{O}_2) = 29,378 \pm 0,008$  получаем:

$$\frac{1}{C_p(\text{VO}_x)} = 0,040853 - 0,014853x. \quad (5)$$

В области составов  $\text{V}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_4$  ( $\text{VO}_2$ ) существует гомологический ряд  $\text{V}_n\text{O}_{2n-1}$ , а в области  $\text{V}_2\text{O}_4$  ( $\text{VO}_2$ ) –  $\text{V}_2\text{O}_5$  – ряд  $\text{V}_n\text{O}_{2n+1}$ . Эти ряды с разных сторон сходятся к составу  $\text{V}_2\text{O}_4$  ( $\text{VO}_2$ ). Это соединение является К.О. во II области т.р. Оксид  $\text{V}_2\text{O}_5$  является предельно насыщенным кислородом. Этот оксид устойчив, что подтверждается наличием его в ванадиевых рудах.

В этой области т.р. суммарной структурной постоянной является произведение постоянных гексагональной и тетраэдрической структур  $k_1 = 3 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \frac{8}{3\sqrt{3}} = \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}} = 3,2660$ .

Уравнение (3) представляется так ( $x > 1$ ):

$$\frac{1}{C_p(\text{VO}_x)} = \frac{1}{C_p(\text{VO}_2)} - \frac{1}{C_p(\text{VO}_2) + C_p(\text{O}_2) + 3,266 C_p(\text{V}_2\text{O}_5)} \cdot x. \quad (6)$$

После подстановки экспериментальных величин (табл. 1) получаем в расчете на один моль V:

$$\frac{1}{C_p(\text{VO}_x)} = 0,024568 - 0,001789x. \quad (7)$$

Результаты расчетов по уравнениям (5) и (7) и экспериментальные величины приведены в табл. 1 и на рис. 1. Наблюдается хорошее согласие расчетных и опытных данных. Для I области т.р.  $\delta = \pm 0,073$ , для II  $\pm 0,092$ .

Совместное решение уравнений (5) и (7) дает  $x = 1,4425$  и  $C_p(\text{VO}_{1,4425}) = 51,480$ . Это координаты точки на кривой равновесия (граница раздела) между I и II областями твердых растворов.

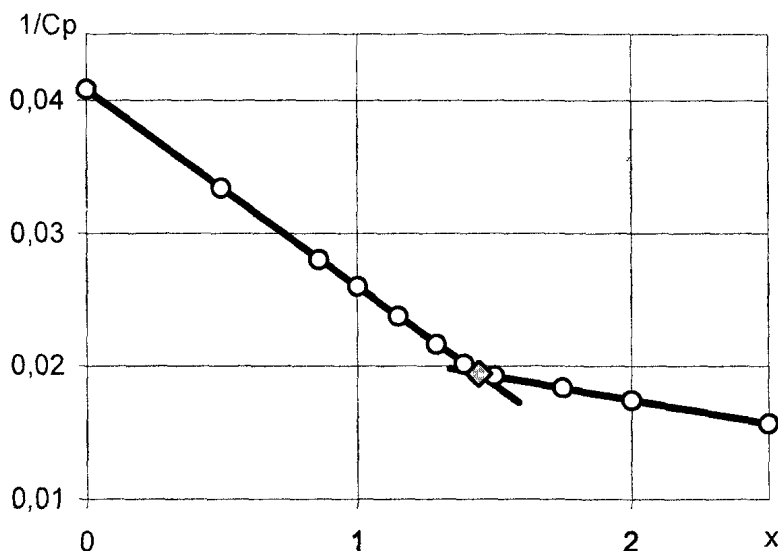


Рис.1. Зависимость стандартной келджи (обратной величины стандартной молярной теплоемкости) оксидов ванадия  $\text{VO}_x$  от их состава, отнесенной к одному молью ванадия. Левая ветвь – I область т.р., правая ветвь – II область т.р.



Таблица 1

## Зависимость теплоемкости оксидов ванадия от состава

## I область твердых растворов

	VO <sub>0,50</sub>	VO <sub>0,86</sub>	VO	VO <sub>1,15</sub>	VO <sub>1,29</sub>	VO <sub>1,36</sub>	VO <sub>1,39</sub>
$C_p$ [1, 7, 8]	–	35,673 ± 0,419	38,420 ± 0,419	–	46,183 ± 0,419	45,845 ± 0,737	49,614 ± 0,837
$\frac{1}{C_p}$ , Келджи	–	0,028033	0,026028	–	0,021653	0,021813	0,020156
$C_p$ , ур. (5)	29,916	35,617	38,466	42,066	46,099	45,845	49,487

## II область твердых растворов

	VO <sub>1,4425</sub>	V <sub>2</sub> O <sub>3</sub> VO <sub>1,5</sub>	V <sub>4</sub> O <sub>7</sub> VO <sub>1,75</sub>	V <sub>2</sub> O <sub>4</sub> VO <sub>2,0</sub>	V <sub>2</sub> O <sub>5</sub> VO <sub>2,5</sub>
$C_p$ [1, 7, 8]	–	105,088 ± 0,628 52,544	219,849 ± 0,419 54,962	115,304 ± 0,837 57,652	127,740 ± 0,628 63,870
$\frac{1}{C_p}$ , Келджи	–	0,0091516 0,0190326	0,004549 0,018194	0,008673 0,017345	0,007828 0,015657
$C_p$ , ур (7) ур (5)	51,480	105,050 52,525	219,868 54,967	115,294 57,647	127,750 63,875

## Система Fe–O

Из диаграммы состояния Fe–O [9] следует, что дальтонид Fe–O входит в I область твердых растворов, так как верхней границе гомогенности отвечает состав FeO<sub>1,056</sub>, для которого приводятся, как и для других оксидов Fe, более или менее полные термические константы [7, 8].

Стехиометрический вюстит FeO получают методом закалки. Его термодинамические характеристики определены довольно хорошо, особенно  $C_p$ .

Кристаллообразующим в этой области является Fe, кристаллизующееся в структуре α-Fe (ОЦК). FeO кристаллизуется в структуре NaCl (ГЦК). Общая структурная постоянная в этом случае составляет  $k = \frac{1}{3}2(\sqrt{2}-1)\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}(\sqrt{2}-1) = 0,253652$ . Количественное отличие от аналогичной постоянной для I области т.р. ванадия заключается в различии электронных структур элементов (V  $3d^3 4s^2$ , Fe  $3d^6 4s^2$ ) и разными характерами и степенями заполнения вакансий. Уравнение (1) принимает вид:

$$\frac{1}{C_p(\text{FeO}_x)} = \frac{1}{C_p(\text{Fe})} - \frac{1}{C_p(\text{Fe}) + \frac{1}{2}C_p(\text{O}_2) + 0,25365 C_p(\text{FeO})} \cdot x. \quad (8)$$

После подстановки экспериментальных величин ( $C_p(\text{Fe}) = 25,140 = 0,024$ ) получим:

$$\frac{1}{C_p(\text{FeO}_x)} = 0,039777 - 0,019178x. \quad (9)$$

Во второй области твердых растворов расположены два оксида: магнетит Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> и гематит α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> при  $T > 125$  К существует в устойчивой обращенной форме Fe<sup>3+</sup>[Fe<sup>2+</sup>Fe<sup>3+</sup>O<sub>4</sub>] с

