

Учредитель – ГОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет»

Редакционная коллегия серии:

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

(отв. редактор),

к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.**

(отв. секретарь),

д.т.н., профессор **Гуревич С.Ю.,**

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

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

д.т.н., профессор **Садаков О.С.,**

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

д.т.н., профессор **Чернявский А.О.**

Серия основана в 2009 году.

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

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

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации от 19 февраля 2010 г. № 6/6 журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России».

Периодичность выхода – 2 номера в год.

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

ГЕРЕНШТЕЙН А.В., ГЕРЕНШТЕЙН Е.А., МАШРАБОВ Н. Устойчивые явные схемы уравнения теплопроводности для осесимметричной задачи	4
ГРИГОРЬЕВА О.В. Метод решения обратных задач, использующий дополнительную априорную информацию.....	9

Механика

ПОНЬКИН А.В., КОЧНЕВ П.В. Оценка возможности использования в конструкции бронезилета металлических бронезащитных элементов мозаичной конструкции	16
САДАКОВ О.С., ЦЕРБАКОВА А.О., ШУЛЬЖЕНКО С.И. Использование круга Мора для решения задачи полярной декомпозиции при плоском напряженном состоянии	21

Физика

ГЛАДКОВ В.Е., БЕРЕЗИН В.М., ЖЕХАНОВА Н.Б. Влияние условий охлаждения расплава 75 мас.% Al_2O_3 –25 мас.% ZrO_2 на формирование структуры и фазового состава	27
ГОЛОВНЕВ Ю.Ф., ЛАКОВЦЕВ А.Б. Фазовая диаграмма магнитоэкситонов в наноразмерных гетеросистемах на основе ферромагнитных полупроводников.....	32
ГОЛОВНЕВ Ю.Ф., НУРГУЛЕЕВ Д.А. Неупругие каналы резонансного туннелирования в гетероструктурах EuS/PbS	38
ГРАХОВ Ю.В., МАТВЕЕНКО О.В., СОЛОМИН Е.В. Инженерный метод и математическое моделирование в проектировании ветроэнергетических установок.....	45
ЗАГУЛЯЕВ Д.В., КОНОВАЛОВ С.В., ГРОМОВ В.Е. Влияние слабых магнитных полей на микротвердость поликристаллического алюминия.....	53
ЗАКИРЬЯНОВ Ф.К., КИСЕЛЕВА Т.А. Теоретическое исследование влияния диссипации и точечных внешних воздействий на динамику ДНК.....	57
КОНОВАЛОВ С.В., ИВАНОВ Ю.Ф., ГРОМОВ В.Е. Индуцированный усталостными испытаниями градиент фазового состава и дефектной структуры в стали 45Г17ЮЗ.....	67
МАЛЬЦЕВ И.В., МИРЗОЕВ А.А. Методика расчета сдвиговой вязкости жидкого железа методом Грина–Кубо.....	76
САДЫКОВ Н.Р., СКОРКИН Н.А. Компьютерное моделирование взаимодействия электромагнитного излучения с нанотрубками	79
СОЗЫКИН С.А., БЕСКАЧКО В.П. Взаимодействие углеродных нанотрубок (7,7) и (8,8) с внедренными атомами.....	87
ТОЛИПОВ Х.Б. Изменение структуры поверхностной волны при распространении в остроугольном клине.....	92
УРСАЕВА А.В., РУЗАНОВА Г.Е., МИРЗОЕВ А.А. Выбор оптимальных параметров для построения максимально точной модели ОЦК-железа.....	97
ХОЛОДОВСКИЙ В.Е., МАЧИХИНА И.О., КУЛЬЧЕНКОВ Е.А. Расчет теплоемкости и среднеквадратичных смещений по фононным спектрам для кристаллов с ОЦК и ГЦК решеткой.....	102
ЧЕБОТАРЕВ С.С., АНДРЕЙЧУК В.П., ПЕСИН Л.А., СЕМОЧКИН П.С., СОКОЛОВА М.Н., ЕВСЮКОВ С.Е., ГРИБОВ И.В., МОСКВИНА Н.А., КУЗНЕЦОВ В.Л. Фотостимулированное окисление карбиноидов.....	111

CONTENTS

Mathematics

HERREINSTEIN A.W., HERREINSTEIN E.A., MASHRABOV N. Independent obvious schemes of the heat equation for the axisymmetric commitment	4
GRIGORIEVA, O.V. Method of the inverse problem solution using an additional <i>a priori</i> information	9

Mechanics

PONKIN A.V., KONCHEV P.V. Evaluation of availability of metal armour elements of tessellation construction in bulletproof vest design	16
SADAKOV O.S., SCHERBAKOVA A.O., SHULZHENKO S.I. Application of the Mohr circles for solving the problem of polar decomposition under plane stress	21

Physics

GLADKOV V.E., BEREZIN V.M., ZHEKHANOVA N.B. Influence of conditions of melt cooling upon structure formation and phase composition in ingots of $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ alloys	27
GOLOVNEV Y.F., LAKOVTSSEV A.B. Phase diagram of magnetic excitons in nanosize heterosystems on base ferromagnetic semiconductor	32
GOLOVNEV Y.F., NURGULEEV D.A. Not elastic channels of resonant tunneling in heterostructures EuS/PbS	38
GRAHOV Y.V., MATVEENKO O.V., SOLOMIN E.V. Engineering method and mathematic modeling in design of wind turbines	45
ZAGULYAEV D.V., KONOVALOV S.V., GROMOV V.E. Weak magnetic fields influence on microhardness of polycrystalline aluminum	53
ZAKIRIYANOV F.K., KISELEVA T.A. Theoretical study of influence of dissipation and point external impact on DNA dynamics	57
KONOVALOV S.V., IVANOV Y.F., GROMOV V.E. The gradient of a phase composition and the defect structure in a 0,45CR17MN3Al steel induced by fatigue test	67
MALTSEV I.V., MIRZOEV A.A. Application of Green–Kubo method to liquid iron shear viscosity calculation	76
SADYKOV N.R., SCORKIN N.A. Computer modeling of electromagnetic radiation interaction with nanotubes	79
SOZYKIN S.A., BESKACHKO V.P. Interaction of carbon nanotubes (7,7) and (8,8) with embedded atoms	87
TOLIPOV K.B. Change of structure of a superficial wave at distribution to an acute-angled wedge	92
URSAEVA A.V., RUZANOVA G.E., MIRZOEV A.A. Selection of optimal parameters for formation the most accurate model of bcc iron	97
KHOLODOVSKY V.E., MACHIKHINA I.O., KULCHENKOV E.A. Calculation of heat capacity and mean–square deviations on phonon spectra for crystals with BCC and FCC lattices	102
CHEBOTAREV S.S., ANDREYCHUK V.P., PESIN L.A., SEMOCHKIN P.S., SOKOLOVA M.N., EVSYUKOV S.E., GRIBOV I.V., MOSKVINA N.A., KUZNETSOV V.L. Photoinduced oxidation of carbynoid films	111

УСТОЙЧИВЫЕ ЯВНЫЕ СХЕМЫ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ЗАДАЧИ

А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн, Н. Машрабов

Предлагается численный метод интегрирования уравнения теплопроводности, основанный на комбинации явной и неявной схемы с использованием линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Предложенный численный метод проверяется на некоторой задаче, для которой известно точное решение.

Ключевые слова: устойчивые явные схемы, устойчивость, погрешность, теплопроводность.

В работах [1, 2] предложена и обоснована явная устойчивая численная схема для уравнения теплопроводности. В этой схеме разностные соотношения заменялись обыкновенными дифференциальными уравнениями или линейными уравнениями с частными производными первого порядка. Была доказана абсолютная устойчивость этой схемы. В настоящей работе предложенный численный метод сравнивается с известным точным решением.

Рассмотрим осесимметричную задачу распределения температуры U в однородном теплоизолированном цилиндре. Все геометрические размеры отнесем к длине R радиуса цилиндра, время отнесем к величине R^2/α , где α^2 – коэффициент температуропроводности материала цилиндра.

В безразмерных цилиндрических координатах вторая смешанная осесимметричная задача имеет вид: в области $Q: \{(r, z, t); 0 \leq r < 1, 0 < z < H, t > 0\}$ требуется найти функцию $U(r, z, t)$, дважды дифференцируемую по r и z , непрерывно дифференцируемую по t , непрерывно дифференцируемую в замыкающие области, удовлетворяющую внутри области уравнению

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (1)$$

начальному условию

$$U(r, z, 0) = \varphi(r, z) \quad (2)$$

и краевым условиям

$$\frac{\partial u}{\partial r} = 0 \text{ при } r = 1; \quad \frac{\partial u}{\partial z} = 0 \text{ при } z = 0 \text{ или } z = H. \quad (3)$$

Здесь $\varphi(r, z)$ – заданная непрерывная функция. Разобьем отрезок $[0, H]$ оси z на m одинаковых участков и обозначим $\Delta z = H/m$, $z_j = \Delta z/2 + j\Delta z$, $j = 1 \dots m$. Радиус цилиндра $[0, 1]$ разобьем на n участков, причем длина участка, начинающегося на оси цилиндра ($r = 0$), в два раза короче длин остальных одинаковых участков. Обозначим $h = 2/(2n-1)$, $r_i = i \cdot h$, $u_{i,j}$ – значение температуры в точке (r_i, z_j) в текущий момент времени t ; $\tilde{u}_{i,j}$ – температура в той же точке в момент времени $t + \Delta t$.

Разностный метод для явной схемы выглядит так [3, 4]:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{u}_{i,j} - u_{i,j}}{\Delta t} &= \frac{1}{r_i} \left[\left(r_i + \frac{h}{2} \right) (u_{i+1,j} - u_{i,j}) - \left(r_i - \frac{h}{2} \right) (u_{i,j} - u_{i-1,j}) \right] + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta z^2} \\ &\quad (i = 1 \dots n-1, j = 1 \dots m), \\ \frac{\tilde{u}_{0,j} - u_{0,j}}{\Delta t} &= 4 \frac{u_{1,j} - u_{0,j}}{h^2} + \frac{u_{0,j+1} - 2u_{0,j} + u_{0,j-1}}{\Delta z^2} \quad (j = 1 \dots m). \end{aligned} \quad (4)$$

Теперь совершим некоторое движение к неявной схеме: значения u_{ij} и u_{0j} будем рассматривать в момент времени $t + \Delta t$. Уравнения (4) примут вид:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{u}_{i,j} - u_{i,j}}{\Delta t} + \left(\frac{2}{h^2} + \frac{2}{\Delta z^2} \right) \tilde{u}_{i,j} &= \frac{1}{r_i} \left(r_i + \frac{h}{2} \right) u_{i+1,j} + \left(r_i - \frac{h}{2} \right) u_{i-1,j} + \frac{u_{i,jn} + u_{i,j-1}}{\Delta z^2} \\ (i=1 \dots n-1, j=1 \dots m), \\ \frac{\tilde{u}_{0,j} - u_{0,j}}{\Delta t} + \left(\frac{4}{h^2} + \frac{2}{\Delta z^2} \right) \tilde{u}_{0,j} &= \frac{4}{h^2} u_{1,j} + \frac{u_{0,jn} + u_{0,j-1}}{\Delta z^2} \quad (j=1 \dots m). \end{aligned} \quad (5)$$

Обозначим

$$\begin{aligned} f_{i,j} &= \frac{\left(r_i + \frac{h}{2} \right) u_{i+1,j} + \left(r_i - \frac{h}{2} \right) u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} + u_{i,j-1}}{\Delta z^2}, \quad i=1 \dots n-1, \\ f_{0,j} &= \frac{4}{h^2} u_{1,j} + \frac{u_{0,j+1} + u_{0,j-1}}{\Delta z^2} \quad (j=1 \dots m), \\ \lambda_i &= \frac{2}{h^2} + \frac{2}{\Delta z^2}, \quad \lambda_0 = \frac{4}{h^2} + \frac{2}{\Delta z^2} \end{aligned} \quad (6)$$

и в уравнениях (5) перейдем к пределу при $\Delta t \rightarrow 0$.

Получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\tilde{u}_{i,j}}{dt} + \lambda_i \tilde{u}_{i,j} = L_{i,j}, \quad i=0 \dots n-1, \quad j=1 \dots m. \quad (7)$$

Но в этих уравнениях появляются значения индексов $i=n, j=0$ и $j=m+1$. Для обеспечения граничных условий (3) введем фиктивные слои [5–7] $i=n, j=0$ и $j=m+1$ и положим для текущего момента времени t

$$\begin{aligned} u_{n,j} &= u_{n-1,j} \quad j=1 \dots m, \\ u_{i,0} &= u_{i,1}, \quad u_{i,m+1} = u_{i,m}, \quad i=0 \dots n-1. \end{aligned} \quad (8)$$

Интегрируя уравнение (7) на отрезке $[t, t+\tau]$ и считая $f_{i,j}$ постоянным на этом отрезке, получим

$$\bar{u}_{i,j} = u_{i,j} \cdot e^{-\lambda_i \tau} + \frac{1}{r_i} (1 - e^{-\lambda_i \tau}) f_{i,j} \quad (i=0 \dots n-1, j=1 \dots m). \quad (9)$$

Полученное значение $\bar{u}_{i,j}$ считаем начальным условием для следующего временного слоя.

Полученная схема является явной, ибо ее получение не требует решения систем уравнений. Абсолютную устойчивость схемы обеспечивает член $e^{-\lambda_i \tau}$ [2].

Для сравнения предложенной численной схемы с точным решением рассмотрим два члена ряда, полученного методом разделения переменных (методом Фурье):

$$U(t, r, z) = T_0 + T_1 \cdot e^{-pt} J_0(lr) \cdot \cos(sz), \quad (10)$$

где T_0 и T_1 – числа, заданные произвольно, $J_0(t)$ – функция Бесселя первого индекса,

$s = \frac{\pi}{H}$, $p = l^2 + s^2$, l – первый нулевой корень уравнения

$$\frac{d}{dl} J_0(l) = 0. \quad (11)$$

В качестве начальных условий ($t=0$) берем функцию

$$U(0, r, z) = T_0 + T_1 J_0(lr) \cos(sz)$$

и для некоторых значений t сравниваем решение (10) с решением по схеме (8) и (9) [6, 7].

В данной задаче $H = 5$; $l = 3,83171$ [8]; $s = 0,628319$; $p = 15,0768$; $h = 0,105263$. Результаты расчетов изменения температуры по радиусу и по длине цилиндра приведены в табл. 1, а график –

Математика

на рис. 1. Кроме этого, в результате расчетов установлено, что максимальное отклонение между $T_{\text{числ}}$ и $T_{\text{теор}}$ достигается через 2,85 с на двадцатом сечении и составляет 3,9 °C (0,45 %).

Таблица 1

Результаты расчетов для двумерной осесимметричной задачи

Кол-во элемент. участ. по длине	Распределение начальное		Распределение ч-з 1 сек.		Распределение ч-з 2 сек.		Распределение ч-з 3 сек.		Макс. отклонение, %
	1	2	3	4	5	6	7	8	
	Числ. на- чальное	Теор. на- чальное	Числ. через 1 с	Теор. через 1 с	Числ. через 2 с	Теор. че- рез 2 с	Числ. че- рез 3 с	Теор. че- рез 3 с	
1	1249,23	1249,23	1163,28	1159,96	1106,88	1102,67	1069,99	1065,89	0,39
2	1243,09	1243,09	1159,26	1156,02	1104,25	1100,14	1068,28	1064,27	0,38
3	1230,97	1230,97	1151,32	1148,24	1099,05	1095,15	1064,87	1061,07	0,38
4	1213,16	1213,16	1139,65	1136,81	1091,42	1087,81	1059,87	1056,36	0,33
5	1190,1	1190,1	1124,54	1122,01	1081,53	1078,31	1053,39	1050,26	0,29
6	1162,36	1162,36	1106,37	1104,21	1069,63	1066,88	1045,6	1042,93	0,27
7	1130,63	1130,63	1085,58	1083,84	1056,02	1053,81	1036,69	1034,54	0,22
8	1095,67	1095,67	1062,68	1061,4	1041,03	1039,41	1026,87	1025,29	0,17
9	1058,36	1058,36	1038,23	1037,46	1025,03	1024,04	1016,39	1015,43	0,09
10	1019,62	1019,62	1012,85	1012,59	1008,41	1008,08	1005,51	1005,19	0,02
11	980,385	980,385	987,15	987,411	991,588	991,92	994,491	994,814	0,04
12	941,639	941,639	961,766	962,542	974,971	975,958	983,609	984,569	0,09
13	904,329	904,329	937,323	938,596	958,971	960,589	973,13	974,705	0,16
14	869,375	869,375	914,424	916,161	943,981	946,19	963,313	965,463	0,22
15	837,638	837,638	893,631	895,791	930,37	933,116	954,399	957,072	0,28
16	809,899	809,899	875,458	877,987	918,473	921,689	946,608	949,738	0,33
17	786,84	786,84	860,352	863,188	908,585	912,19	940,132	943,641	0,37
18	769,03	769,03	848,684	851,757	900,947	904,853	935,13	938,932	0,40
19	756,908	756,908	840,742	843,976	895,748	899,86	931,725	935,727	0,43
20	750,771	750,771	836,722	840,037	893,116	897,331	930,002	934,104	0,44

С целью оценки влияния числа элементарных участков по радиусу, по длине и шага по времени τ на максимальные отклонения между $T_{\text{числ}}$ и $T_{\text{теор}}$ проведены численные эксперименты, результаты приведены в табл. 2.

Таблица 2

Результаты сравнительных численных расчетов

Кол-во элемен- тарных участков	Шаг по времени dt , с							
	1,0		0,1		0,01		0,001	
	T_q , °C	$\frac{T_q - T_m}{T_q}$, %	T_q , °C	$\frac{T_q - T_m}{T_q}$, %	T_q , °C	$\frac{T_q - T_m}{T_q}$, %	T_q , °C	$\frac{T_q - T_m}{T_q}$, %
5	1157,4	7,74	1099,7	2,62	1085,5	0,64	1082,5	0,56
10	1184,2	13,16	1109,8	1,40	1094,2	0,39	1075,8	0,13
20	1218,0	17,27	1140,4	7,52	1098,5	0,99	1092,0	0,16
30	1233,2	18,50	1170,4	11,80	1104,5	2,09	1093,5	0,23
40	1238,1	19,06	1192,1	14,35	1112,9	3,53	1094,4	0,39
50	1241,6	19,35	1205,6	15,88	1122,9	5,17	1095,5	0,60

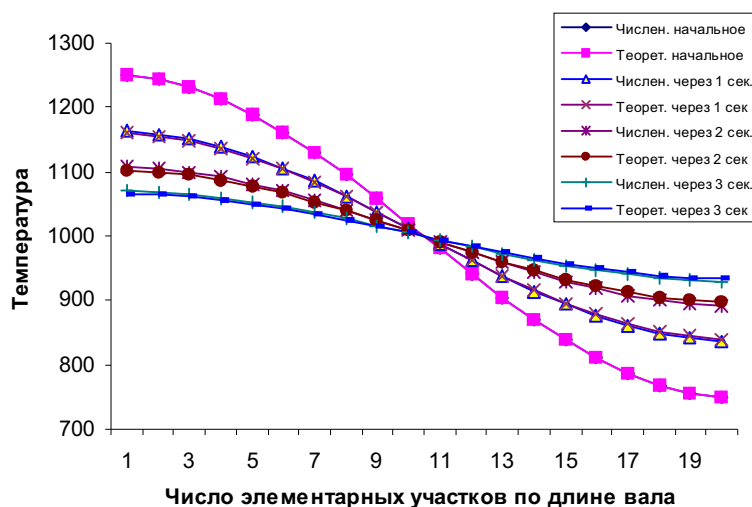


Рис. 1. График изменения температуры от времени
для двухмерной осесимметричной задачи

Результаты сравнительных численных расчетов показывают, что с уменьшением шага по времени увеличивается точность численного расчета, при этом пропорционально увеличивается машинное время счета для любого варианта расчетов (при любых количествах элементарных участков). Для конкретных режимов, когда известны радиус и длина цилиндра, а также заданы шаг по времени и количество элементарных участков, можно установить конкретное значение соответствующего отклонения между $T_{\text{числ}}$ и $T_{\text{теор.}}$. Проведенные расчеты показали, что при шаге менее 1 с рациональное количество участков по радиусу равно 10, при этом максимальная ошибка не превышает 3 %. В прикладных задачах такая методика расчета для разных диаметров и длин изделий, технологических режимов обработки и предъявленных требований позволяет определять рациональное количество элементарных участков для деталей типа тел вращения.

Литература

1. Геренштейн, А.В. Нагревание круга движущимся теплоисточником / А.В. Геренштейн, Н. Машрабов // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 2008. – Т. 15, № 5. – С. 870–871.
2. Геренштейн, А.В. Устойчивые явные схемы для уравнения теплопроводности / А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн, Н. Машрабов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2008. – Вып. 1. – № 15 (115). – С. 9–11.
3. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
4. Годунов, С.К. Разностные схемы / С.К. Годунов, В.С. Рябенский. – М.: Наука, 1977. – 440 с.
5. Шуп, Т. Решение инженерных задач на ЭВМ / Т. Шуп. – М.: Мир, 1982. – 235 с.
6. Геренштейн, А.В. Расчет температурных полей в цилиндре при действии поверхностных тепловых источников «Тепло 4.0» / А.В. Геренштейн, Н. Машрабов, Е.А. Геренштейн // Государственная регистрация в Отраслевом фонде алгоритмов и программ № 9776, 20.02.2008. – М.: ФГНУ ГКЦИТ, 2008.
7. Машрабов, Н. Расчет температурных полей в цилиндре при действии поверхностных тепловых источников «Тепло 5.0» / Н. Машрабов, А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн // Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2008612210, 30.04.2008, РОСПАТЕНТ.
8. Янке, Е. Специальные функции (формулы, графики, таблицы) / Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. – М.: Наука, 1964. – 344 с.

Поступила в редакцию 5 ноября 2009 г.

INDEPENDENT OBVIOUS SCHEMES OF THE HEAT EQUATION FOR THE AXISYMMETRIC COMMITMENT

In produced paper the numerical method of integration of a heat equation grounded on a speed key of the obvious and implicit scheme utilization of linear differential equations of the first order is offered. The tendered numerical method is mustered on some commitment for which one the exact solution is known.

Keywords: independent obvious schemes, sustainability, a lapse, thermal conductivity.

Herreinstein Arkady Wasiljevich – Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Applied Math. Department, South Ural State University.

Геренштейн Аркадий Васильевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедры прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет.

Herreinstein Evgenija Arkadjewna – Cand. Sc. (Engineering), Senior Teacher of the Applied Math. Department, South Ural State University.

Геренштейн Евгения Аркадьевна – кандидат технических наук, старший преподаватель, кафедры прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: h-jane@rambler.ru

Mashrabov Nematulla – Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, stand technics and organisation of an engineering SVC, Chelyabinsk state agroengineering academy.

Машрабов Нематулла – кандидат технических наук, доцент, кафедры технологии и организации технического сервиса, Челябинская государственная агроинженерная академия.

МЕТОД РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ, ИСПОЛЬЗУЮЩИЙ ДОПОЛНИТЕЛЬНУЮ АПРИОРНУЮ ИНФОРМАЦИЮ

О.В. Григорьева

Во многих обратных задачах математической физики имеется дополнительная априорная информация о точном решении, которую необходимо использовать для качественного улучшения приближенного решения. В работе дано обобщение метода невязки, предложенного В.К. Ивановым в работе [1]. Метод невязки позволяет использовать дополнительную априорную информацию.

Ключевые слова: операторное уравнение, некорректно поставленная задача, гильбертово пространство, метод невязки.

I. Постановка задачи. Пусть U , F и V – гильбертовы пространства, A – инъективный линейный ограниченный оператор, отображающий U в F , а L – линейный замкнутый оператор с областью определения $D(L) \subset U$ и множеством значений $R(L) \subset V$, причем $\overline{D(L)} = U$. Обозначим через K выпуклое замкнутое множество из U и предположим, что $K \cap D(L) \neq \emptyset$. Рассмотрим операторное уравнение первого рода

$$Au = f \quad (1)$$

и предположим, что при $f = f_0$ существует решение u_0 уравнения (1), которое принадлежит множеству $K \cap D(L)$, но точное значение f_0 нам не известно, а вместо него даны $f_\delta \in F$ и $\delta > 0$ такие, что

$$\|f_\delta - f_0\| \leq \delta. \quad (2)$$

Требуется, используя априорную информацию f_δ , δ , $D(L)$ и K , построить приближенное решение u_δ уравнения (1) и оценить его отклонение $\|u_\delta - u_0\|$ от точного решения u_0 .

Метод решения поставленной задачи будет заключаться в сведении ее к вариационной задаче

$$\inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in D(L) \cap K, \|Au - f_\delta\| \leq \delta \right\}. \quad (3)$$

II. Обоснование метода (3).

Теорема 1. При любых значениях $\delta > 0$ и $f_\delta \in F$ вариационная задача (3) разрешима.

Доказательство. Пусть $\Omega_\delta = \{u : u \in D(L) \cap K, \|Au - f_\delta\| \leq \delta\}$. Тогда из того, что $u_0 \in K \cap D(L)$ и соотношения (2) следует, что $\Omega_\delta \neq \emptyset$.

Таким образом, числовое множество $G_\delta = \{\|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in \Omega_\delta\}$ непустое и ограничено снизу числом 0. Если $\|f_\delta\| \leq \delta$, то $\theta \in \Omega_\delta$ и является решением вариационной задачи (3). Если $\|f_\delta\| > \delta$, то из ограниченности снизу множества G_δ следует существование нижней грани $\inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in D(L) \cap K, \|Au - f_\delta\| \leq \delta \right\}$. Из определения нижней грани следует существование минимизирующей последовательности $\{u_n\} \subset \Omega_\delta$ такой, что

$$\|u_n\|^2 + \|Lu_n\|^2 \rightarrow \inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in \Omega_\delta \right\}. \quad (4)$$

Из (4) следует ограниченность последовательностей $\{u_n\}$ и $\{Lu_n\}$, а ввиду гильбертовости пространств U и V – их слабая предкомпактность.

Таким образом, существует подпоследовательность $\{u_{n_k}\}$ такая, что

$$u_{n_k} \xrightarrow{сл} \hat{u} \text{ при } k \rightarrow \infty, \quad (5)$$

а

$$Lu_{n_k} \xrightarrow{сл} \bar{v} \text{ при } k \rightarrow \infty. \quad (6)$$

Так как оператор L линеен и замкнут, то из (5) и (6) следует, что $\hat{u} \in K \cap D(L)$ и

$$\bar{v} = L\hat{u}. \quad (7)$$

Из линейности и ограниченности оператора A и соотношения (5) следует, что

$$Au_{n_k} \xrightarrow{сл} A\hat{u} \text{ при } k \rightarrow \infty, \quad (8)$$

а из (8), что

$$Au_{n_k} - f_\delta \xrightarrow{сл} A\hat{u} - f_\delta \text{ при } k \rightarrow \infty. \quad (9)$$

Из (9) по свойству нормы слабого предела имеем, что

$$\|A\hat{u} - f_\delta\| \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \|Au_{n_k} - f_\delta\|, \quad (10)$$

а из того, что для любого k $u_{n_k} \in \Omega_\delta$, а, следовательно, $\|Au_{n_k} - f_\delta\| \leq \delta$, на основании (10) получим, что

$$\|A\hat{u} - f_\delta\| \leq \delta. \quad (11)$$

Таким образом, учитывая соотношение (11) и то, что $\hat{u} \in K \cap D(L)$, получим

$$\hat{u} \in \Omega_\delta. \quad (12)$$

На основании свойства нормы слабого предела и соотношений (5)–(7) получим, что

$$\|\hat{u}\|^2 + \|L\hat{u}\|^2 \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \left\{ \|u_{n_k}\|^2 + \|Lu_{n_k}\|^2 \right\}. \quad (13)$$

Из соотношений (4), (12), (13) следует, что $\hat{u}$ является решением задачи (3). Тем самым теорема доказана.

Наряду с задачей (3) рассмотрим задачу

$$\inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in D(L) \cap K, \|Au - f_\delta\| = \delta \right\}. \quad (14)$$

Теорема 2. Если для любых $u \in K$ и $\lambda \in [0;1]$ $\lambda u \in K$, а $\|f_\delta\| > \delta$, то задачи (3) и (14) эквивалентны.

Доказательство. Чтобы не проверять разрешимость задачи (14), докажем, что любое из решений задачи (3) является решением задачи (14).

Предположим противное, то есть существует точка $\hat{u} \in K \cap D(L)$ такая, что $\|A\hat{u} - f_\delta\| < \delta$ и

$$\|\hat{u}\|^2 + \|L\hat{u}\|^2 = \inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in \Omega_\delta \right\}. \quad (15)$$

Рассмотрим числовую функцию $\varphi(\lambda)$, определяемую формулой

$$\varphi(\lambda) = \|A_\lambda \hat{u} - f_\delta\|, \quad \lambda \in [0;1]. \quad (16)$$

Из (16) следует непрерывность функции $\varphi(\lambda)$ на отрезке $[0;1]$ и что

$$\varphi(1) = \|A\hat{u} - f_\delta\| < \delta. \quad (17)$$

Тогда из (17) следует существование числа $\tau > 0$ такого, что для любого значения λ , удовлетворяющего условию $|\lambda - 1| < \tau$, выполняется неравенство

$$\varphi(\lambda) < \delta. \quad (18)$$

Таким образом, из (18) следует, что $\varphi\left(1-\frac{\tau}{2}\right) = \left\| A\left[\left(1-\frac{\tau}{2}\right)\hat{u}\right] - f_\delta \right\| < \delta$ и, следовательно,

$\left(1-\frac{\tau}{2}\right)\hat{u} \in \Omega_\delta$, а $\left(1-\frac{\tau}{2}\right)^2 \|\hat{u}\|^2 + \left(1-\frac{\tau}{2}\right)^2 \|L\hat{u}\|^2 < \|\hat{u}\|^2 + \|L\hat{u}\|^2$, что противоречит тому, что $\hat{u}$ решение задачи (3).

Таким образом, $\|A\hat{u} - f_\delta\| = \delta$ и $\hat{u}$ является решением задачи (14).

То, что любое решение задачи (14) является решением задачи (3) очевидно.

Теорема 3. Если для любых $u \in K$ и $\lambda \in [0;1]$, $\lambda u \in K$, то решение задачи (3) единственно.

Доказательство. Предположим, что $\|f_\delta\| > \delta$ и теорема неверна. Тогда существуют точки $\hat{u}_1$ и $\hat{u}_2 \in \Omega_\delta$ такие, что $\hat{u}_1 \neq \hat{u}_2$ и

$$\|\hat{u}_1\|^2 + \|L\hat{u}_1\|^2 = \|\hat{u}_2\|^2 + \|L\hat{u}_2\|^2 = \inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in \Omega_\delta \right\}. \quad (19)$$

Пусть $\hat{u} = \frac{\hat{u}_1 + \hat{u}_2}{2}$. Тогда из соотношения (19) будет следовать, что

$$\|\hat{u}\|^2 + \|L\hat{u}\|^2 \leq \inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in \Omega_\delta \right\}. \quad (20)$$

Так как из теоремы 2 следует, что $\|A\hat{u}_1 - f_\delta\| = \delta$ и $\|A\hat{u}_2 - f_\delta\| = \delta$, то из строгой выпуклости гильбертова пространства F следует, что

$$\|A\hat{u} - f_\delta\| < \delta. \quad (21)$$

Из (21) следует существование числа $\tau > 0$ такого, что $\left\| A\left[\left(1-\frac{\tau}{2}\right)\hat{u}\right] - f_\delta \right\| < \delta$, а, следовательно,

$$\left(1-\frac{\tau}{2}\right)\hat{u} \in \Omega_\delta. \quad (22)$$

Тогда из (20) и (22) будет следовать, что

$$\left(1-\frac{\tau}{2}\right)^2 \|\hat{u}\|^2 + \left(1-\frac{\tau}{2}\right)^2 \|L\hat{u}\|^2 < \inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in \Omega_\delta \right\}. \quad (23)$$

Соотношение (23) противоречит нашему предположению о существовании двух различных решений задачи (3).

Если $\|f_\delta\| \leq \delta$, то единственным решением задачи (3) является элемент θ . Тем самым теорема доказана.

Решение задачи (3) обозначим через u_δ и определим оператор P_δ , отображающий F в U формулой

$$P_\delta f_\delta = u_\delta. \quad (24)$$

Теперь исследуем непрерывность оператора P_δ на множестве $\overline{AK} + \overline{S}_{\delta_0}$, где $\overline{S}_{\delta_0} = \{f : f \in F, \|f\| \leq \delta_0, 0 < \delta_0 < \delta\}$. Для этого наряду с задачей (3) рассмотрим аналогичную задачу

$$\inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in D(L) \cap K, \|Au - f_\delta(n)\| \leq \delta \right\}, \quad (25)$$

где $f_\delta(n) \in F$. Из теорем 1–3 будет следовать существование единственного решения $u_\delta(n)$ задачи (25).

В дальнейшем мы будем предполагать, что множество K является выпуклым, замкнутым и удовлетворяет условию: для любых $u \in K$ и $\lambda \in [0;1]$, $\lambda u \in K$.

Теорема 4. Если f_δ и $\{f_\delta(n)\} \subset \overline{AK} + \overline{S}_{\delta_0}$, $\|f_\delta\| > \delta$ и для любого n $f_\delta(n) \geq \delta$, а $f_\delta(n) \rightarrow f_\delta$ при $n \rightarrow \infty$, то $\|u_\delta(n) - u_\delta\|^2 + \|Lu_\delta(n) - Lu_\delta\|^2 \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Доказательство. Предположим противное. Тогда существует число $\varepsilon_0 > 0$ и подпоследовательность $\{n_k\}$ такие, что для любого k $\|f_\delta(n_k)\| > \delta$ и

$$\|u_\delta(n_k) - u_\delta\|^2 + \|Lu_\delta(n_k) - Lu_\delta\|^2 \geq \varepsilon_0^2. \quad (26)$$

Так как $f_\delta \in \overline{AK} + \overline{S}_{\delta_0}$, то существует точка $\bar{u} \in D(L) \cap K$ такая, что

$$\|A\bar{u} - f_\delta\| < \delta. \quad (27)$$

Из того, что $f_\delta(n_k) \rightarrow f_\delta$ при $k \rightarrow \infty$, следует существование номера k_1 такого, что для любого $k \geq k_1$

$$\|f_\delta(n_k) - f_\delta\| \leq \|A\bar{u} - f_\delta\| + \frac{\delta - \|A\bar{u} - f_\delta\|}{2}. \quad (28)$$

Из (27) и (28) следует существование номера $k_2 > k_1$ такого, что для любого $k \geq k_2$

$$\|f_\delta(n_k) - f_\delta\| < \frac{\delta - \|A\bar{u} - f_\delta\|}{2}. \quad (29)$$

Таким образом, из (28) и (29) следует, что при $k \geq k_2$

$$\|f_\delta(n_k) - A\bar{u}\| \leq \delta, \quad (30)$$

а из (30), что для любого $k \geq k_2$

$$\|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \leq \|\bar{u}\|^2 + \|L\bar{u}\|^2. \quad (31)$$

Из (31) следует слабая предкомпактность последовательностей $\{u_{n_k}\}$ и $\{Lu_{n_k}\}$, а так как оператор L линейен и замкнут, то без ограничения общности можем считать, что существует точка $\hat{u} \in D(L) \cap K$ такая, что

$$u_\delta(n_k) \xrightarrow{cl} \hat{u} \text{ при } k \rightarrow \infty \quad (32)$$

и

$$Lu_\delta(n_k) \xrightarrow{cl} L\hat{u} \text{ при } k \rightarrow \infty. \quad (33)$$

Так как оператор A линейен и ограничен, то из соотношения (32) следует, что

$$Au_\delta(n_k) - f_\delta(n_k) \xrightarrow{cl} A\hat{u} - f_\delta \text{ при } k \rightarrow \infty. \quad (34)$$

Из соотношения (34) по свойству нормы слабого предела будем иметь, что

$$\|A\hat{u} - f_\delta\| \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \|Au_\delta(n_k) - f_\delta(n_k)\|. \quad (35)$$

Из того, что для любого k $\|Au_\delta(n_k) - f_\delta(n_k)\| \leq \delta$, а $f_\delta(n_k) \rightarrow f_\delta$ при $k \rightarrow \infty$, на основании (35) будем иметь, что

$$\|A\hat{u} - f_\delta\| \leq \delta. \quad (36)$$

Из (32) и (33) по свойству нормы слабого предела будет следовать, что

$$\|\hat{u}\|^2 + \|L\hat{u}\|^2 \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \left\{ \|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \right\}. \quad (37)$$

Теперь введем в рассмотрение последовательность $\{\hat{u}_k\}$, определяемую формулой

$$\hat{u}_k = \gamma_k u_\delta + (1 - \gamma_k) \bar{u}, \quad (38)$$

где $\gamma_k \in [0; 1]$ и удовлетворяет условию

$$\|A\hat{u}_k - f_\delta\| = \delta - \|f_\delta(n_k) - f_\delta\|. \quad (39)$$

Из (38) и (39) следует, что для любого k

$$\|A\hat{u}_k - f_\delta\| \leq \gamma_k \|Au_k - f_\delta\| + (1 - \gamma_k) \|A\bar{u} - f_\delta\|, \quad (40)$$

а из (40), что для любого k

$$\|A\hat{u}_k - f_\delta\| \leq \gamma_k \delta + (1 - \gamma_k) \|A\bar{u} - f_\delta\| < \delta. \quad (41)$$

Так как $f_\delta(n_k) \rightarrow f_\delta$ при $k \rightarrow \infty$, то из (41) следует, что

$$\gamma_k \rightarrow 1 \text{ при } k \rightarrow \infty. \quad (42)$$

Из (38) и (42) следует, что $\hat{u}_k \rightarrow u_\delta$ при $k \rightarrow \infty$ и $L\hat{u}_k \rightarrow Lu_\delta$ при $k \rightarrow \infty$.

Таким образом,

$$\|\hat{u}_k\|^2 + \|L\hat{u}_k\|^2 \rightarrow \|u_\delta\|^2 + \|Lu_\delta\|^2, \quad (43)$$

а из определения $u_\delta(n_k)$ и теоремы 2, что для любого k

$$\|Au_\delta(n_k) - f_\delta\| \geq \delta - \|f_\delta(n_k) - f_\delta\|. \quad (44)$$

Из определения $u_\delta(n_k)$ и формулы (44) следует, что для любого k

$$\|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \leq \inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in D(L) \cap K, \|Au - f_\delta\| \leq \delta - \|f_\delta(n_k) - f_\delta\| \right\}, \quad (45)$$

а из (39), что для любого k

$$\inf \left\{ \|u\|^2 + \|Lu\|^2 : u \in D(L) \cap K, \|Au - f_\delta\| \leq \delta - \|f_\delta(n_k) - f_\delta\| \right\} \leq \|\hat{u}_k\|^2 + \|L\hat{u}_k\|^2. \quad (46)$$

Из (43), (45) и (46) следует, что

$$\|u_\delta\|^2 + \|Lu_\delta\|^2 \geq \overline{\lim}_{k \rightarrow \infty} \left\{ \|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \right\}, \quad (47)$$

а из определения u_δ и (36), что

$$\|u_\delta\|^2 + \|Lu_\delta\|^2 \leq \|\hat{u}\|^2 + \|L\hat{u}\|^2. \quad (48)$$

Из (37), (47) и (48) следует, что

$$\|u_\delta\|^2 + \|Lu_\delta\|^2 = \|\hat{u}\|^2 + \|L\hat{u}\|^2 = \lim_{k \rightarrow \infty} \left\{ \|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \right\}. \quad (49)$$

Таким образом, из (36), (49) и теоремы 3 следует, что

$$u_\delta = \hat{u}. \quad (50)$$

Из (32), (33) и (50) следует, что

$$u_\delta(n_k) \xrightarrow{сл} u_\delta \text{ при } k \rightarrow \infty, \quad (51)$$

$$Lu_\delta(n_k) \xrightarrow{сл} Lu_\delta \text{ при } k \rightarrow \infty, \quad (52)$$

а из (51) и (52), что

$$\|u_\delta\| \leq \varliminf_{k \rightarrow \infty} \|u_\delta(n_k)\| \quad (53)$$

и

$$\|Lu_\delta\| \leq \varliminf_{k \rightarrow \infty} \|Lu_\delta(n_k)\|. \quad (54)$$

Из (49), (53) и (54) следует, что

$$\|u_\delta(n_k)\| \rightarrow \|u_\delta\| \text{ при } k \rightarrow \infty \quad (55)$$

и

$$\|Lu_\delta(n_k)\| \rightarrow \|Lu_\delta\| \text{ при } k \rightarrow \infty, \quad (56)$$

а из (51), (52), (55) и (56), что $u_\delta(n_k) \rightarrow u_\delta$, а $Lu_\delta(n_k) \rightarrow Lu_\delta$ или $\|u_\delta(n_k) - u_\delta\| + \|Lu_\delta(n_k) - Lu_\delta\| \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$, что противоречит (26) и доказывает теорему.

Теорема 5. Если f_δ и $\{f_\delta(n)\} \subset \overline{AK} + \bar{S}_{\delta_0}$, $\|f_\delta\| \leq \delta$, а $f_\delta(n) \rightarrow f_\delta$ при $n \rightarrow \infty$, то $\|u_\delta(n)\|^2 + \|Lu_\delta(n)\|^2 \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Доказательство. Как отмечалось ранее, при условии $\|f_\delta\| \leq \delta$ задача (3) имеет единственное решение $u_\delta = \theta$. Рассмотрим два случая.

1-й случай. Пусть $\|f_\delta\| < 0$. Тогда существует номер N такой, что для любого $n \geq N$ имеет место соотношение $\|f_\delta(n)\| < \delta$ а, следовательно, при $n \geq N$ $u_\delta(n) = \theta$ и $\|u_\delta(n)\|^2 + \|Lu_\delta(n)\|^2 = 0$.

2-й случай. Предположим, что $\|f_\delta\| = \delta$. Тогда без ограничения общности можем считать, что

$$\|f_\delta(n)\| > \delta. \quad (57)$$

Из (57) и теорем 1–3 следует, что для любого n существует единственное решение $u_\delta(n) \neq 0$ вариационной задачи (3).

Предположим, что теорема неверна. Тогда существуют число $\varepsilon_0 > 0$ и подпоследовательность $\{n_k\}$ такие, что для любого k

$$\|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \geq \varepsilon_0^2. \quad (58)$$

Так как $f_\delta \in \overline{AK} + \overline{S}_{\delta_0}$, где $\delta_0 < \delta$, то существует элемент $\bar{u} \in D(L) \cap K$ такой, что

$$\|A\bar{u} - f_\delta\| < \delta. \quad (59)$$

Из (59) и того, что $f_\delta(n_k) \rightarrow f_\delta$ при $k \rightarrow \infty$, следует существование номера k_0 такого, что для любого $k \geq k_0$

$$\|f_\delta(n_k) - f_\delta\| < \frac{\delta - \|A\bar{u} - f_\delta\|}{2}. \quad (60)$$

Теперь введем в рассмотрение последовательность $\{\bar{u}_k\}$, определяемую формулой

$$\bar{u}_k = \lambda_k \bar{u}, \quad (61)$$

где для любого $k \geq k_0$ $\lambda_k \in (0; 1)$ и

$$\|A\bar{u}_k - f_\delta\| = \delta - \|f_\delta(n_k) - f_\delta\|. \quad (62)$$

Из (60) следует существование числа λ_k , удовлетворяющего соотношениям (61) и (62), а из (62) следует, что для любого $k \geq k_0$

$$\|A\bar{u}_k - f_\delta(n_k)\| \leq \delta. \quad (63)$$

Из (63) и того, что $\bar{u}_k \in D(L) \cap K$ следует, что для любого $k \geq k_0$

$$\|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \leq \|\bar{u}_k\|^2 + \|L\bar{u}_k\|^2, \quad (64)$$

а из (61), (62) и того, что $f_\delta(n_k) \rightarrow f_\delta$ при $k \rightarrow \infty$, следует, что

$$\lambda_k \rightarrow 0 \text{ при } k \rightarrow \infty. \quad (65)$$

Таким образом, из (65) следует, что

$$\|\bar{u}_k\|^2 + \|L\bar{u}_k\|^2 \rightarrow 0 \text{ при } k \rightarrow \infty, \quad (66)$$

а из (64) и (66), что

$$\|u_\delta(n_k)\|^2 + \|Lu_\delta(n_k)\|^2 \rightarrow 0 \text{ при } k \rightarrow \infty. \quad (67)$$

Соотношение (67) противоречит (58) и доказывает теорему.

Из теорем 4, 5 следует, что оператор P_δ , определяемый формулой (24), непрерывен на множестве $\overline{AK} + \overline{S}_{\delta_0}$,

$$P_\delta \in C[\overline{AK} + \overline{S}_{\delta_0}]. \quad (68)$$

III. Решение одной обратной задачи физики твердого тела. Следуя [2], задача определения энергетического спектра бозе-системы по ее теплоемкости может быть сведена к интегральному уравнению первого рода типа свертки

$$Au = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\tau - \xi)u(\xi)d\xi = f(\tau), \quad -\infty < \tau < +\infty, \quad (69)$$

где $G(\tau) = \frac{e^{-3\tau}}{4\operatorname{sh}^2(e^{-\tau}/2)}$, а u и $f \in L_2(-\infty; +\infty)$.