кубической структурой шпинели ( $MgAl_2O_4$ ).  $\alpha-Fe_2O_3$  предельно насыщен кислородом – он кристаллизуется в гексагональной структуре ( $\alpha-Al_2O_3$ ). Общая структурная постоянная

$$k = 2\left(1 + \frac{1}{4} \cdot \frac{8}{3\sqrt{3}}\right) = 2,76980.$$

Кристаллообразующим является  $Fe_3O_4$  ( $FeO_{1,3333}$ ). Уравнение (3) имеет вид ( $x > 1$ ):

$$\frac{1}{C_p(FeO_x)} = \frac{1}{\frac{1}{3}C_p(Fe_3O_4)} - \frac{x-1,3333}{\frac{1}{3}C_p(Fe_3O_4) + \frac{1}{2}C_p(O_2) + 2,7698 \cdot \frac{1}{2}C_p(Fe_2O_3)}. \quad (10)$$

После подстановки экспериментальных данных получим:

$$\frac{1}{C_p(FeO_x)} = 0,02429 - 0,004488x. \quad (11)$$

Результаты расчетов по уравнениям (9) и (11) и экспериментальные величины даны в табл. 2 и на рис. 2. Наблюдается их хорошее согласие (для I области т.р.  $\delta = \pm 0,013$ , для II –  $\delta = \pm 0,035$ ).

Таблица 2

Зависимость теплоемкости оксидов железа от их состава

	Состав	$C_p$ [7, 8, 10]	$C_p$ ур. (9, 11)
1	FeO	48,525 ± 0,042	48,546
2	FeO <sub>0,05</sub>	–	25,761
3	FeO <sub>0,25</sub>	–	28,586
4	FeO <sub>0,50</sub>	–	33,137
5	FeO <sub>0,75</sub>	–	39,381
6	FeO <sub>0,947</sub>	46,264 ± 0,419	46,264
7	FeO <sub>1,05</sub>	–	51,150
8	FeO <sub>1,056</sub>	51,246 ± 0,419	51,178
9	FeO <sub>1,10</sub>	–	51,673
10	FeO <sub>1,15</sub>	–	52,279
11	FeO <sub>1,20</sub>	–	52,900
12	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	163,875 ± 0,279	163,884
	FeO <sub>1,3333</sub>	54,625	54,628
13	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	113,910 ± 0,209	113,906
	FeO <sub>1,50</sub>	56,955	56,953
14	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (1% вак.)	165,378 ± 0,837	164,422
	FeO <sub>1,3476</sub>	55,126	54,807
15	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (2% вак.)	165,378 ± 0,837	164,961
	FeO <sub>1,3600</sub>	55,126	54,987
16	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (4% вак.)	165,378 ± 0,837	166,053
	FeO <sub>1,3876</sub>	55,126	55,351

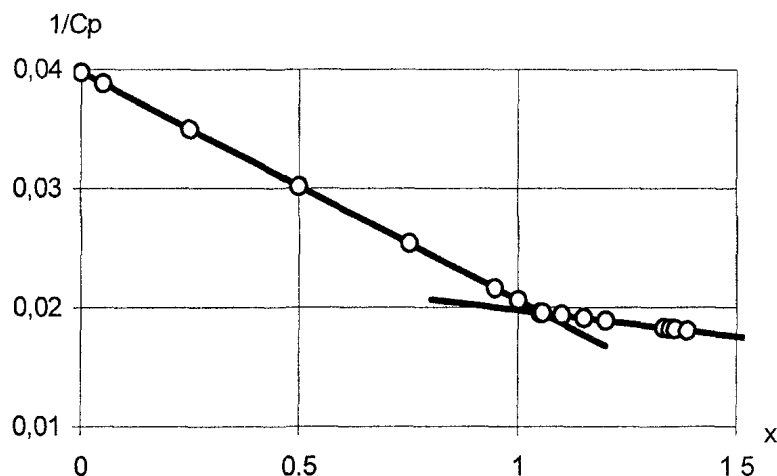


Рис. 2. Зависимость стандартной кельджи (обратной величины стандартной молярной теплоемкости) оксидов железа  $\text{FeO}_x$  от их состава, отнесенному к одному молю железа. Левая ветвь – I область т.р., правая ветвь – II область т.р.

Совместное решение уравнения (9) и (11) дает  $x = 1,0561$  и  $C_p(\text{FeO}_{1,0561}) = 51,220$ . Это координаты точки на кривой равновесия (граница раздела) между I и II областями т.р. В данном случае она совпала с точкой на верхней границе гомогенности.

Уравнение (11) позволяет рассчитать теплоемкости чистых ферритов (не содержащих легирующих компонентов)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , содержащем различное количество вакансий. Для ферритов, содержащих 1, 2 и 4% вакансий в [7] приводятся различающиеся по величинам термические константы, кроме  $C_p$ . Для  $C_p$  дана одинаковая  $165,387 \pm 0,837$ . Такое положение противоречит физическому смыслу. Приведенные содержания вакансий отвечают составам  $\text{FeO}_x$   $x = 1,3462$ ; 1,3600 и 1,3867 соответственно. Рассчитанные для них по уравнению (11) величины  $C_p$  приведены в табл. 2 и на рис. 2.

### Влияние температуры

Теплоемкость является структурно чувствительным фактором, что хорошо показано выше. При изменениях в компонентах системы (фазовый состав, магнитные и другие свойства) изменяются, как правило, скачкообразно их характеристические показатели. Поэтому предложенные уравнения остаются корректными в пределах граничных условий.

Структурные постоянные не зависят от температуры. Теплоемкость является сложной функцией температуры. Как правило,  $C_p = f(T)$  аппроксимирует экспериментальные данные в форме полиномов с табулированными коэффициентами при T. Приводятся и результаты машинной обработки полиномов с фиксацией  $C_p$  при температурах с определенным шагом или приращениями  $C_p$ .

В области отмеченных граничных условий путем подстановки  $C_p$  компонентов при различных фиксированных температурах могут быть рассчитаны  $C_p(\text{KA}_x)$  для двух областей твердых растворов. Определенные совместным решением соответствующих уравнений точки их пересечений дает возможность построить диаграмму  $C_p - x$  в исследованном интервале температур. Этот вопрос будет рассмотрен в ближайшее время, так как имеет первостепенное теоретическое и практическое значение.

### Методика использования разработанной модели

1. По имеющимся экспериментальным данным рассчитывается  $\text{KD} \left( \frac{1}{C_p} \right)$  и строится табли-

ца с аргументом  $x$  и в аналогичных координатах график в пределах доверительных интервалов используемых величин. По графику ориентировочно определяется  $x$  границы раздела, который

определяет положение соединения в низшей степени окисления металла (I или II область твердых растворов).