Предположим, что при $f(\tau) = f_0(\tau)$ существует точное решение $u_0(\xi)$ уравнения (69), которое удовлетворяет следующим условиям:

$$u_0(\xi) \geq 0 \quad (70)$$

и

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u_0(\xi)|^2 d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} |u'_0(\xi)|^2 d\xi \leq r^2, \quad (71)$$

где $u'_0(\xi)$ – производная от функции $u_0(\xi)$, а r – некоторое число.

Предположим, что вместо функции $f_0(\tau)$ нам известны функция $f_\delta(\tau) \in L_2(-\infty, +\infty)$ и $\delta > 0$ такие, что

$$\|f_\delta - f_0\| \leq \delta. \quad (72)$$

Требуется, используя исходную информацию, определить приближенное решение $u_\delta(\xi)$. Введем следующие обозначения:

$$K = \{u(\xi) : u(\xi) \in L_2(-\infty; +\infty), u(\xi) \geq 0 \text{ п.в.}\}$$

и

$$Lu(\xi) = \frac{du(\xi)}{d\xi}, \quad u \text{ и } Lu \in L_2(-\infty; +\infty).$$

Используя для задачи (69)–(72) метод, изложенный в первом пункте настоящей статьи, сведем ее к вариационной задаче

$$\inf \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} u^2(\xi) d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} |u'(\xi)|^2 d\xi : u(\xi) \geq 0, u(\xi) \in W_2^1(-\infty; +\infty), \|Au - f_\delta\| \leq \delta \right\}. \quad (73)$$

Решив задачу (73), мы получим приближенное решение $u_\delta(\xi)$ задачи (69)–(72).

Литература

1. Иванов, В.К. О приближенном решении операторных уравнений первого рода / В.К. Иванов // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1966. – Т. 6, № 6. – С. 1089–1094.
2. Лифшиц, И.М. Об определении энергетического спектра бозе-системы по ее теплоемкости / И.М. Лифшиц // ЖЭТФ. – 1954. – Т. 26. – Вып. 5. – С. 551–556.

Поступила в редакцию 1 декабря 2009 г.

METHOD OF THE INVERSE PROBLEM SOLUTION USING AN ADDITIONAL A PRIORI INFORMATION

There is additional *a priori* information about the exact solution useful for qualitative improvement of the approximate solution in many inverse problems of the mathematical physics. In this article the generalization of the discrepancy method suggested by V.K. Ivanov in the article [1]. The discrepancy method allows using additional *a priori* information.

Keywords: Hilbert space, an operational equation, an improperly posed problem, a discrepancy method.

Grigorieva Olga Vladimirovna – Post-Graduate Student, the South Ural State University.

Григорьева Ольга Владимировна – аспирант, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: zvezdolova@mail.ru

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В КОНСТРУКЦИИ БРОНЕЖИЛЕТА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ БРОНЕЭЛЕМЕНТОВ МОЗАИЧНОЙ КОНСТРУКЦИИ

А.В. Понькин, П.В. Кочнев

Рассматривается возможность создания сборного противопульного металлического бронезлемента в виде мозаики из фрагментов конечного размера, позволяющего реализовать совместную работу бронезлемента и высокопрочного тканевого пакета в составе противопульной защиты бронезлемента. С помощью программного пакета LS-DYNA проведен ряд расчетов, результаты которых позволяют положительно оценить перспективу создания такого бронезлемента.

Ключевые слова: противопульная защита, бронезлемент, мозаичная конструкция, метод конечных элементов.

Введение

Среди используемых в настоящее время в правоохранительных органах и в войсках моделей бронезжилетов наиболее распространены такие, основу конструкции которых, помимо наружного чехла, составляют многослойный тканевый пакет из высокопрочных арамидных нитей и металлический (чаще всего – стальной) бронезэлемент, располагаемый с ударной стороны, толщина которого определяется классом защиты бронезжилета (рис. 1). С тыльной стороны в качестве амортизатора может использоваться дополнительный слой из легкого пористого материала, например пенополиэтилена.

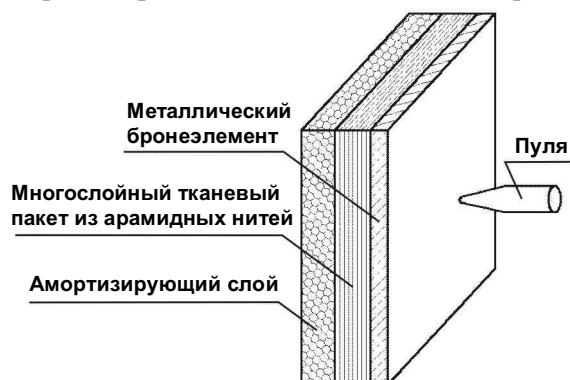


Рис. 1. Конструкция противопульной защиты бронезжилета

Такая конструкция, в частности, имеют бронезжилеты 3, 4 и 5 классов [1], предназначенные для защиты от автоматных и винтовочных пуль. Эта конструкция имеет один существенный недостаток: металлический бронезэлемент и тканевый пакет при ударе пули работают независимо друг от друга. Если прочность бронезлемента достаточна для удержания пули, то тканевый пакет при этом фактически не нужен, так как прогиб в бронезэлементе от удара пули не превышает 2–3 мм (это наблюдается в экспериментах) – тканевый пакет просто не способен при таких малых прогибах оказать существенного сопротивления движению пули. Если же, напротив, металлический бронезэлемент пробивается, то чаще всего расположенный за ним тканевый пакет также пробивается насквозь сердечником пули.

Исходной предпосылкой для проведения данной работы послужило намерение добиться совместной работы металлического бронезлемента и тканевого пакета на всем этапе торможения пули, и, как следствие, снижения веса противопульной защиты.

Совместная работа металлического бронезлемента и тканевого пакета может быть достигнута за счет отделения от бронезлемента при ударе пули фрагмента небольшой массы, двигающегося далее вместе с пулей и останавливаемого тканевым пакетом. Это позволяет получить двойной положительный результат: во-первых, снижение скорости пули за счет увеличения массы движущихся тел и, во-вторых, увеличение площади воздействия на тканевый пакет.

Возможны несколько вариантов решения этой задачи.

– Откол фрагмента с тыльной стороны бронезлемента. Это явление хорошо известно [2, 3] и, в частности, наблюдается в некоторых экспериментах при ударах пуль в стальные бронепласти-

ны. Однако откалывающийся фрагмент имеет небольшую толщину (при исходной толщине бронеластины 5–6 мм толщина отколовшегося фрагмента не превышает 2 мм) и, как правило, ломается сердечником пули. Кроме того, пока не удалось добиться стабильности отколов при каждом попадании пули.

– Откол части бронеэлемента можно реализовать, фрагментировав его с помощью нанесения сетки тонких разрезов, глубина которых меньше толщины пластины. Такое решение представляется достаточно сложным с точки зрения технической реализации.

– Создание сборного бронеэлемента в виде мозаики из фрагментов конечного размера. Подобные конструкции бронеэлементов с керамическими фрагментами сферической и цилиндрической формы известны [4, 5]. При ударе в керамический фрагмент пуля деформируется, частично разрушается и теряет значительную часть своей кинетической энергии, что позволяет расположенному далее тканевому пакету из арамидных нитей эффективно тормозить ее на заключительном участке траектории. Однако при этом разрушается и сам керамический фрагмент, дробясь на многочисленные осколки. Говорить о совместной работе керамического фрагмента и тканевого пакета, по-видимому, можно лишь на начальном участке торможения пули. Кроме того, керамические бронеэлементы имеют существенный разброс свойств и намного дороже металлических. Поэтому представляет интерес создание сборного бронеэлемента из металла. Совместная работа металлического бронеэлемента и ткани будет обеспечена, если составляющие его фрагменты сами не будут пробиваться пулей насквозь, но приходить в движение и двигаться совместно с пулей, воздействуя на тканевый пакет.

Для создания противопульной защиты с металлическим сборным бронеэлементом необходимо решить, как минимум, две задачи.

1. Определить форму и максимальные размеры фрагментов, при которых не происходит их сквозного пробоя при заданных условиях воздействия – это удары автоматных и винтовочных пуль как со свинцовым, так и со стальным термоупрочненным сердечником, движущихся со скоростью от 700 до 900 м/с.

2. Выбрать оптимальный материал для изготовления фрагментов.

Построение расчетной модели

В рамках данной работы на ПЭВМ с помощью пакета метода конечных элементов LS-DYNA проведена расчетная оценка возможности решения этих задач. Рассмотрен вариант сборного бронеэлемента с фрагментами квадратной формы, в качестве пули использован ударник в виде цилиндра (рис. 2). Материал ударника полагался абсолютно упругим и не разрушаемым (MAT ELASTIC) с плотностью 7800 кг/м^3 , модулем упругости при растяжении $2 \times 10^5 \text{ МПа}$ и модулем сдвига $0,8 \times 10^5 \text{ МПа}$. Диаметр ударника приблизительно соответствует калибру пули автомата АК-74 (5,45 мм) и диаметру стального сердечника пули автомата АКМ, длина ударника варьировалась в зависимости от условий решаемой задачи. Конечноэлементная модель ударника создана с помощью восьмиузловых шестигранных элементов SOLID164 с размером грани 0,5 мм.

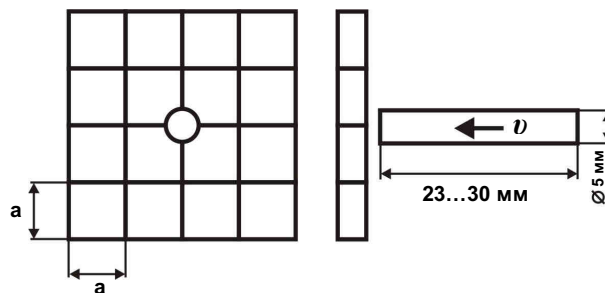


Рис. 2. Сборный бронеэлемент и ударник

Материал бронеэлемента – конструкционная Cr-Ni-Mo-V сталь (служебное обозначение – сталь 44) разработки НИИСтали, г. Москва [6]. Эта сталь используется для изготовления защитных элементов бронежилетов, ее основные физические и механические характеристики представлены в табл. 1.

Таблица 1

Основные характеристики стали 44

Плотность ρ , кг/м ³	Модуль Юнга E , МПа	Модуль сдвига G , МПа	Условный предел текучести $\sigma_{0,2}$, МПа	Предел прочности σ_B , МПа	Относительное остаточное удлинение δ , %	Относительное поперечное сужение ψ , %
7900	$2,16 \times 10^5$	$0,83 \times 10^5$	1700	2200	10	40

Конечноэлементное моделирование бронезлемента также выполнено с помощью элементов SOLID164 с размером грани 0,5 мм, при этом использована модель материала с линейным деформационным упрочнением MAT PLASTIC KINEMATIC (соответствующая диаграмма растяжения представлена на рис. 3). Величина σ_T полагалась равной условному пределу текучести $\sigma_{0,2}$, модуль упрочнения рассчитывался по формуле $E_t = \frac{\sigma_B - \sigma_{0,2}}{\delta}$; разру-

шающая (предельная) деформация $e_{np} = \ln\left(\frac{1}{1-\psi}\right)$. Свой-

ства материала бронезлемента считались не зависящими от скорости нагружения. Критерием разрушения считалось достижение наибольшей главной логарифмической деформацией предельного значения, сама возможность разрушения при расчете учитывалась подключением дополнительной функции MAT ADD EROSION.

Проверка модели материала и определение размеров бронезлемента

Из экспериментов известно, что пластина из стали 44 толщиной 6,5 мм выдерживает попадание под прямым углом пули автомата АКМ со стальным термоупрочненным сердечником (5 класс согласно [1]), и глубина кратера в точке удара не превышает 1/3 от толщины пластины. При этом основное поражающее действие на пластину оказывает сердечник пули. Для проверки адекватности модели материала бронезлемента первоначально проведен расчет воздействия ударника длиной 30 мм и массой 4,6 г на закрепленную по контуру пластину из стали 44, имеющую размеры в плоскости 100×100 мм и толщину 6,5 мм. Скорость ударника в начальный момент времени 715 м/с, что соответствует скорости пули автомата АКМ. Масса ударника имеет промежуточное значение между массой стального сердечника (около 3 г) и полной массой пули (7,9 г). Результат расчета представлен на рис. 4.

Как видно из рисунка, глубина внедрения ударника в пластину составляет приблизительно 50 % ее толщины. Это несколько больше, чем наблюдается в экспериментах, но ошибка расчета идет в запас прочности бронезлемента.

В качестве следующего шага была предпринята попытка уменьшить толщину стальной пластины до 5 мм и подобрать ее размеры в плоскости из условия непробиваемости при воздействии ударником массой 3,5 г (длина ударника 23 мм), с начальной скоростью 900 м/с, что соответствует массе и скорости пули автомата АК-74. Выбор ударника с такими характеристиками обусловлен тем, что в настоящее время именно этот автомат принят на вооружение в большинстве силовых подразделений России. При этом толщина пластины из стали 44, обеспечивающая защиту от этого вида оружия (4 класс согласно [1]), равна 5,5 мм.

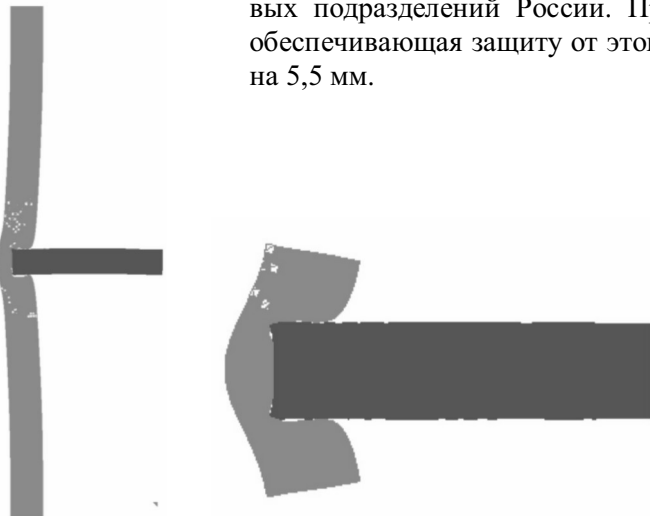


Рис. 4. Максимальное внедрение ударника в бронезлемент

Рис. 5. Максимальное внедрение ударника в пластину размером в плоскости 12×12 мм при начальной скорости ударника 900 м/с

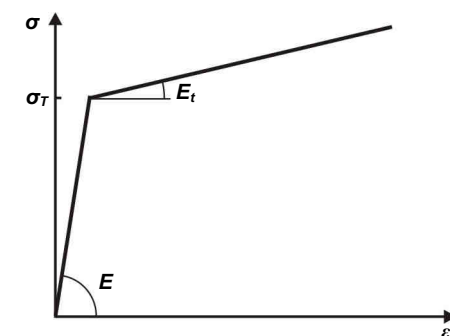


Рис. 3. Расчетная диаграмма деформирования материала бронезлемента

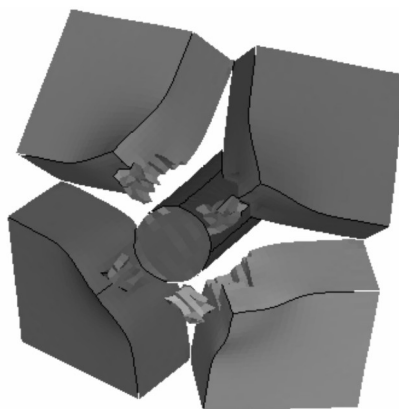


Рис. 6. Удар в угол, образованный четырьмя фрагментами

Проведен ряд расчетов удара под прямым углом в центр свободной от закреплений пластины в форме квадрата со стороной a (см. рис. 2) от 10 до 20 мм. Уверенное непробитие пластины получено при максимальном ее размере в плоскости 12×12 мм (рис. 5). Ударник внедряется в пластину приблизительно на 60 % ее толщины, а скорость их совместного движения в этот момент времени составляет около 340 м/с. Это обнадеживающий результат, однако при создании сборного бронезилов из фрагментов квадратной формы необходимо учитывать возможность попадания пули в стык между двумя фрагментами или, что еще хуже, в угол, образованный четырьмя фрагментами. Результаты соответствующего расчета представлены на рис. 6 (в этом и последующих расчетах все ударяемые фрагменты считались свободными от закреплений). Как видно из рисунка, при таком ударе фрагменты изгибаются и сильно разворачиваются, и ударник достаточно легко проникает за их тыльную поверхность. При этом остаточная скорость ударника 480 м/с, что может привести к сквозному пробою тканевого пакета из арамидных нитей.

Уменьшить изгиб и разворот пластин можно, если существенно увеличить их толщину, однако при этом не должен измениться общий вес бронезилов. Для этого материал бронезилов был заменен на более легкий алюминиевый сплав Д16Т, плотность которого примерно втрое меньше плотности стали. Это позволило увеличить расчетную толщину бронезилов до 14 мм, при этом размеры каждого фрагмента в плоскости бронезилов оставлены 12×12 мм. Основные физические и механические характеристики алюминиевого сплава Д16Т представлены в табл. 2.

Таблица 2

Основные характеристики алюминиевого сплава Д16Т по данным [7]

Плотность ρ , кг/м ³	Модуль Юнга E , МПа	Модуль сдвига G , МПа	Условный предел те- кучести $\sigma_{0,2}$, МПа	Предел прочности σ_B , МПа	Относительное остаточное удлинение δ , %	Относительное поперечное сужение ψ , %
2800	$0,7 \times 10^5$	$0,27 \times 10^5$	400	540	11	50

В расчетах методом конечных элементов для бронезилов из алюминиевого сплава также использована модель материала с линейным деформационным упрочнением (см. рис. 3) с аналогичным критерием разрушения.



Рис. 7. Максимальное внедрение ударника в элемент из алюминиевого сплава Д16Т при начальной скорости ударника 900 м/с

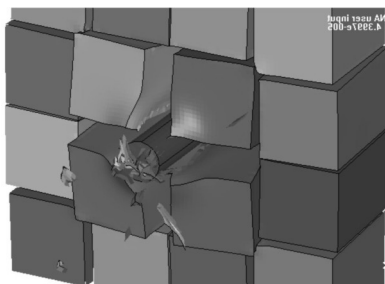


Рис. 8. Удар в угол, образованный четырьмя фрагментами из алюминиевого сплава Д16Т

Результат расчета удара в центр фрагмента из Д16Т представлен на рис. 7. Глубина внедрения ударника составляет около 80 % толщины фрагмента, скорость их совместного движения в этот момент времени равна приблизительно 350 м/с.

Проведен также расчет удара в угол, образованный четырьмя смежными фрагментами (рис. 8). Как видно из рисунка, разворота фрагментов практически не наблюдается, но имеет место их смещение в стороны. Это смещение, по-видимому, будет тем меньше, чем большее количество фрагментов располагается вокруг взаимодействующих с пулей. Кроме того, можно предложить различные варианты крепления фрагментов в бронезилов, препятствующего их боковому смещению. Ударник пробивает бронезилов, и его остаточная скорость составляет около 380 м/с, что на 100 м/с меньше в сравнении с ударом в смежный угол стальных фрагментов (см. рис. 6).

Выводы

Изготовление сборного бронезилов в виде мозаики из фрагментов небольшого размера выглядит принципиально возможным, но перед практической реализацией нужно дополнительно решить следующие задачи.

1. Заменить в расчетах цилиндрический ударник на более точную модель пули с учетом возможности ее разрушения.

2. В качестве материала бронезлемента в расчетах использовать специальные алюминиевые высокопрочные сплавы системы Al–Zn–Mg, например, АБТ-101 (другое обозначение – марка 1901) или АБТ-102 (марка 1903), разработанные в НИИСтали [8]. Эти алюминиевые сплавы применяются для изготовления противопульной и противоснарядной брони.

3. Уточнить форму и размеры фрагментов. Например, замена фрагментов квадратного поперечного сечения на шестигранные позволяет добиться того, что при попадании в сборный бронезлемента пуля может одновременно войти в контакт не более чем с тремя фрагментами (в случае квадратного сечения их может быть четыре). Это уменьшает вовлекаемую в движение массу бронезлемента и, тем самым, снижает вероятность их сквозного пробоя. Той же цели может служить уменьшение размеров фрагментов в плоскости бронезлемента. Эти меры способствуют обеспечению совместного движения пули и фрагментов бронезлемента и, тем самым, повышению эффективности их торможения многослойным тканевым пакетом из высокопрочных арамидных нитей.

Литература

1. ГОСТ Р 50744-95 Бронеодежда. Классификация и общие технические требования. – М.: Издательство стандартов, 1995.
2. Куликов, Д.В. Физическая природа разрушений / Д.В. Куликов, Н.В. Мекалова, М.М. Закиричная; под общ. ред. И.Р. Кузеева. <http://rusnauka.narod.ru/lib/physic/destroy/-glava7.htm> (дата обращения 18.10.2009).
3. Хорев И.Е. Ударно-откольная асимметрия в проблеме высокоскоростного соударения твердых тел // Письма в «Журнал технической физики». – 2005. – Т. 31. – Вып. 4. – С. 71–75. URL: <http://www.ioffe.rssi.ru/journals/pjtf/2005/04/p71-75.pdf> (дата обращения 18.03.2009).
4. Composite armor plates and panel. United States Patent 6289781. URL: <http://www.freepatentsonline.com/6289781.pdf> (дата обращения 11.10.2009).
5. Ballistic armor panel. United States Patent 6892623. URL: <http://www.freepatentsonline.com/6892623.html> (дата обращения 11.10.2009).
6. Броневые стали марки 44 и 56 для средств индивидуальной бронезащиты. Механические свойства. http://www.niistali.ru/pr_secure/material.htm (дата обращения: 23.10.2009).
7. Гуляев А.П. Металловедение / А.П. Гуляев. – М.: Металлургия, 1977. – 648 с.
8. Алюминиевая броня. URL: http://www.niistali.ru/science/legk_bron.htm#1 (дата обращения 26.10.2009).

Поступила в редакцию 31 октября 2009 г.

EVALUATION OF AVAILABILITY OF METAL ARMOUR ELEMENTS OF TESSELLATION CONSTRUCTION IN BULLETPROOF VEST DESIGN

In this paper the possibility of making prefabricated bullet-proof metal armour elements in the form of small tessellation parts which allow to implement joint work of both armour element and high-strength fabric package in the structure of the bullet-proof armour vest was examined. With the help of the finite-element package LS-DYNA a series of calculations were carried out results of which allow to take a favorable view of perspective of making this armour element.

Keywords: bullet-proof, armour element, tessellation construction, finite-element method.

Ponkin Aleksandr Viktorovich – Associate Professor, Cand.Sc.(Engineering), Applied Mechanics, Dynamics and Machine Strength Department, Physics Faculty, South Ural State University.

Понькин Александр Викторович – доцент, кандидат технических наук, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: av_ponkin@74.ru

Konchev Pavel Valentinovich – student, Physics Faculty, Group 687, South Ural State University.

Кочнев Павел Валентинович – студент, физический факультет, группа 687, Южно-Уральский государственный университет.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КРУГА МОРА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПОЛЯРНОЙ ДЕКОМПОЗИЦИИ ПРИ ПЛОСКОМ НАПРЯЖЕННОМ СОСТОЯНИИ

О.С. Садаков, А.О. Щербакова, С.И. Шульженко

Рассмотрена задача разделения несимметричного тензора дисторсии на симметричный (тензор коэффициентов длины) и ортогональный (тензор жесткого поворота) сомножители для случая, когда ортогональный тензор характеризуется одним числом. Рассмотренный случай характеризует плоское деформированное (или напряженное) состояние и является весьма распространенным при решении краевой задачи деформирования твердого тела.

Ключевые слова: круг Мора, тензор дисторсии, тензор жесткого поворота, тензор коэффициентов длины, полярная декомпозиция.

Введение

Для решения краевой задачи деформирования твердого тела в геометрически нелинейной постановке возникает необходимость представить несимметричный тензор (тензор дисторсии) в виде произведения симметричного (тензор коэффициентов длины) и ортогонального (тензор жесткого поворота) сомножителей. Необходимость выделения тензора коэффициентов длины из тензора дисторсии определяется тем, что именно он связан физическим законом с тензором напряжений в данном элементе. Эту задачу обычно называют задачей факторизации и решают с помощью операции извлечения квадратного корня из симметричного тензора, что требует нахождения собственных значений последнего [1–4]. Однако в частном, но весьма типичном случае плоской задачи, когда ортогональный тензор характеризуется одним числом, эта задача может быть существенно упрощена. Ее решение иллюстрирует круг Мора, обобщенный на несимметричные тензоры.

Составляющие дисторсии

При решении задачи о плоском деформировании тензор дисторсии F , определяющий деформирование и поворот волокон в малой окрестности точки тела путем скалярного произведения

$$dr = F \cdot dx \quad (1)$$

(dx – вектор, характеризующий начальное состояние некоторого элементарного волокна, dr – вектор, характеризующий положение того же волокна в деформированном состоянии), представляет сумму четырех диад

$$F = F_{ij}e_i e_j, \quad i, j = 1, 2.$$

Для удобства используем декартову систему координат с правым базисом $\{e_i\}$.

Если тензор F симметричен, то его называют тензором коэффициентов длины и обозначают V или U . Его главные значения представляют суммы

$$1 + \varepsilon_1 \equiv k_1, \quad 1 + \varepsilon_2 \equiv k_2,$$

называемые главными коэффициентами длины (здесь ε_1 и ε_2 – главные деформации). Если тензор F ортогонален, то рассматриваемый элемент объема (точнее, плоскости) не деформируется, а лишь поворачивается как жесткое целое на некоторый угол φ . В этом случае его обозначают R и называют тензором жесткого поворота:

$$R = (e_1 e_1 + e_2 e_2) \cos \varphi + (e_2 e_1 - e_1 e_2) \sin \varphi, \quad (2)$$

φ – угол поворота против часовой стрелки.

В общем случае плоского деформирования тензор дисторсии записывают в виде скалярного произведения $V \cdot R$ или $R \cdot U$ в зависимости от желания представить преобразование (1) в виде поворота элемента площади с последующим деформированием или наоборот – деформирования с последующим поворотом. Тензор R в этих двух случаях одинаков, а тензоры коэффициентов длины отличаются друг от друга и их называют левым (V) или правым (U) тензорами коэффициентов длины.

Круг Мора для дисторсии

Ввиду линейности преобразования (1) при анализе деформации можно исключить из рассмотрения абсолютную длину волокон, отнеся векторы dr и dx к длине последнего (dx):

$$f = F \cdot n, \quad n \equiv \frac{dx}{dx}, \quad f \equiv \frac{dr}{dx}.$$

Вектор n является единичным; он характеризует начальное направление элементарного волокна (рис. 1). Это направление будем определять углом α по отношению к вектору e_1 :

$$n = e_1 \cos \alpha + e_2 \sin \alpha. \quad (3)$$

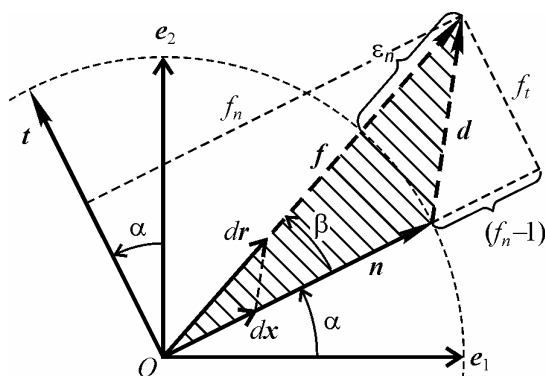


Рис. 1

Деформированное состояние этого волокна (вектор f на рис. 1) можно назвать вектором дисторсии – по аналогии с вектором напряжения (в форме Коши), определяемого скалярным произведением тензора напряжений на нормаль n к площадке.

Разность длин векторов определяет деформацию этого волокна, угол β между ними – поворот волокна. В геометрически линейном подходе (с учетом гипотезы о бесконечной малости деформаций) соответствующую деформацию и поворот волокна n определяет разность векторов $d = f - n$ путем его проецирования на векторы n и ортогональный ему t

$$t = -e_1 \sin \alpha + e_2 \cos \alpha. \quad (4)$$

В нашем случае (строгий, геометрически нелинейный подход) деформация и поворот волокна n определяются выражениями (рис. 1):

$$\varepsilon_n = |f| - 1, \quad \beta = \arctg(f_t / f_n), \quad (5)$$

где

$$f_t = f \cdot t = F \cdot nt, \quad f_n = f \cdot n = F \cdot nn. \quad (6)$$

Из последних выражений, описывающих плоское деформированное состояние, следует закономерность, имеющая прямое отношение к кругу Мора. Проекции f_t и f_n , как следует из выражений (3, 4, 6), представляют следующие функции угла α :

$$f_n = F_{11} \cos^2 \alpha + (F_{12} + F_{21}) \sin \alpha \cos \alpha + F_{22} \sin^2 \alpha, \\ f_t = F_{21} \cos^2 \alpha + (F_{22} - F_{11}) \sin \alpha \cos \alpha - F_{12} \sin^2 \alpha.$$

С учетом того, что $\cos^2 \alpha = (1 + \cos 2\alpha)/2$, $\sin^2 \alpha = (1 - \cos 2\alpha)/2$, а $\sin \alpha \cos \alpha = (\sin 2\alpha)/2$, эти выражения преобразуются к виду:

$$f_n = u_1 - b \cos 2\alpha + a \sin 2\alpha, \\ f_t = u_2 + a \cos 2\alpha + b \sin 2\alpha, \quad (7)$$

где

$$u_1 = \frac{F_{11} + F_{22}}{2}, \quad a = \frac{F_{12} + F_{21}}{2}, \\ u_2 = \frac{F_{21} - F_{12}}{2}, \quad b = \frac{F_{22} - F_{11}}{2}.$$

Покажем, что полученные выражения соответствуют уравнению окружности. Как известно, окружность радиусом r в осях x и y (рис. 2, а), описывается выражениями:

$$x = r \cos \xi, \quad y = r \sin \xi.$$

Если принять

$$\xi = \psi_0 - 2\alpha,$$

где ψ_0 – константа, а угол α характеризует положение волокна n , то с учетом выражений

$$\cos(\psi_0 - 2\alpha) = \cos \psi_0 \cos 2\alpha + \sin \psi_0 \sin 2\alpha, \\ \sin(\psi_0 - 2\alpha) = \sin \psi_0 \cos 2\alpha - \cos \psi_0 \sin 2\alpha$$

получим

$$x = r \cos \psi_0 \cos 2\alpha + r \sin \psi_0 \sin 2\alpha, \quad y = r \sin \psi_0 \cos 2\alpha - r \cos \psi_0 \sin 2\alpha.$$

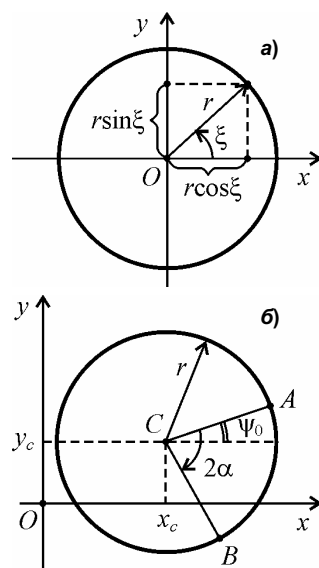


Рис. 2

Эти выражения соответствуют выражениям (7), если сместить центр круга в точку с координатами $x_C = u_1$, $y_C = u_2$ (рис. 2, б) и принять $r \cos \psi_0 = -b$, $r \sin \psi_0 = a$.

Таким образом, множество связанных между собой проекций f_t и f_n отображается на плоскости кругом радиусом r с центром в точке C с координатами f_{nC} , f_{tC} :

$$r = \sqrt{(F_{12} + F_{21})^2 + (F_{11} - F_{22})^2}, \quad f_{nC} = \frac{F_{11} + F_{22}}{2}, \quad f_{tC} = \frac{F_{21} - F_{12}}{2}. \quad (8)$$

Если множество треугольников $\{n, f, d\}$ (рис. 1) для разных углов α повернуть на соответствующие углы α по часовой стрелке в положение $\{n^*, f^*, d^*\}$ и совместить равными сторонами n^* , как показано на рис. 3, то несовпадающие вершины треугольников опишут окружность. Заметим, что если тензор F симметричен, то

$$f_{tc} = \frac{F_{21} - F_{12}}{2} = 0$$

и этот круг представляет привычный круг Мора для произвольно больших деформаций. Отметим также, что при возрастании угла α (при этом вектор n на рис. 1 поворачивается против часовой стрелки) отображающая точка на круге (координаты точки G на рис. 3) смещается по часовой стрелке. Кроме того, если угол между двумя волокнами n равен β , то центральный угол между соответствующими точками круга равен 2β (известное свойство круга Мора).

Факторизация

Изменения волокон dx связаны с деформацией и с дополнительным, общим для всех волокон, жестким поворотом, величина которого – угол φ , отсчитываемый против часовой стрелки, – характеризуется положением центра окружности C (рис. 4). Главным значениям ε_1 и ε_2 (и главным волокнам) отвечают точки A и B , лежащие на луче OC (ось u); значения соответствующих деформаций экстремальны, а поворот не имеет отношения к сдвигам: он связан лишь с жестким поворотом на угол φ всей окрестности. Превышение расстоянием OC единицы (отрезок O_1C) представляет среднюю деформацию ε_0 .

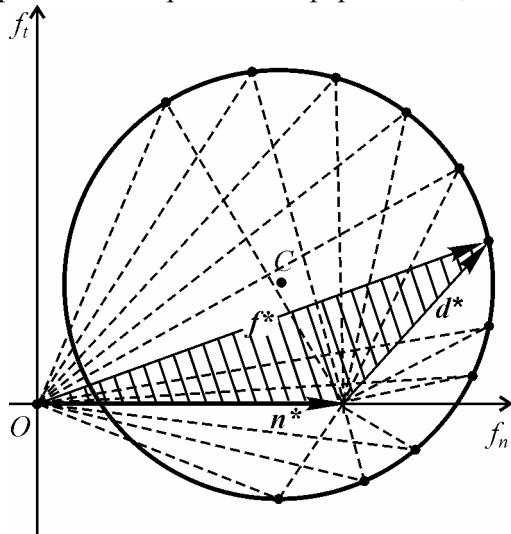


Рис. 3

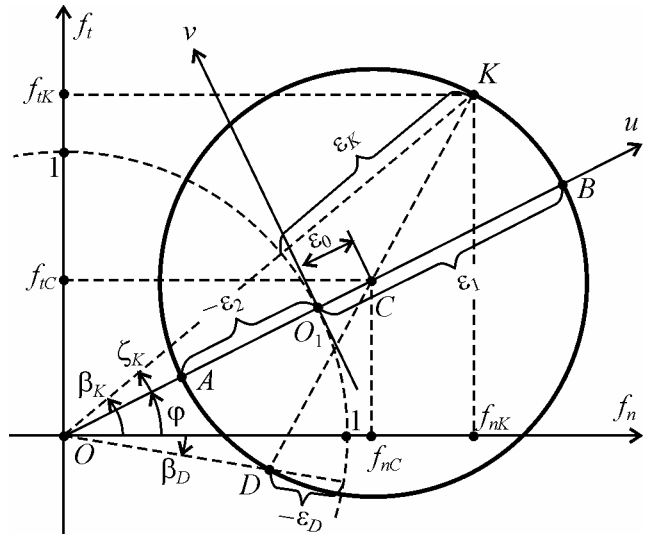


Рис. 4

Точка K на круге соответствует произвольно выбранному волокну; согласно выражению (7) его деформация равна ε_K , а поворот определяется углом $\beta_K = \arctg(f_{tK}/f_{nK})$. Поворот β_K представляет сумму

$$\beta_K = \varphi + \zeta_K,$$

где ζ_K – поворот, обусловленный деформацией. Деформация выражается через координаты u и v следующим образом:

$$\varepsilon_K = (u_K + 1)^2 + v_K^2 - 1.$$

Угол сдвига определяется изменением угла между двумя ортогональными волокнами. Отметим, что на круге центральный угол между точками, которые соответствуют этим волокнам, должен

быть в два раза больше, чем прямой угол между волокнами (свойство круга Мора). Например, угол сдвига пары ортогональных волокон, которые определяются на круге точками K и D , равен

$$\gamma = \beta_K - \beta_D = \operatorname{arctg} \frac{v_K}{1+u_K} - \operatorname{arctg} \frac{v_D}{1+u_D},$$

а максимальная деформация сдвига:

$$\gamma_{\max} = 2 \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + 2}.$$

Координаты центра круга f_{nc} и f_{ic} (8) позволяют определить угол жесткого поворота φ по координатам тензора $\mathbf{F}$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{F_{21} - F_{12}}{F_{11} + F_{22}}. \quad (9)$$

Отметим, что выражение (9) также можно получить, рассмотрев в качестве волокон $\mathbf{n}$ базисные векторы $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$, которым отвечают векторы дисторсии соответственно $\mathbf{f}_1$ (OE_1) и $\mathbf{f}_2$ (OE_2), изображенные на рис. 5. Соответствующие проекции $\{f_n^{(1)}, f_t^{(1)}\}$ и $\{f_n^{(2)}, f_t^{(2)}\}$ векторов дисторсий определяются выражениями:

$$\begin{aligned} f_n^{(1)} &= (\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_1) \cdot \mathbf{e}_1 = F_{11}, & f_t^{(1)} &= (\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_1) \cdot \mathbf{e}_2 = F_{21}, \\ f_n^{(2)} &= (\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_2) \cdot \mathbf{e}_2 = F_{22}, & f_t^{(2)} &= (\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_2) \cdot (-\mathbf{e}_1) = -F_{12}. \end{aligned}$$

В последнем выражении знак «-» появляется вследствие того, что вектор $\mathbf{e}_2$ повернут относительно $\mathbf{e}_1$ на $\pi/2$ против часовой стрелки. Угол между отрезками CE_1 и CE_2 должен быть в два раза больше, чем прямой угол между векторами $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$, то есть он должен быть равен π , следовательно, отрезок E_1E_2 представляет диаметр круга с центром C посередине.

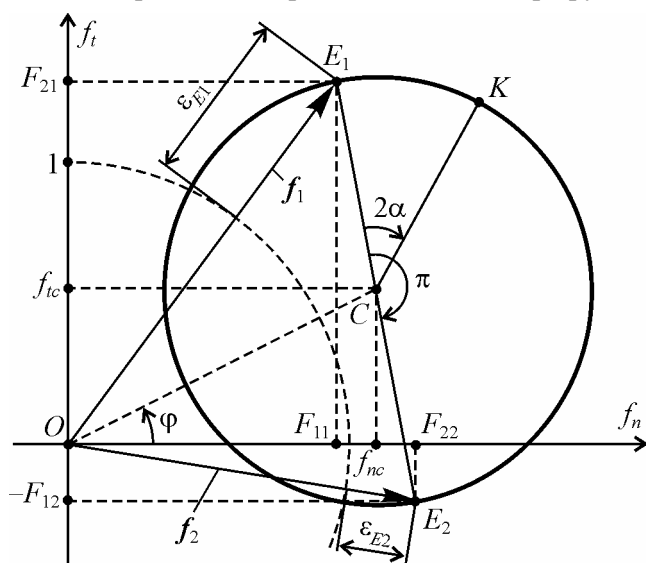


Рис. 5

Это позволяет найти и координаты центра круга и угол жесткого поворота φ . Отметим, что положение волокна, соответствующего точке K на круге (рис. 4, рис. 5), можно определить, повернув базисный вектор $\mathbf{e}_1$ на угол α против часовой стрелки. Зная тангенс угла φ , найдем косинус и синус, входящие в выражение (2):

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi}}, \quad \sin \varphi = \operatorname{tg} \varphi \cos \varphi.$$

Задача факторизации для плоской деформации решается в следующей последовательности: сначала находится тензор $\mathbf{R}$:

$$[\mathbf{R}] = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix},$$

а затем левый ($\mathbf{V}$) или правый ($\mathbf{U}$) тензор коэффициентов длины:

$$\mathbf{V} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}^T, \quad \mathbf{U} = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{F},$$

в этих выражениях учтено свойство ортогонального тензора $\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T$.

Отметим, что рис. 4 (как и рис. 5) отвечает положительным значениям координат тензора дисторсии F_{ij} и углу жесткого поворота φ , разным знакам главных деформаций ε_1 и ε_2 , положительной средней деформации $\varepsilon_0 = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$ и положительному изменению площади элемента. Коэффициент изменения площади фигуры $k_S = k_1 k_2$ (отношение текущей площади к начальной) может быть найден как модуль векторного произведения векторов $\mathbf{f}_1$ и $\mathbf{f}_2$, поскольку начальная площадь равна $|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2|$, то есть единице. Таким образом, с учетом координат точек E_1 и E_2 , указанных на рис. 5,

$$k_S = |\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2| = F_{22} F_{21} - F_{11} F_{12}.$$

Результаты

На рис. 6 показаны различные положения кругов Мора; оси u направлены от начала координат O в сторону соответствующих кругов и проходят через их центры, оси v перпендикулярны u

и касаются единичной окружности, углы φ отложены против часовой стрелки. Главные деформации, соответствующие кругу 1, положительны; на круге 3 – отрицательны; на круге 2 $\varepsilon_1 > 0$, а $\varepsilon_2 < 0$; на круге 4 $\varepsilon_1 > 0$, а $\varepsilon_2 = 0$. Отметим, что все указанные на рис. 6 положения кругов Мора имеют физический смысл.

В случае, когда начало координат $\{f_n; f_t\}$ находится внутри окружности (рис. 7, а), оказывается, что одна из главных деформаций (ε_2) отрицательна и больше единицы; это не имеет физического смысла, так как соответствует выворачиванию рассматриваемого элемента объема наизнанку. Также недопустима ситуация, когда окружность проходит через начало координат (рис. 7, б): одно из волокон сжимается до нулевой длины (точка O), что недопустимо даже для одного волокна: новая площадь обращается в ноль, тензор вырожден (его определитель равен нулю), а это не имеет физического смысла.

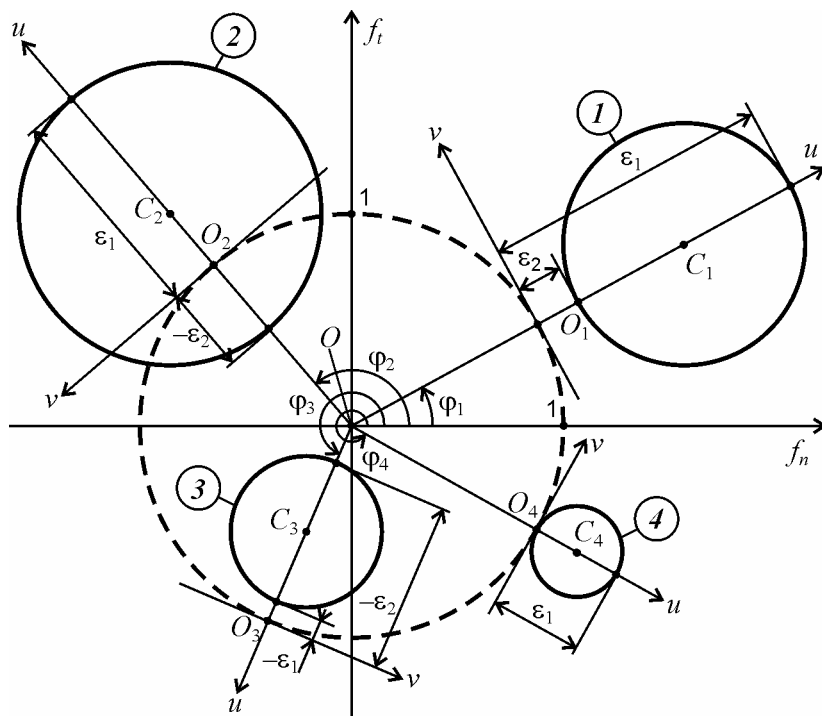


Рис. 6

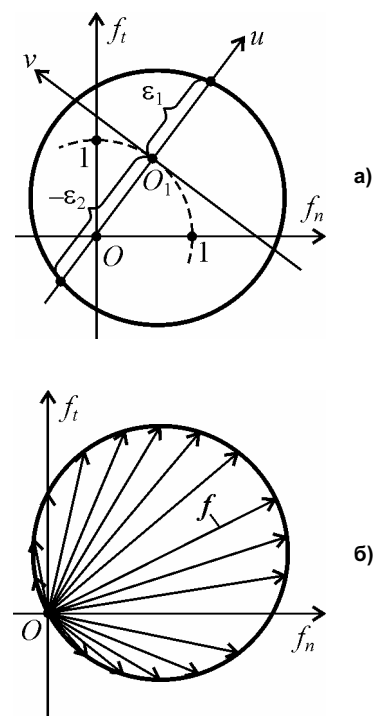


Рис. 7

В случае, когда $F_{11} = F_{22}$, а $F_{12} = -F_{21}$, круг Мора, согласно выражениям (17), превращается в точку (точка A на рис. 8) с координатами $f_{nA} = F_{11}$, $f_{tA} = F_{21}$. При заданной дисторсии сдвиговые деформации отсутствуют, а все линейные деформации (в плоскости) совпадают и являются главными; они равны $\varepsilon^A = k^A - 1$, где $k^A = \sqrt{F_{11}^2 + F_{21}^2}$. Угол поворота φ^A в соответствие с выражением (9) равен $\arctg(F_{21}/F_{11})$. Этот случай соответствует сочетанию равномерного всестороннего растяжения (сжатия) и поворота. Частным случаем выбранного тензора F , может служить ортогональный тензор R (точка D на рис. 8), при этом дисторсия будет определяться только поворотом. Точка B с координатами $f_{nB} = F_{21}/(F_{11}^2 + F_{21}^2)$, $f_{tB} = -F_{11}/(F_{11}^2 + F_{21}^2)$ на рис. 8 соответствует тензору F^{-1} . В этом случае главные деформации $\varepsilon^B = 1/k^A - 1$, а угол поворота $\varphi^B = -\varphi^A$.

Если тензор F симметричен (сплошная линия на рис. 9), тогда центр круга Мора лежит на оси f_n в точке $f_n = (F_{11} + F_{22})/2$ и, следовательно, жесткий поворот отсутствует: $\varphi = 0$, $R = I$ (единичный тензор), а тензоры коэффициентов длины совпадают с тензором дисторсии $U = V = F$. Пунктирной линией на рис. 9 изображен круг Мора для обратного тензора.

Заключение

Полученные результаты позволяют утверждать, что рассмотренные свойства круга Мора для несимметричного тензора в случае двумерной задачи дают возможность найти угол жесткого поворота φ , с помощью которого определяется тензор жесткого поворота. Последний позволяет вычислить симметричный тензор коэффициентов длины.

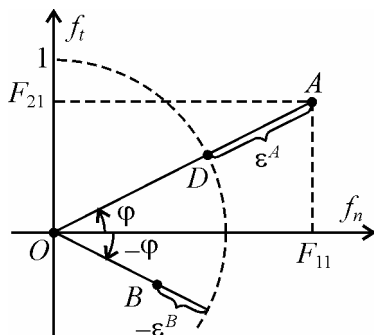


Рис. 8

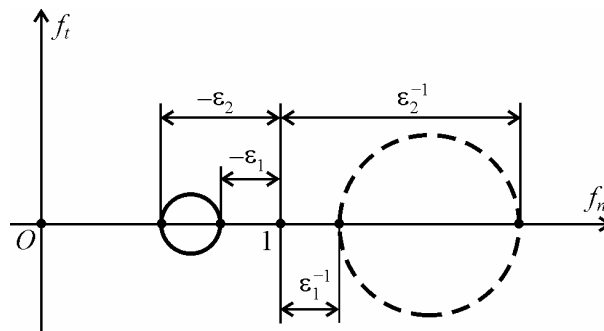


Рис. 9

Литература

1. Садаков, О.С. Использование круга Мора для расшифровки картин муаровых полос в случае больших смещений и деформаций / О.С. Садаков, С.И. Шульженко // Известия Челябинского научного центра. – 2005. – Вып. 4(30). – С. 56–60.
2. Belytschko, T. Nonlinear finite elements for continua and structures / T. Belytschko, W.K. Lin, B. Moran. – New York : John Wiley and sons, 2000.
3. Murph, G.J. C^* – Algebras and operator theory / G.J. Murph. – San Diego: Academic press, 1990.
4. Conway, J.B. A course in functional analysis. Graduate text in mathematics / J.B. Conway. – New York: Springer, 1990.

Поступила в редакцию 22 марта 2010 г.

APPLICATION OF THE MOHR CIRCLES FOR SOLVING THE PROBLEM OF POLAR DECOMPOSITION UNDER PLANE STRESS

The article considers the problem of separation of an asymmetric distortion tensor at the symmetric (stretch tensor) and the orthogonal (rigid body rotation tensor) factors for the case when orthogonal tensor is characterized by one number. This case describes plane strain (or stress) state and is very common when solving boundary problems of deformation of the solid.

Keywords: Mohr circle, deformation gradient, rigid body rotation tensor, stretch tensor, polar decomposition.

Sadakov Oleg Sergeevich – Dr. Sc. (Engineering), Professor of the Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Chair, Physics Department, South Ural State University.

Садаков Олег Сергеевич – доктор технических наук, профессор, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

Scherbakova Alla Olegovna – Cand. Sc. (Engineering), Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Chair, Physics Department, South Ural State University

Щербакowa Алла Олеговна – кандидат технических наук, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: AllaScherbakova@list.ru

Shulzhenko Sergey Ivanovich – Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor of Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Chair, Physics Department, South Ural State University

Шульженко Сергей Иванович – кандидат технических наук, доцент, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ОХЛАЖДЕНИЯ РАСПЛАВА 75 МАС.% Al_2O_3 –25 МАС.% ZrO_2 НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА

В.Е. Гладков, В.М. Березин, Н.Б. Жеханова

Представлены результаты по исследованию закономерностей в формировании макро- и микроструктуры слитков сплавов (75 мас. % Al_2O_3 – 25 мас. % ZrO_2), их фазового состава в зависимости от условий отвода тепла от различных объемов кристаллизующегося расплава. Установлена зависимость структуры, фазового состава и прочности частиц (в составе узкой фракции ($1250 \leq d \leq 1600$) мкм), получаемых при дроблении слитков, от условий отвода тепла при кристаллизации расплава в различных объемах и условиях охлаждения.

Ключевые слова: электрокорунд, кристаллизация, фазовый состав.

Введение

Способы охлаждения расплава в период кристаллизации доэвтектических сплавов Al_2O_3 – ZrO_2 (циркониевый электрокорунд для нужд абразивной промышленности) выступают как своеобразный инструмент, с помощью которого получают форму и размеры слитков, удобных для их переработки на шлифовальное зерно с минимальными энергетическими затратами и материальными потерями. Изменение условий теплоотвода от кристаллизующегося расплава оказывает существенное влияние на формирование структуры и фазового состава сплава. На ряд традиционных вопросов о влиянии условий охлаждения расплава на формирование структуры циркониевого электрокорунда в [1] имеются данные. Результаты исследований по взаимосвязи фазового состава, структуры, прочности и геометрической формы абразивного зерна, получаемого при дроблении слитков, закристаллизованных в различных объемах и условиях охлаждения расплава, недостаточно.

Задача настоящей работы – исследование закономерностей в формировании макро- и микроструктуры слитков сплавов (75 мас. % Al_2O_3 –25 мас. % ZrO_2) и их фазового состава в зависимости от условий отвода тепла от различных объемов кристаллизующегося расплава.

Объекты и методы исследования

Исходными шихтовыми материалами для синтеза сплавов были технической чистоты глинозем (γ - Al_2O_3) и ZrO_2 . Шихту исходного состава 75 мас. % Al_2O_3 –25 мас. % ZrO_2 расплавляли в электродуговой печи, а кристаллизация расплава проходила при следующих условиях охлаждения.

1. В наборной металлической изложнице с изменением объема в пределах $0,25 - 1,25 \times 10^{-4} \text{ м}^3$, что позволяло получать слитки высотой 0,4–0,01 м.

2. В изложнице объемом $0,25 \text{ м}^3$ при низкочастотном вибрировании расплава (50 Гц). Для этого в расплав (по оси изложницы) погружали водоохлаждаемый электромеханический вибратор, в виде стержня на глубину $\leq 0,4 \text{ м}$.

3. В металлической изложнице объемом $0,25 \text{ м}^3$ с загрузкой в сливаемый расплав металлических шаров диаметром 40 мм. В этом случае кристаллизация проходила в объемах ($\leq 10^{-4} \text{ м}^3$), ограниченных шарами.

4. На валках-кристаллизаторах. Этот способ позволяет получать материал в виде пластин, толщина которых зависит от задаваемого зазора между валками. Величину зазора изменяли в пределах 1–5 мм.

Из полученных слитков отбирали образцы для изготовления аншлифов и порошковых препаратов для рентгеноструктурного анализа. При микроскопическом анализе аншлифов определяли размер первичных кристаллов корунда (α - Al_2O_3) и оценивали общий характер структуры кристаллизации в зависимости от условий охлаждения. Фазовый анализ проводили на дифрактомет-

ре ДРОН-2 в CuK_α излучении. После переработки слитков на шлифовальное зерно проводили оценку его геометрической формы и механических свойств (технологическая проба на разрушаемость). Испытанию на разрушаемость подвергали узкую по зерновому составу ($1250 \leq d \leq 1600$ мкм) фракцию зерна. Сущность метода состоит в разрушении зерна в лабораторной шаровой вибромельнице с последующим ситовым анализом. За показатель разрушаемости принимали величину $P, \% = (100 - 100G/M)$, где G – масса остатка шлифовального зерна после испытания и отсева на сите с размером стороны ячейки 1000 мкм; $M = 100$ г – масса исходной навески шлиф-зерна. За величину разрушаемости $P, \%$ принимали её среднеарифметическое значение по результатам трех испытаний.

Обсуждение результатов

Все слитки вне зависимости от условий их кристаллизации характеризуются наличием трех макроскопических зон: 1) мелкокристаллической корочки; 2) зоны столбчатых кристаллов; 3) зоны равноосных (полиэдрических) кристаллов. В зависимости от условий охлаждения и объемов кристаллизующегося расплава объемы зон в слитках изменяются в широких пределах (табл. 1).

Таблица 1

Содержание макроструктурных зон в слитках сплава 75 мас. % Al_2O_3 –25 мас. % ZrO_2 , закристаллизованных при различных условиях охлаждения

Способы охлаждения расплава	Объём структурных зон, %		
	Мелко-кристаллическая корочка	Зона столбчатых кристаллов	Зона равноосных кристаллов
В изложнице $V = 0,25 \text{ м}^3$	≤ 1	30–50	50–70
В наборной изложнице $V = 1,25 \times 10^{-4} \text{ м}^3$	≤ 4	90–95	0–6
В изложнице с шарами	≤ 2	0–10	90–98
На валах кристаллизаторах	20–50	20–70	20–80

Структура мелкокристаллической корочки толщиной 200–400 мкм (рис. 1, а), именуемая [2] как слой замороженных кристаллов, формируется при контакте расплава со стенками изложницы. Микроструктура зоны представлена сростками спутанно-волоконистых кристаллов корунда размером ≤ 5 мкм, не имеющих огранки. В промежутках между ними наблюдаются кристаллы ZrO_2 .

Зона столбчатых кристаллов (рис. 1, б) наиболее сильно выражена при кристаллизации в малых изложницах (см. табл. 1). Она сформирована из кристаллов корунда ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) с размером в поперечном сечении 10–30 мкм (рис. 2, б). Эвтектика и отдельные включения ZrO_2 расположены вдоль направления роста столбчатых кристаллов, которое совпадает с нормалью к охлаждающей поверхности. Объём слитков, закристаллизованных в промежутках между шарами, сравним с таковым, получаемым в малых наборных изложницах. Однако формирование зоны столбчатых кристаллов при данных условиях теплоотвода не типично (рис. 2, б), хотя присутствие отдельных единичных столбчатых кристаллов наблюдали.

При кристаллизации в валах зона столбчатых кристаллов сформирована из отдельных колоний, образованных из 7–30 кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (рис. 2, а) с поперечным размером 4–15 мкм. Колонии разориентированы относительно друг друга и нормали к поверхности валков. Определённого направления наклона по отношению к положению нормали не наблюдали. Протяжённость зоны столбчатых кристаллов (при постоянном зазоре между валками) зависит от скорости вращения валков.

Введение вибратора в кристаллизующийся расплав полностью устраняло формирование зоны столбчатых кристаллов. В этом случае на поверхности вибратора и на стенках изложницы формировались две плотные корки, растущие навстречу друг другу. Расплав, разделяющий эти два фронта кристаллизации, оказывался как бы вспененным. Закристаллизованный материал характеризуется значительной усадочной пористостью. Поры округлые размером до 5 мм равномерно распределены по сечению слитка. Участков эвтектической структуры, в привычном её представлении, при исследовании аншлифов данных сплавов не наблюдали. Значительную долю

объёма сплава занимают первичные кристаллы корунда, а остальной объём приходится на долю вырожденной эвтектики (грубого конгломерата фаз).

Зона равноосных (полиэдрических) кристаллов (рис. 1, в) сформирована беспорядочно ориентированными первичными кристаллами корунда и эвтектическими колониями, размеры которых соизмеримы. С увеличением объёма слитка и удалением от охлаждающих поверхностей размеры кристаллов корунда и эвтектических колоний возрастают (табл. 2).

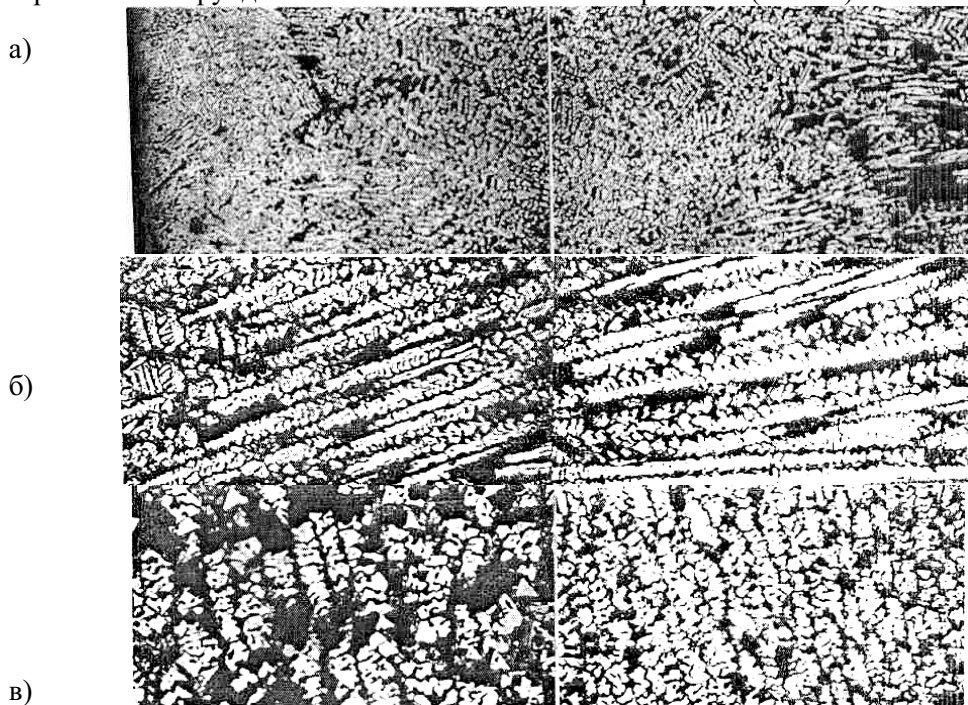


Рис. 1. Структура макроскопических зон слитка при кристаллизации расплава в изложнице объемом 0,25 м³. Фрагменты: а) мелкокристаллическая корочка; б) зона столбчатых кристаллов; в) зона равноосных (полиэдрических) кристаллов. Травление HF, напыление Ag. Увеличение $\times 100$

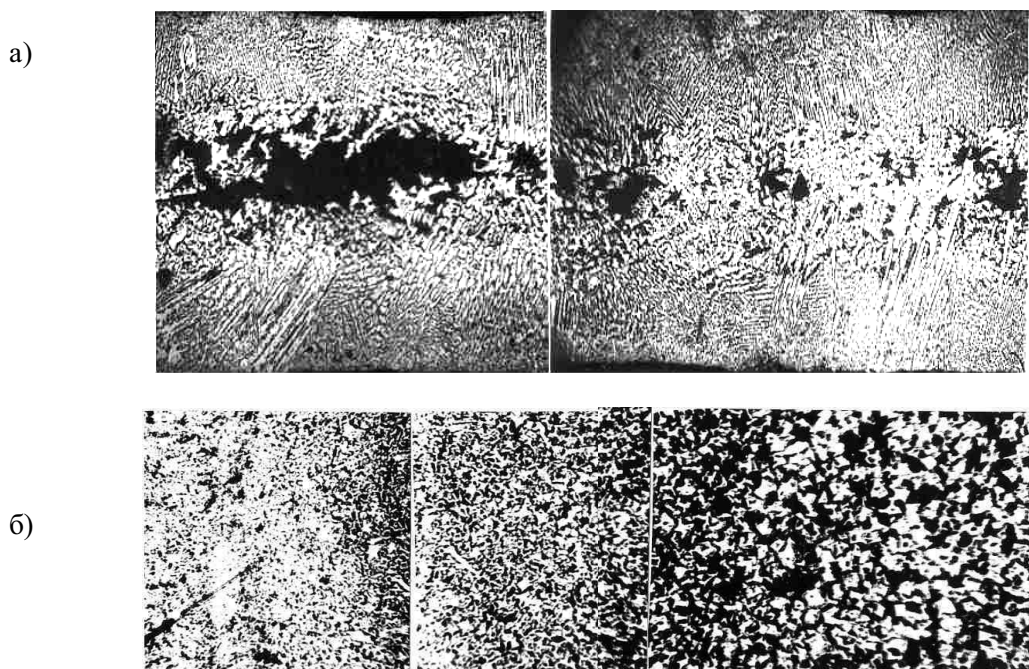


Рис. 2. Структура сплавов: а) пластины, закристаллизованной в вальках-кристаллизаторах; б) слитка в изложнице с шарами. Увеличение $\times 100$

Количественное соотношение между объёмами зон столбчатых и равноосных кристаллов, зависящее от условий отвода тепла от кристаллизующегося расплава (см. табл. 1), определяет структуру поверхности изломов слитков (рис. 3) и существенно сказывается на геометрической

форме частиц абразивного зерна, получаемых при дроблении слитков. С увеличением объёма зоны столбчатых кристаллов (рис. 3, б, в) в составе продуктов дробления пропорционально возрастает доля частиц в виде пластин, игл и других форм, далеких от изометричной.

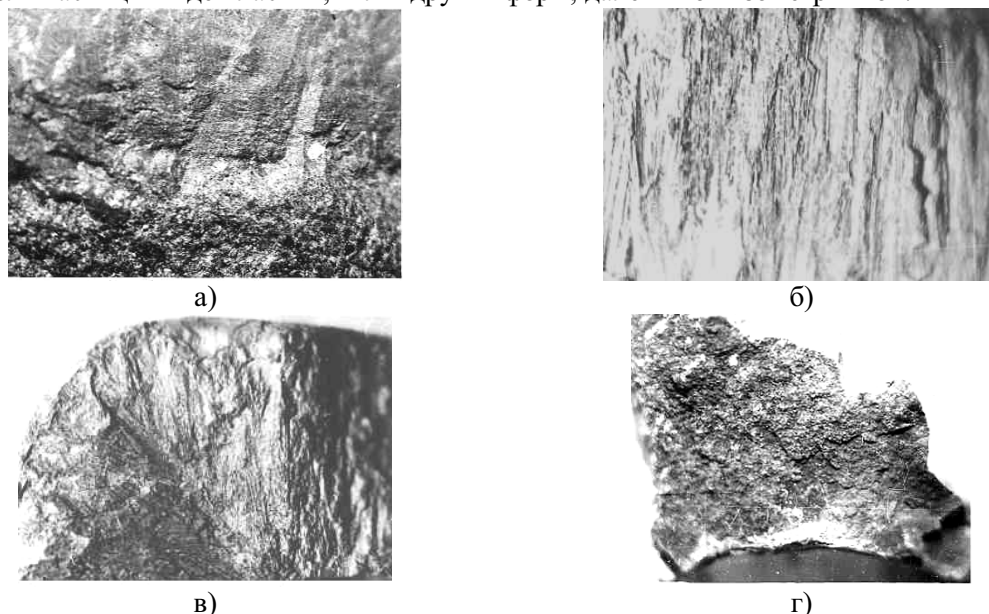


Рис. 3. Морфология поверхности изломов слитков, полученных при различных условиях кристаллизации расплава: а) в изложнице $V = 0,25 \text{ м}^3$; б, в) в изложнице $1,25 \times 10^{-4} \text{ м}^3$; г) в изложнице между шарами

Таблица 2

Влияние условий охлаждения расплава на размер первичных кристаллов корунда, содержание ($\beta\text{-ZrO}_2$) в составе сплавов и разрушаемость абразивного зерна

Условия охлаждения расплава	Размер кристаллов корунда, мкм	Содержание ($\beta\text{-ZrO}_2$), мас. %	Показатель разрушаемости*
В центре изложницы $V = 0,25 \text{ м}^3$	100–250	Нет	1
У стенки изложницы $V = 0,25 \text{ м}^3$	10–60	≤ 10	0,82
В центре изложницы $V = 1,25 \times 10^{-4} \text{ м}^3$	40–60	Нет	0,9
В изложнице с шарами	40–60	25–30	0,63
В изложнице с вибратором	40–60	10–20	0,75
В валах-кристаллизаторах	20–40	10–20	0

*Показатель разрушаемости абразивного зерна, полученного при дроблении материала из центра слитка $V = 0,25 \text{ м}^3$, нормирован на единицу; для других материалов он представлен в долях от единицы.

Фазовый состав диоксида циркония в структуре сплавов зависит от условий охлаждения расплава (см. табл. 2). В зонах слитков, закристаллизованных при контакте с охлаждающими металлическими поверхностями (в наборных изложницах), диоксид циркония обнаруживали в виде двух модификаций: низкотемпературной моноклинной ($\alpha\text{-ZrO}_2$) и высокотемпературной модификации ($\beta\text{-ZrO}_2$), индицируемой в ромбической либо тетрагональной сингонии. При кристаллизации в валах и в изложнице с шарами модификацию ($\beta\text{-ZrO}_2$) обнаруживали во всём объёме материала. Данный факт является необычным. Основное влияние принятых условий охлаждения расплава должно вызывать существенное воздействие только на период кристаллизации, проходящей при температуре $\sim 2000 \text{ К}$, тогда как полиморфное превращение ($\beta\text{-ZrO}_2 \Rightarrow \alpha\text{-ZrO}_2$) развивается в температурном интервале $1480\text{--}1000 \text{ К}$, а согласно [4] высокотемпературную модификацию ($\beta\text{-ZrO}_2$) нельзя сохранить в процессе закалки.

Следует отметить, что обсуждаемые выше экспериментальные результаты получены в производственных технологических процессах. В них отсутствует контроль нестехиометрии оксидных расплавов, поэтому этот очевидный вопрос в статье не обсуждается. Влияние нестехиометрии на фазовый состав циркониевого электрокорунда рассмотрено в работе [5].

Закключение и выводы

Анализ шлифовального зерна, полученного из слитков, закристаллизованных в различных условиях, показал, что геометрическая форма частиц в продуктах дробления существенно зависит от соотношения объемов, занимаемых зонами столбчатых и равноосных кристаллов. С увеличением объема зоны столбчатых кристаллов в составе продуктов дробления ($1250 \leq d \leq 2500$) мкм пропорционально возрастает доля зерен с неизометричной формой.

Показатель разрушаемости шлифовального зерна (см. табл. 2) более чувствителен к изменению содержания высокотемпературной модификации $\beta\text{-ZrO}_2$, чем к изменению дисперсности структурных составляющих сплава.

При изменении среднего размера первичных кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ в пределах 170–50 мкм показатель разрушаемости уменьшается на $\leq 10\%$ (см. табл. 2). Однако при сравнимом среднем размере первичных кристаллов ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3 \leq 50$ мкм), но различном содержании $\beta\text{-ZrO}_2$ показатель разрушаемости отличается на $\leq 30\%$. Рост показателя разрушаемости (табл. 2) при уменьшении высокотемпературной модификации диоксида циркония в структуре сплавов может быть связан с влиянием объемных изменений ($\leq 7\%$) при полиморфном превращении $\beta\text{-ZrO}_2 \Rightarrow \alpha\text{-ZrO}_2$ в процессе охлаждения. Возможные причины сохранения $\beta\text{-ZrO}_2$ в структуре сплавов могут быть связаны со значительными отклонениями от стехиометрического состава, с дисперсностью кристалликов и препятствиями для объемных изменений в процессе перехода $\beta\text{-ZrO}_2 \Rightarrow \alpha\text{-ZrO}_2$ в эвтектике при охлаждении сплавов.

Литература

1. Гаршин, А.П. Абразивные материалы / А.П. Гаршин, Ю.В. Гропянов, Ю.В. Лагунов. – Л.: Машиностроение, 1983. – 231 с.
2. Баландин, Г.Ф. Формирование кристаллического строения отливок. Кристаллизация в литейной форме / Г.Ф. Баландин. – 2-е изд., допол. и перераб. – М.: Машиностроение, 1973. – 283 с.
3. Gevalds, G. Das Zustandsdiagramm $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ und die Bestimmung einer neuer Hochtemperaturphase $\varepsilon\text{-Al}_2\text{O}_3$ / G. Gevalds // Ber. Dtsch. keram Ges. – 1968. – V. 45, № 5. – С. 1413–1417.
4. Сухаревский, Б.Я. Влияние дефектов структуры на фазовые переходы в оксидах / Б.Я. Сухаревский, А.М. Гавриш // в кн.: Физическая химия оксидов металлов. – М.: Наука, 1981. – С. 156–164.
5. Попова Т.В. Физико-химические особенности фазовых переходов в циркониевом электрокорунде: автореферат дис. ... канд. техн. наук / Т.В. Попова. – Челябинск, 1994. – 19 с.

Поступила в редакцию 6 марта 2009 г.

INFLUENCE OF CONDITIONS OF MELT COOLING UPON STRUCTURE FORMATION AND PHASE COMPOSITION IN INGOTS OF $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ ALLOYS

The article presents the results of research of regularities in macro- and microstructure formation of ingots of alloys (75 mass % Al_2O_3 –25 mass % ZrO_2) and their phase composition depending on the conditions of heat removal from different volumes of crystallizing melts. The dependence of structure, phase composition and strength of particles (as part of close-cut fraction ($1250 \leq d \leq 1600$) micrometer) obtained while grinding the ingots upon the conditions of heat removal while crystallizing the melt in different volumes and conditions of cooling.

Keywords: crystallization, electrocorundum, phase composition.

Gladkov Vladimir Evgenievich – Candidate of Science (Chemistry), associate professor, Instrument Production Technique department, South Ural State University.

Гладков Владимир Евгеньевич – доцент, кандидат химических наук, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

Berezin Vladimir Mikhailovich – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Instrument Production Technique department, South Ural State University.

Березин Владимир Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: bvm@susu.ac.ru

Zhekhanova Natalia Borisovna – pensioner.

Жеханова Наталья Борисовна – в настоящее время на пенсии.

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА МАГНИТОЭКСИТОНОВ В НАНОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Ю.Ф. Головнев, А.Б. Лаковцев

Исследуются наноразмерные гетеросистемы на основе ферромагнитных полупроводников. В них рассматривается возможность получения конденсированного состояния из нижайших по энергии триплетных экситонов. Рассчитаны основные параметры, при которых возможна экситонная бозе-конденсация (БК).

Ключевые слова: экситон, бозе-конденсация, энергия связи, время жизни.

Большинство современных как экспериментальных, так и теоретических работ в области низкоразмерных наноструктур связаны с изучением гетеросистем на основе арсенида галлия. В последнее время исследователи обратились к изучению сверхрешеток, включающих ферромагнитные полупроводники. В продолжение этих работ нами изучались наноразмерные гетеросистемы типа ферромагнитный–парамагнитный полупроводники, в частности EuS/SmS, EuS/PbS, которые удовлетворяют всем требованиям при моделировании сверхрешеток по Кремеру и Алферову [1–3]. Для таких наносистем уже проведен анализ минизонной структуры, транспортных свойств с учетом спиновой поляризации носителей тока и предприняты первые попытки оценить условия образования в них экситонов высокой плотности [4–6].

Коллективные свойства экситонов интенсивно изучаются с момента предположения о возможности их бозе-конденсации (БК) и сверхтекучести [7, 8]. Особый интерес представляет изучение конденсации экситонов в низкоразмерных полупроводниковых гетеросистемах [9–11]. Получению БК в экситонной системе благоприятствуют малая масса частиц, а, следовательно, сравнительно высокие температуры перехода, возможность изменять плотность экситонного газа, наличие собственной экситонной люминесценции, анализ спектра которой позволяет отслеживать распределение квазичастиц по энергии, а также фиксировать сам факт БК. И, наконец, для реализации конденсированной фазы, экситоны должны обладать большой энергией связи, силой осциллятора и временем жизни [6].

Если для получения БК использовать только одиночные квантовые ямы, то исследователь сталкивается с тем, что время жизни экситонов в них мало (порядка 50 нс при температуре 350 мК) [12] и недостаточно для охлаждения газа экситонов до критической температуры. Далее, для увеличения времени жизни экситонов необходимо использовать гетеросистемы, в которых электроны и дырки находятся в разных квантовых ямах, т.е. разделены барьером и образуют пространственно непрямой триплетный экситон, и перекрытие волновых функций электрона и дырки экспоненциально уменьшается с увеличением расстояния между ними. Это приводит к значительному увеличению времени жизни экситона. В работе [8] было обнаружено, что время жизни таких экситонов может на несколько порядков возрастать по сравнению с временем жизни экситонов в одиночной квантовой яме.

Критическая температура T_{BC} , при которой зарождается БК, зависит от плотности экситонного газа n и эффективной массы m^* частиц его составляющих [10]:

$$T_{BC} \sim \frac{\hbar^2}{m^*} n^{2/3}, \quad (1)$$

где $\hbar$ – постоянная Планка. Очевидно, что наблюдать БК при высоких температурах (близких к комнатным) можно только в системах, состоящих из легких бозонов, эффективная масса которых сравнима с массой свободного электрона – экситонов Ванье–Мотта или поляритонов. С этой точки зрения наиболее перспективными являются наноструктуры на основе ферромагнитных полупроводников типа EuO, EuS, SmS.

В сверхрешетках из ферромагнитного (EuS) и парамагнитного (PbS) полупроводников создаются стабильные экситонные состояния с высокой энергией связи и силой осциллятора. В таких гетероструктурах электроны и дырки могут локализовываться в различных «закрытых» [9]

квантовых ямах, образованных $4f^7$ -уровнями в запрещенных зонах барьерных слоев халькогенида европия.

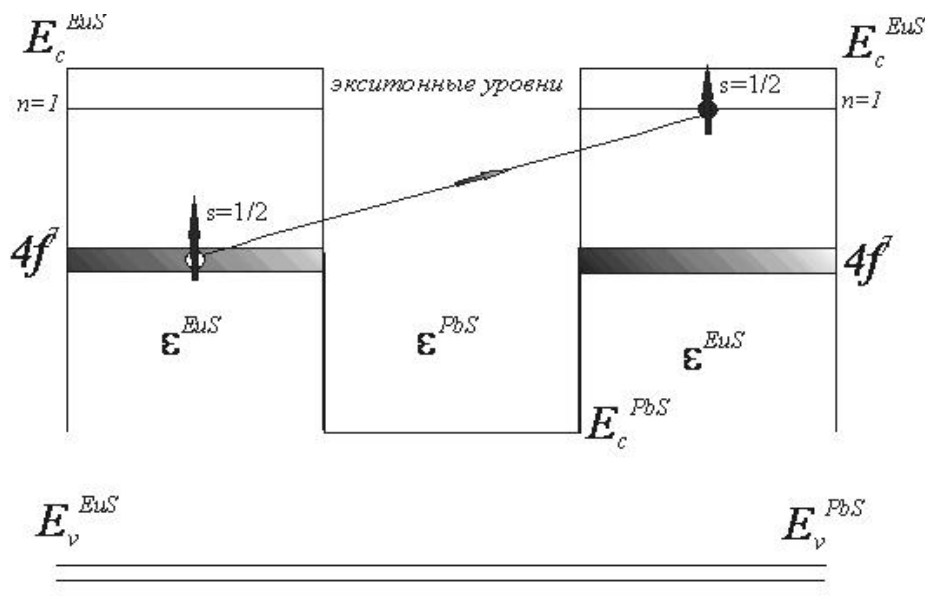


Рис. 1. Образование межъямного триплетного магнитного экситона в нанослоях моносulfида европия

Они связываются в не прямые триплетные экситоны (рис. 1) с большим временем жизни вследствие слабого перекрытия волновых функций. Причиной этого является парамагнитный слой, разделяющий квантовые ямы [13–15]. Дипольный момент межъямных экситонов в основном состоянии препятствует связыванию их в молекулы. Такие экситоны накапливаются и охлаждаются до температур, при которых возможна БК. Для нанослоев из халькогенида европия эти температуры оказываются не ниже 16 К.

В наших исследованиях в гетероструктуре EuS/PbS/EuS изучалась система взаимодействующих между собой частиц (экситонов), создаваемых внешней накачкой. Если выполняется условие $\partial n / \partial t = 0$, т.е. скорость генерации частиц не зависит от времени, то в системе устанавливается стационарное состояние, при котором число возникающих и диссоциирующих частиц находится в динамическом равновесии. Хотя само стационарное состояние может изменяться из-за конечности времени жизни этих квазичастиц.

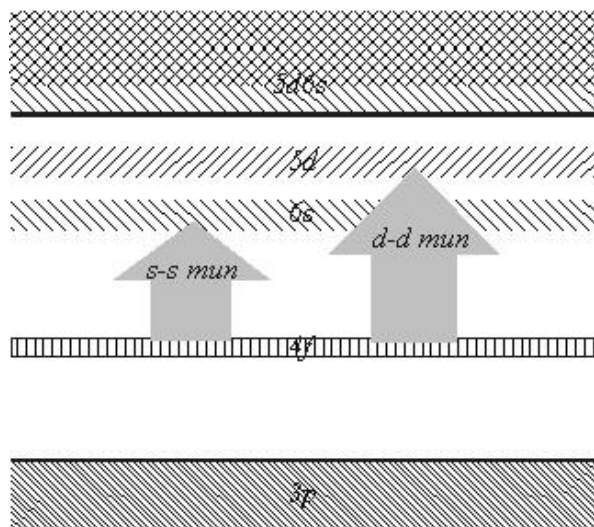


Рис. 2. Схема энергетических уровней моносulfида европия в соответствии с моделью магнитного экситона

Тяжелая дырка магнитного экситона находится в узкой $4f$ -зоне сульфида европия, поэтому такое возбуждение является статическим образованием. Оптически активный электрон $d-d$ типа (рис. 2) обладает тем же типом симметрии, что и дырка (7P), и локализуется в точке X_3 . Энергия магнитного экситона включает в себя энергию $d-f$ -обменного взаимодействия:

$$H = -2 \sum_n J_{in}^d \sigma_i S_n, \quad (2)$$

где σ_i и S_n – спиновые операторы электрона магнитного экситона и $4f$ -атомов Eu в n -м узле, J_{in}^d – константа обменного взаимодействия.

Собственные значения энергии системы для гамильтониана (2) можно получить, используя соответствующий базис волновых функций [16]:

$$\langle \Psi^{S_c, S_c+1}, + | 2\sigma S_c | \Psi^{S_c, S_c+1}, + \rangle = S_c, \quad (3)$$

$$\langle \Psi^{S_c, S_c+1}, - | 2\sigma S_c | \Psi^{S_c, S_c+1}, - \rangle = -(S_c + 1), \quad (4)$$

$$\langle \Psi^{S_u, S_u+1}, + | 2\sigma S_u | \Psi^{S_u, S_u+1}, + \rangle = S_u, \quad (5)$$

$$\langle \Psi^{S_u, S_u+1}, - | 2\sigma S_u | \Psi^{S_u, S_u+1}, - \rangle = -(S_u + 1), \quad (6)$$

где $S_c = 7/2$ – спин центрального иона европия, $S_u = 42$ – сумма спинов ближайших двенадцати соседей. Тогда собственные значения энергий для состояний (3)–(6) составит:

$$E | \Psi^{S_c, S_c+1}, + \rangle = -7/2 J_0 - 42 J_1, \quad (7)$$

$$E | \Psi^{S_c, S_c+1}, - \rangle = -7/2 J_0 + 43 J_1, \quad (8)$$

$$E | \Psi^{S_u, S_u+1}, + \rangle = 9/2 J_0 - 42 J_1, \quad (9)$$

$$E | \Psi^{S_u, S_u+1}, - \rangle = 9/2 J_0 + 43 J_1. \quad (10)$$

Величину обменного интеграла (при поглощении) можно определить как

$$I_{df} = \sum_n J_{in}^d = 57,161 \text{ мЭВ},$$

где $\sum_n$ – сумма по ближайшим соседям.

Величина обменного интеграла, полученная при анализе спектра испускания, оказалась равной 97,582 мЭВ. Различие в значениях можно объяснить, если учесть, что при образовании экситона его электрон воздействует на ближайшее окружение центрального иона, поэтому процесс рекомбинации происходит в условиях искаженной решетки. В итоге, к моменту аннигиляции волновая функция электрона простирается на большее расстояние, чем в момент рождения.

Энергия связи экситона, т.е. разность между максимальным и минимальным значениями энергий, оказалась равной $\Delta E = 0,4$ эВ.

Излучательное время жизни экситонов с образованием фотона можно оценить исходя из процесса одноэкситонной рекомбинации [11]:

$$\tau_{phot} = \frac{\pi c}{L^2 k_0^2}, \quad (11)$$

где L – эффективная константа взаимодействия.

При диссоциации экситонов с участием фононов время их жизни равно [17]:

$$\tau_{phon} = \frac{(2\pi\hbar)^{3/2} e^{\frac{E}{kT}}}{\sqrt{3}(kT)^2 \mu \sigma}, \quad (12)$$

где E – энергия связи экситона, $\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$ – приведенная масса экситона, σ – эффективное сечение взаимодействия с фононом.

Как видно из расчетов для сульфида европия (рис. 3), в области гелиевых температур наблюдается значительный рост времени жизни, вплоть до $\tau_{phon} = 10$ с (в районе абсолютного нуля). Энергия связи триплетных экситонов, определяемая полным спектром, т.е. с учетом зееманского расщепления, оказалась равной 0,6 эВ.

С повышением температуры наблюдается заметное уменьшение времени жизни. По-видимому, это связано с тем, что расчетная формула (12) не позволяет оценить его для высоких температур. Следует заметить для сравнения, что экспериментальное измерение времени жизни экситонов в Cu_2O оказалось значительно ниже: $\tau_{phot} \approx \tau_{phon} \approx 10^{-5}$ с.

Аналогично, можно предположить, что τ_{phot} для халькогенида европия также будет на несколько порядков превышать соответствующее значение в Cu_2O . Причиной этого является, прежде всего, гигантское значение силы осциллятора экситонного перехода в ферромагнитных полупроводниках [18]:

$$f_{mn} = \frac{2m(E_m - E_n)}{\hbar^2} \left| \langle \psi_m^* | U_{mn} | \psi_n \rangle \right|^2, \quad (13)$$

где ψ_n^* и ψ_m – волновые функции исходного и конечного состояний, которые подбирались авторами работы [19] в виде:

$$\Psi_n = c_1 \phi_1 \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} + c_2 \phi_2 \begin{vmatrix} \phi_1 \\ 0 \\ -\phi_1 \\ 0 \end{vmatrix} + c_3 \phi_3 \begin{vmatrix} 0 \\ (i/\sqrt{3})(\varepsilon_2 + i\varepsilon_1) \\ i\varepsilon_3/\sqrt{3} \\ 0 \end{vmatrix} + c_4 \phi_4 \begin{vmatrix} 0 \\ (2/\sqrt{15})(\varepsilon_1 - i\varepsilon_2) \\ (1/\sqrt{15})i\varepsilon_3 \\ -(1/\sqrt{5})(\varepsilon_1 - i\varepsilon_2) \end{vmatrix},$$

$$\Psi_m = c_1 \phi_1 \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} + c_2 \phi_2 \begin{vmatrix} 0 \\ -\phi_1 \\ 0 \\ -\phi_2 \end{vmatrix} + c_3 \phi_3 \begin{vmatrix} -(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2)/\sqrt{3} \\ 0 \\ 0 \\ i\varepsilon_3/\sqrt{3} \end{vmatrix} + c_4 \phi_4 \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ -(1/\sqrt{5})(\varepsilon_1 - i\varepsilon_2) \\ -i(\sqrt{3/5})\varepsilon_3 \end{vmatrix}.$$

где $\varepsilon_1 = yz$, $\varepsilon_2 = xz$, $\varepsilon_3 = xy$ – базисные функции представления Γ'_{25} , либо $\varepsilon_1 = z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$,

$\varepsilon_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}(x^2 - y^2)$ – базисные функции представления Γ_{12} , $\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r/r_1} r_1^{-3/2}$,

$$\phi_2 = \frac{1}{3\sqrt{\pi}} e^{-r/r_2} r_2^{-7/2}, \quad \phi_3 = \sqrt{\frac{2}{3\pi}} e^{-r/r_2} r_2^{-7/2},$$

$$\phi_4 = \sqrt{\frac{2}{3\pi}} e^{-r/r_3} r_3^{-7/2}, \quad c_1, c_2, c_3, c_4 – \text{константы,}$$

удовлетворяющие условию нормировки

$$\sum_{i=1}^4 c_i^2 = 1.$$

Действительно, из численных расчетов для разрешенного перехода $\Gamma'_{25} \rightarrow \Gamma_{12}$ было получено значение силы осциллятора $f \sim 0,02$, что на четыре порядка выше, чем для Cu_2O .

Тот же результат можно получить, проведя вычисления силы осциллятора, используя полуэмпирическую формулу [20]:

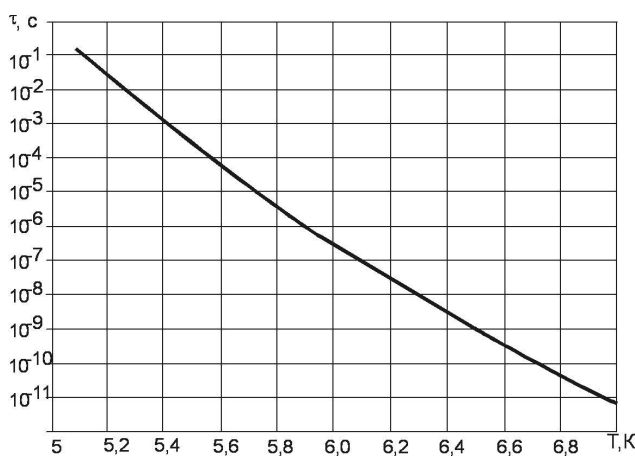


Рис. 3. Время жизни экситонов в зависимости от температуры

$$f = mc(\pi e^2 N)^{-1} \int \alpha dv ,$$

где N – концентрация ионов; α – коэффициент поглощения; ν – частота света.

Результаты расчетов позволяют сделать следующие выводы:

– процесс БК должен быть обнаружен в интервале экситонных плотностей от 10^9 см^{-2} до 10^{12} см^{-2} при температуре не выше 16 К;

– в области гелиевых температур время жизни экситонов в ферромагнитных полупроводниках достигает 10 с;

– экситонным комплексам в ферромагнитных полупроводниках (связь их с магнонами) соответствует гигантская сила осциллятора.

На их основе можно предложить следующую фазовую диаграмму конденсации межъямных экситонов в сульфиде европия (рис. 4).

Все это дает возможность заключить, что гетероструктуры на основе ферромагнитных полупроводников с гигантской силой осциллятора экситонного перехода оказываются наиболее перспективными с точки зрения возможности получения в них БК.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 08-01-00790-а.

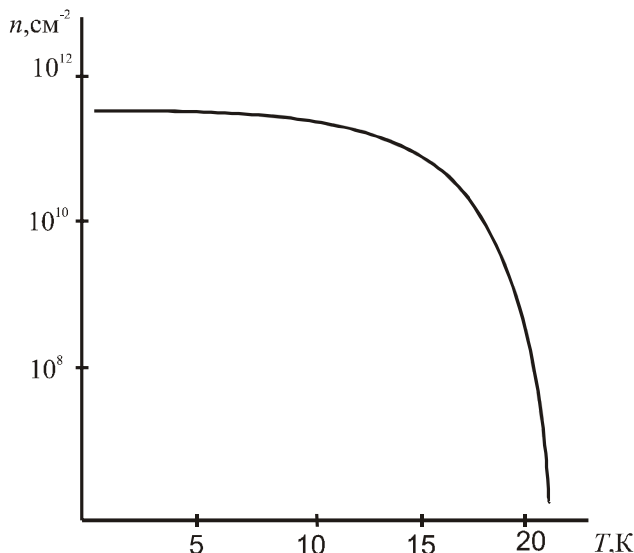


Рис. 4. Фазовая диаграмма конденсации экситонов

Литература

1. Алферов, Ж.И. Двойные гетероструктуры: концепция и применения в физике, электронике и технологии / Ж.И. Алферов // УФН. – 2002. – Т. 172, № 9. – С. 1068–1086.
2. Кремер, Г. Квазиэлектрическое поле и разрывы зон / Г. Кремер // УФН. – 2002. – Т. 172, № 9. – С. 1087–1101.
3. Головнев, Ю.Ф. Расчет зонной структуры в приближении огибающей функции для сверхрешеток из магнитных полупроводников / Ю.Ф. Головнев, А.В. Парамонов // Тез. док. Всероссийской научной конференции «Современные проблемы математики, механики, информатики». Тула, 2002. – С. 89–91.
4. Головнев, Ю.Ф. Резонансное туннелирование в сверхрешетках на основе ферромагнитных полупроводников / Ю.Ф. Головнев, Л.В. Никольская, А.В. Ермолов // Тез. док. 4-й Международной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы физики». – Саранск, 2003. – С. 95.
5. Головнев, Ю.Ф. Решение системы волновых уравнений для периодических структур методом трансферных матриц / Ю.Ф. Головнев, Л.В. Никольская, А.В. Ермолов // Известия ТГУ. Серия «Математика. Механика. Информатика». – 2003. – Т. 9. – Вып. 2. – С. 47–52.
6. Головнев, Ю.Ф. Экситоны в сверхрешетках PbS-EuS / Ю.Ф. Головнев, Л.В. Никольская // Известия ТулГУ. Серия «Физика». – 2005. – Вып. 5. – С. 104–110.
7. Blatt, J.M. Bose-Einstein condensation of excitons / J.M. Blatt, K. Bower, W. Brandt // Phys. Rev. – 1962. – V. 126. – P. 1691–1692.
8. Москаленко, С.А. Обратимые оптико-гидродинамические явления в неидеальном экситонном газе / С.А. Москаленко // ФТТ. – 1962. – Т. 4, № 1. – С. 276.
9. Головнев, Ю.Ф. Прямые и межъямные экситоны в гетероструктурах на основе редкоземельных полупроводников / Ю.Ф. Головнев, А.Б. Лаковцев // Известия ТулГУ. Серия «Естественные науки». – 2008. – Т. 1. – Вып. 1. – С. 126–136.
10. Бозе-конденсация межъямных экситонов в двойных квантовых ямах / А.В. Ларионов, В.Б. Тимофеев, П.А. Ни и др. // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т. 75, № 11. – С. 689–694.