2. Если известны  $C_p$  кристаллообразователей  $C_p(\text{К.О.})$ , то решение уравнения (1) относительно  $k$ :

$$k = \frac{C_p^2(\text{К.О.}) - C_p(\text{А})[C_p(\text{КА}) - C_p(\text{К.О.})]}{C_p^2(\text{КА}) - C_p(\text{КА})C_p(\text{К.О.})} \quad (12)$$

При этом необходимо учесть, что для газов в уравнении (12) используется  $\frac{1}{2}C_p(\text{А}_2)$ . Если  $k$  совпадает с комбинацией структурных постоянных или близко к ней, то коррекцию угла наклона  $C_p - x$  проводят до теоретического, изменяя его в пределах доверительных интервалов исходных данных. Так как уравнение (1) строго линейное, то выход экспериментальной точки с учетом приведенного в справочной литературе ее доверительного интервала, говорит чаще всего о ее некорректности усреднения при обработке данных. Такую точку из расчетов необходимо убрать. Для обеих областей т.р. подход одинаков.

3. По полученным  $k$  и  $k_1$  совместным решением уравнений для I и II областей т.р. определяется точка равновесия.

4. По расчетам при различных температурах с учетом граничных условий строится диаграмма  $C_p - x$ .

5. Если  $C_p$  соединения неизвестна, то уравнение (1) решается относительно нее (например, для системы Ti–O известны  $C_p$  для оксидов обеих областей и, следовательно, могут быть составлены уравнения  $C_p(\text{TiO}_x) - x$ ). Для ZrO приводится только  $\Delta_f H$ , а для HfO отсутствуют и эти данные. Однако, электронные аналоги Ti, Zr, Hf кристаллизуются в гексагональной структуре (Mg), их оксиды MeO в структуре NaCl, а диоксиды – в тетрагональной. Это позволяет предположить, что  $k$  и  $k_1$  для этих веществ будут одинаковы (как в системе Ti–O). Решение уравнения (1) относительно  $C_p(\text{КА})$  дает:

$$C_p(\text{КА}) = \frac{1}{2}[C_p(\text{К}) + \frac{1}{2k}C_p(\text{O}_2)] + \sqrt{\frac{1}{4}[C_p(\text{К}) + \frac{1}{2k}C_p(\text{O}_2)]^2 + \frac{1}{k}C_p(\text{К})[C_p(\text{К}) + \frac{1}{2}C_p(\text{O}_2)]}. \quad (13)$$

## Заключение

1. Вводится принципиально важное понятие – кристаллообразующий компонент (вещество).

2. Предложены гиперболические уравнения для расчета теплоемкостей сложных (бинарных) нестехиометрических и стехиометрических соединений по экспериментальным данным простых веществ (металлов, неметаллов и стехиометрических соединений) с учетом их кристаллических структур. Свободным членом в гиперболическом уравнении является обратная величина кристаллообразующего компонента. В первой области твердых растворов – кристаллообразующим является металл. В других областях – термически устойчивое соединение с промежуточной степенью окисления металла.

3. Предложен независимый метод построения диаграммы состав – свойство ( $C_p - x$ ), так как пересечение прямых для разных областей (первые твердые растворы – вторые твердые растворы) дает координаты точки на равновесной кривой. Расчет этой точки при разных температурах позволяет построить разделительную границу на диаграмме  $C_p - x$ .

4. Модель проверена на экспериментальных результатах двух систем: V–O и Fe–O.

5. Изложенная модель дает возможность уточнения экспериментальных данных и их согласования между собой. Особую роль здесь играют газы  $\text{O}_2$ ,  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2$ , для которых  $C_p$  определены с высокой точностью.

6. Хорошее согласие расчетных и имеющихся экспериментальных данных создает предпосылки для аналогичного подхода к определению других термодинамических величин ( $ДН$ ,  $\Delta G$ ,  $S$ ,  $\Delta S$ ).
7. Предложена методика использования разработанной модели.
8. Эта приоритетная работа является предпосылкой для создания математических моделей расчета теплоемкостей и построения диаграмм  $C_p - x$  веществ, состоящих из трех, и из большего числа различных атомов (оксикарбиды, оксинитриды, шпинели, перовскиты, гранаты и т.д.).

#### Литература

1. Rjabukhin A.G. Effective ionic radii. // Высокотемпературные расплавы. – Челябинск: ЧНЦ УрО РАН – ЧГТУ, 1996. – № 1. – С. 39–41.
2. Рябухин А.Г. Эффективные ионные радиусы. Энтальпия кристаллической решетки. Энтальпия гидратации ионов. Монография. – Челябинск: ЮУрГУ, 2000. – 115 с.
3. Рябухин А.Г. Расчет стандартной энтропии гидратированных катионов // Журн. физ. хим. – 1981. – Т. IV. – № 7. – С. 1670–1673.
4. Мелвин-Хьюз Э.А. Физическая химия. Пер. с англ. – М.: Изд. иностр. литер. – Кн. 1 и 2, 1961. – 1148 с.
5. Глесстон С., Лейдлер К., Эйринг Г. Теория абсолютных скоростей реакций. Пер. с англ. – М.: Изд. иностр. литер., 1948. – 583 с.
6. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Спр. изд. в 4 т. / Под редакцией В.П. Глушко. – М.: Наука, 1978–1982.
7. Термодинамические константы веществ. Спр. в 10 вып. / Под ред. В.П. Глушко. – М.: АН СССР, ВИНТИ, 1974. – Вып. VII. – 343 с.
8. Физико-химические свойства окислов: Спр. / Под ред. Г.В. Самсонова. – М.: Металлургия, 1978. – 471 с.
9. Лыкасов А.А., Карел К., Мень А.Н., Варшавский М.Т., Михайлов Г.Г. Физико-химические свойства вюстита и его растворов. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1987. – 229 с.
10. Химическая энциклопедия. – М.: Сов. энцикл. – Т.1, 2. – 1988, 1990.

Поступила 20 мая 2003 г.

# РЕНТГЕНОРАДИОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ВЕЩЕСТВА СЛОЖНОГО ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА

П.М. Косьянов

В работе приведены результаты исследований энергодисперсионного рентгено-радиометрического метода анализа элементного состава вещества сложного химического состава при помощи дополнительного поглотителя из вещества анализируемой пробы. Для полного учета матричного эффекта в каждом отдельном случае рассчитывается оптимальная поверхностная плотность дополнительного поглотителя.