11. Лозовик, Ю.Е. Стимулированное многофотонное излучение экситонным бозе-конденсатом / Ю.Е. Лозовик, И.В. Овчинников // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т. 75, № 11. – С. 603–608.
12. Свидетельство конденсации экситонов в двойных квантовых ямах / Л.В. Бутов, А. Цренер, М. Хагн и др. // УФН. – 1996. – Т. 166, № 7. – С. 801–803.
13. Головнев, Ю.Ф. Прямые и межъямные экситоны в магнитных наноструктурах / Ю.Ф. Головнев, Л.В. Никольская // Известия РАН. Физика. – 2007. – Т. 71, № 11. – С. 1664–1666.
14. Golovnev, J.F. Heterostructures from magnetic and paramagnetic semiconductors for spintronics / J.F. Golovnev, A.B. Lakovtsev // 3rd international conference on physics of electronic materials PHUEM. – Kaluga, 2008. – С. 244–247.
15. Головнев, Ю.Ф. Коллективные свойства триплетных экситонов в гетероструктурах на основе ферромагнитных полупроводников / Ю.Ф. Головнев, А.Б. Лаковцев // Материалы XXI Междунар. школы-семинара НМММ. – М., 2009. – С. 606–607.
16. Yanase, A. Mechanisms for the Anomalous Properties of Eu-Chalcogenides Alloys / A. Yanase, T. Kasuya // Phys. Soc. Japan. – 1968. – V. 25. – P. 1025–1042.
17. Нокс, Р. Теория экситонов / Р. Нокс. – М.: Мир, 1966. – 219 с.
18. Рашба, Э.И. Гигантские силы осцилляторов, связанные с экситонными комплексами / Э.И. Рашба // ФТП. – 1974. – Т. 8, № 7. – С. 1241–1256.
19. Бир, Г.Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. / Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. – М.: Наука, 1972. – 584 с.
20. Метфессель, Э. Магнитные полупроводники / Э. Метфессель, Д. Маттис. – М.: Мир, 1972. – 406 с.

Поступила в редакцию 25 сентября 2009 г.

PHASE DIAGRAM OF MAGNETIC EXCITONS IN NANOSIZE HETEROSYSTEMS ON BASE FERROMAGNETIC SEMICONDUCTOR

In work are investigated nanodimensional heterosystems on the basis of ferromagnetic semiconductors. In them possibility of reception of the condensed condition from lowermost on energy triplet excitons is considered. Key parametres at which boze-condensation of excitons is possible are calculated.

Keywords: exciton, boze-condensation, energy of communication, life time.

Golovnev Yuri Filippovich – Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, Tula State Pedagogical University.

Головнев Юрий Филиппович – профессор, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, ГОУ ВПО «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого».

e-mail: physics@tspu.tula.ru

Lakovtsev Alexey Borisovich – Post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, Tula State Pedagogical University.

Лаковцев Алексей Борисович – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, ГОУ ВПО «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого».

e-mail: alex_lak@rambler.ru

НЕУПРУГИЕ КАНАЛЫ РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ EuS/PbS

Ю.Ф. Головнев, Д.А. Нургалеев

Рассматривается задача о резонансном туннелировании носителей тока через ферромагнитные барьеры. Методом туннельного гамильтониана учитывается электрон-магнонное взаимодействие на резонансном центре, приводящее к образованию спинполярона и размытию энергетической зависимости туннельной прозрачности.

Ключевые слова: неупругое резонансное туннелирование, ферромагнитные гетероструктуры, сульфид европия, магнон, спинполярон.

Одним из перспективных источников получения спин-поляризованного потока электронов являются сверхрешетки на основе ферромагнитных полупроводников типа EuS–PbS. В них нанослой халькогенида европия выполняет функции инжектора и фильтра электронов, поляризованных по спину. Такие сверхрешетки могут быть использованы в различных устройствах спинтроники.

С этой целью был проведен анализ влияния обменного взаимодействия на туннельную прозрачность барьерных слоев EuS, где использовались методы трансферных матриц и туннельного гамильтониана [1–2]. В частности определена прозрачность в приближении «периодических рассеивателей», расположенных в области $4f^7$ -состояний европия, учтено влияние флуктуаций магнитного порядка, интерфейсных и инверсионных состояний гетеропереходов на туннелирование электронов из нанослоя PbS. Расчеты отражают уровень спиновой поляризации, особенности зонной структуры и показывают, что спиновая когерентность имеет резонанс в области расположения $4f^7$ -состояний, а подбором толщины слоев, образующих сверхрешетку, можно смещать уровень Ферми в заданный интервал энергий и создавать условия для получения высоких значений потока спин-поляризованных электронов [3].

Проблемой дальнейших исследований транспортных свойств гетероструктур «ферромагнитный полупроводник – парамагнитный полупроводник» является оценка влияния на туннельную прозрачность не только обменной связи, но и взаимодействия туннелирующих электронов с магнонами различной частоты. В настоящее время исследователи сходятся во мнении, что поляризацию своего спинового окружения носителем тока (туннелирующим электроном), то есть образование магнитного полярона, в халькогенидах европия необходимо учитывать. Это позволяет с единой точки зрения описывать их резистивное поведение.

В мультислоях, содержащих ферромагнитный барьер, вероятность рассеивания электронов со спином, параллельным направлению намагниченности ферромагнетика, меньше, чем для электронов со спином, направленным антипараллельно намагниченности. Сильная взаимосвязь между электронной и магнитной подсистемами в EuS создает условия для управления электрическими, магнитными и оптическими параметрами ферромагнитного полупроводника внешними магнитными и электрическими полями.

В EuS валентная зона, образованная $3p$ -состояниями серы, отделена от зоны проводимости из $5d(6s)$ -состояниями европия, энергетическим зазором $\Delta_g \approx 3$ эВ. Расщепление f -полосы за счет внутреннего обменного взаимодействия происходит таким образом, что все семь электронов, заполняющие нижние подболочки $4f_i$, упорядоченные ферромагнитно, образуют узкую энергетическую полосу $\sim 0,7$ эВ в запрещенной зоне, а пустые $4f_i$ -уровни оказываются в зоне проводимости [4–5].

Периодический потенциал сверхрешетки EuS–PbS приводит к образованию минизон в квантовых ямах PbS и влияет на соответствующее уширение $4f$ -полосы в запрещенной зоне сульфида европия, образуя из нее, по сути, закрытую квантовую яму (между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны) как было отмечено в работе [6]. Эта яма и определяет упругое и неупругое туннелирование зонных электронов из PbS. Закрытую квантовую яму из $4f$ -электронов, так как она находится в запрещенной зоне, считают донорным примесным состоянием [7], которое и способствует резонансному туннелированию в соответствие с формулой Брейта–Вигнера

$$T(E) = \frac{\Gamma^2}{4(E - E_0)^2 + \Gamma^2}, \quad (1)$$

где Γ – ширина образованного резонансного уровня в барьере, а E_0 и есть энергия $4f$ -уровней.

При взаимодействии электронов проводимости с f -уровнями на потенциале «магнитной примеси» происходит рассеяние, характеризуемое фазовым сдвигом $\delta_{f\sigma}$. Вероятность рассеяния зависит от направления спина рассеиваемого электрона относительно магнитного момента иона Eu^{2+} . Фазовый сдвиг электронной волновой функции определяется суммой всех резонансных – $\delta_{f\sigma}^{\text{res}}$ и нерезонансных – $\delta_{f\sigma}^0$ составляющих. По мере приближения энергии электрона к энергии связанного состояния E_f главным образом увеличивается фазовый сдвиг лишь той парциальной волны, полный момент которой равен моменту резонансного состояния. Иными словами, при $E \sim E_f$ выполняется неравенство $\delta_{f\sigma}^{\text{res}} \gg \delta_{f\sigma}^0$ и зависимость фазового сдвига от энергии электронов, находящихся на уровне Ферми E_F , определяется лишь резонансной его частью

$$\delta_f = \delta_{f\sigma}^{\text{res}} = \sum_{\sigma} \arctg \frac{\Gamma}{E_{f\sigma} - E_F}, \quad (2)$$

где параметр Γ определяет ширину образованных уровней. Учитывая их расщепление $2u = E_{f\sigma} - E_{f-\sigma}$ и положение относительно уровня Ферми $E_f = \frac{1}{2}(E_{f\sigma} + E_{f-\sigma}) - E_F$, можно записать

$$\delta_f = \arctg \frac{\Gamma}{E_f + u} + \arctg \frac{\Gamma}{E_f - u}. \quad (3)$$

Используя правило сумм Фриделя [8]

$$Z = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sum_l (2l+1) \delta_{f\sigma}, \quad (4)$$

запишем величину фазового сдвига $\delta_f = Z\pi/7$, где Z определяется исходя из условия экранировки.

Отмеченное свойство указывает на сильную взаимосвязь между носителями тока и локализованными спинами иона Eu^{2+} при формировании f -уровней. Величина расщепления зависит от параметра обменного взаимодействия, который для EuS составляет $4,3 \cdot 10^{-2}$ эВ. При этом туннельный спектр гетероструктуры имеет двухпиковую форму и определяется расщеплением уровней электрона, локализованного на центре рассеяния малого радиуса.

В детальном рассмотрении нуждается взаимодействие подвижных носителей спина с магнитными моментами редкоземельного иона. Ферромагнитное упорядочение существенно влияет на характер движения электронов, попадающих в барьер, ориентируя их спины параллельно. При этом электрон взаимодействует с ионом при близком по энергии расположении к его центру локализации. Величина обменной связи пропорциональна квадрату модуля волновой функции носителя тока в месте нахождения Eu^{2+} . В свою очередь, концентрация электронов проводимости оказывает влияние на магнитное упорядочение слоя EuS, достигая максимального значения на берегах туннельного контакта с парамагнитным полупроводником и уменьшаясь к центру. Это явление приводит к медленным отклонениям магнитных моментов иона по величине и по направлению. Однако при этом суммарный спин ионов Eu^{2+} не меняется.

При $T \rightarrow 0$ К в халькогенидах европия необходимо учитывать поляризацию своего спинового окружения носителем тока. Полная энергия ниже при параллельных спинах электрона и ионов. Однако при отличных от нуля температурах ионные спины характеризуются определенной разупорядоченностью, и «лишний» электрон обнаруживает тенденцию поляризовать ионные спины, находящиеся по соседству с ним, увеличивая степень ферромагнитного упорядочения. Если зона достаточно узка, электрон будет захвачен ферромагнитным спиновым облаком, и для его перемещения требуется некоторая дополнительная энергия. Эта квазичастица (электрон + спиновая поляризация соседних с ним ионов) и называется спинполяроном и во многом анало-

гична электростатическому полярону. В этом случае главный вклад в проводимость дают неупругие каналы взаимодействия с квазичастицами в барьере.

Для решения задачи о резонансном туннелировании обычно применяют метод туннельного гамильтониана [9]. Соответственно этому подходу оператор Гамильтона записывается в виде суммы

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (5)$$

где H_0 относится к свободным состояниям частиц и содержит состояния носителей на берегах туннельного контакта, описываемых с помощью квазиимпульсов l и r ,

$$H_0 = \sum_l E_l a_l^\dagger a_l + \sum_r E_r b_r^\dagger b_r, \quad (6)$$

при резонансном туннелировании необходимо учесть наличие в барьере резонансных центров $\sum_f E_f c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma}$, где E_l , E_r , E_f , $a_l^\dagger$ (a_l), $b_r^\dagger$ (b_r), $c_{f\sigma}^\dagger$ ($c_{f\sigma}$) – энергии и операторы рождения (уничтожения) электрона в левом и правом берегах и в резонансном состоянии, σ – спин.

Взаимодействие резонансного состояния с берегами отражает наличие каналов упругого туннелирования и входит в H_{int} :

$$H_{\text{int}} = \sum_{lf} g_{lf} (a_l^\dagger c_f + c_f^\dagger a_l) + \sum_{rf} g_{rf} (b_r^\dagger c_f + c_f^\dagger b_r), \quad (7)$$

где g_{lf} и g_{rf} – матричные элементы гамильтониана между состояниями l и f , r и f . При этом, как указывается в [10], большинство результатов не зависит от явного вида гибридизационных констант в случае, когда нерезонансное туннелирование несущественно, как в рассматриваемой модели (электроны из PbS туннелируют по 4f-зоне сульфида европия) g_{lf} , $g_{rf} \ll E_f$.

Вероятность резонансного туннелирования в единицу времени из состояния l в r дается соотношением

$$W_{lr} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|g_{lf}|^2 |g_{rf}|^2}{(E - E_f) + \Gamma^2} \delta(E_l - E_r).$$

Зависимость туннельной прозрачности имеет максимум $T(E_f) = 1$ и характеризуется так называемым лоренцевским профилем.

В настоящей работе взаимодействие спинов туннелирующих электронов со спинами рассеивающих центров из-за высокой плотности последних необходимо рассматривать как взаимодействие магнитных поляронов малого радиуса (спинполяронов) с магнонами различной частоты.

При низких температурах все спины рассеивающих центров параллельны. Спиновая волна в барьере имеет бесконечно большую длину и не влияет на движение носителя. Однако если в барьере окажется лишний (туннелирующий) электрон, то будет происходить движение «неправильного» спина $S + \frac{1}{2}$ по решетке «правильных» S . Т.е. движению лишнего электрона сопутствует перемещение магнитного полярона малого радиуса. Такой спинполярон и будет взаимодействовать барьерными магнонами, частота которых зависит от температуры. Так как все ионы Eu^{2+} в EuS эквивалентны друг другу, электрон проводимости передвигается с одного иона на другой посредством реакции перезаряда $\text{Eu}^+ + \text{Eu}^{2+} \rightarrow \text{Eu}^{2+} + \text{Eu}^+$.

В работах [11–12] было учтено влияние электрон-фоонного взаимодействия на резонансное туннелирование. Однако в рассматриваемой модели ситуация усложняется учетом не фоонов, а других квазичастиц. При отклонении от положения равновесия одного спина иона Eu^{2+} возбуждение может распространяться на соседний спин, от соседнего быть переданным следующему. Результирующее возбуждение при низких температурах может быть описано состояниями волнового типа. Энергия, затрачиваемая на поворот спина, распределяется по всей спиновой системе и распространяется в виде спиновой волны. Спиновые волны представляют собой колебания относительной ориентации спинов в барьере EuS , могут квантоваться, и, следовательно, возникают магноны. Туннелирующие спины, попадая в барьер, взаимодействуют именно с магнонами. Это

и приводит к уменьшению вероятности упругого туннелирования за счет появления неупругих каналов.

Если пренебречь дефектом в спиновой системе, связанным с отличием спина Eu^{2+} , на котором находится туннелирующий электрон, от спина иона матрицы (барьер), то электрон-магнонное взаимодействие можно записать в виде

$$H'_{\text{int}} = \sum_{qf\sigma} J \sqrt{\frac{S}{2N}} (d_q^+ c_{f\sigma}^+ c_{f+q-\sigma} + d_q c_{f-\sigma}^+ c_{f-q\sigma}), \quad (8)$$

здесь $d_q^+ (d_q)$ – операторы рождения (уничтожения) магнона, а ферми-операторы учитывают изменение квазиимпульса и спиновую ориентацию электронов.

$$H'_0 = \sum_q \hbar \omega_q d_q^+ d_q \quad (9)$$

– описывает состояние свободного магнона.

Локализация спинполярона на резонансном центре в барьере описывается гамильтонианом электрон-магнонного взаимодействия, который можно записать в виде

$$\tilde{H}_{cq} = \sum_f (\varepsilon_f - \eta_q) \tilde{c}_f^+ \tilde{c}_f + \sum_q \omega_q \tilde{d}_q^+ \tilde{d}_q, \quad (10)$$

где $\varepsilon_{f\sigma} = E_f - \sigma \frac{JS}{2}$ – электронный спектр с учетом обменного расщепления (знак $\sim$ означает проведенные канонические преобразования над соответствующими операторами).

Соотношение (9) показывает, что резонансное значение энергии электронного состояния $\varepsilon_{f\sigma}$ испытывает поляронный сдвиг. При этом гибридизация зонных состояний и магнонов эффективно происходит по-прежнему в полосе энергий, центр которой совпадает с резонансным значением $\varepsilon_{f\sigma}$. Ширина этой полосы может быть определена соотношением [13]

$$D = \sum J(m) e^{-S_T(m)} e^{-ikm}, \quad (11)$$

которое содержит множитель $e^{-S_T(m)}$. Он дает экспоненциальное убывание ширины зоны и соответствующий рост эффективной массы электрона с возрастанием температуры

$$S_T(m) = -J(m) \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_q (\hbar \omega_q)^{-1} e^{-iqR}, \quad (12)$$

где R – радиус-вектор узла, m – расстояние до ближайшего соседа. Переходы зонных электронов в состояния этой полосы определяют размытие линии резонансного туннелирования и его неупругий характер ($E_l \neq E_r$). Потеря энергии в процессе прохождения электроном барьера определяется величиной η_q из соотношения

$$\eta_q = \sum_q \left(J \sqrt{\frac{S}{2N}} \right)^2 \frac{1}{\omega_q}, \quad (13)$$

которая и отвечает за поляронный сдвиг резонансного уровня и представляет собой энергию активации магнитного полярона.

Вычисление вероятности резонансного туннелирования электронов проводимости из PbS в барьер связано с анализом распада зонного состояния l , обусловленного эффектом его гибридизации с набором локальных электрон-магнонных состояний. Волновая функция системы с составленным гамильтонианом имеет вид

$$\psi(t) = \left\{ \begin{aligned} & \left(\varepsilon_f + \sum_q J \sqrt{\frac{S}{2N}} \right) \sum_l \alpha_l(t) e^{-\frac{E_l}{\hbar} t} a_l^+ + \\ & + \sum_r \beta_r(t) e^{-\frac{E_r}{\hbar} t} b_r^+ + \sum_{f\sigma} \gamma_{f\sigma}(t) e^{-\frac{E_{f\sigma}}{\hbar} t} c_{f\sigma}^+ \end{aligned} \right\} \Phi_0, \quad (14)$$

где $\alpha_l(t)$, $\beta_r(t)$, $\gamma_{f\sigma}(t)$ – амплитуды вероятностей перехода, заданного в начальный момент состояния $a_l^+|\Phi_0\rangle$ в состояния $b_r^+|\Phi_0\rangle$ и $c_{f\sigma}^+|\Phi_0\rangle$.

Решая нестационарное уравнение Шредингера при заданных операторе Гамильтона и волновой функции, получим систему уравнений:

$$\begin{aligned}\dot{\alpha}_l(t) &= -i[\varepsilon_l \alpha_l + g_{lf} \gamma_f(t)], \\ \dot{\beta}_r(t) &= -i[\varepsilon_r \beta_r + g_{rf} \gamma_f(t)], \\ \dot{\gamma}_f(t) &= -i \left[\left(\varepsilon_f + \sum_q \sqrt{\frac{S}{2N}} \left(e^{i\omega_q t} d_q^+ + e^{-i\omega_q t} d_q \right) \right) \gamma_f(t) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{lf} g_{lf} \alpha_l(t) + \sum_{rf} g_{rf} \beta_r(t) \right],\end{aligned}\quad (15)$$

приняв $\varepsilon_l = \varepsilon_f - E_l$, $\varepsilon_r = \varepsilon_f - E_r$ и начальные условия

$$\alpha_l(0) = \alpha_0 \delta_{l'l}, \quad \beta_r(0) = 0, \quad \gamma_f(0) = 0. \quad (16)$$

Амплитуда вероятности туннелирования через барьер определяется решением системы (15), а именно состоянием в правом берегу гетеробарьера. В случае резонансного прохождения электронов, когда $\frac{|\varepsilon_l - \varepsilon_r|}{\varepsilon_l} \ll 1$, она имеет вид

$$\beta_r(t) = -g_{lf} g_{rf} \int_0^t e^{i(\varepsilon_r + i\Gamma)t_2} dt_2 \int_0^{t_2} e^{i(-\varepsilon_l - i\Gamma)t_1} e^{-i \int_{t_1}^{t_2} \eta(\tau) d\tau} dt_1 \alpha_0. \quad (17)$$

В последнем выражении $\Gamma = \Gamma_l + \Gamma_r$ определяет полуширину пика резонансного туннелирования при отсутствии обменного взаимодействия; Γ_l , Γ_r – парциальные значения полуширин: $\Gamma_l = \pi \sum_l g_{lf}^2 \delta(E_l - \varepsilon_f)$ и $\Gamma_r = \pi \sum_r g_{rf}^2 \delta(E_r - \varepsilon_f)$.

В формуле (12) магнонную часть можно выделить, записав ее в виде функции Грина

$$G(t_2, t_1) = e^{-i \int_{t_1}^{t_2} \eta(\tau) d\tau}, \quad (18)$$

где был осуществлен переход к Фурье-компоненте по времени $\eta(\tau) = \int_0^\infty \eta(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega$.

С учетом (11), (12), (14), (15) туннельную прозрачность гетеробарьера можно переписать в виде

$$T(E) = \frac{2\Gamma_l \Gamma_r}{\pi} \int_{-\infty}^\infty e^{i(E-E_l)t} \int_0^\infty e^{-i(E+i\Gamma)\tau} \int_0^\infty e^{i(E_l-i\Gamma)\tau_l} \langle G(\tau, 0) G(t, t-\tau_l)^+ \rangle dt d\tau d\tau_l. \quad (19)$$

В последнем выражении при взаимодействии спинполярона с длинноволновыми магнонами ($\omega \rightarrow 0$) вычисление среднего значения произведения операторов можно производить независимо друг от друга:

$$\langle \langle G(\tau, 0) G(t, t-\tau_l)^+ \rangle \rangle = \langle G(\tau, 0) G(t, t-\tau_l)^+ \rangle - \langle G(\tau, 0) G(t, t-\tau_l) \rangle, \quad (20)$$

что позволяет выделить в процессе неупругую и упругую части

$$T(E) = T_{in}(E - \varepsilon_f) + T_{el}(E - \varepsilon_f). \quad (21)$$

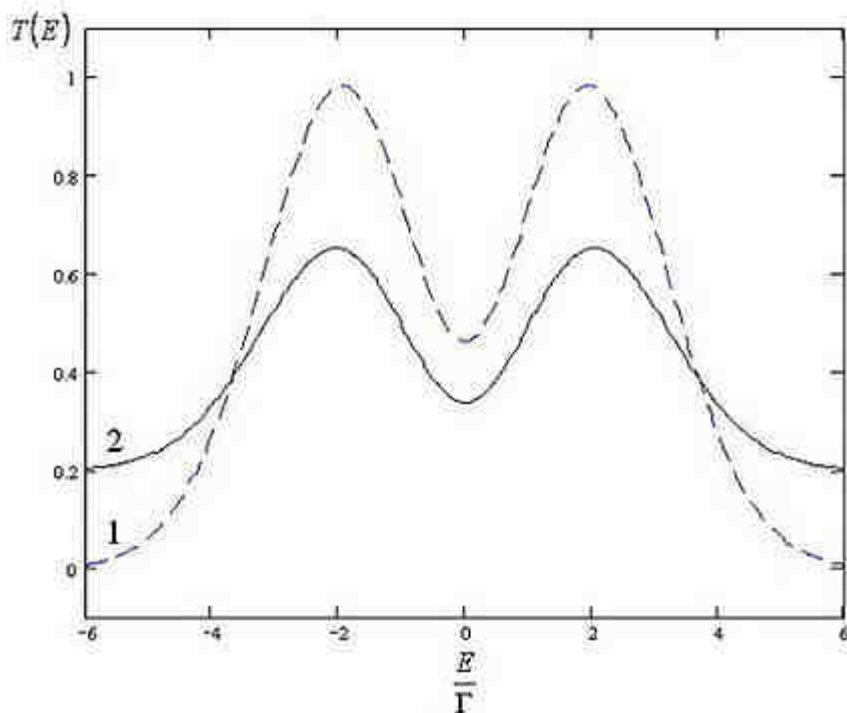
Полная прозрачность барьера для электрона с начальной энергией E равна:

$$T(E) = 4 \frac{\Gamma_l \Gamma_r}{\Gamma_l + \Gamma_r} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\infty dt e^{-(iE+\Gamma)t} \langle G(t, 0) \rangle \right\}. \quad (22)$$

Обменное взаимодействие приводит к рассеянию электронов на спиновых волнах. Электроны, главным образом, взаимодействуют с магнонами, энергия которых $\hbar\omega_q \approx kT$. Взаимодействие носителя спина в барьере с магноном и приводит к образованию спинполярона. Это приводит к размытию резонансной линии и возникновению неупругих каналов резонансного туннелирования, сохраняя при этом его интегральную интенсивность. Тогда вместо единичного $4f^7$ -уровня электрон-магнонные состояния образуют энергетическую полосу с центром $\varepsilon_{f\sigma}$. Такое электрон-магнонное взаимодействие на центре приводит к связыванию состояний туннелирующего электрона и магнонов в состояние поляронного типа.

При отсутствии электрон-магнонного взаимодействия $\eta_q = 0$ упругое резонансное туннелирование определяется формулой Брейта–Вигнера. Когда $\eta_q \neq 0$ в туннелирование включаются неупругие процессы (электрон-магнонное взаимодействие).

С ростом η_q «крылья» у пика растут (см. рисунок, кривые 1, 2) и положение резонансной кривой изменяется согласно росту магнитополяронного сдвига. Основной вклад в $T(E)$ связан с уменьшением вероятности упругого и параллельным включением неупругого канала резонансного туннелирования.



Туннельная прозрачность гетеробарьера EuS

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 08-01-00790-а.

Литература

1. Головнев, Ю.Ф. Расчет туннельной прозрачности магнитной гетероструктуры PbS–EuS–PbS / Ю.Ф. Головнев, А.В. Ермолов // Новое в магнетизме и магнитных материалах: матер. XIX Межд. шк.-сем. НМММ. – М., 2004. – С. 892–894.
2. Головнев, Ю.Ф. Расчет зонной структуры в приближении огибающей функции для сверхрешеток из магнитных полупроводников / Ю.Ф. Головнев, А.В. Парамонов // Современные проблемы математики, механики, информатики: тез. докл. Всерос. науч. конф. Тула, 2002. – С. 89–91.
3. Борухович, А.С. Особенности квантового туннелирования в мультислоях и гетероструктурах, содержащих ферромагнитные полупроводники / А.С. Борухович // УФН. – 1999. – Т. 169, № 7. – С. 737–750.
4. Нагаев, Э.Л. Физика магнитных полупроводников / Э.Л. Нагаев. – М.: Наука, 1979. – 432 с.

5. Kasuya, T.A Theory of Impurity Conduction I // Phys. Soc. Japan. – 1958. – V. 13. – P. 1096–1110.
6. Головнев, Ю.Ф. Расчет зонной структуры в приближении огибающей функции для сверхрешеток из магнитных полупроводников / Ю.Ф. Головнев, А.В. Парамонов // Известия ТГУ. Серия «Математика. Механика. Информатика». – 2002. – Т. 8. – Вып. 2. – С. 77–80.
7. Головнев, Ю.Ф. Туннельные процессы в гетероструктурах на основе ферромагнитных полупроводников / Ю.Ф. Головнев, Д.А. Нургүлеев // Известия ТулГУ. Серия «Естественные науки». – 2008. – Т. 1. – Вып. 1. – С. 136–144.
8. Гантмахер, В.Ф. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. / В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. – М.: Наука, 1984. – 352 с.
9. Дякин, В.В. Локализованные спин-поляронные состояния в ферромагнетиках / В.В. Дякин, Б.М. Летфулов // ТМФ. – 1987. – Т. 73, № 3. – С. 454–462.
10. Ларкин, А.И. Вольт-амперная характеристика мезоскопических полупроводниковых контактов / А.И. Ларкин, К.А. Матвеев // ЖЭТФ. – 1987. – Т. 93, № 3. – С. 1030–1038.
11. Глазман, Л.И. Неупругое резонансное туннелирование электронов через потенциальный барьер / Л.И. Глазман, Р.И. Шехтер // ЖЭТФ. – 1988. – Т. 94, № 1. – С. 292–305.
12. Брагинский, Л.С. Неупругое резонансное туннелирование / Л.С. Брагинский, Э.М. Баскин // ФТТ. – 1998. – Т. 40, № 6. – С. 1151–1155.
13. Капустин, А.В. «Аномальные» явления переноса в халькогенидах европия / А.В. Капустин; под ред. В.П. Жузе / Редкоземельные полупроводники: сб. науч. тр. – Л.: «Наука», 1977. – 208 с.

Поступила в редакцию 25 сентября 2009 г.

NOT ELASTIC CHANNELS OF RESONANT TUNNELING IN HETEROSTRUCTURES EuS/PbS

In work, the problem about resonant tunneling of carriers of a current through ferromagnetic barriers is considered. By a method of tunnel Hamiltonian it is considered electron and magnon interaction on the resonant centre, leading to formation spinpolaron and to degradation of power dependence of a tunnel transparency.

Keywords: not elastic resonant tunneling, ferromagnetic heterostructures, europium sulphide, magnon, spinpolaron.

Golovnev Yuriy Filippovich – Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the General and Theoretical Physics Department, Tula State Pedagogical University.

Головнев Юрий Филиппович – профессор, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, ГОУ ВПО «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого».

e-mail: physics@tspu.tula.ru

Nurguleev Damir Abdulganovich – Post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, Tula State Pedagogical University.

Нургүлеев Дамир Абдулганович – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, ГОУ ВПО «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого».

e-mail: damir625@gmail.com

ИНЖЕНЕРНЫЙ МЕТОД И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРОЕКТИРОВАНИИ ВЕТРОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК*

Ю.В. Грахов, О.В. Матвеев, Е.В. Соломин

Описан опыт практического применения математических моделей, инженерного метода конструирования и поэтапной оптимизации на примере создания конструкции ветроэнергетической установки с вертикальной осью вращения мощностью 1 кВт.

Ключевые слова: ветроэнергетика, математическое моделирование, инженерный метод.

Введение

На основе построения и анализа математических моделей, инженерных методов и оптимизационных расчетов силами ученых кафедры «Электротехника» Южно-Уральского государственного университета (г. Челябинск) и ООО «ГРЦ-Вертикаль» (г. Миасс) разработана ветроэнергетическая установка (ВЭУ) с вертикальной осью вращения мощностью 1 кВт (ВЭУ-1), рис. 1. Процесс разработки завершился созданием образца ВЭУ, полностью удовлетворяющего изначально предъявляемым высоким техническим требованиям и подлежащему монтажу на одном из корпусов ЮУрГУ с целью проведения всесторонних натурных испытаний.

История развития исследуемой темы связана с растущим интересом разработчиков к вертикально-осевым конструкциям, несмотря на то, что среди применяемых в мире ветровых турбин преобладают горизонтально-осевые. Они имеют несколько больший коэффициент использования энергии ветра: 40–45 % против 35–40 % у вертикально-осевых турбин. В то же время вертикально-осевые ВЭУ имеют ряд преимуществ: это отсутствие необходимости ориентации на ветер, более простая технология изготовления, малая шумность и меньшая стоимость.

Задача научно-исследовательской и опытно-конструкторской работы (НИИОКР) заключалась в проектировании малогабаритной, легко перемещаемой вертикально-осевую ВЭУ мощностью не менее 1 кВт, в том числе и для работы в районах Севера. Турбина ВЭУ должна самозапускаться при скорости ветра 2–3 м/с и обеспечивать рабочий режим, начиная со скорости ветра 4 м/с. Расчетная мощность в 1 кВт должна реализоваться при скорости ветра 11 м/с. В конструкции используется тихоходный генератор переменного тока на постоянных магнитах, установленный непосредственно на валу турбины. ВЭУ должна непрерывно работать при любой скорости ветра вплоть до 45 м/с с устойчивостью до 60 м/с. В связи с этим для обеспечения прочности ВЭУ ее обороты ограничиваются аэродинамическими тормозами. Для аварийной ситуации предусматривается остановочный тормоз.



Рис. 1. Ветроэнергетическая установка ВЭУ-1

Трехмерная математическая модель ВЭУ-1

При проектировании новой турбины ВЭУ в части аэродинамики на первом этапе в кратчайший срок должны были быть решены следующие задачи.

1. Определение основных габаритных соотношений турбины, обеспечивающих заданную расчетную мощность.
2. Выбор компоновочной схемы, обеспечивающей самозапуск ВЭУ.
3. Расчет аэродинамических характеристик лопастей, выбор оптимального профиля.

* Работа проведена в рамках Государственного контракта № 02.516.11.6186 от 15.06.2009 г.

4. Расчет коэффициента использования энергии ветра в зависимости от быстроходности, то есть получение главной аэродинамической характеристики турбины (быстроходность определяет, во сколько раз линейная скорость лопастей превышает скорость ветра).

5. Проведение оптимизационных расчетов с целью получения размеров лопастей и их установочных углов, обеспечивающих максимальную эффективность турбины.

6. Подготовка данных по величинам аэродинамических сил и моментов для всего используемого диапазона быстроходностей, необходимых для проведения прочностных и динамических расчетов.

7. Подготовка массива значений аэродинамической мощности как функции двух переменных: скорости ветра и скорости вращения турбины, так называемого поля мощности – для использования его в системе управления (СУ).

8. Определение основных параметров и расчет эффективности аэродинамических тормозов.

Для решения большей части этих аэродинамических задач на первом этапе проектирования использовался инженерный метод, программно реализованный на языке «С». Этот метод является также составной частью математической (функциональной) модели ветроэнергетической установки (ВЭУ) в целом.

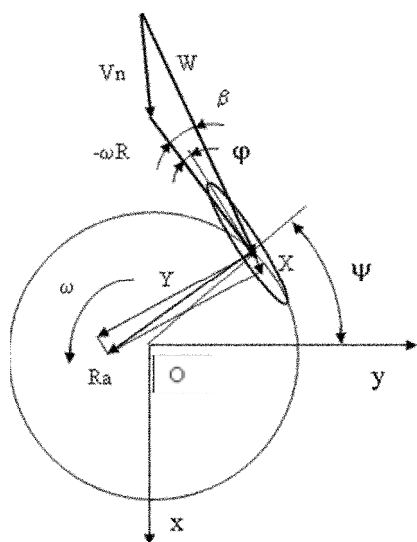


Рис. 2. Схема образования крутящего момента

Прямое численное моделирование (симулирование), а особенно экспериментальные исследования требуют гораздо больших, чем инженерный метод, затрат времени, финансовых и материальных ресурсов. Их роль состоит в подтверждении и уточнении принятых инженерно-технических решений. Кроме того, исследование картины течения потока ветра вокруг работающей турбины и принятие на основе анализа данных экспериментов, а также численного моделирования новых конструктивных решений позволяет обеспечить повышение как аэродинамической эффективности, так и технико-экономических показателей ВЭУ в целом.

Экспериментальные исследования и прямое численное моделирование представляют также данные, необходимые для совершенствования инженерного метода расчета. С ростом вычислительных мощностей прямое численное моделирование будет иметь определяющее значение и на первых этапах проектирования ветровых установок.

Инженерный метод, помимо геометрии, использует аэродинамические характеристики профиля лопастей при круговом

обдуве, учитывает установочные углы лопастей φ (рис. 2), коэффициент заполнения σ , равный отношению общей площади лопастей в плане к ометаемой фронтальной площади турбины, и многие другие параметры.

Сущность метода состоит в том, что силы, действующие на лопасть, вычисляются с учетом индуктивных скоростей, то есть с учетом влияния самой турбины на скорость потока. На рис. 2 показано, что в некоторых положениях при движении по окружности каждая отдельная лопасть создает положительный крутящий момент. В этих положениях угол атаки сравнительно небольшой, так что сила сопротивления X достаточно мала, а подъемная сила Y велика, то есть реализуется высокое значение аэродинамического качества, в результате чего полная аэродинамическая сила R_a , как видно на рисунке, создает положительный момент. К сожалению, такая картина наблюдается не на всей круговой траектории лопасти.

Инженерный метод расчета аэродинамических характеристик вертикально-осевой турбины

Ряд обозначений:

R, H, b, L – радиус и высота турбины, длина хорды лопасти и количество лопастей в одном ярусе;

V, V_n – скорость ветра и скорость ветра с учетом индуктивных скоростей;

$Z = \omega R / V$ – быстроходность, ω – угловая скорость;

$\sigma = Lb/(2R)$ – коэффициент заполнения;

C_d – коэффициент центра давления профиля лопасти;

$\delta = \pi/10$ – угол перехода от наветренной стороны к подветренной;

u, v – отнесенные к скорости ветра составляющие индуктивных скоростей по осям OX и OY .

Инженерный метод расчета содержит целый ряд параметров, изменение которых влияет на результаты расчетов. Прямое численное моделирование работы турбины и экспериментальные исследования позволили в дальнейшем сузить этот диапазон или дать конкретные значения параметров. Исходные диапазоны числовых параметров:

$$2,0 \leq k_2 \leq 4,0; -0,2 \leq \delta u \leq -0,4; -0,2 \leq u_0 \leq 0,2; 0,4 \leq s_1 \leq 0,95; \quad (1)$$

$$0,3 \leq s_2 \leq 0,6; 0,55 \leq s \leq 0,63, 0,6 \leq s_z \leq 1,0, 0,27 \leq \sigma_m \leq 0,29; \quad (2)$$

$$0,25 \leq C_{d0} \leq 0,4; \quad (3)$$

$$\sigma_{cr} = (L/2)^s \sigma_m, k_1 = \sigma_{cr} (\sigma / \sigma_{cr})^{s^1}, \text{ если } \sigma > \sigma_{cr}, \text{ иначе } k_1 = \sigma_{cr} (\sigma / \sigma_{cr})^{s^2}.$$

Базовые компоненты индуктивных скоростей вычисляются по формулам:

$$v_1 = -k_1 Z^{sz} / k_2; u_1 = -v_1 (1 + \delta u); \quad (4)$$

$$u_2 = v_1 (1 - \delta u); v_2 = 1 + (1 + v_1)(1 + 2v_1). \quad (5)$$

Величины индуктивных скоростей в зависимости от угла поворота лопасти находятся из соотношений:

$$1) 0 \leq \psi \leq \pi; v = v_1; u = v_1 (\cos \psi + \delta u); \quad (6)$$

$$2) \pi < \psi \leq \pi + \delta; v = v_1 + (v_2 - v_1)(\psi - \pi)/\delta;$$

$$v = v_1 + (v_2 - v_1)(\psi - \pi)/\delta; u = u_2 + (u_0 + u_2)(\psi - \pi)/\delta; \quad (7)$$

$$3) \pi + \delta < \psi < 2\pi - \delta; v = v_2; u = u_2; \quad (8)$$

$$4) 2\pi - \delta < \psi < 2\pi; v = v_2 + (v_1 - v_2)(\psi - (2\pi - \delta))/\delta; \quad (9)$$

$$u = u_2 + (u_1 - u_0)(\psi - (2\pi - \delta))/\delta. \quad (10)$$

Составляющие относительной скорости набегающего на лопасть потока:

$$w_x = 1 + v + Z \cos \psi; w_y = u + Z \sin \psi; \quad (11)$$

$$w_x = W_x/V; w_y = W_y/V; \alpha = \beta - \varphi \text{ – угол атаки.} \quad (12)$$

Вектор $\vec{W}$ набегающего на лопасть потока изображен на рис. 2.

Коэффициенты направленной параллельно радиусу силы, действующей на лопасть (положительное направление в сторону оси вращения), и крутящего момента находятся по формулам:

$$C_r = (C_x(\alpha) \sin \beta + C_y(\alpha) \cos \beta)(w_x^2 + w_y^2)\sigma/L; \quad (13)$$

$$C_q = ((-C_x(\alpha) \cos \beta + C_y(\alpha) \sin \beta)(w_x^2 + w_y^2) - 2C_r(C_d(\alpha) - C_{d0}))\sigma/L. \quad (14)$$

Коэффициенты сил здесь определяются стандартным образом: отношением соответствующей силы к произведению местного скоростного напора на площадь лопасти в плане. В случае коэффициента момента к указанному произведению добавляется множитель – длина хорды лопасти.

В расчетной программе, реализующей инженерный метод, определяются также составляющие сил по осям Ox и Oy на каждый элемент турбины и вычисляются интегральные силы на турбине в целом в зависимости от угла ее поворота ψ (см. рис. 2) и быстроходности $Z = \omega R/V$.

В результате расчетов по приведенной выше методике был сформирован аэродинамический конструктивно-компоновочный облик турбины мощностью 1 кВт, показанный в его исходном виде на рис. 3. Турбина имеет два яруса для обеспечения самозапуска. В каждом ярусе две главные вертикальные лопасти и две наклонные вспомогательные. Длина вертикальных лопастей составляет 1,3 м, общая высота турбины 2,6 м, ее диаметр равен 2,3 м.

Ометаемая фронтальная площадь при этих размерах равна 5,98 м², что даже при коэффициенте использования энергии ветра (КИЭВ), равном 30 %, обеспечивает около 1,5 кВт аэродинамической мощности на валу турбины при расчетной скорости ветра 11 м/с. Лопасти имеют симметричный профиль, как наиболее эффективный для вертикально-осевых турбин. Профиль имеет максимальную толщину 20 % от длины хорды, расположенную на 35 % длины хорды от носка

профиля. Нижние горизонтальные трубы полностью закрыты аэродинамическими обтекателями, наклонные – частично вспомогательными лопастями.

Профиль обтекателей такой же, как и у основных лопастей. На верхних горизонтальных трубах смонтированы аэродинамические тормоза, представляющие собой на каждой трубе две отклоняемые в разные стороны секции разной длины. Более длинные секции расположены ближе к оси вращения, чтобы обеспечить минимальные аэродинамические возмущения в вертикальном направлении. Аэродинамические тормоза ограничивают скорость вращения турбины 220 оборотами в минуту. В нижней части турбины помещена ступица с электрическим генератором. В ходе дальнейших расчетов было установлено, что оптимальная длина хорды профиля лопастей может иметь значения в диапазоне от 300 до 400 мм, а установочный угол – от 3° до 4° . Под установочным углом понимается угол между хордой профиля вертикальной лопасти и касательной к радиусу, проведенному в аэродинамический центр профиля, расположенный на хорде в 30 % длины хорды от носка профиля.

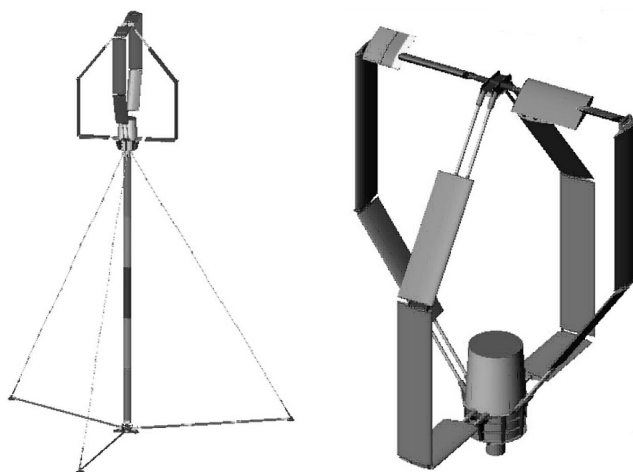


Рис. 3. Облик ВЭУ-1 на этапе проектирования

Расчет аэродинамических характеристик различных вариантов профилей с целью выбора из них оптимального по критерию эффективности его использования в составе турбины описанной выше конструктивно-компоновочной схемы проведен в пакете вычислительной гидродинамики ANSYS CFX 10.0 на компьютерном кластере [3]. Задача решалась в трехмерной постановке. Использовалась модель турбулентности переноса сдвиговых напряжений SST (Shear Stress Transport) при значении параметра Y^+ [1], близком к единице на поверхности профиля. Расчетная сетка имела 23 призматических слоя на поверхности профилей, чтобы обеспечить корректный расчет пограничного слоя (рис. 4).

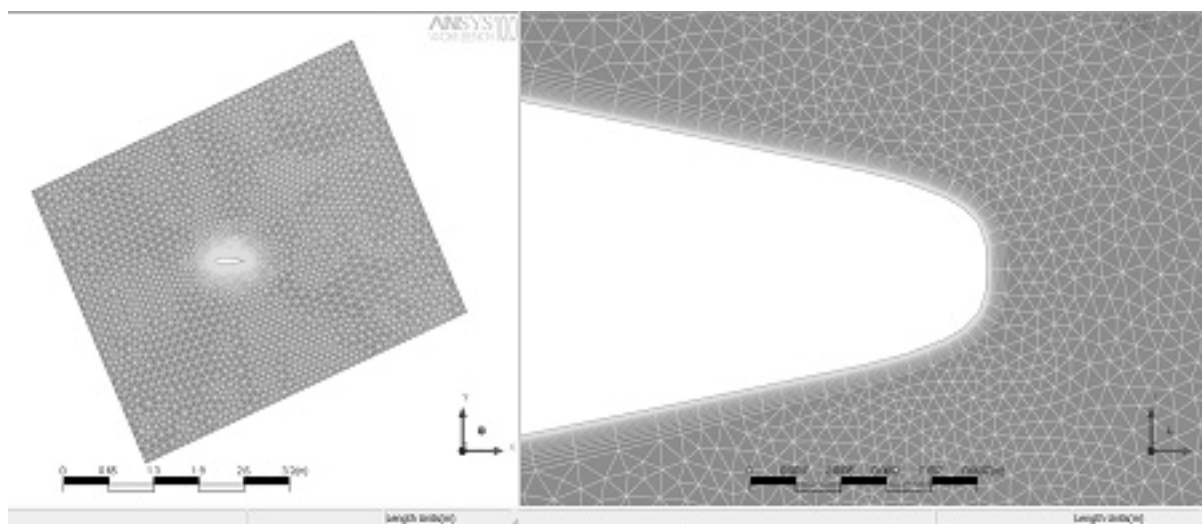


Рис. 4. Сетка в плоскости симметрии вокруг профиля (слева) и фрагмент сетки у задней кромки профиля (справа)

Общее количество элементов сетки составляло около трех миллионов. Расчет проводился в связанной системе координат, для изменения угла атаки расчетная область поворачивалась вокруг профиля и сетка перестраивалась.

Расчеты были проведены для серии профилей SRCV, разработанных в ООО «ГРЦ-Вертикаль», а также NASA0015, NASA0018 и Эсперо0040 ЦАГИ. Сравнение результатов расче-

тов показало, что для вертикально-осевых турбин предпочтительнее использовать симметричные профили как более технологичные, несмотря на то, что профиль Эсперо0040 ЦАГИ показал эффективность на уровне лучших симметричных профилей.

Контур профиля SRCV2035 изображен на рис. 5.

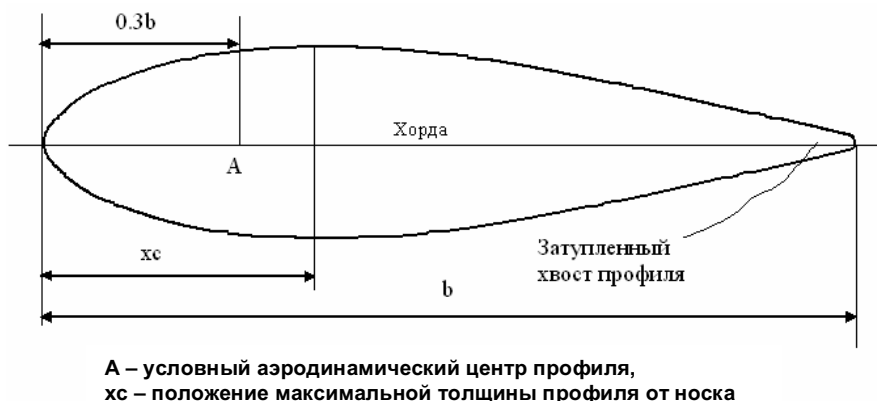


Рис. 5. Аэродинамический профиль лопасти

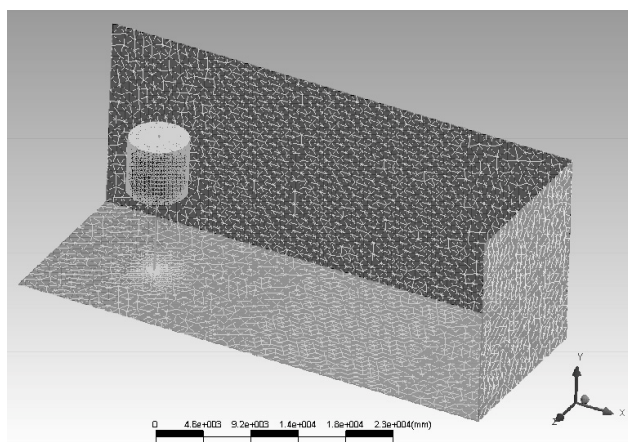


Рис. 6. Поверхностная сетка на поверхности стационарного домена

Для увеличения коэффициента использования энергии ветра лопасти имеют специально разработанные симметричные профили с относительной толщиной 20–25 % от длины хорды с расположением максимальной толщины на расстоянии 23–37 % длины хорды, считая от носка профиля.

Более близкое к носку положение максимальной толщины способствует самостарту ротора, но уменьшает эффективность при работе на номинальном режиме, поэтому в данном варианте были использованы, в основном, профили с 35 %-м удалением максимальной толщины от носка длины.

Дальнейшее повышение эффективности достигается установкой лопастей под углом от +2 до +5 к линии, перпендикулярной к радиусу, проведенному из центра вращения в условный аэродинамический центр профиля лопасти.

В режиме раскрутки ротора некоторое время существуют моменты, когда ветер дует в хвост лопасти. Затупленный конец лопасти гарантирует при этом отсутствие вибраций потока вследствие многократного отрыва, отсюда имеем снижение генерации шума и продление жизни установки. Существует еще одно расчетно-экспериментальное ограничение, состоящее в том, что

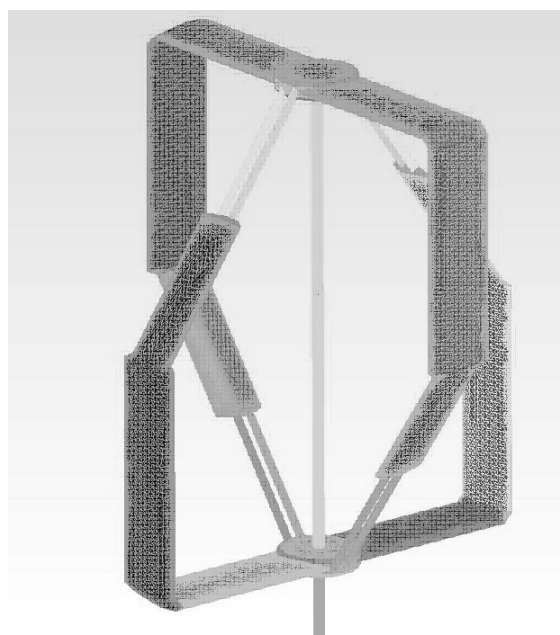


Рис. 7. Поверхностная сетка на поверхности турбины

длина хорды лопасти должна находиться в диапазоне от $0,1D$ до $0,17D$ (D – диаметр ротора), чтобы обеспечивать необходимый уровень коэффициента использования энергии ветра.

Во втором варианте, когда лопастей в каждом ярусе только две, они крепятся непосредственно к силовым траверсам, их концы при этом покрываются пластинами, края которых выступают за профиль лопасти на величину от 0,5 до 1 максимальной толщины лопасти. Это способствует снижению вихреобразования и повышению крутящего момента. Сами лопасти могут подкрепляться растяжками.

Для прямого численного моделирования работы турбины, расположенной на мачте в атмосфере, в пакете Solidworks была создана трехмерная математическая модель турбины, пригодная для проведения аэродинамического моделирования. В этой модели вертикальные лопасти имеют длину хорды 400 мм, наклонные – 300 мм. Собственно модель представлена на рис. 3.

Расчетная область для моделирования была составлена из двух доменов (расчетных подобластей): стационарного и вращающегося со скоростью $\omega = Z \cdot V/R$, где Z – быстроходность, V – скорость ветра, R – радиус турбины. Внутри вращающегося домена помещалась модель турбины на мачте. Расчеты были проведены для ряда значений быстроходности от нуля и до режима авторотации. В расчетах учтена сила тяжести, что было отражено в задании граничных и начальных условий. Интерфейс между вращающимся и стационарным доменами имел тип Transient Rotor-Stator.

Общее количество расчетных элементов в подвижном домене превышало пять миллионов, а в стационарном объеме было порядка полутора миллионов. Интенсивность турбулентности ветра на входе в стационарный домен задавалась равной 10 %. Все расчеты, кроме отдельных поисковых вариантов, проведены с использованием модели турбулентности SST. Поверхностная сетка стационарного домена видна на рис. 6, где показана неподвижная интерфейсная цилиндрическая поверхность со стороны стационарного домена. К ней вплотную примыкает вращающаяся цилиндрическая поверхность нестационарного домена.

На рис. 7 приведена поверхностная сетка на поверхности модели турбины. Сетка на этой поверхности имеет 17 призматических слоев для адекватного моделирования пограничного слоя на вращающихся лопастях.

На рис. 8 приведены результаты расчета главной аэродинамической характеристики турбины ВЭУ 1 кВт, полученные в пакете ANSYS CFX. Как видно, КИЭВ составляет 32 %.

Обозначения на рис. 8: $C_p = 2P/(\rho V^3 S)$ – коэффициент использования энергии ветра, $C_m = 2M_z/(\rho V^2 S R)$ – коэффициент момента, $S = 2RH$ – фронтальная площадь турбины, P – аэродинамическая мощность, M_z – крутящий момент.

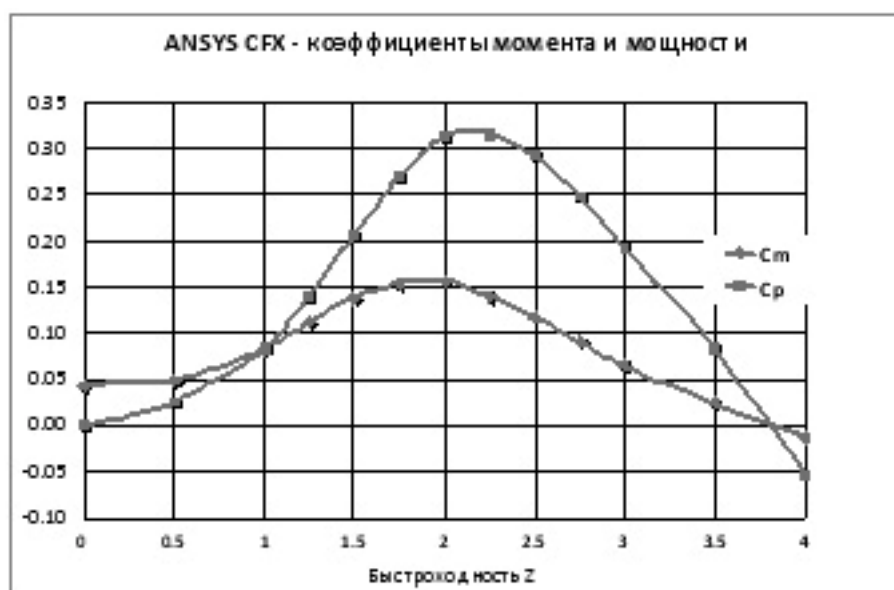


Рис. 8. Зависимости коэффициента использования энергии ветра и коэффициента момента от быстроходности (ANSYS CFX)

Главная аэродинамическая характеристика ВЭУ позволяет построить численно и графически поле мощности – зависимость аэродинамической мощности от скорости ветра и скорости вращения турбины. Поле мощности ВЭУ-1 показано на рис. 9.

Приведенное на рис. 9 поле аэродинамической мощности ВЭУ-1 используется при разработке алгоритмов системы управления и самой системы управления, а также в прочностных расчетах.

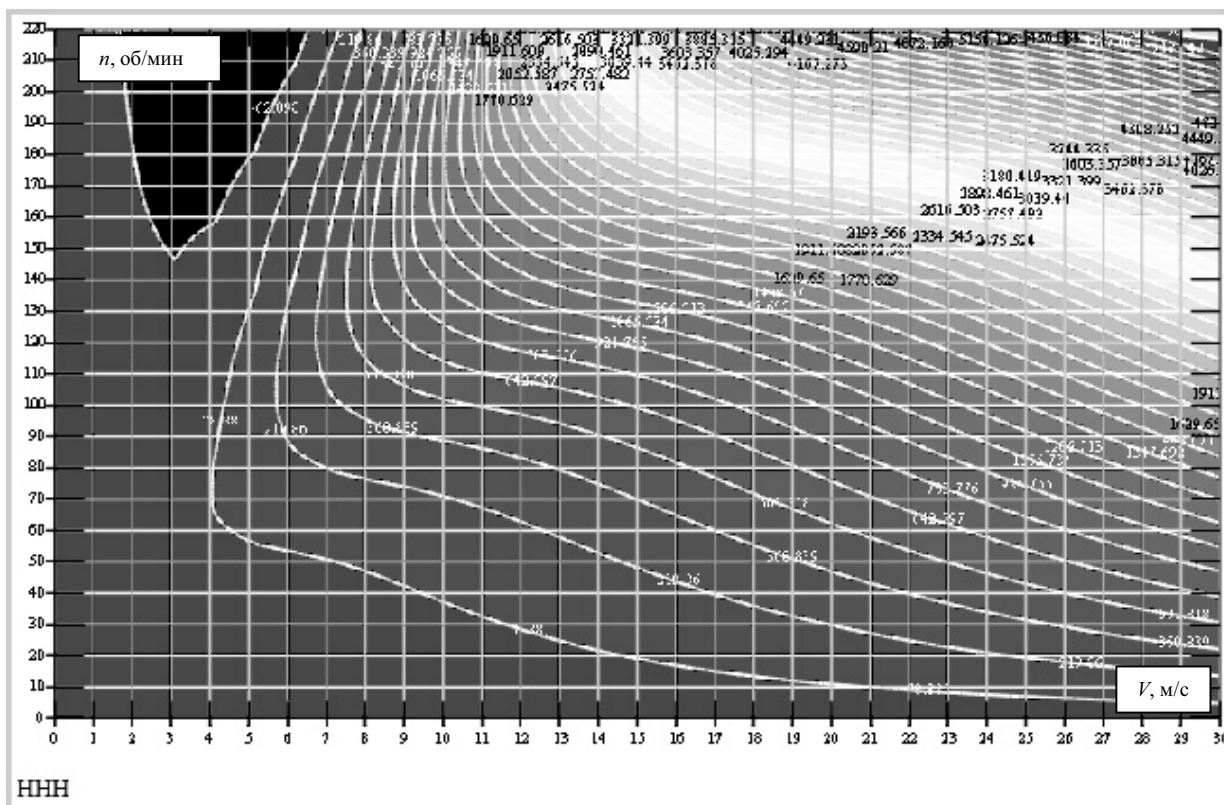


Рис. 9. Поле мощности ВЭУ-1

ANSYS CFX позволяет получить детальные картины течения вокруг работающей турбины. На рис. 10 представлена заливка модулем скорости в плоском сечении по центральной части турбины.

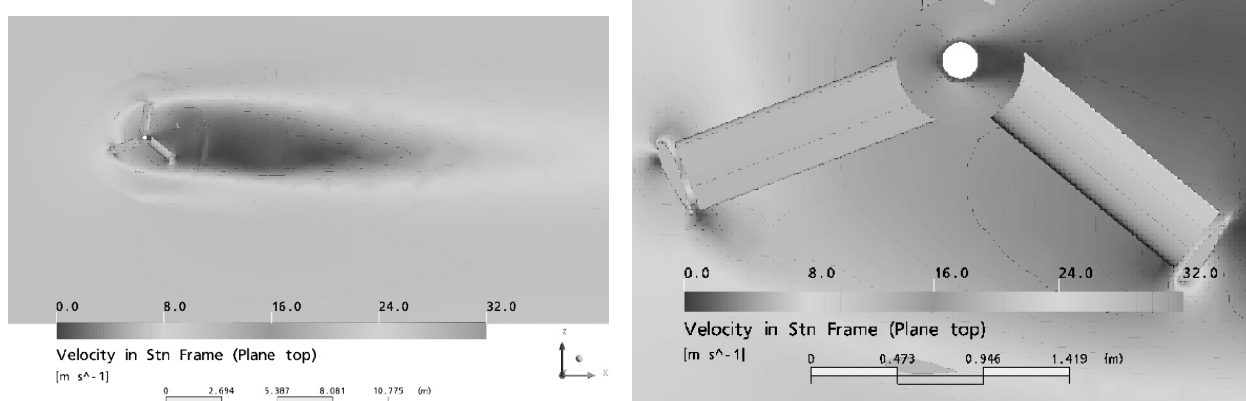


Рис. 10. Поля скоростей

Видно, что максимальные скорости имеют место вблизи вертикальных лопастей. В следе за турбиной скорости падают очень резко, и это снижение скорости действует на большие относи-

тельные расстояния. Помимо прочего следует отметить, что влияние вращающейся турбины распространяется не только назад и вперед, но и далеко в боковом направлении.

Следует отметить в качестве вывода, что на проведение экспериментальных исследований затрачивается значительно больше времени и средств, чем на моделирование работы ВЭУ в ANSYS CFX. Таким образом, использование прямого численного моделирования позволит в будущем до необходимого минимума снизить объем экспериментальных исследований на масштабных моделях.

Оригинальная форма ротора в совокупности с оптимальным профилем лопастей дают КПД до 38 % при любом направлении ветра, пониженный уровень вибраций до $0,004 \text{ м/с}^2$ в третьоктавном диапазоне частот, низкий уровень шума до 41–45 дБ(А), отсутствие инфразвука за счет невозможности срыва потока благодаря одинаковым мгновенным линейным скоростям всех точек лопасти по вертикали.

Конструкция ступицы и ротора ВЭУ сделана быстро разборной и пригодной для транспортировки в багажнике легкового автомобиля. Ступица содержит специально сконструированную систему подшипников, позволяющую предельно уменьшить потери от момента сопротивления.

Литература

1. Шимкович, Д.Г. Расчет конструкций в MSC/NASTRAN for Windows / Д.Г. Шимкович. – М.: ДМК Пресс, 2001.
2. Технические условия на безопасность ветросиловых установок / Компания «Германишер Ллойд».
3. ANSYS CFX Release 10.0 documentation. 2006.

Поступила в редакцию 10 ноября 2009 г.

ENGINEERING METHOD AND MATHEMATIC MODELING IN DESIGN OF WIND TURBINES

The article describes the experience of practical application of mathematic models, engineering method of design and step by step optimizing on the example of design of 1 kW vertical axis wind turbine.

Keywords: wind power, mathematic modeling, engineering method.

Grahov Yuri Vasilyevich – Engineer, «SRC-Vertical», Ltd., State Rocket Center, academician V.P. Makeyev Design Bureau.

Грахов Юрий Васильевич – инженер ООО «ГРЦ-Вертикаль», ОАО Государственный Ракетный Центр, КБ им. академика В.П.Макеева.
e-mail: grahov@chel.surnet.ru

Matveenko Oleg Vladimirovich – Engineer, «SRC-Vertical», Ltd., State Rocket Center, academician V.P. Makeyev Design Bureau.

Матвеенко Олег Владимирович – инженер ООО «ГРЦ-Вертикаль», ОАО Государственный Ракетный Центр, КБ им. академика В.П.Макеева.
e-mail: o_matveenko@mail.ru

Solomin Evgeny Viktorovich – Dr. Sc. (Engineering), Associate Professor, Electric Engineering Department, South Ural State University.

Соломин Евгений Викторович – кандидат технических наук, доцент, кафедра электротехники, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: nii-uramet@mail.ru

ВЛИЯНИЕ СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА МИКРОТВЕРДОСТЬ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО АЛЮМИНИЯ

Д.В. Загуляев, С.В. Коновалов, В.Е. Громов

Экспериментально изучено влияние слабых магнитных полей ($B \leq 300$ мТл) на микротвердость поликристаллического алюминия. Показано, что микротвердость алюминия линейно зависит от индукции магнитного поля. Установлена зависимость микротвердости от времени выдержки в магнитном поле и обнаружено насыщение микротвердости при достижении определенного времени выдержки.

Ключевые слова: магнитное поле, микротвердость, поликристаллический алюминий, магнитоупругий эффект.

Исследованию влияния магнитных полей (МП) на физические и механические свойства немагнитных монокристаллических материалов посвящено значительное количество работ (см., например, обзоры [1–3]). Впервые магнитоупругий эффект (МПУ) был обнаружен в 1987 г. группой ученых под руководством профессора Альшица В.И. [4]. Было установлено явление перемещения дислокаций под действием постоянного МП в кристаллах NaCl в отсутствие механических напряжений, которое в дальнейшем получило название МПУ. Дальнейшие исследования в этой области показали, что МПУ приводит к понижению предела текучести [5, 6], уменьшению микротвердости [7–11] и внутреннего трения [12]. Интерес к данному явлению не случаен, поскольку, кроме теоретического, оно имеет практическую значимость, например, при оценке изменения свойств материалов энергетических установок, в которых имеются магнитные поля.

Влияние МП на пластические свойства поликристаллических металлов, обладающих парамагнитными свойствами, изучено недостаточно. В этой связи целью настоящей работы является установление феноменологии влияния МП на такую микромеханическую характеристику металлов, как микротвердость.

В работе использовали образцы поликристаллического Al с размерами $1 \times 1 \times 2$ см³. Они предварительно механически полировались, химически травились (0,2 мл – HF; 0,9 мл – HNO₃; 2,6 мл – HCl; 100 мл – H₂O) и отжигались при 700 К в течение 2 часов с последующим охлаждением в печи. Источником МП служил электромагнит с регулированием индукции магнитного поля путем изменения тока в катушках. Отметим, что геометрия магнитного поля во всех испытаниях оставалась постоянной. Индукция МП измерялась миллитесламетром с точностью до 0,01 мТл и варьировалась в пределах от 0 до 300 мТл. Измерения микротвердости проводились с помощью микротвердомера ПМТ-3 для трех вариантов: без воздействия МП, сразу после выдержки в МП и после определенных интервалов времени; при этом варьировалось значение индукции МП и время выдержки в нем. Значение микротвердости усреднялось не менее чем по 50 измерениям на разных образцах.

Количественно эффект влияния магнитного поля характеризовался относительным изменением микротвердости:

$$\xi = \frac{HV - HV_0}{HV_0},$$

где HV – значение микротвердости образца, выдержанного в МП, HV_0 – исходное значение микротвердости.

Как видно из рис. 1 микротвердость поликристаллического алюминия после удаления из МП релаксирует до исходного значения, причем полная релаксация микротвердости происходит за время порядка 30 ч. Похожие зависимости получены Головиным Ю.И. на полимерах [7], кристаллах C₆₀ [8] и NaCl [10]. Отметим, что повторная выдержка алюминия, микротвердость которого еще не достигла исходного значения, в МП приводит к изменению микротвердости до таких же значений, как и при первоначальной обработке в МП.

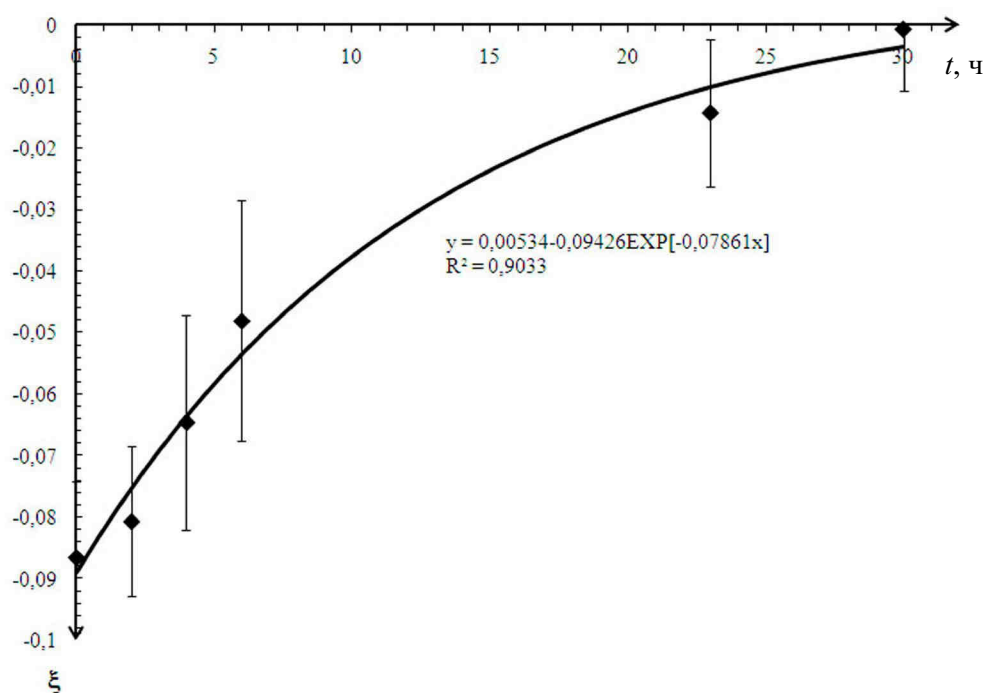


Рис. 1. Релаксация ξ после одного часа выдержки в МП ($B = 300$ мТл)

Из зависимости ξ от индукции МП (рис. 2) видно, что влияние магнитного поля на микротвердость не наблюдается для значений индукции < 150 мТл, а при дальнейшем увеличении индукции МП эффект линейно возрастает, что говорит о существовании порогового значения B_n . Подобное значение величины B_n было получено в [13] на монокристаллах NaCl, Al, LiF ($B_n \approx 200$ мТл), а насыщение МПЭ наступало при значениях магнитной индукции порядка 300–500 мТл.

Обобщенные зависимости ξ от времени выдержки в МП различной индукции представлены на рис. 3. Видно, что значение ξ достигает своего максимума при времени выдержки в МП по-

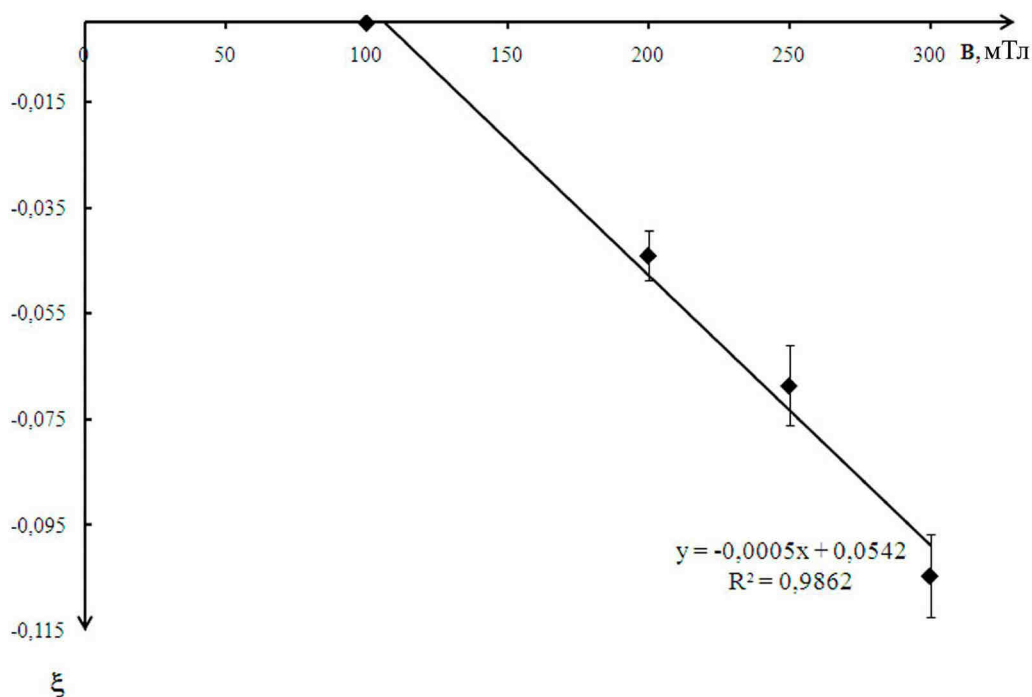


Рис. 2. Зависимость ξ от индукции магнитного поля

рядка 2 часов, дальнейшее увеличение времени не приводит к усилению эффекта. Значения максимального эффекта для поликристаллического алюминия при значениях магнитной индукции 200, 250 и 300 мТл равны $4,0 \pm 0,9$ %, $7,12 \pm 1,2$ %, $12,5 \pm 0,9$ % соответственно.

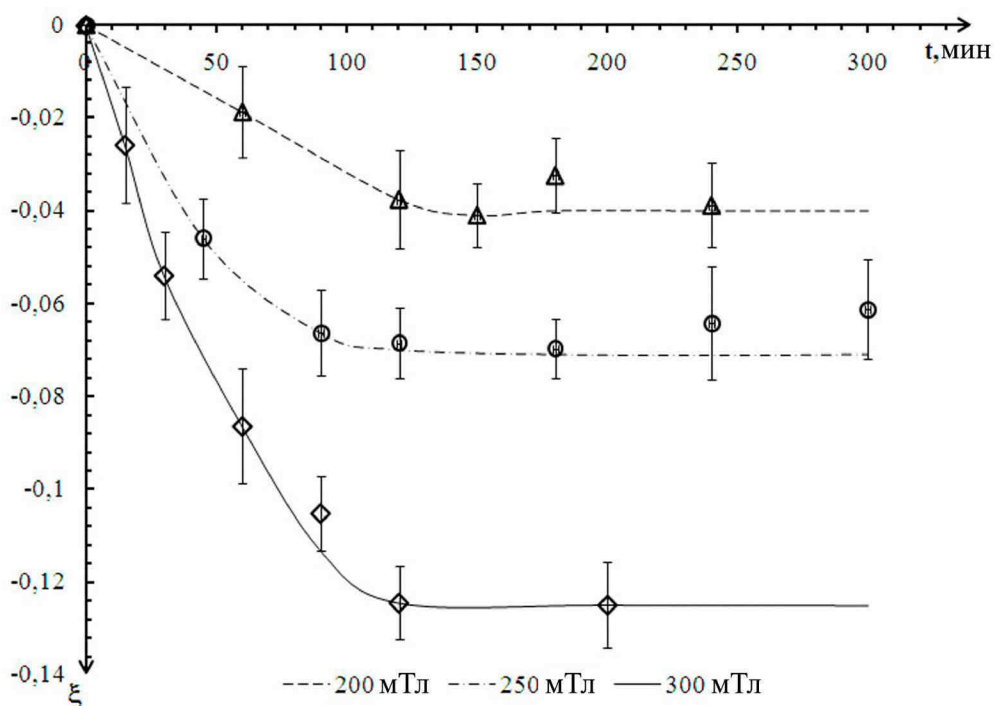


Рис. 3. Зависимость ξ от времени выдержки в магнитном поле

Одно из возможных объяснений зависимостей на рис. 1–3 может быть связано с откреплением дислокаций от парамагнитных центров под действием МП. Данное явление происходит в результате спин-зависимых переходов в системе «примесь – ядро дислокации» с последующим движением дислокаций в поле дальнедействующих внутренних напряжений в кристалле [14]. В рамках этой модели происходит разрушение локальных барьеров за некоторое характерное время.

Таким образом, можно предполагать, что одним из механизмов влияния МП на микротвердость поликристаллического алюминия является стимулированное МП движение дислокаций. Для однозначного выяснения физической природы влияния слабых магнитных полей необходимо проведение прецизионных исследований по эволюции дислокационных субструктур, в том числе методами просвечивающей электронной микроскопии.

Литература

1. Головин, Ю.И. Магнитопластичность твердых тел (Обзор) / Ю.И. Головин // ФТТ. – 2004. – № 5. – С. 769–803.
2. Альшиц, В.И. Магнитопластический эффект: основные свойства и физические механизмы / В.И. Альшиц // Кристаллография. – 2003. – № 5. – С. 826–854.
3. Урусовская, А.А. Эффекты магнитного воздействия на механические свойства и реальную структуру немагнитных кристаллов / А.А. Урусовская, В.И. Альшиц, А.Е. Смирнов // Кристаллография. – 2003. – № 5. – С. 855–872.
4. О движении дислокаций в кристаллах NaCl под действием постоянного магнитного поля / В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, Т.М. Перекалина и др. // ФТТ. – 1987. – № 2. – С. 467–471.
5. Урусовская, А.А. О влиянии магнитного поля на предел текучести и кинетику макропластичности кристаллов LiF / А.А. Урусовская, В.И. Альшиц, А.Е. Смирнов и др. // Письма в ЖЭТФ. – 1997. – № 6. – С. 470–474.
6. Деформация кристаллов LiF в постоянном магнитном поле / В.А. Альшиц, А.А. Урусовская, А.Е. Смирнов, Н.Н. Беккауер // ФТТ. – 2000. – № 2. – С. 270–272.
7. Головин, Ю.И. Новый тип магнитопластических эффектов в линейных аморфных полимерах / Ю.И. Головин, Р.Б. Моргунов // ФТТ. – 2001. – № 5. – С. 827–832.

8. Влияние импульсного магнитного поля на микротвердость монокристаллов C_{60} / Ю.А. Осипьян, Ю.И. Головин, Д.В. Лопатин и др. // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – Т. 69. – Вып. 2. – С. 110–113.
9. Влияние магнитного поля на пластичность, фото- и электролюминесценцию монокристаллов ZnS / Ю.И. Головин, Р.Б. Моргунов, А.А. Баскаков и др. // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – Т. 69. – Вып. 2. – С. 114–118.
10. Обратимые и необратимые изменения пластических свойств кристаллов NaCl, вызванные действием магнитного поля / Ю.И. Головин, Р.Б. Моргунов, Д.В. Лопатин и др. // ФТТ. – 1998. – № 11. – С. 2065–2068.
11. Пинчук, А.И. Влияние постоянного магнитного поля и импульсного электрического тока на среднюю линейную плотность двойникоующихся дислокаций в кристаллах висмута / А.И. Пинчук, С.Д. Шаврей // ФТТ. – 2001. – № 8. – С. 1416–1417.
12. Тяпунина, Н.А. Влияние магнитного поля на неупругие свойства кристаллов LiF / Н.А. Тяпунина, В.Л. Красников, Э.П. Белозерова // ФТТ. – 1999. – № 6. – С. 1035–1040.
13. Магнитоэластический эффект и спин-решеточная релаксация в системе дислокация – парамагнитный центр / В.И. Альшиц, Е.В. Даринская, О.Л. Казакова и др. // Письма в ЖЭТФ. – 1996. – Т. 63. – Вып. 8. – С. 628–633.
14. Альшиц, В.И. «*In situ*» изучение магнитоэластического эффекта в кристаллах NaCl методом непрерывного травления / В.И. Альшиц, Е.В. Дарицкая, Е.А. Петржик // ФТТ. – 1991. – № 10. – С. 3001–3009.

Поступила в редакцию 31 июля 2009 г.

WEAK MAGNETIC FIELDS INFLUENCE ON MICROHARDNESS OF POLYCRYSTALLINE ALUMINUM

Weak magnetic fields ($B \leq 300$ mT) influence on microhardness of polycrystalline aluminum is studied experimentally. It is shown that microhardness of aluminum linearly depends on an induction of a magnetic field. Dependence of microhardness on release time in a magnetic field is determined and saturation of microhardness is revealed under attainment of certain release time.

Keywords: magnetic field, microhardness, polycrystalline aluminum, magnetoplastic effect.

Zagulyaev Dmitry Valerievich – Postgraduate student of Physics Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Загуляев Дмитрий Валерьевич – аспирант, кафедра физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк.

e-mail: zagulyaev_dv@physics.sibsiu.ru

Konovalov Sergey Valerievich – Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor of Physics Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Коновалов Сергей Валерьевич – кандидат технических наук, доцент, кафедра физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк.

e-mail: konovalov@physics.sibsiu.ru

Gromov Victor Evgenievich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Physics Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Громов Виктор Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк.

e-mail: gromov@physics.sibsiu.ru

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИССИПАЦИИ И ТОЧЕЧНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ДИНАМИКУ ДНК

Ф.К. Закирьянов, Т.А. Киселева

Рассмотрена модель двухцепочечной ДНК, основной вклад в динамику которой вносят вращения оснований вокруг сахаро-фосфатных цепочек. С помощью обобщенного метода Ван-дер-Поля были получены два разных типа решения – в виде бризеров и пар кинк–антикинк, описывающие соответственно начальные процессы тепловой денатурации молекулы ДНК и образование открытого состояния в процессе транскрипции. Исследовано влияние двух видов сил на динамику модели.

Ключевые слова: нелинейная динамика ДНК, бризеры, метод Ван-дер-Поля.

Локализованные возбуждения, математическими образами которых являются кинки, бризеры и другие нелинейные волны, играют большую роль в физике конденсированного состояния, в том числе в динамике полимеров [1]. В частности, с помощью кинков описываются процессы конформационных В–А-переходов в молекуле ДНК, а также её взаимодействие с внешними лигандами в процессах транскрипции [2, 3]. Бризеры часто используются для описания начальных стадий образования *открытого состояния* в процессах денатурации и плавления ДНК [4]. Как правило, для теоретического описания указанных процессов используются модификации так называемой РВ-модели, предложенной Пейярдом и Бишопом (рис. 1). В этой модели учитываются только *поперечные* смещения нуклеотидов в направлении, перпендикулярном оси молекулы ДНК. Уравнения динамики такой системы преобразуются в нелинейное уравнение Шрёдингера, которое имеет решения в виде бризеров [4, 5].

Вместе с тем, существует большая группа моделей, в которых основной вклад в динамику вносят *повороты* оснований вокруг сахаро-фосфатного остова молекулы ДНК [3]. Такие модели условно объединяются термином Y-модели (рис. 2) и успешно применяются для описания различных нелинейных эффектов в ДНК [3, 6]. Поскольку упомянутые повороты приводят к разрыву водородных связей между комплементарными основаниями и, как следствие, к образованию открытого состояния, то появляется еще одна возможность описания начальных стадий плавления ДНК. В настоящей работе представлены результаты исследования одной из модификаций Y-модели, решения которой в виде бризеров и пар кинк–антикинк используются для описания упомянутых выше процессов.

Предполагая, что основной вклад в динамику вносят вращения оснований вокруг сахаро-фосфатного остова, рассмотрим модель [7] (рис. 2):

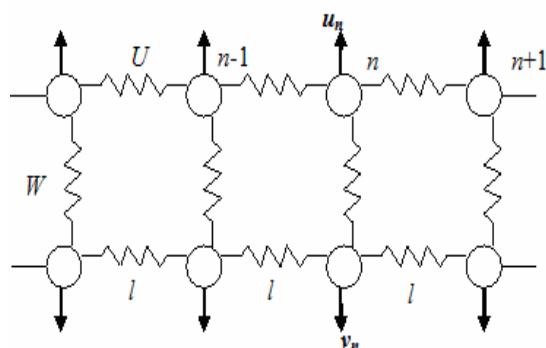


Рис. 1. РВ-модель

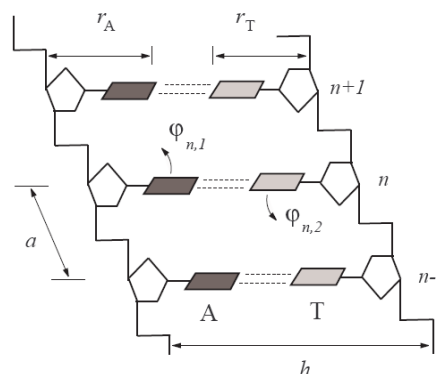


Рис. 2. Y-модель

В континуальном приближении динамика рассматриваемой модели описывается системой уравнений [2]:

$$\left. \begin{aligned} I_1 \ddot{\varphi}_1 - \varepsilon_1 \varphi_1'' + \frac{\partial V}{\partial \varphi_1} &= 0, \\ I_2 \ddot{\varphi}_2 - \varepsilon_2 \varphi_2'' + \frac{\partial V}{\partial \varphi_2} &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (1)$$

где I_1, I_2 – моменты инерции оснований в цепочках 1 и 2, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – жесткость сахаро-фосфатного остова в обеих цепочках. Точками обозначена вторая производная по времени, а штрихами – вторая производная по координате x (ось x параллельна оси молекулы ДНК). Потенциальная энергия взаимодействия оснований берется в виде [2, 7, 8]:

$$V(\varphi_1, \varphi_2) = k_1(1 - \cos \varphi_1) + k_1(1 - \cos \varphi_2) + k_2(1 - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)), \quad (2)$$

где k_1, k_2 характеризуют взаимодействие оснований в одной и разных цепочках соответственно. Подставляя (2) в (1) после обезразмеривания в приближении однородной ДНК получим следующую систему:

$$\left. \begin{aligned} \ddot{\varphi}_1 - \varphi_1'' + \sin \varphi_1 - \alpha \sin(\varphi_1 - \varphi_2) &= 0, \\ \ddot{\varphi}_2 - \varphi_2'' + \sin \varphi_2 + \alpha \sin(\varphi_1 - \varphi_2) &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (3)$$

где безразмерный параметр $\alpha = k_2 / k_1$ – константа связи цепочек. Этот параметр в большинстве моделей принимается малым ($0 \leq \alpha \leq 0,1$).

В частном случае $\varphi_1 = \varphi_2$ мы переходим от (3) к уравнению синус-Гордона, решение которого в виде кинка [9, 10] и интерпретация его для нелинейной динамики ДНК хорошо известны [11].

Заметим, что рассматриваемая модель может быть *модифицирована* с целью учета эффектов *диссипации*, неоднородности молекулы ДНК и влияния *внешних воздействий*. Некоторые из этих модификаций рассмотрим ниже.

В частном случае $\varphi_1 = -\varphi_2$ с учетом диссипации мы переходим от (3) к двойному уравнению синус-Гордона (ДУСГ)

$$\varphi_{tt} - \varphi_{xx} + \sin \varphi = \alpha \sin 2\varphi - \beta \varphi_t. \quad (4)$$

Решение уравнения (4) ищем *обобщенным методом Ван-дер-Поля* [12] в виде:

$$\varphi = 4 \operatorname{arctg} \left(\sqrt{\frac{1-\Omega}{\Omega+\varepsilon^2}} \cdot \frac{1}{\operatorname{ch}(x\sqrt{1-\Omega})} \right), \quad (5)$$

$$\varphi_t = -2\varepsilon \sin \frac{\varphi}{2}, \quad (6)$$

$$\varepsilon = -\sqrt{\Omega} \operatorname{ctg} \chi, \quad (7)$$

где $\chi = \sqrt{\Omega}t + \chi_0$; $\chi_0 = \text{const}$; $-\varepsilon^2 < \Omega < 1$.

При наличии возмущения $\alpha \sin 2\varphi - \beta \varphi_t$, стремящегося к нулю на бесконечности, в (5)–(7) полагаем параметры решения $\Omega = \Omega(t)$, $\varepsilon = \varepsilon(t)$ неизвестными функциями времени. Причем Ω считаем медленно изменяющейся с течением времени.

Следуя [12], получаем систему уравнений для определения эволюции параметров Ω и ε со временем

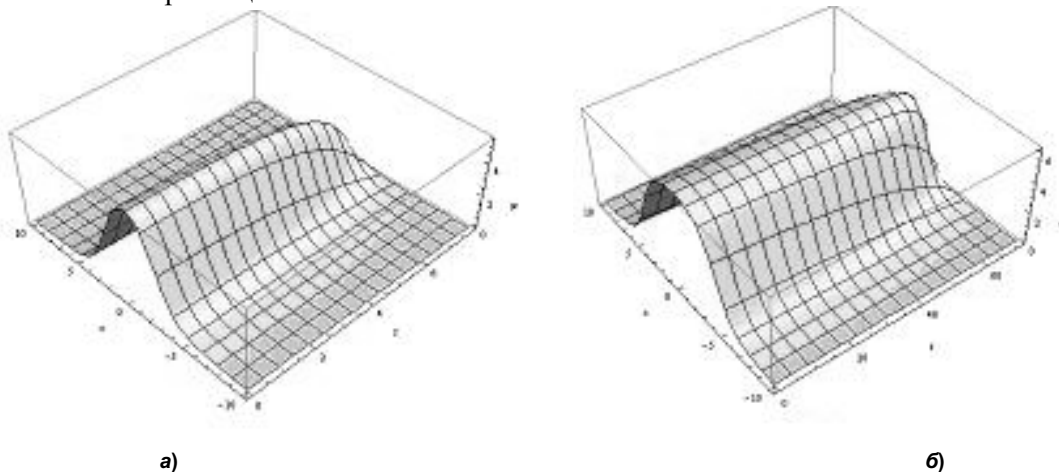
$$\left. \begin{aligned} \Omega_t &= \frac{2\varepsilon(1-\Omega)}{1+\varepsilon^2} \{ \varepsilon\beta[1+F] + \alpha \cdot R \}, \\ \varepsilon_t &= \Omega + \varepsilon^2 - \varepsilon\beta - \frac{\alpha \cdot R}{1+F} \end{aligned} \right\}, \quad (8)$$

$$\text{где } F = \frac{\Omega + \varepsilon^2}{\sqrt{(1+\varepsilon^2)(1-\Omega)}} \ln \left(\frac{\sqrt{1-\Omega} + \sqrt{1+\varepsilon^2}}{\sqrt{\Omega + \varepsilon^2}} \right),$$

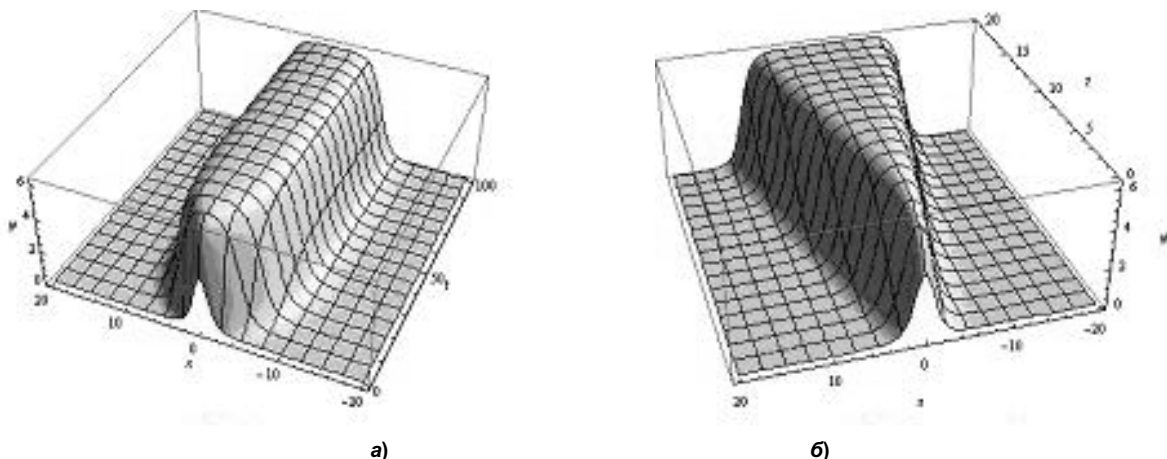
$$R = \frac{(\Omega + \varepsilon^2)^3}{6(1 + \varepsilon^2)^3} \left(21 - 58 \frac{1 - \Omega}{\Omega + \varepsilon^2} + 26 \left(\frac{1 - \Omega}{\Omega + \varepsilon^2} \right)^2 \right) +$$

$$+ \frac{(\Omega + \varepsilon^2)^4}{2(1 + \varepsilon^2)^{7/2} \sqrt{1 - \Omega}} \left(1 - 12 \frac{1 - \Omega}{\Omega + \varepsilon^2} + 18 \left(\frac{1 - \Omega}{\Omega + \varepsilon^2} \right)^2 - 4 \left(\frac{1 - \Omega}{\Omega + \varepsilon^2} \right)^3 \right) \ln \left(\frac{\sqrt{1 - \Omega} + \sqrt{1 + \varepsilon^2}}{\sqrt{\Omega + \varepsilon^2}} \right).$$

Решение уравнения (4) можно представить в виде (5), где параметры Ω и ε находятся из системы (8), решение которой проводилось численно. Эти решения имеют качественно различный вид в разных областях значений параметра Ω (рис. 3, 4). При положительных значениях параметра Ω любое начальное возмущение затухает с течением времени (рис. 3). Такие решения не являются интересными с точки зрения описания динамики ДНК, поскольку характерные времена рассматриваемых процессов намного меньше, чем характерные времена реальных конформационных изменений в молекуле ДНК [11]. При отрицательных значениях Ω начальное конформационное возмущение приводит к появлению пары кинк–антикинк (рис. 4), которая соответствует образованию открытого состояния в процессе транскрипции ДНК (рис. 5). Как видно из рис. 5, а, поворот оснований вокруг сахаро-фосфатного остова приводит к разрыву водородных связей между комплементарными парами и образованию так называемых начальных «пузырей денатурации» – *denaturation bubbles* [4] (рис. 5, б). Анализ результатов приводит к выводу о том, что ширина области такого локального раскрытия пар оснований уменьшается с ростом как коэффициента диссипации, так и параметра α , который соответствует интенсивности взаимодействия двух комплементарных цепочек.