Среди инструментальных способов учета матричного эффекта наибольшее применение получил способ спектральных отношений, впервые предложенный Мейером и Нахабцевым для рентгенорадиометрического анализа, где в качестве аналитического параметра берется отношение интенсивности аналитической линии определяемого элемента к интенсивности некогерентно рассеянного от образца монохроматического первичного излучения –  $\eta = I_1/I_2$  [1]. Данный аналитический параметр может быть представлен в виде:

$$\eta = \frac{\kappa_1 [m_a C_a (1/\sin \varphi + 1/\sin \psi) + m_m C_m (1/\sin \varphi + 1/\sin \psi)] C_a}{\kappa_2 m_a C_a [(E_0/E_i)^3 / S_k \sin \varphi + 1/\sin \psi] + m_m C_m [(E_0/E_i)^3 / \sin \varphi + 1/\sin \psi]}, \quad (1)$$

где:  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  – коэффициенты пропорциональности, не зависящие от химического состава пробы;  $C_a$  и  $C_m$  – содержание определяемого элемента и элементов наполнителя пробы ( $C_a + C_m = 1$ );  $m_a$  и  $m_m$  – массовые коэффициенты поглощения первичного излучения в определяемом элементе и в наполнителе пробы;  $\varphi$  и  $\psi$  – углы падения первичного излучения к поверхности пробы и отбора характеристического излучения;  $E_0$  и  $E_i$  – значения энергий первичного и характеристического излучений соответственно [2]. Из анализа данного выражения следует, что метод спектральных отношений эффективен только в области очень малых  $C_a \approx 0$  или очень больших концентраций  $C_a \approx 1$  определяемого элемента, в остальной же области для элементов средней группы периодической таблицы зависимость результатов анализа от изменения матрицы сохраняется. Как видно из выражения (1), и что подтверждается экспериментальными данными, аналитический параметр

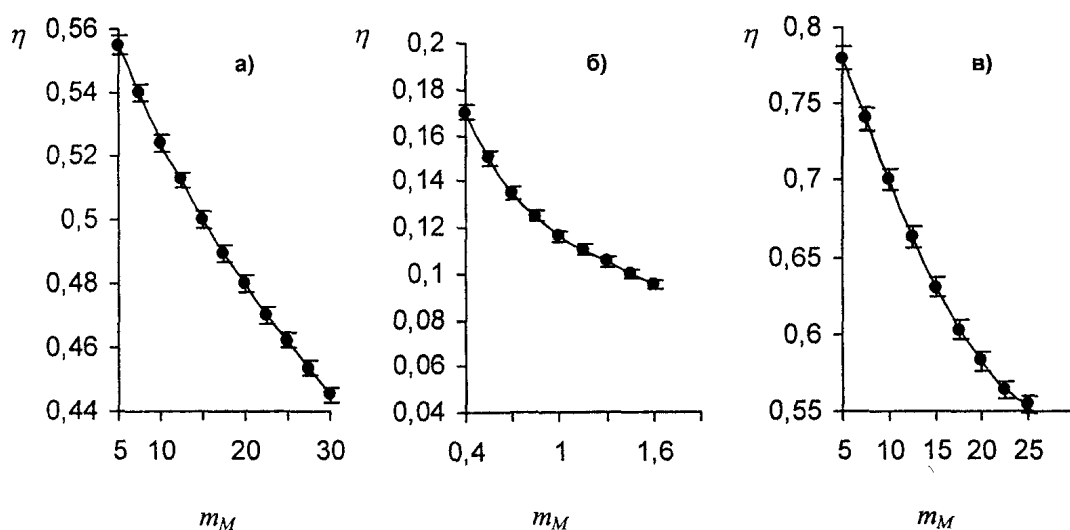


Рис. 1. Зависимость аналитического параметра  $\eta$  от массового коэффициента поглощения наполнителя пробы при определении W в W-отходах на источнике Cd-109 (а); Mo в Mo-концентрах на источнике Am-241 (б); Co в Co-промппродуктах на источнике Pu-238 (в)

$\eta$  (для проб равной концентрации определяемого элемента  $C_a = \text{const}$ , но с различным химическим составом и значениями  $m_m$ ), нелинейно убывает с ростом массового коэффициента поглощения первичного излучения в наполнителе пробы при выбранной энергии первичного излучения (рис. 1) [3, 4].

Исследован способ учета матричного эффекта с использованием дополнительного поглотителя из вещества анализируемой пробы, помещаемого между образцом и детектором излучений (рис. 2), и регистрацией некогерентно рассеянного пробой первичного излучения прошедшего через дополнительный поглотитель.

В качестве аналитического параметра берется отношение интенсивности аналитической линии определяемого элемента в прямом измерении (без поглотителя) к интенсивности некогерентно рассеянного пробой первичного излучения прошедшего через дополнительный поглотитель:

$$\eta_1 = \frac{I_1}{I_3} = \eta \exp[-(m_a C_a + m_m C_m) d]. \quad (2)$$

Как следует из выражения (2), и что подтверждается экспериментальными данными, аналитический параметр  $\eta_1$  как функция от переменной величины  $m_m$ , при фиксированных значениях  $C_a$ ,  $C_m$ ,  $m_a$  при выбранной энергии первичного излучения имеет вид кривой с минимумом, зависящим от поверхностной плотности поглотителя  $d$  (рис. 3) [5].

Наиболее полный учет матричного эффекта происходит в области минимума аналитического параметра  $\eta_1$ . Изменяя поверхностную плотность поглотителя, можно изменять степень учета матричного эффекта для данной пробы, имеющей соответствующее значение массового коэффициента поглощения наполнителя. Проблема заключалась в том, что для каждой конкретной пробы с неизвестным значением коэффициента поглощения  $m_m$  приходилось подбирать опытным путем поверхностную плотность поглотителя  $d$ , соответствующую минимуму аналитического параметра, сменой нескольких поглотителей с различной поверхностной плотностью [3,4]. Для устранения этого недостатка, снижающего экспрессность способа, найдена возможность расчета для каждой конкретной пробы, точного значения поверхностной плотности поглотителя, соответствующего

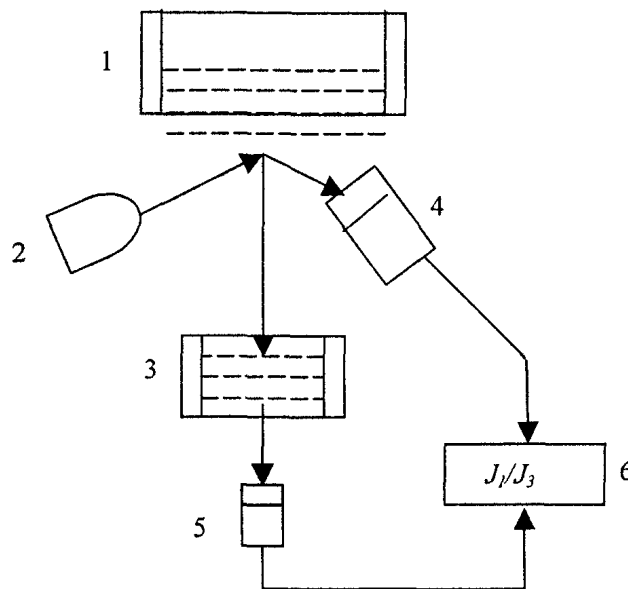


Рис. 2. Схема измерения с использованием дополнительного поглотителя: 1 – образец; 2 – источник излучения; 3 – поглотитель из анализируемого вещества; 4 – детектор излучения; 5 – детектор излучения; 6 – блок регистрации

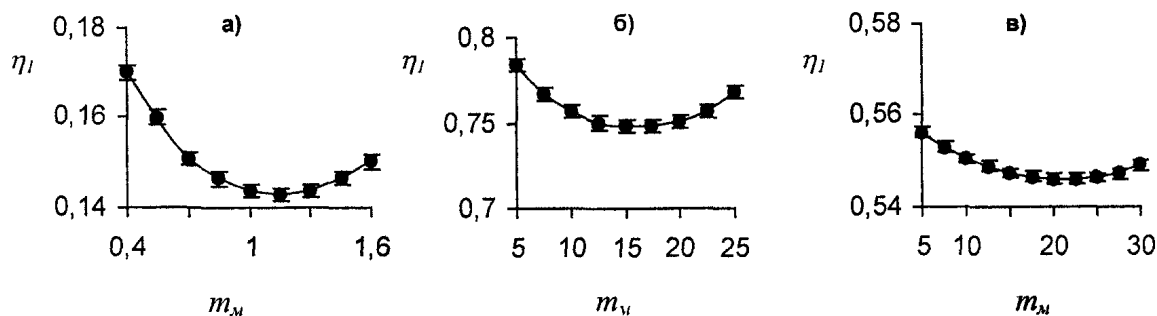


Рис. 3. Зависимость аналитического параметра  $\eta_1$  от массового коэффициента поглощения наполнителя пробы при определении W в W-отходах на источнике Cd-109 (а); Mo в Mo-концентратах на источнике Am-241 (б); Co в Co-промппродуктах на источнике Pu-238 (в)

наиболее полному учету матричного эффекта. Наиболее полный учет матричного эффекта происходит в области минимума аналитического параметра  $\eta_1$ . Взяв производную от  $\eta_1$  по  $m_m$  при фиксированных прочих параметрах и приравняв ее нулю, после определенных преобразований можно выразить поверхностную плотность  $d$  как функцию от интенсивностей аналитической линии определяемого элемента  $I_1$  и некогерентно рассеянного первичного излучения  $I_2$  в прямом измерении:

$$d = \frac{I_1 I_2}{\kappa_1 \kappa_2} m_a (1/\sin \varphi + 1/\sin \psi) (E_0/E_i)^3 (1-1/S_k)/\sin \varphi . \quad (4)$$

Как видно из последнего выражения, для любой пробы можно рассчитать значение поверхностной толщины поглотителя  $d$ , соответствующего практически полному учету матричного эффекта [6].

На практике выполнение измерений по определению содержания какого-либо элемента осуществляется следующим образом. Измеряемая проба с толщиной, превышающей слой насыщения, вводится в зону облучения первичного излучения, снимается спектр, спектрометрическим устройством выделяются пики аналитической линии определяемого элемента и некогерентно рассеянного первичного излучения, определяются площади пиков и на ЭВМ по специально созданной программе для данной пробы рассчитывается оптимальная поверхностная плотность поглотителя. На аналитических весах берется соответствующая навеска для поглотителя. Параллельно или последовательно измеряется интенсивность некогерентно рассеянного излучения, прошедшего через данный поглотитель от той же пробы. В качестве аналитического параметра берется отношение  $I_1/I_2$ , по которому на ЭВМ (по программе рассчитывающей регрессию методом наименьших квадратов по ранее измеренным тем же способом эталонам с гарантированным содержанием определяемого элемента), рассчитываются концентрация определяемого элемента в измеряемой пробе и величина погрешности измерения. Как видно из вышесказанного, наиболее просто данный способ реализуется для энергодисперсионных методов рентгеноспектрального и рентгенорадиометрического анализа, характеризующихся высоким энергетическим разрешением спектрометрической аппаратуры. В качестве первичного излучения используются соответственно: рентгеновское излучение рентгеновской трубки или  $\gamma$ -излучение различных радиоизотопных источников. В качестве детекторов в этом случае используются полупроводниковые детекторы, в основном кремний литиевые, позволяющие разрешать характеристические линии различных элементов.

Предложенный способ позволяет практически полностью устранить влияние химического состава пробы на ошибку измерения, понизить систематическую составляющую ошибки на порядок и ниже случайной составляющей. Созданные на основе данного способа методики анализа по метрологическим характеристикам соответствуют требованиям ГОСТов и отличаются высокой экспрессностью.

## Литература

1. А.с. 171482 СССР / В.А. Майер, В.С. Нахабцев // Бюллетень «Открытия. Изобретения». – 1965. – № 11.
2. Мамиконян С.В. Аппаратура и методы флуоресцентного рентгенорадиометрического анализа. – М.: Атомиздат, 1976.
3. А.с. 1040389 СССР / А.Ч. Ким, Э.Н. Фариков // Бюллетень «Открытия. Изобретения». – 1983. – № 33.
4. Патент 4242 29/11/1995 СССР / П.М. Косьянов, А.Ч. Ким // Бюллетень «Новости науки». – Ташкент, 1997. – № 1.
5. Косьянов П.М. Исследование и разработка способа учета матричного эффекта при рентгенофлуоресцентном анализе вещества в продуктах вольфрамового и молибденового производства: Дисс. ... канд. техн. наук. – Ташкент, 1997.
6. Косьянов П.М. Учет матричного эффекта при рентгенофлуоресцентном анализе // Контроль. Диагностика. – М.: Машиностроение. – № 7. – 2001. – С. 8–10.

Поступила в редакцию 13 апреля 2003 г.



# УЧЁТ МАТРИЧНОГО ЭФФЕКТА ПРИ КОЛИЧЕСТВЕННОМ РЕНТГЕНОФАЗОВОМ АНАЛИЗЕ

*П.М. Косьянов*

В статье рассмотрена возможность применения для количественного рентгенофазового анализа способа спектральных отношений, в котором для учёта матричного эффекта, в качестве аналитического параметра берётся отношение интенсивности фазы определяемой компоненты пробы, к интенсивности некогерентно рассеянному пробой первичному излучению. Для проб с сильно меняющимся вещественным составом, рассмотрена также возможность использования дополнительного поглотителя, для полного учёта матричного эффекта.

При исследовании минерального сырья, горных пород и почв возникает потребность в оценке концентраций минералов, составляющих анализируемое вещество. Решение этой проблемы достигается различными методами, среди которых наибольшее развитие получили рентгенографические благодаря относительной простоте, высокой точности и объективности анализа.

Данные количественного фазового анализа тонкодисперсных образцов используются для детального расчленения геологических разрезов, позволяют судить об изменении условий осадко-накопления, помогают оценивать перспективность отложений для накопления и сохранения нефти и газа.

Особенно интересен данный метод в связи с широко развернувшимися экспериментальными исследованиями по моделированию процессов минералообразования, где возможность количественной оценки продуктов гидротермального синтеза приобретает особую ценность, позволяя проследить динамику фазовых превращений, повышая точность определения границ фазового преобразования, фиксируя начало изменения концентрации той или иной кристаллической фазы (минерала). В совокупности с химическим анализом количественный фазовый анализ повышает достоверность кристаллохимических формул минералов при невозможности их выделения из состава породы.