Рис. 3. Вид решения (5) в области $0 < \Omega < 1$:

а) $\beta = 0, \alpha = 0,02, \Omega(0) = 0,04, \varepsilon(0) = 0$; б) $\beta = 0,1, \alpha = 0,02, \Omega(0) = 0,001, \varepsilon(0) = 0,005$

Рис. 4. Вид решения (5) в области $-\varepsilon^2 < \Omega < 0$:

а) $\beta = 0,1, \alpha = 0,1, \Omega(0) = -0,6, \varepsilon(0) = -1,5$; б) $\beta = 0,05, \alpha = 0,05, \Omega(0) = -0,3, \varepsilon(0) = -1,2$

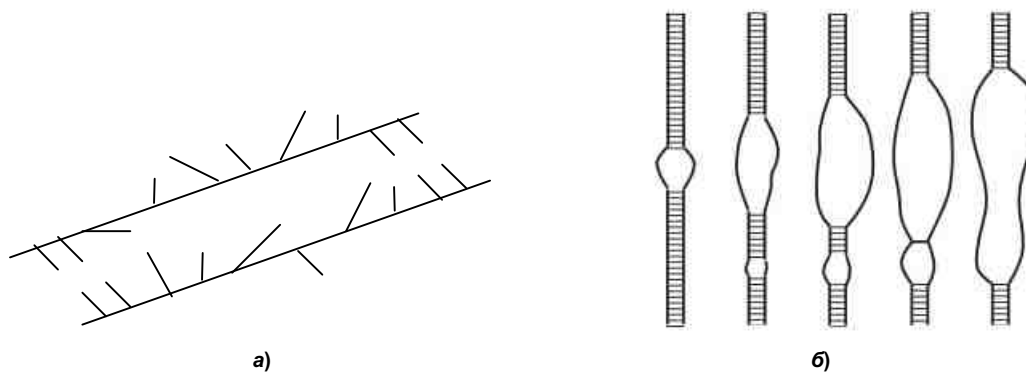


Рис. 5. Интерпретация решений:
а) поворот оснований приводит к образованию открытого состояния;
б) образование и развитие пузырей денатурации [4]

Для получения решения уравнения (4) в виде бризера преобразуем рассматриваемую систему. Полагая $\Omega = \omega^2$, получим из (7) $\varepsilon = -\omega \operatorname{ctg} \chi$. После подстановки система уравнений (8) переходит в следующую систему:

$$\left. \begin{aligned} \omega_t &= \frac{(\omega^2 - 1) \cos \chi \sin \chi}{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2} \{-\omega \beta \operatorname{ctg} \chi [1 + F_1] + \alpha \cdot R_1\}, \\ \chi_t &= \omega + \beta \cos \chi \sin \chi + \frac{(1 - \omega^2) \beta \cos^3 \chi \sin \chi}{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2} [1 + F_1] + \\ &\quad \frac{\alpha \cdot R_1 \sin^2 \chi}{\omega} \left[\frac{(\omega^2 - 1) \cos^2 \chi}{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2} - \frac{1}{1 + F_1} \right] \end{aligned} \right\}, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{\omega^2}{\sqrt{1 - \omega^2} \sin \chi \sqrt{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2}} \ln \left(\frac{\sqrt{1 - \omega^2} \sin \chi + \sqrt{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2}}{\omega} \right), \\ R_1 &= \frac{\omega^6}{6((1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2)^3} \left(21 - 58 \frac{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi}{\omega^2} + 26 \left(\frac{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi}{\omega^2} \right)^2 \right) + \\ &\quad + \frac{\omega^8}{2 \sin \chi ((1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2)^{7/2} \sqrt{1 - \omega^2}} \times \\ &\quad \times \left(1 - 12 \frac{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi}{\omega^2} + 18 \left(\frac{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi}{\omega^2} \right)^2 - 4 \left(\frac{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi}{\omega^2} \right)^3 \right) \times \ln \left(\frac{\sqrt{1 - \omega^2} \sin \chi + \sqrt{(1 - \omega^2) \sin^2 \chi + \omega^2}}{\omega} \right). \end{aligned}$$

А формула (5) примет вид

$$\varphi = 4 \operatorname{arctg} \left(\sqrt{\frac{1 - \omega^2}{\omega^2}} \cdot \frac{\sin \chi}{\operatorname{ch}(x \sqrt{1 - \omega^2})} \right). \quad (10)$$

Решение системы уравнений (9), как и в случае системы (8), проводилось численно. Решение (10) в отсутствие затухания имеет вид бризера (рис. 6, а). При наличии диссипации (рис. 6, б) амплитуда бризера уменьшается пропорционально β , т.е. начальное возмущение затухает с течением времени.

При малых начальных значениях ω решение (10) предстает в виде пары кинк-антикинк. Такая начальная локальная неоднородность также затухает с течением времени при наличии диссипации (рис. 6, в, г).

Обоснованность применения обобщенного метода Ван-дер-Поля была подтверждена путем прямого численного интегрирования уравнения движения (4).

Большой интерес для описания динамики ДНК представляет моделирование ее **взаимодействия с внешними силами**, источниками которых могут служить молекулы раствора, в котором происходит ее функционирование, макромолекулярные белковые комплексы, осуществляющие считывание генетической информации, и, наконец, внешние поля. В этом случае в рассматриваемое уравнение (4) добавляется слагаемое, описывающее действие указанных внешних сил:

$$\varphi_{tt} - \varphi_{xx} + \sin \varphi = \alpha \sin 2\varphi - \beta \varphi_t + f(x, t). \quad (11)$$

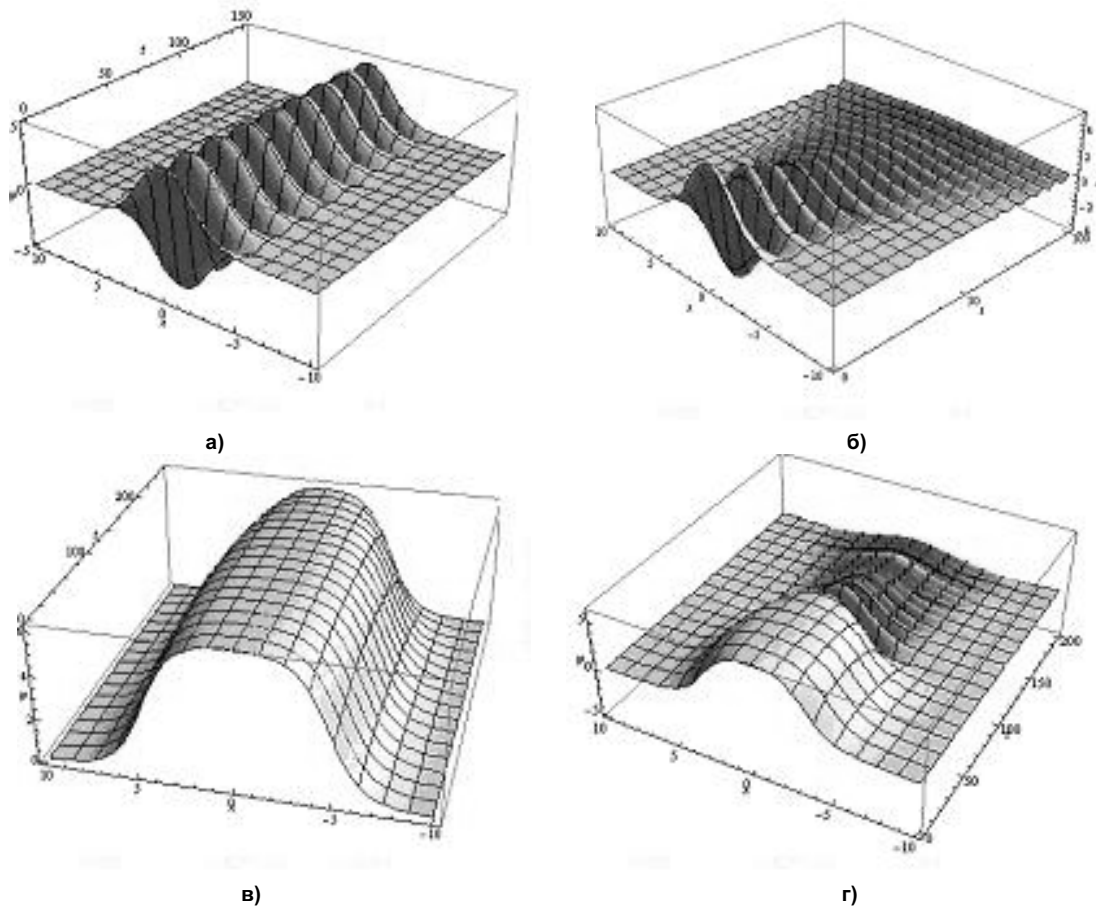


Рис. 6. Вид решения (10):

а) $\beta = 0$, $\alpha = 0,01$, $\omega(0) = 0,332039$, $\chi(0) = 1,57$; б) $\beta = 0,02$, $\alpha = 0,01$, $\omega(0) = 0,332039$, $\chi(0) = 1,57$;

в) $\beta = 0$, $\alpha = 0,01$, $\omega(0) = 0,008$, $\chi(0) = 0,5$; г) $\beta = 0,01$, $\alpha = 0,01$, $\omega(0) = 0,008$, $\chi(0) = 0,1$

Нами было исследовано два типа сил $f(x, t)$.

I. $f(x, t) = A \cos(\gamma t) \delta(x - x_0)$. Эта сила соответствует периодическому воздействию с частотой γ и амплитудой A , приложенному в точке x_0 рассматриваемой модели.

Следуя методу Ван-дер-Поля, описанному выше, получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений для определения эволюции параметров решения Ω и ε . Как и в случае (8), решение соответствующей системы проводилось численно. При $0 < \Omega < 1$ в зависимости от значений параметров уравнения начальное возмущение либо довольно быстро затухает с течением времени, либо приводит к появлению пары кинк-антикинк (рис. 7). При отсутствии внешней силы в области положительных значений Ω наблюдались только решения первого типа.

При отрицательных значениях параметра Ω ($-\varepsilon^2 < \Omega < 0$) решения уравнения предстают в виде пары кинк-антикинк (рис. 8). Значения частоты и амплитуды внешней силы не влияют на качественный вид решений, наблюдаются лишь количественные изменения.

Проведя преобразование системы уравнений для эволюции параметров по аналогии с (9) и численно решив ее, получим решения уравнения в виде бризеров (10), затухающих при наличии диссипации (рис. 9). При малых значениях параметра β на рисунке явно видно действие внешней силы (рис. 9, б). При увеличении амплитуды внешней силы это влияние становится более заметным (рис. 9, в).

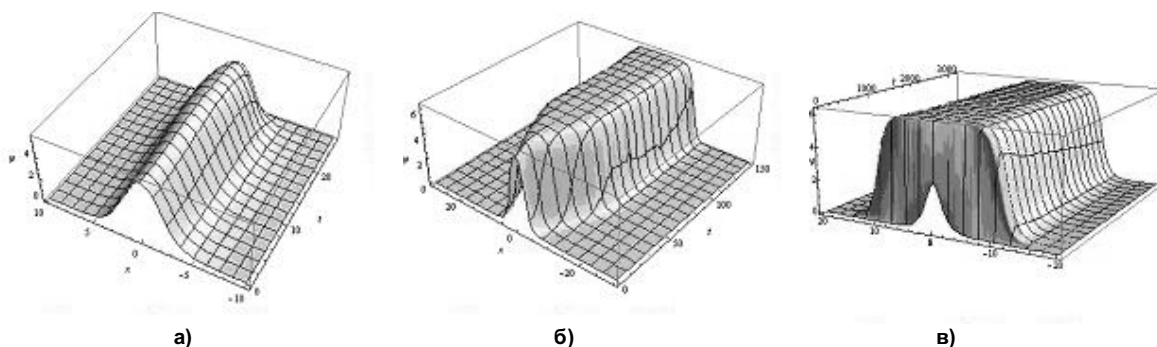


Рис. 7. Вид решения (5) в области $0 < \Omega < 1$:

- а) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\Omega(0) = 0,04$, $\varepsilon(0) = 0$;
 б) $\alpha = 0,01$, $\beta = 0,01$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\Omega(0) = 0,0332$, $\varepsilon(0) = 0$;
 в) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0,05$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\Omega(0) = 0,2$, $\varepsilon(0) = -1,0$

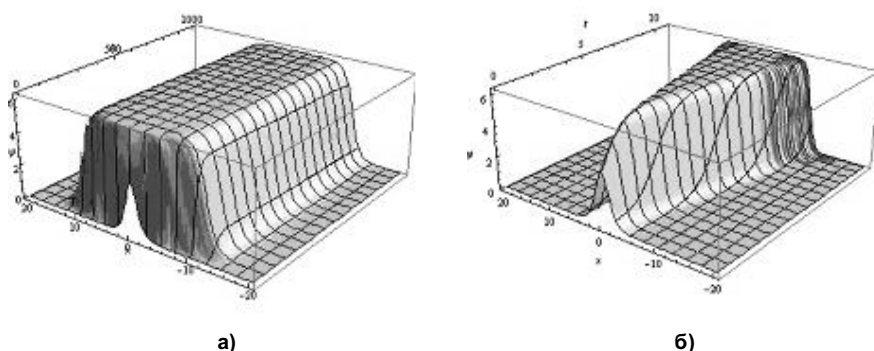


Рис. 8. Вид решения (5) в области $-\varepsilon^2 < \Omega < 0$:

- а) $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,1$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\Omega(0) = -0,6$, $\varepsilon(0) = -1,5$;
 б) $\alpha = 0,1$, $\beta = 0$, $A = 3$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,2$, $\Omega(0) = -0,1$, $\varepsilon(0) = -1,0$

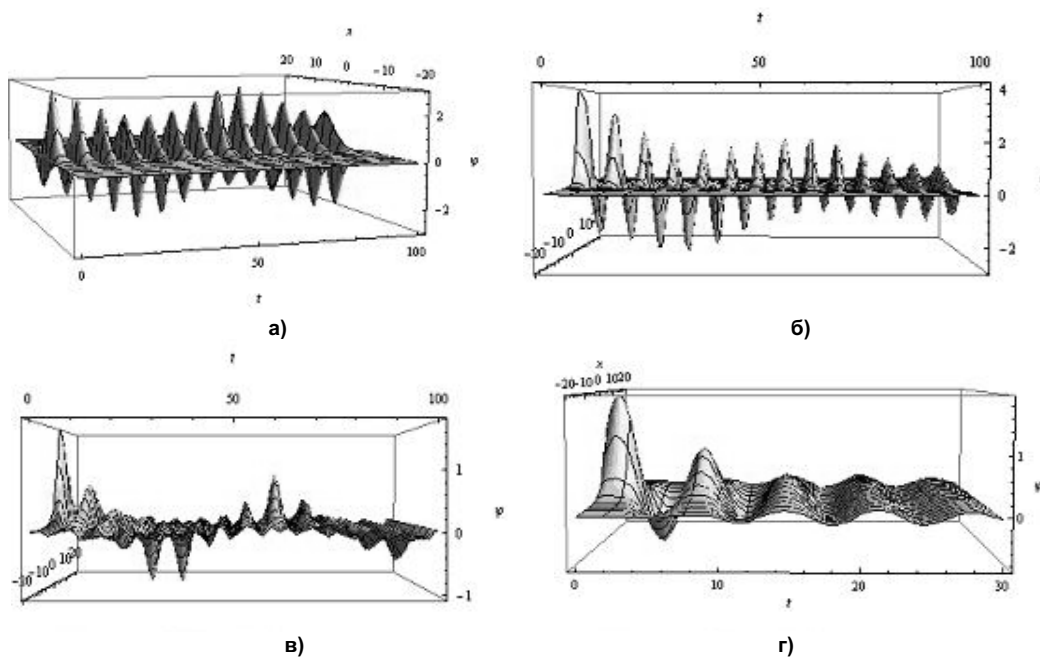
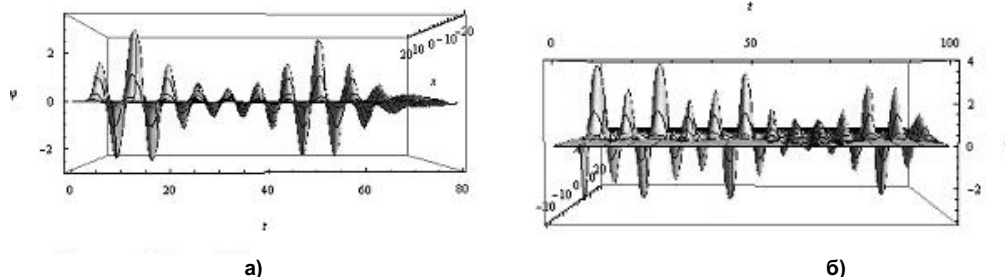


Рис. 9. Вид решения (10):

- а) $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = -\pi/4$;
 б) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0,01$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\omega(0) = 0,5$, $\chi(0) = \pi/2$;
 в) $\alpha = 0,05$, $\beta = 0,01$, $A = 5$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = \pi/2$;
 г) $\alpha = 0,05$, $\beta = 0,1$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = \pi/4$

При приближении частоты внешнего воздействия к собственной частоте колебаний брызера наблюдаются биения (рис. 10).

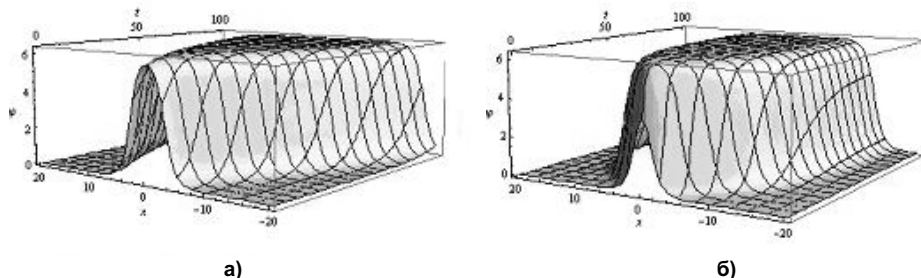
При малых начальных значения ω , χ решения предстают в виде пары кинк–антикинк (рис. 11). Заметим, что в отсутствие внешней силы решения такого типа не наблюдались.



а) б)
Рис. 10. Вид решения (10) при частоте внешнего воздействия близкой к собственной частоте колебаний брызера:

а) $\alpha = 0,05$, $\beta = 0,01$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 1,0$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = \pi/4$;

б) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0,01$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 1,0$, $\omega(0) = 0,5$, $\chi(0) = -\pi/4$



а) б)
Рис. 11. Вид решения (10) при малых начальных значениях ω , χ :

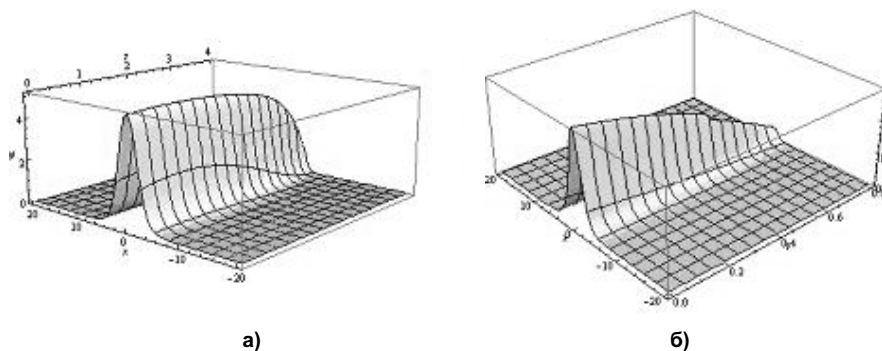
а) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0,01$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,1$, $\omega(0) = 0,001$, $\chi(0) = 0,01$;

б) $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,05$, $A = 1$, $x_0 = 1$, $\gamma = 0,2$, $\omega(0) = 0,008$, $\chi(0) = 0,01$

II. Следующий тип внешней силы описывает точечное, ограниченное во времени постоянное воздействие:

$$f(x, t) = f(t) \delta(x - x_0), \text{ где } f(t) = \begin{cases} C, & 0 \leq t \leq T \\ 0, & t \notin (0; T) \end{cases}. \quad (12)$$

Следуя методу Ван-дер-Поля, получим систему уравнений для параметров Ω и ε , аналогичную системе (8). Решение этой системы также проводилось численно. В области положительных начальных значений Ω ($0 < \Omega < 1$) при $C = -\pi$ любое начальное возмущение затухает с течением времени (рис. 12), а при $C = \pi$ в зависимости от значений параметров решение либо затухает, либо имеет вид пары кинк–антикинк (рис. 13). При $-\varepsilon^2 < \Omega < 0$ вне зависимости от знака силы получаются и затухающие решения, и решения в виде пары кинк–антикинк (рис. 14).



а) б)
Рис. 12. Вид решения (5) в области $0 < \Omega < 1$ при $C = -\pi$:

а) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0,0$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = -\pi$, $\Omega(0) = 0,01$, $\varepsilon(0) = -0,3$;

б) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0,0$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = -\pi$, $\Omega(0) = 0,1$, $\varepsilon(0) = 1,0$

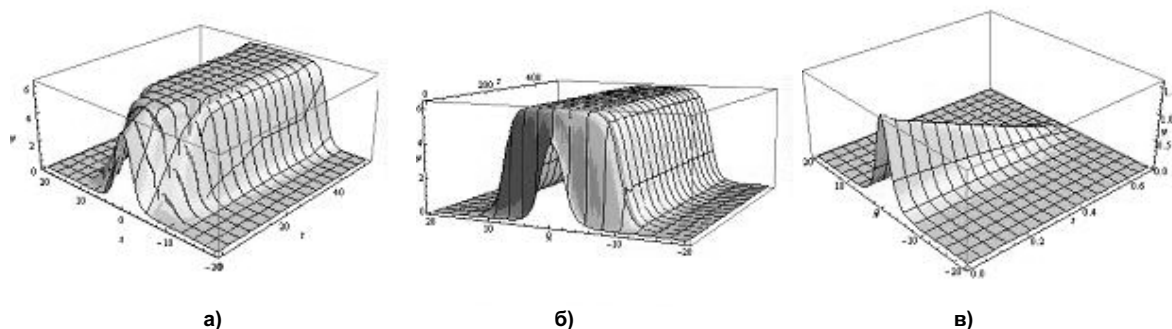


Рис. 13. Вид решения (5) в области $0 < \Omega < 1$ при $C = \pi$:
а) $\alpha = 0,02, \beta = 0,05, x_0 = 1, T = 50, C = \pi, \Omega(0) = 0,01, \varepsilon(0) = -0,3$;
б) $\alpha = 0,02, \beta = 0,1, x_0 = 1, T = 50, C = \pi, \Omega(0) = 0,2, \varepsilon(0) = 0,0$;
в) $\alpha = 0,02, \beta = 0, x_0 = 1, T = 50, C = \pi, \Omega(0) = 0,5, \varepsilon(0) = 1,5$

Проведя преобразование системы уравнений для эволюции параметров по аналогии с (9) и численно решив ее, получим решения уравнения в виде бризеров (10), затухающих при наличии диссипации (рис. 15). При малых значениях коэффициента диссипации ($\beta = 0,01$) на рисунках явно видно действие внешней силы, которое заканчивается при $t = T$ (рис. 15, а–в). Качественный вид решения не зависит от знака силы. При малых начальных значениях ω, χ в случае $C = \pi$ решения предстают в виде пары кинк–антикинк (рис. 16).

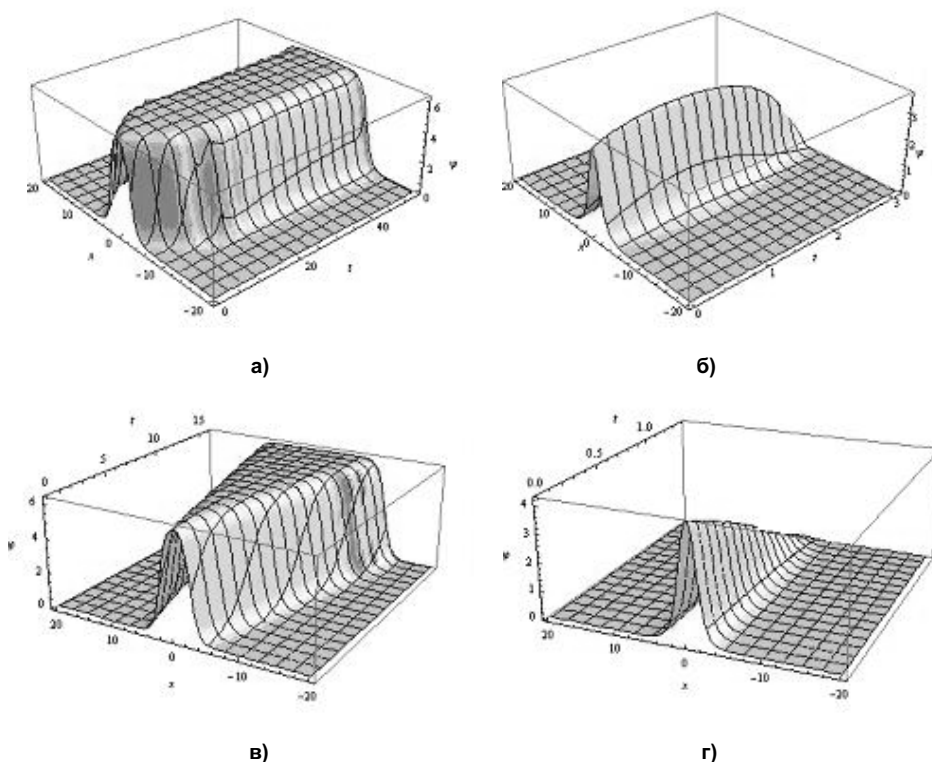


Рис. 14. Вид решения (5) в области $-\varepsilon^2 < \Omega < 0$:
а) $\alpha = 0,02, \beta = 0,05, x_0 = 1, T = 50, C = \pi, \Omega(0) = -0,99, \varepsilon(0) = -1,0$;
б) $\alpha = 0,02, \beta = 0,05, x_0 = 1, T = 50, C = -\pi, \Omega(0) = -0,01, \varepsilon(0) = -1,0$;
в) $\alpha = 0,02, \beta = 0, x_0 = 1, T = 50, C = -\pi, \Omega(0) = 0,99, \varepsilon(0) = -1,0$;
г) $\alpha = 0,02, \beta = 0, x_0 = 1, T = 50, C = \pi, \Omega(0) = -0,5, \varepsilon(0) = 1,0$

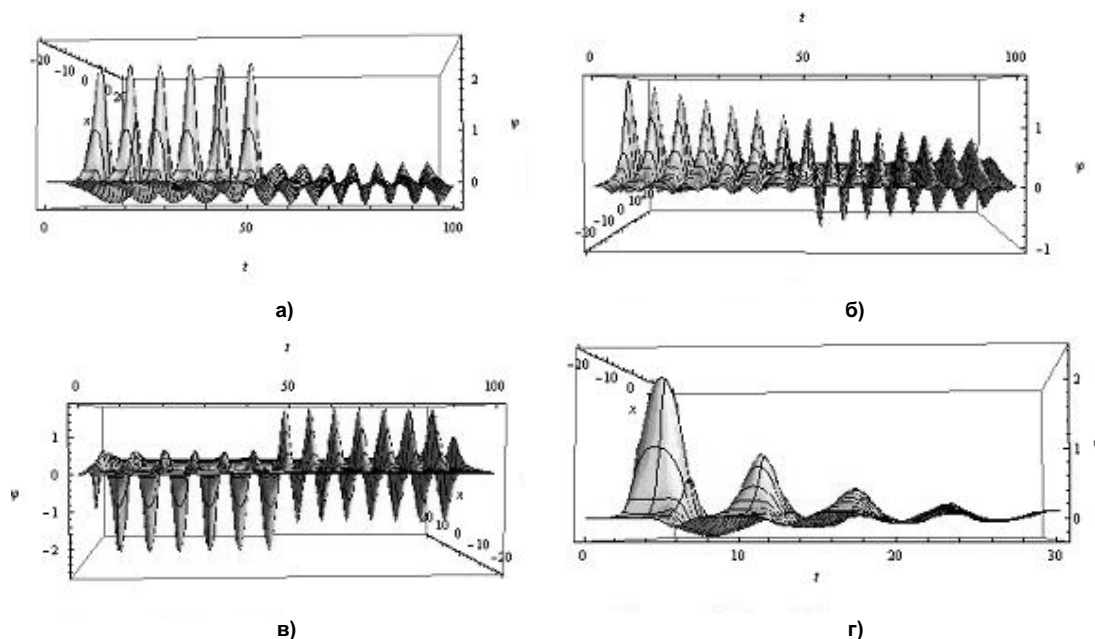
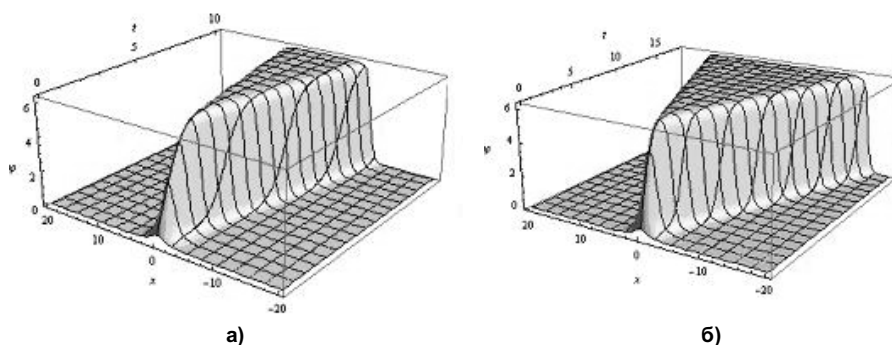


Рис. 15. Вид решения (10):

- а) $\alpha = 0,1$, $\beta = 0$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = \pi$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = \pi/4$;
 б) $\alpha = 0$, $\beta = 0,01$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = \pi$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = \pi/2$;
 в) $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = -\pi$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = -\pi/4$;
 г) $\alpha = 0,01$, $\beta = 0,1$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = \pi$, $\omega(0) = 0,9$, $\chi(0) = \pi/4$

Рис. 16. Вид решения (10) при малых начальных значениях ω , χ :

- а) $\alpha = 0,05$, $\beta = 0,01$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = \pi$, $\omega(0) = 0,008$, $\chi(0) = 0,001$;
 б) $\alpha = 0,02$, $\beta = 0$, $x_0 = 1$, $T = 50$, $C = \pi$, $\omega(0) = 0,008$, $\chi(0) = 0,001$

Итак, в настоящей работе рассмотрена модель двухцепочечной ДНК, основной вклад в динамику которой вносят вращения оснований вокруг сахара-фосфатных цепочек. Получены уравнения движения для модели. Рассмотрены частные случаи уравнений движения. С помощью обобщенного метода Ван-дер-Поля были получены два разных типа решения, представляющих интерес с точки зрения описания динамики ДНК: решения в виде бризеров и пар кинк-антикинк, описывающие соответственно начальные процессы тепловой денатурации молекулы ДНК и образование открытого состояния в процессе транскрипции. При $\phi_1 = -\phi_2$ исследовано влияние двух видов сил на динамику модели. Прямое численное интегрирование уравнений движения подтвердило обоснованность применения обобщенного метода Ван-дер-Поля для нашего случая.

Литература

1. Маневич, Л.И. Солитоны в физике полимеров / Л.И. Маневич // Высокомолекулярные соединения. Сер. С. – 2001. – Т. 43, № 12. – С. 2215–2288.
2. Якушевич, Л.В. Методы теоретической физики в исследованиях свойств биополимеров / Л.В. Якушевич. – Пущино: НЦБИ. – 1990. – 123 с.
3. Yakushevich, L.V. Nonlinear Physics of DNA / L.V. Yakushevich. – John Wiley & Sons, Chichester, 1998. – 204 с.

4. Peyrard, M. Nonlinear dynamic and statistical physics of DNA / M. Peyrard // *Nonlinearity*. – 2004. – 17. – R1–R40.
5. Zdravcovic, S. Peyrard-Bishop-Dauxois Model of DNA Dynamics and Impact of Viscosity / S. Zdravcovic, J.A. Tuszynski, M.V. Sataric // *J. Comput. Theor. Nanosu.* – 2005. – V. 2, № 2. – P. 1–9.
6. Gaeta, G. Results and limits of the soliton theory of DNA transcription / G. Gaeta // *Journal of Biological Physics*. – 1999. – V. 24, № 2–4. – P. 81–96.
7. Yakushevich, L.V. On the nonlinear dynamics of topological solitons in DNA / L.V. Yakushevich, A.V. Savin, L.I. Manevitch // *Phys. Rev. E*. – 2002. – V. 66.
8. Zhang, C. Soliton excitations in DNA double helices / C. Zhang // *Phys. Rev. A*. – 1987. – V. 35. – P. 886–891.
9. Солитоны и нелинейные волновые уравнения / Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис. – М.: Мир, 1988. – 694 с.
10. Новокшенов В.Ю. Математические модели в естествознании (Введение в теорию солитонов) / В.Ю. Новокшенов. – Уфа: изд. УГАТУ, 1999. – 98 с.
11. Рубин, А.Б. Биофизика: в 2 т. / А.Б. Рубин. – М.: Изд. МГУ: Наука, 2004. – Т. 1 – 448 с.
12. Ферро- и антиферромагнетодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны / М.А. Шамсутдинов, И.Ю. Ломакина, В.Н. Назаров и др. – Уфа: Гилем, 2007. – 368 с.

Поступила в редакцию 19 марта 2009 г.

THEORETICAL STUDY OF INFLUENCE OF DISSIPATION AND POINT EXTERNAL IMPACT ON DNA DYNAMICS

Two-chained DNA model the basic contribution to which dynamic is given by rotation of the bases around sugar-phosphate backbone is presented. Two types of solutions – breathers and kink-antikink pairs – are obtained using generalized Van der Pol method. These solutions describe initial stages of thermal DNA denaturation and open state formation during transcription respectively. The influence of two types of external forces on the model dynamics is also investigated.

Keywords: nonlinear dynamics of DNA, breathers, Van der Pol method.

Zakiryanov Farit Kabirovich – Associate professor, Theoretical Physics department, Bashkir State University.

Закирьянов Фарит Кабирович – доцент, кафедра теоретической физики, Башкирский государственный университет.

e-mail: farni@rambler.ru

Kiseleva Tatyana Aleksandrovna – undergraduate of the Theoretical Physics department of Bashkir State University.

Киселева Татьяна Александровна – магистрант кафедры теоретической физики, Башкирский государственный университет.

ИНДУЦИРОВАННЫЙ УСТАЛОСТНЫМИ ИСПЫТАНИЯМИ ГРАДИЕНТ ФАЗОВОГО СОСТАВА И ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ В СТАЛИ 45Г17Ю3

С.В. Коновалов, Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов

Методами дифракционной электронной микроскопии проведены исследования градиентной структуры, формирующейся в стали 45Г17Ю3 на стадии разрушения в условиях усталостных испытаний, характеризующейся закономерным изменением скалярной и избыточной плотности дислокаций, амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки стали, объемной доли ϵ -мартенсита в зависимости от расстояния до поверхности разрушения образца.

Ключевые слова: градиент, дефектная структура, усталость, электрические импульсы, сталь.

Введение

В последние годы сформировалось и продолжает бурно развиваться новое научное направление – фундаментальные исследования структуры и свойств градиентных структурно-фазовых состояний в твердых телах [1–5]. Это обусловлено, с одной стороны, ужесточением требований в современных условиях к свойствам конструкционных материалов и, с другой стороны, практически полным исчерпанием резерва повышения эксплуатационных характеристик материалов традиционно используемыми в промышленности способами. Параметры структуры, концентрация дефектов и фазовый состав в градиентных структурах являются переменной величиной. Соответственно этому должны меняться эксплуатационные характеристики материала как поверхностно чувствительные, так и объемные (твердость и прочность, пластичность и коррозионная стойкость, износо- и трещиностойкость и т.д.). Изменение их с расстоянием от поверхности может подчиняться различным законам, которые являются, как правило, следствием нелинейного поведения системы. Целью настоящей работы являлся анализ, выполненный на качественном и количественном уровне, градиентных структурно-фазовых состояний, формирующихся в аустенитной стали 45Г17Ю3 в условиях многоцикловых усталостных испытаний по обычной схеме и в условиях промежуточной электроимпульсной обработки, выявление закономерностей их образования.

Материал и методика исследования

В качестве материала для исследований использовали горячекатаную сталь аустенитного класса 45Г17Ю3 в состоянии поставки. Из листов горячего проката вырезались образцы, форма и размеры которых идентичны представленным в [6]. Усталостные испытания проводились на специальной установке по схеме циклического симметричного консольного изгиба [6]. Верхнее значение напряжения цикла нагрузки подбиралось экспериментальным путем таким, чтобы образец до разрушения выдерживал $(12...20) \cdot 10^4$ циклов нагружения, и составляло в среднем 20 МПа. Расчет напряжения цикла нагрузки осуществляли с помощью компьютерной программы ANSYS 3.1 [7]. Температура испытаний ~ 300 К, частота нагружения образцов изгибом составляла 20 Гц. При испытаниях определялось число циклов, выдерживаемых образцом до полного разрушения. Фиксацию ранних стадий зарождения трещин осуществляли путем измерения скорости распространения в испытуемом образце ультразвуковых волн (использовали метод автоциркуляции импульсов) [8, 9]. Для электростимулирования усталостно нагруженных образцов использовали генератор мощных токовых импульсов низких частот со следующими параметрами [10]: максимальная амплитуда тока 10 кА, длительность импульса 100 мкс, форма импульса полусинусоидальная, частота токовых импульсов 20 Гц.

В результате усталостных испытаний образец был разрушен после $10,2 \cdot 10^4$ циклов нагружения. Электростимулирование (обработка импульсным электрическим током) образцов на промежуточной стадии усталостного нагружения ($N_n = 7 \cdot 10^4$ циклов) и последующие усталостные испытания привели к разрушению стали после $17,9 \cdot 10^4$ циклов [6].

Структурные исследования проводились методами оптической (прибор МИМ-10) и электронной дифракционной (приборы ЭМ-125 и ЭМ-125к) микроскопии. Определение размеров и объемных долей деформационных микродвойников и ε -мартенсита проводилось по изображениям, подтвержденным микродифракционными картинками и темнопольными изображениями, полученными в рефлексах соответствующих фаз. Для приготовления фольг для просмотра в электронном микроскопе образцы разрезались на тонкие пластинки толщиной 0,2–0,3 мм на электроискровом станке. Режим вырезки был подобран таким образом, что не вносил дополнительной деформации и, следовательно, не влиял на структуру образца. Места вырезки фольг для исследования находились на расстояниях 500, 800 и 2300 мкм от поверхности разрушения. Вырезанные таким образом фольги утонялись химически и полировались электролитически. Составы электролитов следующие: для химического утонения – 50мл H_3PO_4 + 100мл H_2O_2 , для электрополировки – насыщенный раствор Cr_2O_3 в H_3PO_4 . Режим полировки: плотность тока 0,5–0,7 А/см², температура полировки ~330 К. Химическое утонение образцов проводилось при комнатной температуре.

Результаты исследования и их обсуждение

Образцы для усталостных испытаний, как отмечалось выше, были вырезаны из листового проката (вдоль направления проката). Выполненные методами металлографии исследования показали, что зерна в приготовленных образцах (далее по тексту «исходное состояние») вытянуты вдоль направления проката; средний угол отклонения продольной оси зерен от направления проката $\varphi \sim 8^\circ$; средние размеры зерен – продольные $\langle L \rangle = 20,8$ мкм, поперечные $\langle D \rangle = 10,3$ мкм. В объеме зерен исходной стали, так же как и в стали, разрушенной в условиях усталостного нагружения, присутствует дислокационная субструктура, которая, в соответствии с [11, 12], была классифицирована следующим образом: субструктура дислокационного хаоса (рис. 1, а), сетчатая дислокационная субструктура (неразориентированная и разориентированная) (рис. 1, б, в), фрагментированная (фрагменты анизотропные и изотропные) дислокационная субструктура (рис. 1, г). Практически всегда в объеме фрагментов присутствует дислокационная структура в виде хаоса или сеток. Сравнительно редко в сетчатой дислокационной субструктуре обнаруживаются оборванные малоугловые границы, как правило, формирующиеся от большеугловых границ зерен.

Объемные доли перечисленных дислокационных субструктур (неразориентированная и разориентированная сетчатая дислокационная субструктуры, а также изотропные и анизотропные фрагменты при оценке объемной доли объединены, соответственно) в исходном материале составляют 0,1; 0,2 и 0,7 дислокационной структуры материала соответственно. Очевидно, что основной причиной формирования в стали широкого набора дислокационных субструктур является термомеханическая обработка, осуществленная путем высокотемпературной прокатки, инициирующей протекание возврата и динамической рекристаллизации [13, 14].

Зерна исследуемой стали как исходного состояния, так и в разрушенном после усталостных испытаний состояниях, независимо от типа присутствующей в них дислокационной субструктуры, содержат большое число изгибных экстинкционных контуров, что указывает на упруго-пластический изгиб материала [15–17]. Источниками внутренних полей напряжений являются границы (рис. 2, а) и стыки границ (рис. 2, б) зерен, границы микродвойников (рис. 2, в), кристаллы ε -мартенсита (рис. 2, г). Оценки амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки стали в исходном состоянии (χ), выполненные по методике, предложенной в [17], показали, что в среднем по материалу величина $\langle \chi \rangle = 460 \text{ см}^{-1}$; относительно типа дислокационной субструктуры в последовательности хаос, сетки, фрагменты $\chi = 240, 395, 510 \text{ см}^{-1}$ соответственно. Следовательно, в исходной структуре наиболее напряженной является фрагментированная субструктура, наименее напряженной – субструктура дислокационного хаоса.

Как и при обычной усталостном нагружении по схеме с промежуточным электростимулированием в зоне разрушения стали формируются три основных типа дислокационной субструктуры – хаотическая, сетчатая и фрагментированная (рис. 1). Относительное содержание данных типов субструктуры изменяется по мере удаления от поверхности разрушения соответственно (рис. 3).