Определение количественного содержания кристаллических фаз (минералов), входящих в состав исследуемого образца породы, может быть проведено путем сравнительной оценки интенсивностей дифракционных максимумов, на порошковой рентгенограмме (дебаеграмме, дифрактограмме). Возможность решения такой задачи основывается на существовании зависимости интенсивности дифракционного максимума от концентрации каждой кристаллической фазы, входящей в состав пробы. В общем случае эта зависимость не является линейной, так как помимо концентрации данной фазы на интенсивность дифракционного максимума влияет коэффициент поглощения образца, зависящий от концентрации всех фаз. Учёт влияния минералогического состава пробы на результаты анализа, в дальнейшем матричного эффекта, является важнейшей задачей РФА, и данная работа посвящена поиску путей решения этой задачи.

Убыль энергии первичного пучка из-за поглощения в пробе дается выражением

$$J = J_0 e^{-\mu d}, \quad (1)$$

где  $J_0$  – интенсивность первичного пучка;  $J$  – интенсивность первичного пучка после прохождения слоя вещества толщиной  $d$ ;  $\mu$  – линейный коэффициент поглощения,  $\text{см}^{-1}$ . Выражение (1) справедливо для строго монохроматического излучения (так как  $\mu = f(\lambda)$ , где  $\lambda$  – длина волны излучения) и однородного вещества пробы.

В основе всех методов количественного фазового анализа лежит следующее фундаментальное уравнение [1]:

$$J_i = K_i \frac{x_i}{\rho_i \sum_{i=1}^n x_i \mu_i^*}, \quad (2)$$

где  $J_i$  – интенсивность некоторого выбранного рефлекса фазы  $i$ ,  $K_i$  – экспериментальная постоянная, зависящая от энергии первичного пучка, от структуры анализируемой фазы, индексов ( $hkl$ ) и условий съемки;  $\mu_i^*$  – массовый коэффициент поглощения фазы  $i$ ;  $x_i$  – содержание фазы  $i$  в пробе, %;  $\rho_i$  – плотность фазы  $i$ . Массовый коэффициент поглощения не зависит от агрегатного состояния вещества. При выводе формулы (2) предполагалось, что дифракция происходит от поверхности плоского образца (съемка на отражение), составленного однородной смесью  $n$  компонентов, причем толщина образца бесконечна. Ниже приведены различные методы количественного фазового анализа, основанные на аналитических зависимостях, полученных при преобразовании формулы (2); конкретные приемы этих преобразований и их результаты рассматриваются для каждого метода. В зависимости от конкретной задачи, сложности пробы и резерва времени для получения результатов могут быть использованы различные методы количественного фазового анализа.

**Метод внутреннего стандарта.** Рассмотрим многофазную систему (пробу), в составе которой  $n$  кристаллических составляющих (минералов) с массовыми коэффициентами поглощения  $\mu_i^*$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ). Прямой анализ поликомпонентной системы с различными  $\mu_i^*$  выполняется методом внутреннего эталона. Сущность метода состоит в определении концентрации искомой фазы  $x_i$  по отношению интенсивностей аналитических линий этой фазы и добавляемой в анализируемую пробу в постоянной концентрации фазы внутреннего эталона ( $x_s = \text{const}$ ).

Интенсивность отражения фазы  $x_i$  в смеси с внутренним эталоном согласно уравнению (2)

$$J_i = K_i \frac{x_i}{\rho_i \mu_i^*} \quad (3)$$

Для внутреннего эталона

$$J_s = K_s \frac{x_s}{\rho_s \mu_s^*} \quad (4)$$

Для отношения интенсивностей получим

$$\frac{J_i}{J_s} = \frac{K_i}{K_s} \frac{\rho_s}{\rho_i} \frac{x_i}{x_s} = \text{const } x_i. \quad (5)$$

Уравнение (5) означает, что при добавлении в пробу внутреннего эталона в постоянной концентрации содержание искомой фазы  $x_i$  пропорционально отношению интенсивностей  $J_i/J_s$ . Выявленная здесь прямолинейная зависимость устанавливается по трем искусственным смесям различной концентрации [1].

**Метод внешнего эталона.** Попытки избежать необходимости добавления в каждую пробу определенного количества внутреннего эталона и исключение процесса взвешивания и перемешивания пробы и эталона привели к разработке методов, частично или полностью исключаящих эту процедуру. В методе используется специальный держатель образца, представляющий собой круглое углубление в плексиглазе, заполняемое порошком пробы, в центре которого запрессован металлический стержень. Его торцевая поверхность совпадает с плоскостью образца. При облучении пробы рентгеновским пучком этот стержень дает несколько интенсивных линий и таким образом является эталоном, внешним по отношению к пробе. Предварительная калибровка и получение графических зависимостей проводятся так же, как в методе внутреннего эталона. За счет исключения процедуры взвешивания и перемешивания веществ пробы и эталона сокращается время на анализ каждого образца.

К недостаткам метода относятся ограниченный выбор веществ-эталонов, необходимость переделки стандартного держателя образца, возможность изменения отражающей способности торцевой части эталона при окислении, децентровке или механических повреждениях. Примерное отношение облучаемых поверхностей эталона и анализируемой пробы равно 1:10 [1]. Абсолютная погрешность определения концентраций отдельных фаз рассматриваемым методом 2–3%.

**Метод добавления определяемой фазы.** При анализе проб с малым содержанием определяемых фаз добавочное разбавление их концентрации нежелательно. Увеличение концентрации может быть достигнуто путем их добавки в пробу. Л. Коуплэндом и Р. Брэггом [1] проведена аналитическая обработка основного уравнения (2) для случая, когда добавкой в систему служит

одна из фаз, входящих в ее состав. В исходной пробе отношение интенсивностей аналитических линий искомой фазы  $i$  к фазе  $l$

$$\left(\frac{J_i}{J_l}\right)_0 = \frac{K_i}{K_l} \frac{\rho_i}{\rho_l} \frac{x_i}{x_l}. \quad (6)$$

После добавления в пробу фазы  $i$  в количестве  $\varepsilon$ ; величина отношения тех же рефлексов станет

$$\left(\frac{J_i}{J_l}\right)_1 = \frac{K_i}{K_l} \frac{\rho_i}{\rho_l} \frac{x_i + \varepsilon}{x_l}. \quad (7)$$

После деления уравнения (7) на (6) получим

$$x_i = \varepsilon \left(\frac{J_i}{J_l}\right)_0 \left[ \left(\frac{J_i}{J_l}\right)_1 - \left(\frac{J_i}{J_l}\right)_0 \right], \quad (8)$$

где  $\varepsilon$  – величина добавки в граммах на 1 г пробы.

Для вычисления концентрации фазы  $i$  по уравнению (8) необходимо измерить отношение интенсивностей аналитических линий фаз  $i$  и  $l$  до и после добавки определяемой фазы. Величину добавки находят путем взвешивания. Недостаток метода: необходимость добавления фазы и связанная с этим процедура пробоподготовки и два дополнительных измерения отношений интенсивностей до и после нее значительно увеличивают продолжительность определения концентрации фазы. Эта методика может быть использована при выборочном анализе отдельных фаз, содержание которых мало.

**Прямые методы.** Предложены также методы, не требующие введения эталонов в анализируемые пробы. Формула (2) для 100%-ного содержания фазы ( $x_i = 1$ ) имеет вид

$$(J_i)_0 = K_i \frac{1}{\rho_l \mu_i^*}. \quad (9)$$

Из отношения формул (2) к (9) получим

$$x_i = \frac{J_i}{(J_i)_0} \frac{\mu_i^*}{\mu_i^*}. \quad (10)$$

Определив отношение массовых коэффициентов поглощения анализируемой пробы и искомой фазы в смеси и в чистом виде, по формуле (10) получим значение концентрации фазы. Однако при практическом использовании формулы (10) наблюдалось несовпадение вычисленных и полученных экспериментально результатов. Например, при определении содержания кварца в различных смесях формула (10) преобразуется к виду

$$x_i = \frac{J_i}{(J_i)_0} \left(\frac{\mu_i^*}{\mu_i^*}\right)^{-C}, \quad (11)$$

где  $C = -0,78$ .

Конкретный тип зависимости может быть найден с помощью искусственных смесей, для которых известны  $x_i$ ,  $\mu_i$ ,  $\mu_i^*$ ; значения же  $J_i$ ,  $(J_i)_0$  определяются экспериментально.

**Методы постоянных коэффициентов.** Формула (2) не дает возможности прямого определения концентраций всех фаз непосредственно по набору экспериментальных интенсивностей. Практически более важными явились бы формулы, дающие зависимость типа

$$X_i = f_i(J_1, J_2, J_3, \dots, J_n) \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (12)$$

Предложены различные приемы получения такой зависимости суть которых сводится к определению на искусственных бинарных смесях значений коэффициентов  $K_i$ ,  $K_{i+1}$ , и с учётом ус-

ловия нормировки  $\sum_{i=1}^n x_i = 1,00$  получению полной системы  $n$  уравнений с  $n$  неизвестными. Не-

достаток предложенного способа состоит в том, что при наличии в образце аморфной составляющей или фаз, не выявляющихся на рентгенограмме из-за малого содержания, можно определить лишь отношение концентраций.

**Предлагаемые методы.** Приведенный выше обзор методов количественного рентгенофазового анализа показывает, что все они являются недостаточно эффективными, либо из-за сложности реализации, либо в силу определённой селективности. В данной работе автором показана

возможность применения нового, на первый взгляд несколько неожиданного для количественного рентгенофазового анализа способа, сходного со способом стандарта – фона, широко применяемого в рентгенофлуоресцентном анализе.

Дифрактограмма представляет собой пики дифракционных максимумов когерентно рассеянного первичного излучения различными фазами вещества анализируемой пробы, наложенные на сплошную линию фона, представляющего некогерентно рассеянное веществом анализируемой пробы первичное излучение. Суть данного способа заключается в том, что аналитическим параметром служит отношение  $J_i$  – интенсивности измеряемого рефлекса фазы  $i$  к интенсивности  $J_p$  некогерентно рассеянного анализируемым веществом пробы первичного рентгеновского излучения.

Легко увидеть аналогичность выражений (2) для определения  $J_i$  интенсивности измеряемого рефлекса фазы  $i$  и выражения для определения интенсивности  $i$  линии спектра флуоресценции анализируемого элемента, для монохроматического первичного излучения и бесконечно толстой пробы [2]

$$J_i = k_i C_a / [(M_{oa} / \sin \varphi + M_{ia} / \sin \psi) C_a + (M_{om} / \sin \varphi + M_{im} / \sin \psi) C_m], \quad (13)$$

где:  $k_i$  – коэффициент пропорциональности, не зависящий от химического состава пробы;  $C_a$  и  $C_m$  – содержание определяемого компонента и элементов наполнителя в пробе ( $C_a + C_m = 1$ );  $M_{oa}$  и  $M_{ia}$  – массовые коэффициенты поглощения первичного и характеристического излучения в определяемом компоненте;  $M_{om}$  и  $M_{im}$  – массовые коэффициенты поглощения первичного и характеристического излучения в наполнителе пробы;  $\varphi$  и  $\psi$  – углы падения к поверхности пробы первичного и отбора характеристического излучений.

Так как при снятии дифрактограммы углы падения и отбора равны, а в роли характеристического излучения выступает когерентно рассеянное первичное монохроматическое излучение, то есть  $M_{oa} = M_{ia}$  и  $M_{om} = M_{im}$ , то (13) можно представить как

$$J_i = K_i C_a / [M_{oa} C_a + M_{om} C_m] = K_i \frac{C_a}{\sum_{i=1}^n M_{oi} C_i}, \quad (14)$$

где  $K_i = k_i / \sin \varphi$  – коэффициент пропорциональности, зависящий от геометрии съёмки, но не зависящий от химического состава пробы. Полученное выражение полностью коррелирует с выражением (2).

Интенсивность некогерентно рассеянного излучения описывается следующим выражением [2, 3]

$$J_p = k_p / [(M_{oa} / \sin \varphi + M_{2a} / \sin \psi) C_a + (M_{om} / \sin \varphi + M_{2m} / \sin \psi) C_m], \quad (15)$$

где  $k_p$  – коэффициент пропорциональности, не зависящий от химического состава пробы;  $M_{2a}$  и  $M_{2m}$  – массовые коэффициенты поглощения рассеянного излучения соответственно в определяемой фазе и наполнителе пробы.

В нашем случае (15) можно представить как

$$J_p = K_p / [(M_{oa} + M_{2a}) C_a + (M_{om} + M_{2m}) C_m]. \quad (16)$$

Как следует из выражений (13), (14) и (2), интенсивность определяемой фазы, также как и интенсивность флуоресценции, убывают с ростом поглощающей способности анализируемой пробы. Причём, при значительном росте массового коэффициента наполнителя пробы интенсивность может уменьшаться в несколько раз, что может привести к относительной ошибке определения содержания того или иного компонента в несколько сот процентов! Аналогичным образом ведет себя зависимость интенсивности рассеянного излучения от поглощающей способности пробы, что следует из выражений (15) и (16). На рис. 1 приведены результаты измерения проб с одинаковым содержанием  $ZrO_2$  (1%), но различными наполнителями, массовый коэффициент поглощения которых для различных проб изменялся в интервале от 0,5 до 60  $см^2/г$ .

Как видно из рисунка, интенсивности рефлекса анализируемой фазы и рассеянного излучения незначительно отличаются на всём рассматриваемом интервале изменения поглощающей способности наполнителя, это подтверждает, что аналитический параметр  $\eta = J_i / J_p$  незначительно зависит от матрицы пробы. Но тем не менее, опытные данные показывают, что интенсивность рассеянного излучения спадает медленнее интенсивности рефлекса анализируемой фазы. То есть, аналитический параметр также уменьшается с ростом

поглощательной способности пробы рис. 2а, что при значительном изменении поглощательной способности наполнителя приводит к появлению систематической ошибки определения до десяти процентов и выше, при требовании различных ГОСТов не более одного процента.