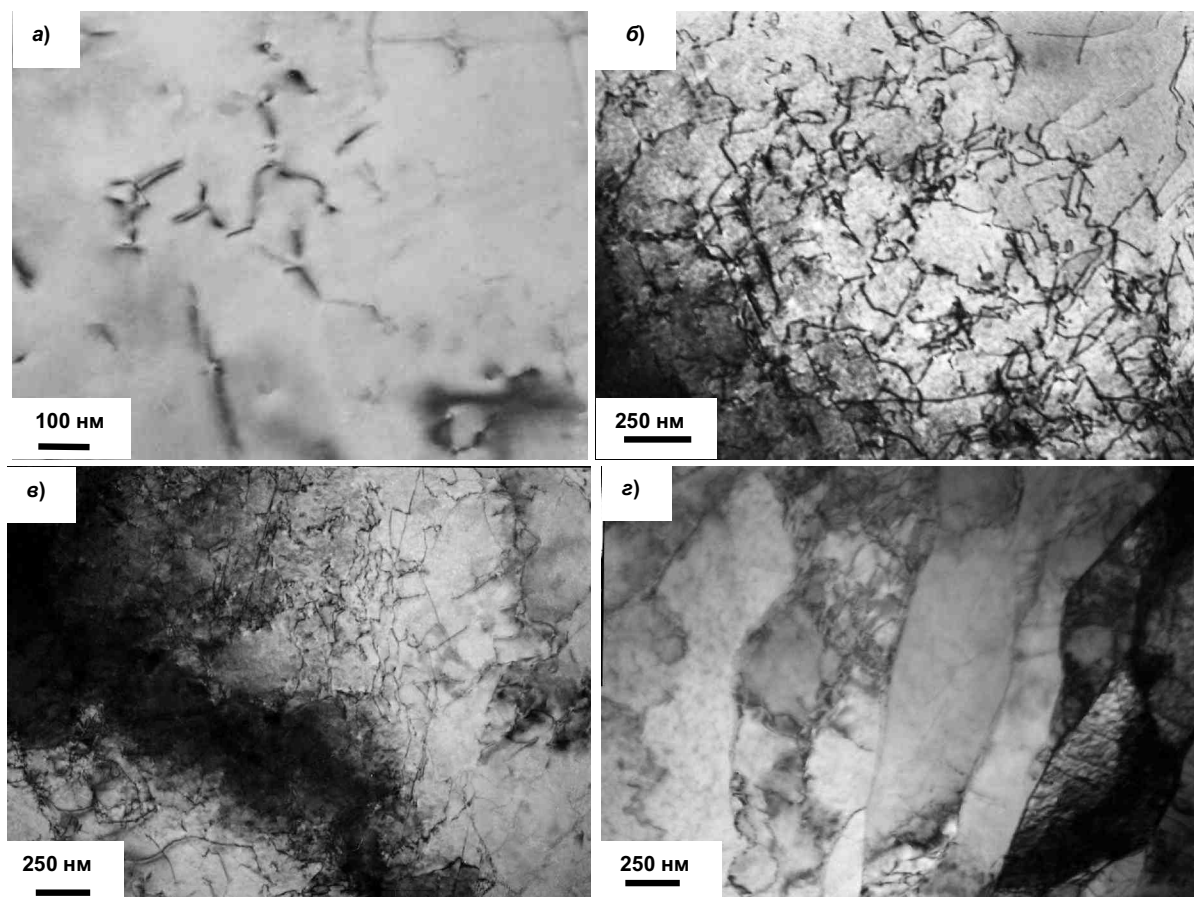


Рис. 1. Дислокационная субструктура стали 45Г17Ю3, разрушенной в результате усталостных испытаний: а – структура дислокационного хаоса; б – сетчатая неразориентированная субструктура; в – сетчатая разориентированная субструктура; г – анизотропные фрагменты

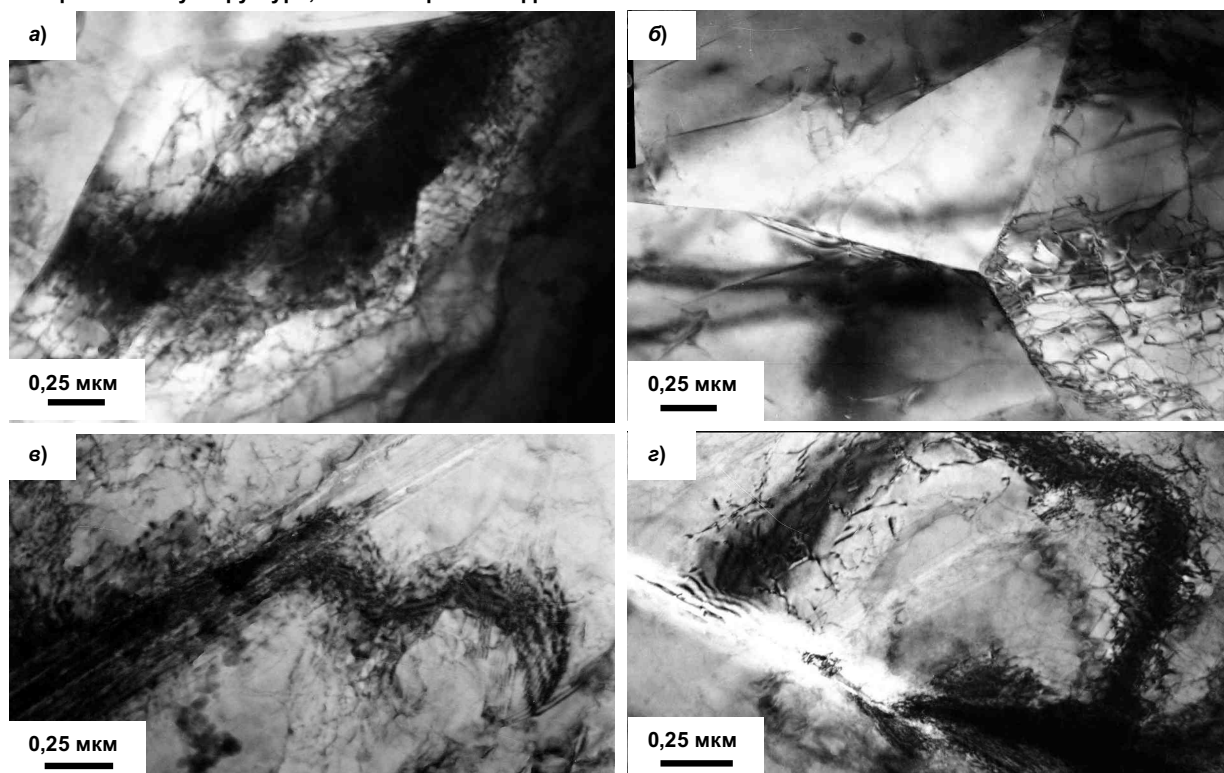


Рис. 2. Изгибные экстинкционные контуры, присутствующие в стали 45Г17Ю3, разрушенной в результате усталостных испытаний. Источниками кривизны-кручения стали являются: а – граница раздела зерен; б – стык границ зерен; в – граница микродвойника; г – кристалл ϵ -мартенсита

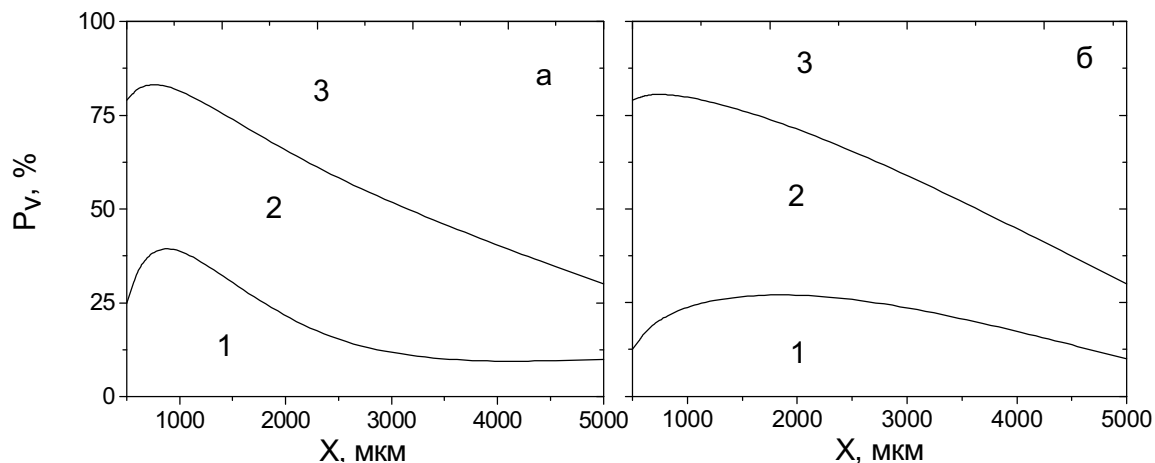


Рис. 3. Градиент дислокационных субструктур, формирующихся в стали 45Г17Ю3, разрушенной в условиях усталостных испытаний по непрерывной схеме (а) и при промежуточном электростимулировании (б). Цифрами обозначены области существования: 1 – субструктуры дислокационного хаоса; 2 – сетчатой дислокационной субструктуры; 3 – фрагментированной субструктуры

Необходимо отметить, что вблизи зоны разрушения преобладающей дислокационной субструктурой является сетчатая. При этом объемная доля материала с сетчатой субструктурой в стали с промежуточным электростимулированием выше, чем в стали, разрушенной по непрерывной схеме испытаний. То, что сетчатая дислокационная субструктура, как правило, предшествует зарождению разрушения, ранее уже отмечалось. Именно в этой дислокационной субструктуре чаще появляется ε -мартенсит с последующим зарождением микротрещин на межфазных и внутрифазных границах. Тем самым подтверждается решающая роль конкретного типа – сетчатой субструктуры в формировании условий разрушения пластичных материалов [11, 12, 16–18].

По мере удаления от поверхности разрушения сетчатая субструктура и субструктура дислокационного хаоса замещаются фрагментированной. Следовательно, циклирование стали 45Г17Ю3 сопровождается следующей схемой превращения дислокационной субструктуры:

дислокационный хаос $\Rightarrow$ сетчатая $\Rightarrow$ фрагментированная субструктуры.

В многочисленных работах показано, что фрагментированная субструктура является (при различных видах холодных механических испытаний) конечной стадией развития дислокационной субструктуры, предшествующей разрушению материала [11, 12, 14, 16–18].

Фрагментированная дислокационная субструктура, являясь доминирующей после термомеханической обработки стали прокаткой (структура исходного состояния), в процессе испытаний стали на усталость постепенно утрачивает свои позиции, несмотря на то, что фиксируется переход сетчатой субструктуры во фрагментированную. При деформировании в условиях нагрева возможна эволюция фрагментированной субструктуры в субзеренную с последующим протеканием процесса динамической рекристаллизации [13, 14].

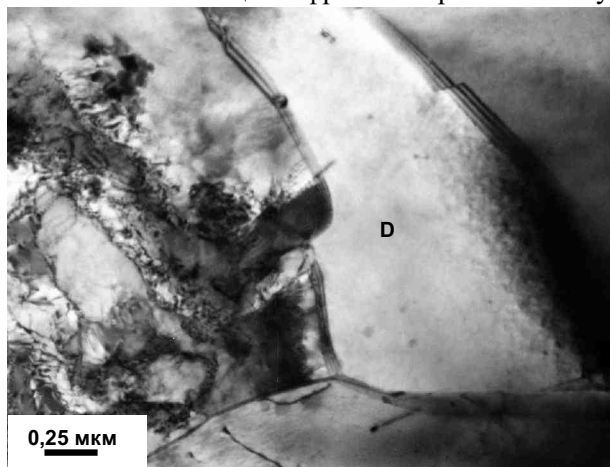


Рис. 4. Зерно динамической рекристаллизации (D), присутствующее в стали 45Г17Ю3, разрушенной в результате усталостных испытаний

Данный процесс, естественно, сопровождается снижением объемной доли материала, занятого фрагментированной субструктурой. Ранее подобные факты наблюдались при исследовании феррито-перлитной стали [17]. Можно предположить, что испытание стали 45Г17Ю3 на усталость также сопровождается протеканием процесса динамической рекристаллизации.

Действительно, присутствие зерен динамической рекристаллизации, подтверждающих высказанное предположение, обнаруживается методами металлографии и электронной микроскопии (рис. 4). Анализируя представленный на данном рисунке снимок, можно отметить сравнительно малые размеры таких зерен, весьма

низкую плотность дислокаций в них и весьма существенную плотность дислокаций в окружающих их объемах материала.

Усталостные испытания стали по непрерывной схеме нагружения и в условиях промежуточного электростимулирования сопровождаются формированием градиента скалярной плотности дислокаций и амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки. На рис. 5 представлены результаты исследования градиента скалярной плотности дислокаций, усредненной с учетом объемных долей типов дислокационной субструктуры. Отчетливо видно, что в результате промежуточного электростимулирования в зоне разрушения формируется дислокационная субструктура, средняя по образцу скалярная плотность дислокаций $\langle \rho \rangle$ в которой существенно (в ~5 раз) выше, чем в исходном состоянии (рис. 5, кривая 1). В то же время в образце, разрушенном по непрерывной схеме испытаний, величина $\langle \rho \rangle$ в зоне разрушения практически совпадает с соответствующей характеристикой структуры исходного состояния (рис. 5, кривая 2), а максимум плотности дислокаций располагается на некотором удалении (~2300 мкм) от зоны разрушения.

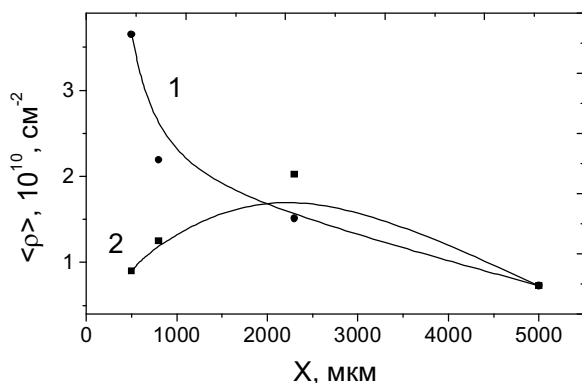


Рис. 5. Градиент скалярной плотности дислокаций, усредненной с учетом объемных долей типов дислокационной субструктуры: 1 – сталь, разрушенная в условиях электростимулирования на промежуточной ($N_n = 7 \cdot 10^4$ циклов) стадии испытаний; 2 – сталь, разрушенная по непрерывной схеме испытаний

Результаты, представленные на рис. 6, демонстрирующие изменение скалярной плотности дислокаций в выявленных типах дислокационной субструктуры от расстояния до поверхности разрушения, подтверждают результаты рис. 5 и детализируют их. А именно, независимо от схемы нагружения, плотность дислокаций максимальна в сетчатой субструктуре и минимальна в структуре дислокационного хаоса. В зоне разрушения плотность дислокаций в сетчатой и фрагментированной субструктурах существенно выше в стали, разрушенной в условиях промежуточного электростимулирования.

Из анализа градиента амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки разрушенных образцов стали, усредненного с учетом объемных долей типов дислокационной субструктуры, следует, что в образцах, разрушенных по непрерывной схеме нагружения, амплитуда кривизны-кручения кристаллической решетки в зоне разрушения в ~1,9 раза выше, чем в исходной стали и в ~1,4 раза выше, чем в зоне разрушения образца, электростимулированного на промежуточной стадии испытаний. Следовательно, одной из причин пластификации стали является ре-

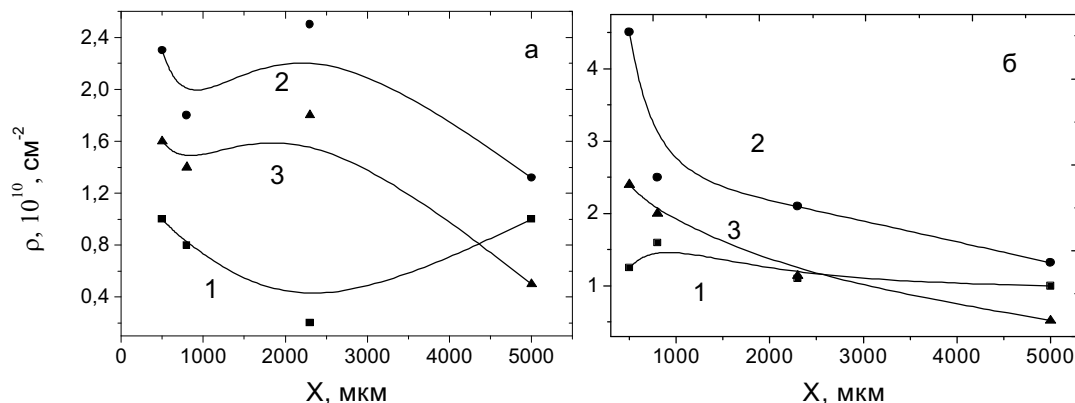


Рис. 6. Градиент скалярной плотности дислокаций, формирующих структуру дислокационного хаоса (кривая 1), сетчатую структуру (кривая 2) и расположенных во фрагментах (кривая 3): а – сталь, разрушенная в условиях непрерывного нагружения; б – в условиях промежуточного электростимулирования

лаксация пиковых напряжений при электростимулировании. Результаты, приведенные на рис. 7, позволяют детализировать картину формирования внутренних полей напряжений в разрушенных образцах. Видно, что в зоне разрушения стали, деформированной по непрерывной схеме нагружения, амплитуда кривизны-кручения кристаллической решетки всех дислокационных субструктур заметно выше, чем в стали, разрушенной в условиях промежуточного электростимулирования. Пиковые напряжения, более чем в два раза превышающие напряжения структуры исходного состояния, формируются в стали, разрушенной по непрерывной схеме в сетчатой субструктуре. В стали, разрушенной в условиях промежуточного электростимулирования, структуры с ярко выраженными пиковыми значениями внутренних напряжений нет. Сравнение амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки и плотности изгибных контуров в разрушенных состояниях образцов без и с электростимулированием показывает, что после электростимулирования релаксируют наиболее мощные концентраторы напряжения. В результате этого плотность концентраторов практически не меняется, а может быть и возрастает (за счет мелких концентраторов), но среднее значение амплитуды кривизны-кручения убывает. Поэтому процессы зарождения и особенно развития трещин отодвигаются к более высокому значению числа циклов нагружения, что свидетельствует о пластифицирующей роли электростимулирования стали.

Усталостные испытания стали 45Г17ЮЗ сопровождаются формированием в зоне разрушения микродвойников деформации. Микродвойники образуются преимущественно в сетчатой дислокационной субструктуре, т.е. в субструктуре, имеющей наиболее высокие значения скалярной плотности дислокаций и амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки. Одной из причин двойникового разрушения исследуемой стали при циклическом нагружении, является высокий уровень внутренних действующих полей напряжений, достигающий наибольших значений именно в сетчатой дислокационной субструктуре. Сравнительный анализ структуры, формирующейся в зоне разрушения образцов, испытанных по непрерывной схеме нагружения и в условиях промежуточного электростимулирования показали, что при второй схеме нагружения скалярная плотность дислокаций и плотность микродвойников наивысшая.

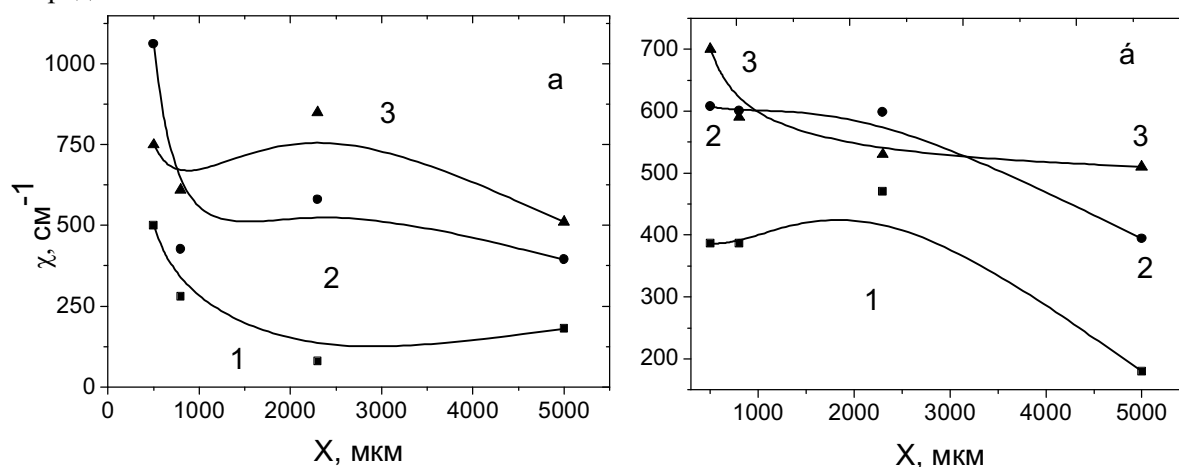


Рис. 7. Градиент амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки 45Г17ЮЗ, разрушенной по непрерывной схеме нагружения (а) и в условиях промежуточного электростимулирования (б): (1) – субструктура дислокационного хаоса; (2) – сетчатая субструктура; (3) –фрагментированная субструктура

Как отмечалось выше, в стали уже в исходном состоянии присутствует незначительное количество кристаллов ε -мартенсита, расположенных вдоль границ зерен. В зоне разрушения образцов, испытанных по непрерывной схеме нагружения, объемная доля кристаллов ε -мартенсита существенно (в ~2–3 раза) возрастает. При этом, как и в исходной стали, наблюдается формирование кристаллов ε -мартенсита лишь одной системы. Кристаллы ε -мартенсита формируются в большинстве случаев в сетчатой дислокационной субструктуре, значительно реже – в хаотической (рис. 8, а). Во фрагментах ε -мартенсит не обнаружен.

Присутствие в стали кристаллов мартенситной фазы сопровождается микрорастрескиванием материала в процессе приготовления тонких фольг. Микротрещины образуются вдоль межфазных границ, разделяющих γ - и ε -фазы (рис. 8). В фольге, приготовленной из объема материала, прилегающего к зоне разрушения, плотность микротрещин заметно (в ~8,5 раз) выше исходного

состояния. Можно констатировать, что появление ε -мартенсита изменяет механизм разрушения исследуемой стали. Вместо развития микротрещин по разориентированным границам деформационного происхождения (типичным для разрушения материалов без двойников и ε -мартенсита [11, 12]) более выгодным является развитие микротрещин по межфазным γ - ε границам.

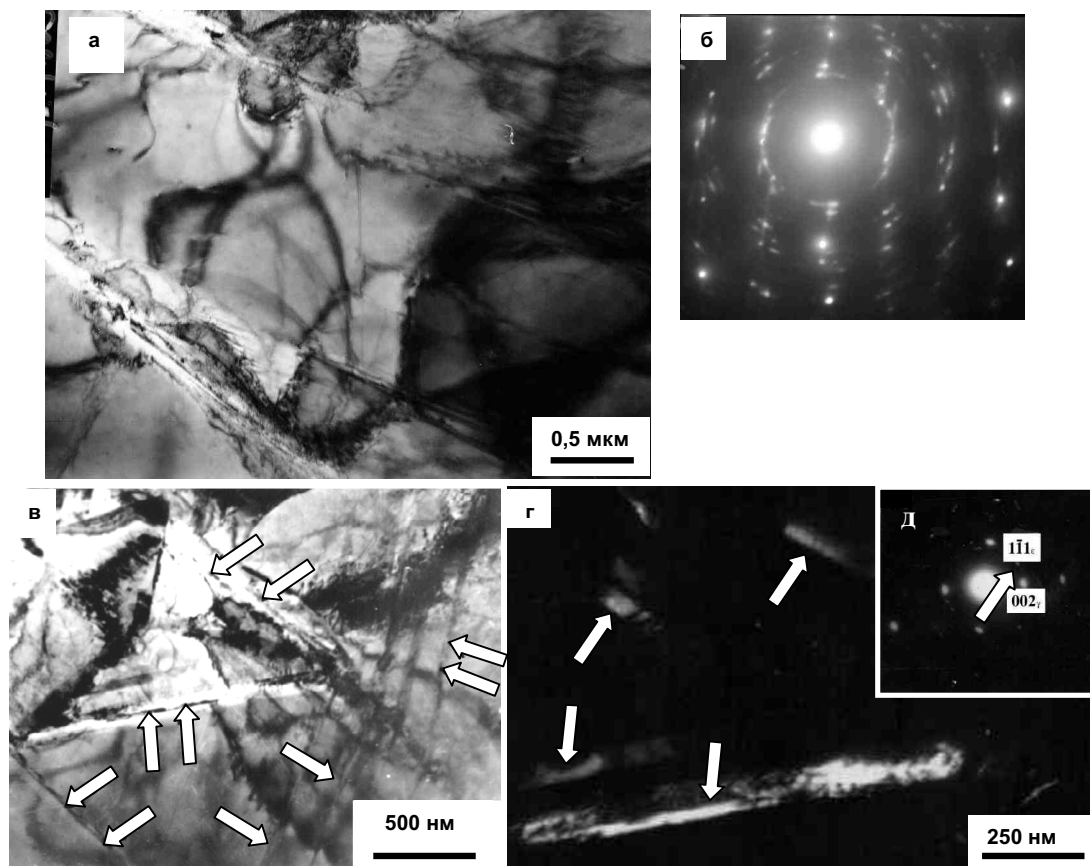


Рис. 8. Электронно-микроскопическое изображение тонкой структуры стали 45Г17Ю3, сформировавшейся в зоне разрушения по непрерывной схеме усталостных испытаний (а, б) и после усталостных испытаний электростимулированного на промежуточном этапе образца (в–д). На участке (в) присутствует несколько пересекающихся систем пластин ε -мартенсита (отмечены стрелками). Темнопольное изображение (г) кристаллов мартенсита получено в рефлексе $[1\bar{1}1]$ ε -мартенсита. На (д) стрелкой указан рефлекс, в котором получено темнопольное изображение (г)

Усталостные испытания стали, электростимулированной на промежуточной стадии нагружения, также сопровождаются $\gamma \rightarrow \varepsilon$ мартенситным превращением. Отличительной (от структуры исходного состояния и структуры материала, разрушенного по непрерывной схеме нагружения) особенностью структуры зоны разрушения таких образцов является формирование объемов, содержащих кристаллы мартенсита нескольких смежных систем мартенситного $\gamma \rightarrow \varepsilon$ превращения (рис. 8, в–д). Такой процесс $\gamma \rightarrow \varepsilon$ превращения, несомненно, является релаксационным и уменьшает опасность зарождения очагов разрушения.

Выводы

Проведены исследования стали 45Г17Ю3, разрушенной в результате циклических усталостных испытаний, и выявлено формирование ярко выраженной градиентной структуры, характеризующейся закономерным изменением с увеличением расстояния от поверхности разрушения относительного содержания типов дислокационных субструктур, скалярной плотности дислокаций, амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки. Показано, что одной из причин разрушения стали является образование кристаллов ε -мартенсита, на межфазных границах которых зарождаются микротрещины, развивающиеся в магистральную трещину. Причиной мартенситного $\gamma \rightarrow \varepsilon$ превращения являются внутренние поля напряжений, локализованные в сетчатой дислокационной субструктуре.

Обработка образцов на промежуточной стадии нагружения мощными импульсами электрического тока, приводящая к увеличению усталостной долговечности стали в 1,75 раза, сопровождается формированием в зоне разрушения структуры, характеризующейся повышенной склонностью к деформационному упрочнению, повышенной стабильностью кристаллической решетки по отношению к $\gamma \Rightarrow \epsilon$ мартенситному превращению, повышенной способностью к релаксации внутренних полей напряжений. Очевидно, что одной из причин этого является изменение состояния внутрифазных границ раздела (границ раздела зерен, субзерен, микродвойников) и твердого раствора на основе железа в результате электростимулирования стали.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.» (гос. контракт № П411).

Литература

1. Козлов, Э.В. Градиентные структурно фазовые состояния в твердых телах / Э.В. Козлов, А.М. Глезер, В.Е. Громов // Известия РАН. Серия Физическая. – 2003. – Т. 67, № 10. – С. 1374.
2. Градиентные структурно-фазовые состояния в рельсовой стали / В.Е. Громов, В.Е. Громов, В.А. Бердышев, Э.В. Козлов. – М.: Недра ком. ЛТД, 2000. – 176 с.
3. Градиентные структуры в перлитной стали / Э.В. Козлов, В.Е. Громов, В.В. Коваленко и др. – Новокузнецк: Изд. СибГИУ, 2004. – 224 с.
4. Градиентные структурно-фазовые состояния в сталях / Ю.Ф. Иванов, В.В. Коваленко, Э.В. Козлов, В.Е. Громов. – Новосибирск: Наука, 2006. – 280 с.
5. Физическая природа формирования и эволюции градиентных структурно-фазовых состояний в сталях и сплавах / В.В. Коваленко, Э.В. Козлов, Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов. – Новокузнецк: ООО «Полиграфист», 2009. – 557 с.
6. Усталость сталей при импульсном токовом воздействии / О.В. Соснин, В.Е. Громов, Э.В. Козлов и др. – Новокузнецк: Изд. СибГИУ, 2004. – 464 с.
7. Анализ напряжений в пластине с несимметричным вырезом / С.В. Коновалов, В.И. Базайкин, В.Е. Громов и др. // Вестник горно-металлургической секции Российской академии естественных наук. Отделение металлургии. – 2001. – Вып. 11. – С. 85–89.
8. Приборы для неразрушающего контроля материалов и изделий: в 2 т. / под ред. В.В. Клюева. – М.: Машиностроение, 1976. – Т. 2
9. Муравьев, В.В. Скорость звука и структура сталей и сплавов / В.В. Муравьев, Л.Б. Зуев, К.Л. Комаров. – Новосибирск: Наука, 1996. – 283 с.
10. Установка для исследования электростимулированной усталости / С.В. Коновалов, Е.В. Семакин, О.Б. Соснин и др. // Вестник горно-металлургической секции Российской академии естественных наук. Отделение металлургии. – 2000. – Вып. 10. – С. 97–100.
11. Конева, Н.А. Природа субструктурного упрочнения / Н.А. Конева, Э.В. Козлов // Изв. вузов. Физика. – 1982. – № 8. – С. 3–14.
12. Структурные уровни пластической деформации и разрушения / В.Е. Панин, Ю.В. Гриняев, В.И. Данилов и др. – Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1990. – 232 с.
13. Горелик, С.С. Рекристаллизация металлов и сплавов / С.С. Горелик. – М.: Металлургия, 1978. – 568 с.
14. Рыбин, В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов / В.В. Рыбин. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
15. Электронная микроскопия тонких кристаллов / П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон и др. – М.: Мир, 1968. – 574 с.
16. Эволюция субструктуры при горячей прокатке высокоазотистой аустенитной стали X18AG15 / С.П. Ефименко, Э.В. Козлов, Л.А. Теплякова и др. // Металлы. – 1995. – № 5. – С. 30–36.
17. Физика и механика волочения и объемной штамповки / В.Е. Громов, Э.В. Козлов, В.И. Базайкин и др. – М.: Недра, 1997. – 293 с.
18. Конева, Н.А. Эволюция субструктуры и зарождение разрушения / Н.А. Конева, Л.И. Тришкина, Э.В. Козлов // Современные вопросы физики и механики материалов: сб. науч. тр. – Санкт-Петербург: НИИ НМ СПбГУ, 1997. – С. 322–332.

Поступила в редакцию 5 октября 2009 г.

THE GRADIENT OF A PHASE COMPOSITION AND THE DEFECT STRUCTURE IN A 0,45Cr17Mn3Al STEEL INDUCED BY FATIGUE TEST

The investigations of the gradient structure induced by fatigue loading of 0,45Cr17Mn3Al steel on the fracture stage in the conditions of electric current treatment being characterised by regular change of scalar and excess dislocation density, amplitude of curvature-torsion of a crystal lattice of a steel, ε -martensite volume fraction depending on distance to a fracture sample surface are carried out by the methods of diffraction electron microscopy.

Keywords: gradient, defect structure, fatigue, electrical impulses, steel.

Konovalov Sergey Valerievich – Candidate of Technical Sciences, associate professor of the Physics department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Коновалов Сергей Валерьевич – кандидат технических наук, доцент, кафедра физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк.
e-mail: konovalov@physics.sibsiu.ru

Ivanov Yurii Fedorovich – Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, Head of the group of material science in the laboratory of the plasma emissive electronics, Institute of High Current Electronics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Tomsk-62.

Иванов Юрий Федорович – доктор физико-математических наук, профессор, руководитель группы материаловедения в лаборатории плазменной эмиссионной электроники, Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук, г. Томск-62.
e-mail: yufi@mail2000.ru

Gromov Victor Evgenievich – Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Physics department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Громов Виктор Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк.
e-mail: gromov@physics.sibsiu.ru

МЕТОДИКА РАСЧЕТА СДВИГОВОЙ ВЯЗКОСТИ ЖИДКОГО ЖЕЛЕЗА МЕТОДОМ ГРИНА–КУБО

И.В. Мальцев, А.А. Мирзоев

Рассмотрен вопрос о применении равновесной молекулярной динамики к расчету коэффициента сдвиговой вязкости жидкого железа. Для расчета использован метод Грина–Кубо. Построены зависимости вязкости от параметров используемого термостата, количества частиц системы, шага интегрирования.

Ключевые слова: молекулярная динамика, сдвиговая вязкость, жидкое железо, метод Грина–Кубо.

Введение

Метод молекулярной динамики уже давно используется для исследования разнообразных физических систем. В последнее десятилетие были разработаны [1–3] потенциалы взаимодействия, позволяющие моделировать системы атомов железа в различных условиях. Один из наиболее подходящих потенциалов для моделирования жидкого железа при нормальных условиях был предложен Менделевым и др. [2].

Ранее уже рассматривались вопросы о влиянии параметров моделирования и точности вычисления коэффициента сдвиговой вязкости [4, 5] для жидкости Леннарда–Джонса. Было показано [4], что коэффициент сдвиговой вязкости (далее вязкость) очень слабо зависит от числа частиц. Для количества частиц больше 256 вычисленные значения лежат близко друг к другу в пределах погрешности. Верле и др. [6] не обнаружили зависимости от числа частиц.

В литературе практически отсутствует информация по влиянию внутренних параметров моделирования: термостат, шаг интегрирования. Для проведения масштабных численных экспериментов по определению вязкости жидкого железа представляется важным рассмотрение этих вопросов и нахождение параметров, при которых вышеупомянутая зависимость от числа частиц отсутствует.

Метод расчета

Вязкость в настоящей работе рассчитывалась методом Грина–Кубо [7, 8], для чего приведенная в равновесие система частиц, взаимодействующих посредством потенциала [4], развивалась продолжительное время. Подробности применения метода Грина–Кубо могут быть найдены в работе [9]. Температура в системе была установлена равной $T = 1950$ К, давление равнялось нулю. Широко известный термостат Нозе–Гувера [10], использованный в этой работе, имеет один важный варьируемый параметр, который отвечает за скорость релаксации температуры. Пакет LAMMPS [11], при помощи которого проводилось моделирование, принимает этот параметр как время, необходимое для релаксации системы.

В табл. 1 приведены параметры проведенных численных экспериментов. Каждый эксперимент включал в себя 100 независимых расчетов с различными начальными конфигурациями. В каждом эксперименте для получения автокорреляционной функции тензора давления участвовало 39 000 субтраекторий [9], и только при шаге интегрирования $0,0001 \cdot 10^{-12}$ усреднение проводилось по 18 500 субтраекториям.

Коэффициент самодиффузии был рассчитан методом Эйнштейна–Гельфанда [12]. Так как вязкость в методе Грина–Кубо представлена как интеграл по времени от автокорреляционной функции тензора давления, то необходимо задать время, при котором следует оборвать вычисление интеграла. Мы использовали здесь значение времени, достаточное, чтобы интеграл изменялся мало (около некоторого среднего), что автоматически приводит к учету медленно сходящейся к нулю части автокорреляционной функции при больших t («long-time tail»).

Это время было принято равным 10^{-11} с, что соответствует 10 000 шагов моделирования при шаге, равном $0,001 \cdot 10^{-12}$ с. Определение погрешности $\Delta\eta(t)$ было основано на хорошо известной формуле для стандартного отклонения от среднего $\eta^*(t)$, примененной в работе [5]:

$$\Delta\eta(t) = \left[\frac{\sum_k (\eta_k(t) - \eta^*(t))^2}{N_{\text{exp}}(N_{\text{exp}} - 1)} \right]^{1/2}, \quad (1)$$

где N_{exp} – количество независимых экспериментов, $\eta_k(t)$ – вязкость, полученная в отдельном эксперименте.

Таблица 1

Количество частиц N	Шаг интегрирования $dt, 10^{-12}$ с	Параметр термостата $t_{\text{relax}}, 10^{-12}$ с	Коэффициент самодиффузии $D, 10^{-9}$ м ² /с	Коэффициент сдвиговой вязкости $\eta, 10^{-2}$ пуаз
2000	0,001	10,0	$4,28 \pm 0,02$	$4,15 \pm 0,02$
4000	0,001	10,0	$4,38 \pm 0,02$	$4,17 \pm 0,01$
2000	0,0001	10,0	$4,27 \pm 0,03$	$4,17 \pm 0,03$
2000	0,0002	10,0	$4,27 \pm 0,05$	$4,15 \pm 0,02$
2000	0,001	1,0	$4,29 \pm 0,02$	$4,13 \pm 0,02$
2000	0,001	100,0	$4,27 \pm 0,02$	$4,18 \pm 0,02$
2000	0,001	1000,0	$4,27 \pm 0,03$	$4,14 \pm 0,02$

Результаты и обсуждение

Из табл. 1 видно, что коэффициент самодиффузии монотонно уменьшается при увеличении времени релаксации для термостата, но при этом разница между вычисленными значениями менее 1 %. Коэффициент сдвиговой вязкости не обнаруживает (рис. 1) монотонной зависимости от параметра термостата, разница значений здесь также мала и составляет около 1 %. Этот результат позволяет при выборе параметра термостата руководствоваться минимизацией времени для приведения и удержания модели в равновесии.

Значения вязкости систем с различным числом частиц также очень близки, что подтверждает для моделируемой системы жидкого железа результат, полученный для жидкости Леннарда–Джонса. Так как компьютерный расчет вязкости занимает продолжительное время, то возможность ограничиваться малым (~2000 частиц) размером системы позволяет обеспечить лучшее усреднение автокорреляционной функции при той же длительности моделирования.

Отсутствие практически значимой разницы коэффициента вязкости при различном выборе шага интегрирования также позволяет использовать большой шаг интегрирования. Для оценки

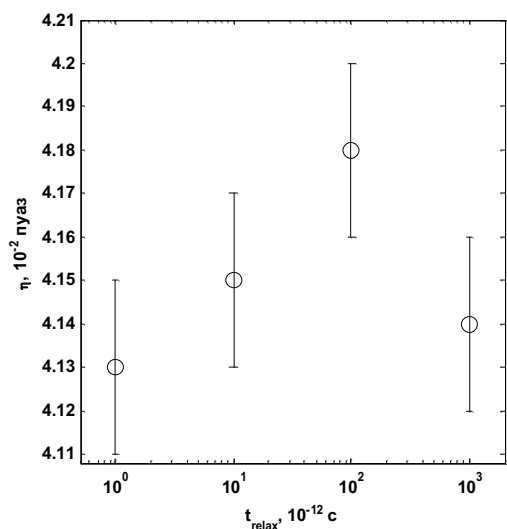


Рис. 1. Зависимость коэффициента сдвиговой вязкости от параметра термостата

верхней границы шага интегрирования, при котором еще возможно получение коэффициента вязкости, был проведен молекулярно-динамический эксперимент в шагом $0,005 \cdot 10^{-12}$ с. Было обнаружено, что система частиц железа перестает быть устойчивой: расчет вязкости дает заведомо неверный результат.

Получение корректной автокорреляционной функции тензора давления требует усреднения по большому количеству начальных конфигураций. От ее точности во многом зависит сходимость интеграла вязкости в методе Грина–Кубо. Использование в работе 100 независимых конфигураций позволило добиться погрешности расчета вязкости менее 1 %.

Полученное в настоящей работе значение вязкости совпадает со значением, полученным ранее [9], что подтверждает воспроизводимость расчетов.

Заключение

Проведенные численные эксперименты показали слабую зависимость коэффициента сдвиговой вязкости от параметров моделирования: разница значений составляет около 1%. Выявлен предельный шаг интегрирования $0,005 \cdot 10^{-12}$ с, при котором система частиц становится неустойчивой и не дает значения вязкости. Полученные данные могут быть применены для планирования молекулярно-динамических расчетов вязкости.

Численные эксперименты проведены на базе суперкомпьютерного центра ЮУрГУ [13].

Литература

1. Mendelev, M.I. Development of New Interatomic Potentials Appropriate for Crystalline and Liquid Iron / M.I. Mendelev, S. Han, D.J. Srolovitz *et al.* // *Phil. Mag. A.* – 2003. – V. 83. – P. 3977.
2. Koci, L. Molecular dynamics study of liquid iron under high pressure and high temperature / L. Koci, A.B. Belonoshko, R. Ahuja // *Phys. Rev. B.* – 2006. – V. 73. – P. 224113.
3. Белащенко, Д.К. Применение модели погруженного атома к жидким металлам. Жидкое железо / Д.К. Белащенко // *Журнал физической химии.* – 2006. – V. 80. – P. 1–11.
4. Jerome J. Erpenbeck Shear viscosity of the Lennard-Jones fluid near the triple point: Green-Kubo results / Erpenbeck Jerome J. // *Phys. Rev. A.* – 1988. – V. 38. – P. 6255.
5. Ryckaert, J.-P. Evaluation of transport coefficients of simple fluids by molecular dynamics: comparison of Green-Kubo and nonequilibrium approaches for shear viscosity / J.-P. Ryckaert, A. Bellemans, G. Ciccotti, G.V. Paolini // *Phys. Rev. A.* – 1989. – V. 39. – P. 259.
6. Levesque, D. Computer «Experiments» on Classical Fluids. IV. Transport Properties and Time-Correlation Functions of the Lennard-Jones Liquid near Its Triple Point / D. Levesque, L. Verlet, J. Kurkijarvi // *Phys. Rev. A.* – 1973. – V. 7. – P. 1690.
7. Green, M.S. Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids / M.S. Green // *J. Chem. Phys.* – 1954. – V. 22. – P. 398–413.
8. Kubo, R. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems / R. Kubo // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1957. – V. 12. – P. 570–586.
9. Мальцев, И.В. Вязкость жидкого железа: молекулярно-динамический расчет с потенциалом погруженного атома / И.В. Мальцев, А.А. Мирзоев // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика».* – 2009. – Вып. 1. – № 22(155). – С. 79–83.
10. Nose, S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods / S. Nose // *J. Chem. Phys.* – 1984. – V. 81. – P. 511.
11. <http://lammmps.sandia.gov/>
12. Helphand, E. Transport Coefficients from Dissipation in a Canonical Ensemble / E. Helphand // *Phys. Rev.* – 1960. – V. 119. – P. 1.
13. http://supercomputer.susu.ru/computers/ckif_ural/

Поступила в редакцию 8 февраля 2010 г.

APPLICATION OF GREEN-KUBO METHOD TO LIQUID IRON SHEAR VISCOSITY CALCULATION

Green-Kubo method within equilibrium molecular-dynamics simulation was applied to calculate shear viscosity of liquid iron. Simulation-parameters (thermostat strength, number of particles, integration step) dependence of shear viscosity coefficient was obtained.

Keywords: molecular-dynamics simulation, shear viscosity, liquid iron, Green-Kubo method.

Maltsev Ilya Vladimirovich – post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Мальцев Илья Владимирович – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: maltsev.ilya@gmail.com.

Mirzoev Alexander Aminulaevich – Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Мирзоев Александр Аминулаевич – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С НАНОТРУБКАМИ

Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин

Предлагается для СВЧ-излучения длиной волны $\lambda \sim 1$ см способ усиления в активной среде. Накачка среды производится воздействием нестационарного электрического поля на распыленные в воздухе нанотрубки. Получено аналитическое значение коэффициента усиления излучения. При объемной доле нанотрубок $s_0 \approx 10^{-3}$ за счет использования нанои импульсного источника напряжения большой мощности (плотность энергии ~ 200 Дж/м³) коэффициент усиления слабого сигнала $G_0 = 0,055$ м⁻¹. Рассмотрен один из возможных механизмов усиления СВЧ-излучения в пространственном резонаторе.

Ключевые слова: СВЧ-излучение, наночастицы, электрическое поле.