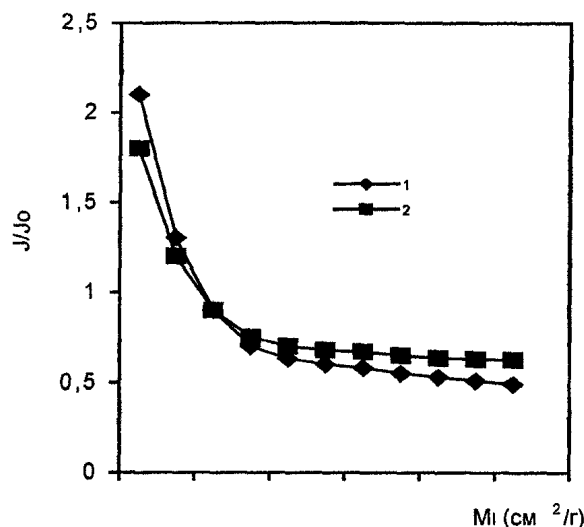


Рис. 1. Зависимость интенсивности измеряемой фазы (1) и рассеянного излучения (2) от поглощательной способности наполнителя

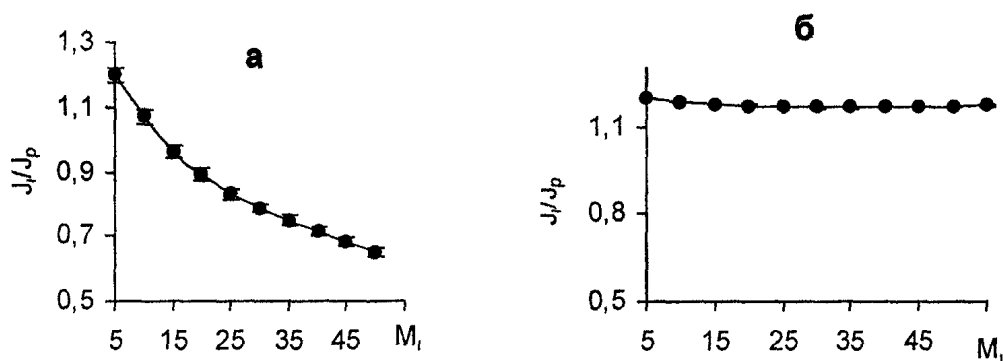


Рис. 2 Зависимость аналитического параметра  $\eta$  (а) и (б) от массового коэффициента поглощения наполнителя пробы (значения параметра  $\eta$ , нормированы относительно значений параметра  $\eta$ )

Для устранения этого недостатка, автором данной работы рассмотрена возможность применения для количественного фазового анализа, способа дополнительного поглотителя, разработанного им для различных методов рентгенофлуоресцентного анализа [2, 4, 5].

Суть способа заключается в использовании дополнительного поглотителя из анализируемого вещества, помещаемого между пробой и детектором, при измерении интенсивности некогерентно рассеянного пробой первичного излучения (рис. 3). Техническая реализация способа с использованием дополнительного поглотителя в силу своей простоты легко осуществима на серийных отечественных дифрактометрах типа ДРОН.

Для проб с незначительно меняющейся матрицей регистрируется интенсивность измеряемой фазы, затем детектор перемещается на малый угол (рядом с измеряемой фазой) и регистрируется интенсивность рассеянного излучения, после чего концентрация измеряемой фазы определяется по отношению вышеуказанных интенсивностей. Для проб с сильно меняющимся вещественным составом, после регистрации измеряемой фазы, перед детектором излучения устанавливается дополнительный поглотитель из анализируемого вещества оптимальной поверхностной плотности [5], и регистрируется интенсивность рассеянного излучения прошедшего через дополнительный

поглотитель. А концентрация измеряемой фазы определяется по отношению вышеуказанных интенсивностей.

Аналитический параметр  $\eta_1$  в этом случае описывается следующим выражением:

$$\eta_1 = \frac{I_1}{I_3} = \eta \exp[-(\mu_a C_a + \mu_n C_n) d], \quad (17)$$

где  $d$  – поверхностная плотность поглотителя ( $\text{г/см}^2$ ). Использование дополнительного поглотителя позволяет практически полностью устранить зависимость аналитического параметра от изменения химического состава пробы (рис. 2б) [2–5].

Предложенный способ позволяет практически полностью устранить влияние химического состава пробы на ошибку измерения, понизить систематическую составляющую ошибки на порядок и ниже случайной составляющей. Созданные на основе данного способа методики анализа вольфрамовой и молибденовой продукции УзКТЖМ и родственных предприятий по метрологическим характеристикам соответствуют требованиям ГОСТов и отличаются высокой экспрессностью и простотой реализации.

Разработанные методики анализа и установки внедрены на предприятии ПО «Союзтвердослав» УзКТЖМ.

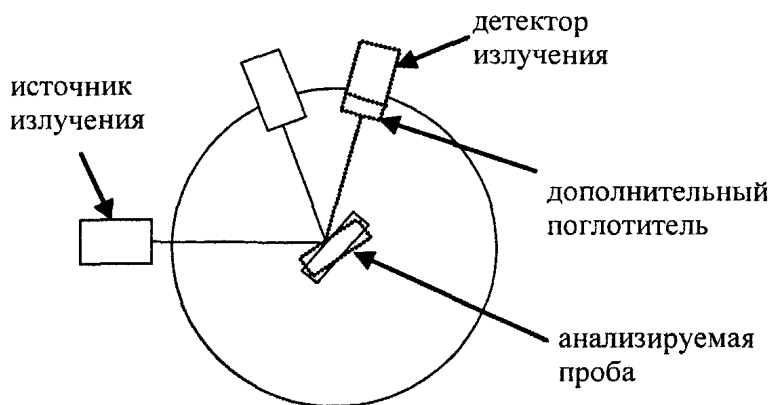


Рис. 3. Схема измерения с использованием дополнительного поглотителя

## Литература

1. Герасимов В.Н. и др. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов. – Ленинград: Недра, 1975. – 396 с.
2. А.с. 1040389 СССР / А.Ч. Ким, Э.Н. Фариков // Бюллетень «Открытия. Изобретения» –1983. – № 33.
3. Косьянов П.М. Исследование и разработка способа учета матричного эффекта при рентгенофлуоресцентном анализе вещества в продуктах вольфрамового и молибденового производства: Дисс... канд. техн. наук. – Ташкент, 1997.
4. Патент 4242 29/11/1995 СССР / П.М. Косьянов, А.Ч. Ким // Бюллетень «Новости науки». – Ташкент, 1997. – № 1.
5. Косьянов П.М. Учет матричного эффекта при рентгенофлуоресцентном анализе // Контроль. Диагностика, 2001. – № 7. – С. 8–10.

Поступила в редакцию 23 апреля 2003 г.

**ВЕСТНИК  
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА**

**№ 8 (24) 2003**

**Серия  
«МАТЕМАТИКА, ФИЗИКА, ХИМИЯ»  
Выпуск 4**

**Издательство Южно-Уральского государственного университета**

---

ИД № 00200 от 28.09.99. Подписано в печать 22.09.2003. Формат 60×84 1/8. Печать трафаретная.  
Усл. печ. л. 17,67. Уч.-изд. л. 16,67. Тираж 210 экз. Заказ 639/136.

---

Группа МЭНП Издательства. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.