Введение. Представляет научный и практический интерес исследование различных физических процессов, обусловленных наличием пылевых частиц в нейтральной газовой среде, в ионизированном газе, исследования оптических свойств неупорядоченных фрактальных кластеров, образованных сферическими наночастицами [1, 2]. Это направление является перспективным в связи с различными технологическими приложениями: процессы горения, плазменные технологии, физика атмосферы, управляемый термоядерный синтез. В случае плазменных технологий большой интерес вызывает кристаллизация пылевых частиц в газоразрядной плазме – образование упорядоченных структур [3, 4], которые имеют место в случае самоорганизующихся систем. Для описания нелинейной спектроскопии в видимом диапазоне излучения вырожденного электронного газа в металлических наночастицах сферической формы привлекается аппарат квантовой механики [5]. Вызывают интерес процессы, обусловленные взаимодействием излучения с наночастицами и наноструктурами [6, 7]. В работе [6] для СВЧ-излучения показана возможность создания нестационарного многомодового волноводного канала из проводящих вытянутых вдоль одного направления наночастиц, исходя из их концентрации в воздухе 1 кг на 1 м³. Показано, что если длина частиц превосходит поперечные размеры в 10–20 раз, то величина апертуры вводимого излучения составляет 13°–22°, что в 4–7 раз больше, чем в случае наночастиц сферической формы [7]. Увеличение поляризуемости вытянутых наночастиц позволяет значительно уменьшить объемную концентрацию наночастиц. Полученные в [6, 7] результаты формально не зависят от абсолютных размеров частиц, которые могут меняться в широком диапазоне: от наноразмеров ($\sim 10^{-7}$ см) до микронных ($\sim 10^{-4}$ см). Верхний предел определяется возможностью частиц удерживаться в воздухе в поле сил тяжести. Уникальные эффекты возникают при взаимодействии высокочастотного излучения с рядом квантовых наноструктур в продольном магнитном поле: квантовым кольцом конечной ширины, квантовым цилиндром конечной толщины и квантовой проволочкой [8, 9]. Поверхностная проводимость в сильном магнитном поле за счет статического скин-эффекта может оказаться заметно больше объемной [10] на величину $(\omega_c \tau)^2$, где условие сильного магнитного поля выполняется при низких температурах в случае $\omega_c \tau \gg 1$, τ – время релаксации, $\omega_c = |e|B/m^*c$ – циклотронная частота, m^* – эффективная масса, e – заряд электрона, c – скорость света. Сами гальваномагнитные эффекты весьма чувствительны к геометрии поверхности Ферми. Существенный вклад вносят медленные электроны, например в электропроводность. В этом случае существует значение энергии, при которой изменяется топология изохронических поверхностей, в результате чего плотность электронных состояний имеет корневую особенность – особенность Ван Хофа (в этом случае поверхность содержит точку, в которой скорость электронов обращается в нуль).

В случае цилиндра при наличии продольного магнитного поля B на кривой коэффициента поглощения существует только одна точка резонанса, связанная с электронными переходами между соседними уровнями $n \rightarrow n+1$ (n – радиальное квантовое число). Переходы с изменением магнитного квантового числа запрещены. Резонансная частота определяется частотой конфин-

мента $\omega_0 \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ и циклотронной частотой ω_c (в работе [8] приведено соотношение $\omega_c/\omega_0 \sim 0,1$). В случае квантовой проволоки ситуация, хотя изначально сложнее, но масштабы величин ω_0, ω_c остаются прежними. В этом случае в дипольном приближении возможны только переходы, обусловленные изменением обоих квантовых чисел n и m . Кривая коэффициента поглощения имеет серию пиков, имеющих дублетную структуру, причем пики, составляющие дублет, располагаются на расстоянии ω_c друг от друга. Дублеты располагаются периодически с периодом Ω , причем высота пиков резко уменьшается с увеличением частоты ω . Для дублета с минимальной частотой имеет место соотношение $\omega = \Omega + \omega_c/2$, в котором $\Omega \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $\omega_c/\Omega \sim 0,1$. При $\tau \approx 10^{-12} \text{ с}$ условие сильного магнитного поля достигается при $\omega_0 \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$. В нашем случае $\omega \sim 10^{10} - 10^{11} \text{ с}^{-1}$. При $t = 20^\circ \text{C}$ и обычно используемых значениях магнитной индукции $B \sim 1 \text{ Тл}$ ($\omega\tau \leq 1$) относительное изменение коэффициента поглощения для большинства металлов весьма мало.

В работе [11] было показано, что в воздушной среде с удлиненными наночастицами с объемной долей $c_0 \sim 10^{-3}$ возможен механизм усиления и самофокусировки (в волновом канале и пространственном резонаторе) СВЧ-излучения. Накачка нелинейной среды может быть произведена с помощью нестационарного электрического поля. В [11] наночастицы аппроксимировались гантелью с невесомым стержнем, обладающим конечным электрическим сопротивлением и коэффициентом упругости. В данной работе в отличие от [11] предлагается рассмотреть реальные наночастицы – нанотрубки.

Перспективными материалами для рассмотренной в работе [11] задаче являются одно- и многослойные нанотрубки (с детальным обзором работ в этой области можно ознакомиться в [12–14]). Возможность изготавливать нанотрубки большой протяженности по сравнению с их поперечными размерами позволит получить величину предварительной накачки энергии при значительно меньших значениях энергии нестационарных полей. Кроме того (например, в соответствии с приведенными в [15] результатами), модуль Юнга (или коэффициент упругости) однослойных и многослойных углеродных нанотрубок порядка $\sim 1 \text{ ТПа}$, что в несколько раз больше модуля Юнга стали. Такие большие значения модуля Юнга приводят применительно к задаче, рассмотренной в [11], к величине резонансного колебания наночастицы порядка $\omega \sim 10^{11} - 10^{12} \text{ с}^{-1}$ (длина волны генерируемого излучения $\lambda \sim 0,1 - 1 \text{ см}$), что позволяет рассмотреть сигналы в коротковолновой части СВЧ-излучения.

В данной работе предлагается для СВЧ-излучения длиной волны $\lambda \sim 1 \text{ см}$ на основе полученной системы материальных уравнений способ усиления в активной среде. Накачка среды производится воздействием нестационарного электрического поля на распыленные в воздухе удлиненные нанотрубки. Получено аналитическое выражение коэффициента усиления электромагнитного излучения. В работе оценены при объемной доле нанотрубок $c_0 \approx 10^{-3}$ и атмосферном давлении в воздухе необходимое значение нестационарного электрического поля для накачки среды (за счет использования наноимпульсного источника напряжения большой мощности – плотность энергии $\sim 200 \text{ Дж/м}^3$) и коэффициент усиления слабого сигнала ($\Gamma_0 = 0,055 \text{ м}^{-1}$). Рассмотрен один из возможных механизмов усиления СВЧ-излучения в пространственном резонаторе.

Вывод системы материальных уравнений. Пусть имеется неограниченная область, состоящая из вытянутых наночастиц (нанотрубок) концентрации n . Пусть через такую область распространяется электромагнитное излучение. Электрическое поле обозначим как $\vec{E}(t, \vec{r})$. Рассмотрим наночастицы в форме вытянутых цилиндров, у которых радиусы R значительно меньше длины цилиндров $L/R \gg 1$ (одно- и многослойные нанотрубки). В этом случае индуцированный на поверхности длинного цилиндра заряд, отнесенный к единице длины, запишется [16, с. 35] в виде

$$\tilde{\tau}(x) = \frac{x \cdot G(t)}{2X \left(1 + \frac{1}{2X} \ln \left(1 - 4 \frac{x^2}{L^2} \right) \right)}, \quad (1)$$

где $-L/2 \leq x \leq L/2$, $X = -1 + \ln(L/R)$, R и L – соответственно радиус и длина цилиндра, $G(t)$ – плотность энергии нестационарного электрического поля.

Для линейной поляризации получим [16, с. 35]

$$P_0(t) = n \int_{-L/2}^{L/2} x \tilde{\tau}(x) dx \approx G(t) V \frac{1}{4\pi n_x}, \quad \frac{1}{n_x} = \frac{A(X)}{2X} \frac{L^2}{R^2}, \quad (2)$$

где n_x – коэффициент деполяризации [6, с. 43], $V = \pi R^2 L$, $A(X)$ – безразмерная величина,

$$A(X) = \int_0^1 \frac{\xi^2 d\xi}{1 + \frac{1}{2X} \ln(1 - \xi^2)}. \quad (3)$$

С учетом (2) для «инверсии населенностей» [11, 17] получим

$$N(t) = \frac{1}{2} n G(t) P_0(t) = \frac{c_0 |G(t)|^2}{8\pi n_x}, \quad (4)$$

где $c_0 = nV$, n – концентрация наночастиц.

Наличие индуцированного заряда $\tilde{\tau}(x)$ позволяет записать уравнение колебаний для величины продольного смещения цилиндра в виде

$$u_{tt} = \frac{\tilde{W}}{\rho} u_{xx} + \frac{1}{\pi R^2 \rho} \tilde{\tau}(x) E(t), \quad (5)$$

где $\tilde{W} = \tilde{E}(1 - \sigma) / [(1 + \sigma)(1 - 2\sigma)]$ – коэффициент упругости, $\tilde{E}$ – модуль Юнга, σ – коэффициент Пуассона, ρ – плотность материала наночастиц, $E(t)$ – напряженность электрического поля, $u_{tt} = \partial^2 u / \partial t^2$, $u_{xx} = \partial^2 u / \partial x^2$.

Для получения формального решения неоднородного уравнения гиперболического типа (5) воспользуемся общим вариантом метода Фурье [18, с. 468], несколько видоизменив его применительно к нашей задаче. Решение разложим в ряд Фурье по собственным функциям и выделим единственную резонансную гармонику $u \sim \sin(\pi x / L)$ (акустическая ветвь). В результате из (5) получим [18, с. 468]

$$u_{tt} + \tilde{\Omega}^2 u = \frac{1}{\pi R^2 \rho} \frac{G(t)L}{2X} B(X) E(t) \sin(\pi x / L), \quad (6)$$

где $\tilde{\Omega}^2 = \pi^2 \tilde{W} / (\rho L^2)$; $G(t)$ – медленно меняющаяся по сравнению с $E(t)$ функция. При выводе (6) в правой части (5) после разложения в ряд Фурье выделена интересующая нас составляющая

$$\tilde{\tau}(x) = \frac{GL}{2X} B(X) \sin(\pi x / L), \quad B(X) = \int_0^1 \frac{\xi \sin(\pi \xi / 2) d\xi}{1 + \frac{1}{2X} \ln(1 - \xi^2)}. \quad (7)$$

Далее по аналогии со случаем гантелек [17] введем нелинейную поляризацию для наночастиц в форме вытянутых цилиндров

$$P_1 = \int_{-L/2}^{L/2} n \tilde{\tau}(x) u(x) dx - \int_{-L/2}^{L/2} n \tilde{\tau}_0(x) u_0(x) dx, \quad (8)$$

где $u_0(x)$ по аналогии с $x^{(0)}$ в [17] характеризует дополнительную деформацию за счет упругой и электрической сил предварительно распределенного заряда $\tau_0(x)$ на поверхности цилиндра (определяет величину начальной накачки) при наличии $E(t)$:

$$\tilde{\Omega}^2 u_0(x) = \frac{1}{\pi R^2 \rho} \tilde{\tau}_0(x) E(t). \quad (9)$$

В (9) полагалось $u_0 \sim \sin(\pi x / L)$. Умножим (6) на $n \tilde{\tau}(x)$, где плотность заряда $\tilde{\tau}(x)$ определена в (7), и проинтегрируем по переменной x . С учетом (7), (8) и (9) получим приближенное уравнение для нелинейной поляризации

$$\frac{\partial^2 P_1}{\partial t^2} + \tilde{\Omega}^2 P_1 = \frac{n|G(t)|^2 L^3}{8\pi R^2 \rho X^2} B^2(X) E(t) - \frac{n|G(t=0)|^2 L^3}{8\pi R^2 \rho X^2} B^2(X) E(t). \quad (10)$$

В случае диссипативных процессов уравнение (10) с учетом (4) окончательно запишется в виде

$$\frac{\partial^2 P_1}{\partial t^2} + \frac{2}{T_2} \frac{\partial P_1}{\partial t} + \tilde{\Omega}^2 P_1 = \Lambda (N - N_0) E, \quad (11)$$

где $\Lambda = 2LB^2/(mXA)$, $m = \pi R^2 L \rho$, $N = N(t)$, $N_0 = N(t=0)$. В случае нанотрубок величина m больше массы нанотрубки. Уравнение (11) аналогично одному из двух материальных уравнений, описывающих процесс усиления лазерного излучения [19].

Теперь вычислим в (11) диссипативное слагаемое $\sim 1/T_2$ (T_2 – аналог времени поперечной релаксации). Рассматриваемые в работе частоты соответствуют гиперзвуку. В воздухе гиперзвук не может распространяться. Поэтому для определения диссипативного слагаемого в (11) воспользуемся кинетическим подходом. При соударении с торцом совершающего гармонические колебания цилиндра поток импульса падающих на поверхность торца молекул равен $\tilde{\rho} f(v_x)(v_x + u_t)^2 dv_x$, где $f(v_x)$ – функция распределения молекул по скоростям, $\tilde{\rho} = m_0 \tilde{n}$ – плотность воздуха, m_0 – масса молекул воздуха, $\tilde{n}$ – концентрация молекул воздуха, $u_t = du/dt$, $u_t \ll \langle v_x \rangle$. При отражении молекул поток импульса равен $\tilde{\rho} f(v_x)(v_x - u_t)^2 dv_x$. За счет разности потоков импульсов дополнительное давление внутри цилиндра около торца будет равно $\Delta p_1 = 4\tilde{\rho} \langle v_x \rangle u_t|_{x=L/2}$, где $\langle v_x \rangle$ – среднее значение x -компонента вектора скорости молекул. Скачок давления в точках $x_0 \rightarrow -L/2$, $x_1 \rightarrow L/2$ за счет давления Δp_1 приводит к дополнительной силе

$$F(x) = -\pi R^2 dp_1/dx = \pi R^2 \Delta p_1 \{ \delta(x - x_0) - \delta(x - x_1) \},$$

где $p_1(x) = \Delta p_1 \{1 - \Theta(x - x_0) + \Theta(x - x_1)\}$, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, $\Theta(x)$ – функция Хевисайда, $p_1(x)$ – функция давления. Наличие силы $F(x)$ приведет к наличию в правой части (5) дополнительного слагаемого $(\Delta p_1/\rho) \{ \delta(x - x_0) - \delta(x - x_1) \}$, что, в свою очередь, приведет к появлению в правой части (6) дополнительного слагаемого

$$-\frac{\tilde{\rho} \langle v_x \rangle}{\rho L} u_t|_{x=L/2} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right).$$

Поскольку в силу введенных обозначений $u_t|_{x=L/2} \sin(\pi x/L) = u_t(x)$, то для T_2 из (11) получим, что $T_2 = \rho L/(8\tilde{\rho} \langle v_x \rangle)$.

Теперь оценим время T_1 (T_1 – аналог времени продольной релаксации) во втором материальном уравнении, которое может быть получено по аналогии с [17] из закона сохранения энергии:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{1}{T_1} (N - N_0) = -E \frac{\partial P_1}{\partial t}, \quad (12)$$

где в (12) предполагается, что будет иметь место соотношение $N - N_0 < 0$. Если $E \cdot \partial P_1/\partial t > 0$, то поле будет совершать положительную работу, и энергия поля будет уменьшаться. Поэтому для увеличения энергии поля необходимо выполнение условия $E \cdot \partial P_1/\partial t < 0$ в (12). Поскольку при $N - N_0 < 0$ должно выполняться условие $\partial N/\partial t > 0$, то исходя из закона сохранения энергии, получим уравнение (12). При отсутствии поля $E(t) = 0$ «потеря» энергии наночастиц, содержа-

щихся в единице объема, за счет диссипативных процессов $Q = \int_{-L/2}^{L/2} n\pi R^2 j E_0 dz \approx c_0 |E_0|^2 / \rho_0$, где

$j = E_0/\rho_0$ – плотность тока, ρ_0 – удельное сопротивление. В соответствие с законом сохранения энергии $dN/dt = -Q$ получим:

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{1}{T_1}(N - N_0), \quad T_1 = \frac{\rho_0}{8\pi n_x} = \frac{\varepsilon_0 \rho_0}{2n_x}. \quad (13)$$

При $L/R = 200$ величина $X \approx 4,3$. Величина A из (3) при $X \gg 1$ вычисляется аналитически (см. [16, с. 35]) в соответствии с приближенной формулой

$$A \approx \frac{1}{3} \left[1 + \frac{1}{X} \left(\frac{4}{3} - \ln 2 \right) \right]. \quad (14)$$

При $X \gg 1$ можно считать $A = 1/3$, т. е. в этом случае в (3) можно пренебречь величиной $\sim \ln(1 - \xi^2)$. При $X \approx 4,3$ величина A в соответствии с приближенной формулой (14) будет $\approx 0,38$, т.е. наличие в (3) логарифма незначительно меняет величину A по сравнению с этой величиной при $X \gg 1$.

Из (13) с учетом (2) получим, что $T_1 \approx 884 \varepsilon_0 \rho_0$. В качестве материала, из которого изготовлена нанотрубка, рассмотрим материалы с удельными сопротивлениями кремния и германия. В этом случае для удельного электрического сопротивления кремния и германия $\rho_0^{\text{Si}} = 2,3 \cdot 10^3 \text{ Ом} \cdot \text{м}$, $\rho_0^{\text{Ge}} = 0,5 \text{ Ом} \cdot \text{м}$ соответственно. Следовательно, для времени накачки энергии для материалов с удельным сопротивлением кремния и германия получим $T_1^{\text{Si}} \approx 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ с}$, $T_1^{\text{Ge}} \approx 3,9 \cdot 10^{-9} \text{ с}$ соответственно. Из вышеприведенных оценок видно, что время накачки и релаксации для германия составляет величину порядка нескольких десятков периодов колебаний излучения, т.е. материал с удельным сопротивлением германия можно использовать при накачке нестационарным электрическим полем длительностью $\Delta t \geq T_1^{\text{Ge}}$. Это означает, что можно было бы воспользоваться импульсными генераторами большой мощности (нестационарные электрические поля) [20–22]. Время накачки и релаксации для кремния на пять порядков больше периода колебаний излучения, и это вещество можно использовать при накачке среды нестационарным полем длительностью $\Delta t \geq T_1^{\text{Si}}$.

Теперь, исходя из системы материальных уравнений (11), (12) и уравнения для усиливаемого поля излучения [17]

$$\Delta \vec{E} = \frac{\partial^2 \vec{E}}{c^2 \partial t^2} + 4\pi \frac{\partial^2 \vec{P}_1}{c^2 \partial t^2}, \quad (15)$$

оценим для резонатора величину коэффициента усиления СВЧ-излучения для среды с удлиненными нанотрубками при $\tilde{\Omega} = \omega$. В приближении медленно меняющейся амплитуды $E = \tilde{E} \exp(-i\omega t)$, $P_1 = \tilde{P}_1 \exp(-i\omega t)$ уравнения (11) и (15) запишутся в виде

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial t} + \frac{1}{2\tau_1} \tilde{E} = i2\pi \omega \tilde{P}_1, \quad \frac{\partial \tilde{P}_1}{\partial t} + \frac{1}{T_2} \tilde{P}_1 = i \frac{\Lambda}{2\omega} (N - N_0) \tilde{E}, \quad (16)$$

где $\tau_1 \ll T_2$. В результате численного решения задачи установлено, что на начальном промежутке времени $N \approx N_0$. В этом случае система уравнений (16) допускает аналитическое решение. Полагая в уравнениях (16) $N = N_0$ и исключая переменную $\tilde{P}_1$, приходим к дифференциальному уравнению второго порядка с постоянными коэффициентами

$$\frac{d^2 \tilde{E}}{dt^2} + \left(\frac{1}{T_2} + \frac{1}{2\tau_1} \right) \frac{d\tilde{E}}{dt} + \left(\frac{1}{2T_2\tau_1} - \frac{\Lambda N_0}{4} \right) \tilde{E} = 0 \quad (17)$$

и начальными данными $\tilde{E}(0) = \sqrt{2W(0)/\varepsilon_0}$, $W(0) = 1,0 \text{ Дж/м}^3$, $\frac{d\tilde{E}(0)}{dt} = -\frac{1}{2\tau_1} \tilde{E}(0) + i \frac{\omega}{2} \tilde{P}_1(0)$.

При $N = 0$, $N_0 = \text{const}$ из уравнения (17) (или из (16)) при $\tilde{E} \sim \exp\left(\frac{\Gamma}{2}t\right)$, $\tau_1 \ll T_2$, $\tilde{P}_1 \sim \exp\left(\frac{\Gamma}{2}t\right)$ получим

$$\Gamma = -\frac{1}{T_2} \pm \left[\left(\frac{1}{T_2} \right)^2 + \Lambda N_0 \right]^{1/2}. \quad (18)$$

Отсюда при $(1/T_2)^2 \ll \Lambda N_0$ коэффициент усиления $\Gamma \approx (\Lambda N_0)^{1/2}$. Пусть $R = 5 \cdot 10^{-9}$ м, $L = 200R = 10^{-7}$ м, $\tilde{\rho} = 1,29$ кг/м³, $\langle v_x \rangle \approx [RT/\mu]^{1/2} \approx 370$ м/с. Положим $\tilde{W} = E \approx 10^{12}$ Дж/м³. Плотность кремния $\rho_{Si} = 2,3 \cdot 10^3$ кг/м³. Из уравнения (6) получим, что $\tilde{\Omega} \approx 5,7 \cdot 10^{10}$ с⁻¹ (длина волны излучения равна $\lambda = 2\pi c/\tilde{\Omega} \approx 3,3$ см), $T_2 \approx 1,6 \cdot 10^{-7}$ с ($1/T_2 \approx 6,4 \cdot 10^6$ с⁻¹). В соответствии с формулой (2) получим, что $1/n_x \approx 1660$. При значениях стационарного электрического поля $G = 7 \cdot 10^6$ м/с ($G^2/8 \cdot \pi = 200$ Дж/м³) в воздухе из (4) получим $N_0 \approx 357$ Дж/м³. Такое значение N_0 при длительностях импульса $\Delta t \geq 5 \cdot 10^{-9}$ с можно достичь за счет увеличения давления в газовой среде. Полагая в (7) $B \approx A = 0,38$, из приведенных выше оценок с учетом уравнений (16) получим, что коэффициент усиления в резонаторе $\Gamma \approx 1,9 \cdot 10^7$ с⁻¹.

Аналитическое решение выражается функциями гиперболического синуса и косинуса и имеет достаточно громоздкий вид, поэтому приводить его не будем. На рис. 1 для функции $W(t)$

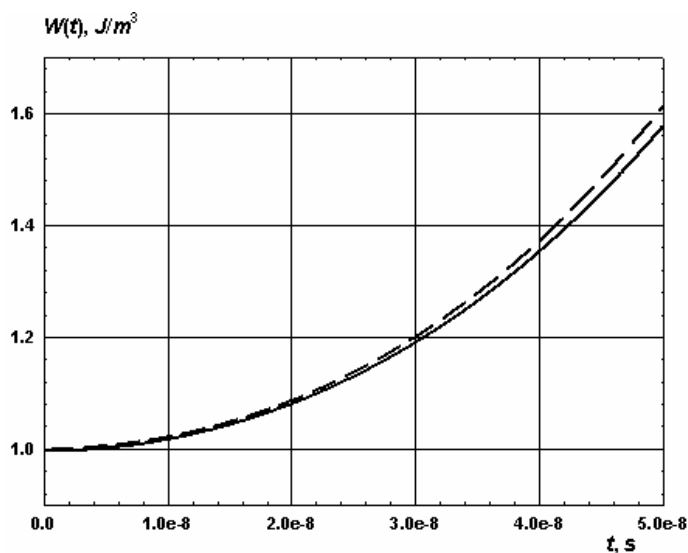


Рис. 1. Численное и аналитическое решения

представлены аналитическое решение (штриховая линия) и результат численного интегрирования (сплошная линия) полной системы уравнений (12), (16). Полученное аналитическое решение подтверждает справедливость вышеприведенных предположений и оценок коэффициента усиления в резонаторе Γ .

Из рис. 2 следует, что на начальном промежутке времени поляризация имеет линейную зависимость по переменной t , а из рис. 1 следует, что зависимость функции $W(z)$ близка к параболической. Вследствие такой зависимости значение $W(t)/W(t=0) = 1,5$ достигается только при $t \approx 4,6 \cdot 10^{-8}$ с.

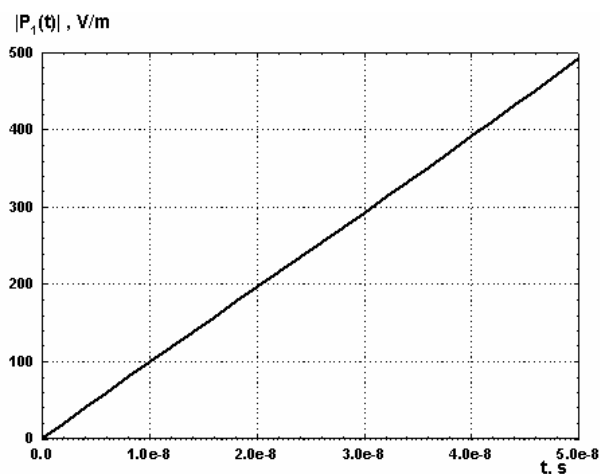


Рис. 2. Численное решение $|\tilde{P}_1(t)|$

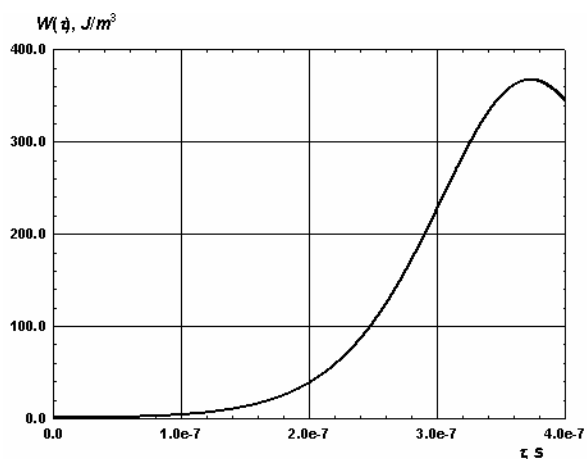


Рис. 3. Численное решение $W(\tau)$

Уравнения (16) позволяют также рассмотреть в приближении медленно меняющейся огибающей поля процесс распространения излучения в широком волновом канале [17]. В этом случае в формуле (16) временную переменную t нужно заменить на $\tau = z/c_s$, где c_s – скорость света. Приведенные на рис. 1 результаты применительно к волноводному каналу будут означать, что значение $W(t)/W(0) = 1,5$ будет достигаться при $z \approx 13$ м.

На промежутке $0 \leq \tau \leq 4 \cdot 10^{-7}$ с (рис. 3) максимальный коэффициент усиления Γ_0 в волноводном канале определится из соотношения $\Gamma_0 c_s / \Gamma \approx 0,87$. Здесь $\Gamma_0 = 0,055 \text{ м}^{-1}$, параметр Γ определен выше, см. (18).

Таким образом, из результатов работы следует, что экспериментально можно подтвердить предсказанный в работе эффект усиления СВЧ-излучения с помощью распыленных в воздухе удлиненных нанотрубок при длине волновода порядка ~ 30 м, объемной доле нанотрубок $c_0 = 10^{-3}$ и длине волны излучения $\lambda \approx 3$ см.

Авторы благодарят В.Г. Шпака, М.И. Яландина за помощь в подборе параметров квазистационарного поля и В.Г. Елецкого за консультацию по нанотрубкам.

Литература

1. Shalaev, V.M. Electromagnetic properties of smallparticle composites / V.M. Shalaev // Phys. Rep. – 1996. – Т. 272. – Р. 61.
2. Карпов, С.В. Оптические и фотофизические свойства фрактально-структурированных зол металлов / С.В. Карпов, В.В. Слабко. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2003. – 265 с.
3. Фортон, В.Е. Пылевая плазма, индуцированная солнечным излучением, в условиях микрогравитации: эксперимент на борту орбитальной станции «Мир» / В.Е. Фортон, А.П. Нефедов, О.С. Ваулина и др. // ЖЭТФ. – 1998. – Т. 114. – Вып. 6(12). – С. 2004–2021.
4. Нефедов, А.П. Кристаллические структуры в плазме с сильным взаимодействием макро-частиц / А.П. Нефедов, О.Ф. Петров, В.Е. Фортон // УФН. – 1998. – Т. 176, № 11. – С. 1215–1226.
5. Раутиан, С.Г. Нелинейная спектроскопия насыщения вырожденного электронного газа в сферических частицах металла / С.Г. Раутиан // ЖЭТФ. – 1997. – Т. 112. – С. 836.
6. Садыков, Н.Р. О возможности создания нестационарного волноводного канала на основе удлиненных наночастиц / В.А. Зацепин, Н.Р. Садыков, М.О. Садыкова и др. // Оптика атмосферы и океана. – 2007. – Т. 20, № 4. – С. 378–379.
7. Садыков, Н.Р. О возможности создания нестационарного волноводного канала на основе удлиненных наночастиц / В.А. Зацепин, В.П. Смыслов, Н.Р. Садыков и др. // Оптика атмосферы и океана. – 2004. – Т. 17, № 2–3. – С. 168–170.
8. Галкин, Н.Г. Внутризонное поглощение электромагнитного излучения квантовыми наноструктурами с параболическим потенциалом конфайнмента / Н.Г. Галкин, В.А. Маргулис, А.В. Шорохов // ФТТ. – 2001. – Т. 43. – Вып. 3. – С. 511–519.
9. Галкин, Н.Г. Электродинамическая восприимчивость квантовой нанотрубки в параллельном магнитном поле / Н.Г. Галкин, В.А. Маргулис, А.В. Шорохов // ФТТ. – 2002. – Т. 44. – Вып. 3. – С. 466–467.
10. Каганов, М.И. Электронная теория металлов и геометрия / М.И. Каганов, И.М. Лифшиц // УФН. – 1979. – Т. 129. – Вып. 3. – С. 487–529.
11. Садыков, Н.Р. Усиление и самофокусировка СВЧ-излучения с помощью квазистационарного электрического поля в среде с удлиненными наночастицами / Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин // Письма в ЖТФ. – 2009. – Т. 35. – Вып. 21. – С. 42.
12. Елецкий, А.В. Фуллерены и структуры углерода / А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов // УФН. – 1995. – Т. 165, № 9. – С. 977.
13. Елецкий, А.В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе / А.В. Елецкий // УФН. – 2007. – Т. 177, № 3. – С. 233–274.
14. Елецкий, А.В. Транспортные свойства углеродных нанотрубок / А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов // УФН. – 2009. – Т. 179, № 3. – С. 225–242.
15. Лозовик, Ю.А. Свойства и нанотехнологические применения нанотрубок / Ю.А. Лозовик, А.М. Попов // УФН. – 2007. – Т. 177, № 7. – С. 786–799.

16. Ландау, Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1982. – Т. 8. – 656 с.
17. Садыков, Н.Р. Математическое моделирование процесса взаимодействия излучения с дисперсными наночастицами / Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин // Оптика атмосферы и океана. – 2009. – Т. 22. – № 5. – С. 445; Садыков, Н.Р. Математическое моделирование процесса взаимодействия излучения с наночастицами / Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин // ЖТФ. – 2009. – Т. 79.В – Вып. 9. – С. 83.
18. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики / В.С. Владимиров. – М.: Наука, 1981. – 512 с.
19. Пантел, Р. Основы квантовой электроники / Р. Пантел, Г. Путхов. – М.: Мир, 1972. – 384 с.
20. Месяц, Г.А. Пикосекундная электроника больших мощностей / Г.А. Месяц, М.И. Яландин // УФН. – 2005. – Т. 175, № 3. – С. 225.
21. Месяц, Г.А. Законы подобия в импульсных газовых разрядах / Г.А. Месяц // УФН. – 2006. – Т. 176, № 10. – С. 1069.
22. Яландин, М.И. Мощные малогабаритные импульсно-периодические генераторы субнаносекундного диапазона (обзор) / М.И. Яландин, В.Г. Шпак // Приборы и техника эксперимента. – 2001. – № 3. – С. 5.

Поступила в редакцию 16 октября 2009 г.

COMPUTER MODELING OF ELECTROMAGNETIC RADIATION INTERACTION WITH NANOTUBES

It is offered for microwave radiations way of the reinforcement in active medium. Pumping the medium is produced using non-stationary electric field on sprayed midair nanotubes. Analytical importance of radiation reinforcements factor is received. Under $c_0 \approx 10^{-3}$ three-dimentional share of nanotubes to account of the use the pulsed source of the voltage to big power (energy density $\sim 200 \text{ J/m}^3$) weak signal gain factor $\Gamma_0 = 0,055 \text{ m}^{-1}$. One of the possible mechanism of the reinforcement microwave radiations is considered in spatial resonator.

Keywords: microwave radiation, nanoparticles, electric field.

Sadykov Nail Rahmatullovich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Snezhinsk state academy of physics and technology, Snezhinsk.

Садыков Наиль Рахматуллович – доктор физико-математических наук, профессор, Снежинская государственная физико-техническая академия, г. Снежинск.

Scorkin Nikolai Andreevich – Dr. Sc. (Engineering), Professor, Snezhinsk state academy of physics and technology, Snezhinsk.

Скоркин Николай Андреевич – доктор технических наук, профессор, Снежинская государственная физико-техническая академия, г. Снежинск.

e-mail: n.a.scorkin@rambler.ru

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК (7,7) и (8,8) С ВНЕДРЕННЫМИ АТОМАМИ

С.А. Созыкин, В.П. Бескачко

Приводятся результаты неэмпирических расчетов по теории функционала электронной плотности углеродных нанотрубок, содержащих атомы лития, натрия, магния, алюминия, кремния и хлора. Путем оптимизации геометрии в базисе 6-31G определены устойчивые положения внедренных атомов, их влияние на ширину энергетической щели между занятыми и свободными орбиталями и распределение электронной плотности в системе.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, внедренные атомы, электронная плотность, метод функционала электронной плотности.

Введение

Существование полупроводниковых углеродных нанотрубок делает возможным прорыв в области создания элементной базы электроники нанометрового масштаба. Поскольку свойства таких элементов определяются электронной структурой валентной зоны и зоны проводимости, возможность контроля и управления параметрами зон в нанотрубках кажется весьма заманчивой. Как показывают эксперименты [1, с. 84], электрические свойства углеродных нанотрубок можно изменять, варьируя заполнением их внутренней полости. На сегодняшний день, однако, данных об электронной структуре заполненных нанотрубок совершенно недостаточно для их обобщения и систематизации. Наиболее изучен случай заполнения атомами лития – в связи с перспективой создания литий-ионных батарей нового поколения. Полученные в этих работах результаты относятся к трубкам малого радиуса (трубки (5,5) и (8,0)), где существенным взаимодействием внедренного атома со стенкой является обычное катион – π взаимодействие, вследствие чего внедренный атом размещается над центром шестиугольника каркаса трубки. При увеличении диаметра трубки ситуация должна измениться. Первой известной нам работой по этому поводу является статья [2]. В ней с помощью первопринципной молекулярной динамики показано, что в зависимости от диаметра трубки возможны различные варианты заполнения ее полости литием. Так, для нанотрубки (6,0) атомы лития размещаются на оси. В нанотрубке большего диаметра (5,5) внедренные атомы располагаются возле стенки, образуя цилиндрическую поверхность. Во внутреннем канале нанотрубки (7,7) имеются и атомы на оси, и цилиндрическая поверхность. По мере увеличения диаметра нанотрубки количество таких коаксиальных цилиндрических поверхностей увеличивается. К сожалению, из данной работы нельзя понять, как будет вести себя внутри «толстой» нанотрубки одиночный атом лития: обладает он устойчивым положением на оси в отсутствие «цилиндра» из атомов лития у стенки или нет. В работе [3] приводятся результаты моделирования кремниевой нанопроволоки внутри углеродной нанотрубки методами молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности. Согласно данным этой работы ковалентных связей со стенкой кремний не образует. Эти примеры показывают, что имеющиеся данные о равновесных положениях одиночных атомов, внедренных в нанотрубки, фрагментарны и достаточно противоречивы. То же относится и к изменениям в электронной структуре нанотрубок, обусловленным таким внедрением.

В настоящей работе приводятся результаты неэмпирических расчетов углеродных нанотрубок с индексами хиральности (7,7) и (8,8), содержащих атомы лития, натрия, магния, алюминия, кремния и хлора (рис. 1). Такой выбор позволит сделать определенные заключения о влиянии на свойства системы «нанотрубка + внедренный атом» химической природы внедряемых атомов и их параметров. В частности, приводятся результаты поиска устойчивых положений внедренных атомов и анализируется их зарядовое состояние.

Описание модели и метода моделирования

Углеродные нанотрубки могут быть одно- или многослойными, но для использования в электронных устройствах больше подходят однослойные, поскольку у них меньше разброс характеристик. Для моделирования в рамках *ab initio* методов использовались фрагменты трубок,

содержащие около десятка «колец» углеродной цепи (см. рис. 1). Оборванные углеродные связи на концах таких систем насыщались атомами водорода. Таким образом, моделируемый фрагмент нанотрубки (7,7) состоит из 192 атомов углерода и 24 атомов водорода, а нанотрубки (8,8) – из 280 и 32 атомов соответственно. Размер системы в последнем случае – предельный для имеющихся в нашем распоряжении вычислительных средств (если ориентироваться на время расчета одного варианта порядка недели). Тестовые расчеты на кластере СКИФ-Урал ЮУрГУ показали, что использовать более 40 ядер нецелесообразно, так как это не приводит к уменьшению времени расчета.

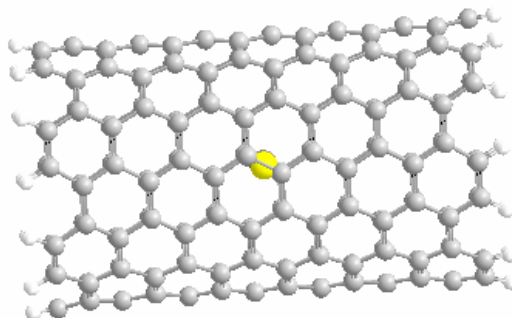


Рис. 1. Углеродная нанотрубка (7,7), содержащая атом лития

Все расчеты выполнены с помощью неэмпирического метода теории функционала электронной плотности, реализованного в квантово-химическом пакете Firefly (новое название пакета PCGAMESS) [4]. Использовался гибридный обменно-корреляционный функционал B3LYP и валентно-расщепленный базисный набор Попла 6-31G. При оптимизации геометрии варьировались координаты всех атомов. Процедура выполнялась до тех пор, пока максимальная компонента градиента энергии не становилась меньше 5 мэВ/нм. Такой выбор обусловлен тем, что, как оказалось, для систем с указанным выше количеством атомов лучший критерий сходимости недостижим.

Для определения устойчивых положений внедренных атомов в канале углеродных нанотрубок проводилась серия расчетов, в которой испытываемый атом вначале помещался на оси трубки, а затем на расстояниях 0,1, 0,2 и 0,3 нм от нее. После этого для каждого варианта начального размещения производилась оптимизация геометрии системы, охватывающая все ее атомы. Указанных начальных смещений было достаточно, чтобы в рассматриваемых трубках обнаружить устойчивые пристеночные положения внедренных атомов, если они существуют.

Результаты

В ходе предварительных расчетов было обнаружено, что если рассматривать полную энергию системы как функцию расстояния внедренного атома лития или натрия до стенки нанотрубки, когда ее геометрия фиксирована, то получается обычно описываемая в литературе ситуация – минимум энергии системы соответствует положению атомов вблизи стенки (рис. 2). Для лития, например, расстояние от этого минимума до стенки составляет 0,18 нм, что хорошо согласуется с результатом работы [5] (0,19 нм).

Если же снять ограничение на степени свободы атомов каркаса, то для большинства рассмотренных нами элементов минимум полной энергии для случая локализации внедренного атома возле стенки также наблюдается, но оказывается локальным и по энергии лежит выше глобального минимума, соответствующего положению внедренного атома на оси нанотрубки.

На рис. 3 представлены сечения поверхностей одинаковой зарядовой плотности в случае локализации внедренных атомов лития, натрия и хлора на оси нанотрубки (7,7) и возле ее стенки. Электронная плотность в объеме, ограниченном изоповерхностью в 0,001 а.е. (внешний контур), включает более 98 % электронного заряда атома водорода в углеводородах и свыше 99 % для атомов в ряду от углерода до неона [6, с. 232]. Из рис. 3 видно, что помещенные на оси нанотрубки атомы незначительно изменяют ее электронную плотность.

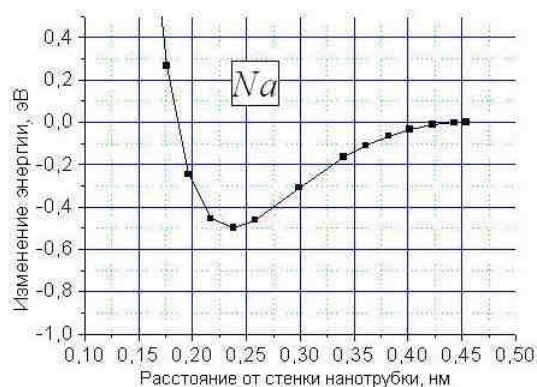
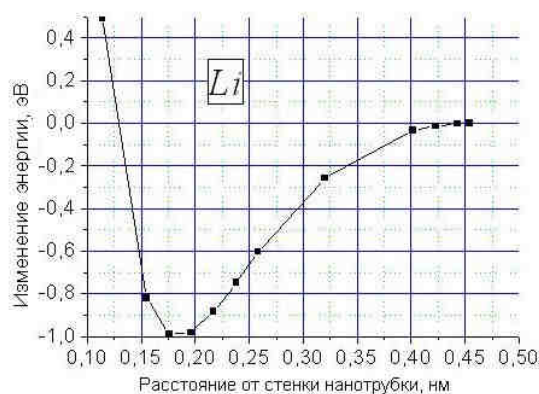


Рис. 2. Изменение полной энергии системы как функции расстояния внедренного атома от стенки нанотрубки (7,7)

Для количественной оценки величины перераспределенного заряда использовалась методика Малликена, обычно применяемая при оценке переноса заряда в углеродсодержащих системах. Вследствие конечной длины трубки в модели и присутствия атомов водорода даже в изолированной углеродной нанотрубке (без внедренных атомов) эффективный заряд атомов углерода оказывается различным. С этим связан один из использованных нами критериев определения минимальной длины моделируемой системы: при помещении атома в центр нанотрубки эффективный заряд концевых атомов углерода и водорода не должен существенно изменяться.

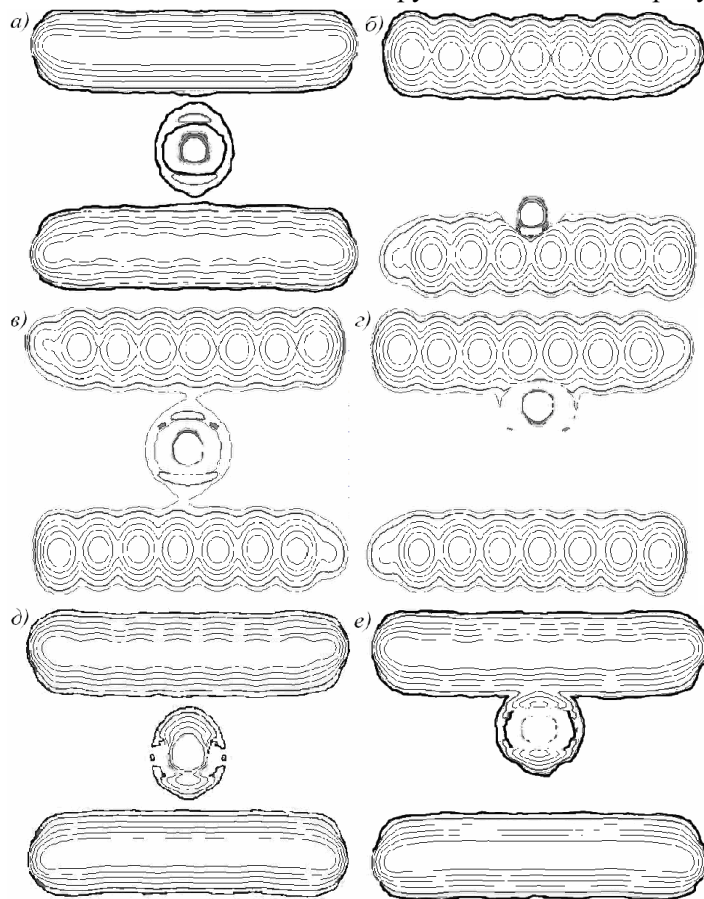


Рис. 3. Карты электронной плотности углеродной нанотрубки с внедренными атомами: а) лития (на оси), б) лития (возле стенки), в) натрия (на оси), г) натрия (возле стенки), д) хлора (на оси), е) хлора (возле стенки)

от ядра и, следовательно, связан с ним слабее. По этой причине перенос заряда с атома натрия на нанотрубку больше, чем для атома лития. Металлические свойства алюминия выражены несколько слабее, поэтому и перенос заряда составляет всего 0,666 заряда электрона. Атому хлора не хватает одного электрона на внешней оболочке. Его он заимствует от нанотрубки.

В методе молекулярных орбиталей полная волновая функция молекулы строится из волновых функций, описывающих поведение отдельных электронов в поле, создаваемом остальными электронами и всеми атомными ядрами. Каждая молекулярная орбиталь представляется линей-

Из табл. 1 видно, что для всех рассмотренных элементов, кроме хлора, в случае их локализации на оси нанотрубки перенос заряда практически отсутствует.

Таким образом, для переноса заряда с внедренного атома на нанотрубку необходимо, чтобы эти атомы находились в менее энергетически выгодной позиции – возле стенки нанотрубки. Скорее всего, эта ситуация будет реализовываться, когда все возможные положения на оси нанотрубки будут заняты другими атомами. Литий и натрий имеют по одному s -электрону на внешней оболочке. Именно его должен отдать атом типичного металла. Внешний s -электрон натрия находится дальше

ной комбинацией атомных орбиталей. Количество молекулярных орбиталей всегда больше, чем необходимо для размещения электронов. Таким образом, в молекуле присутствуют занятые и свободные орбитали, каждой из которых соответствует определенная энергия. Энергия, соответствующая наивысшей занятой молекулярной орбитали, получила название НОМО. Самой нижней по энергии свободной молекулярной орбитали соответствует уровень LUMO. Стоит отметить, что хотя энергетическая щель НОМО–LUMO не является физически наблюдаемой, относительное положение этих уровней имеет смысл.

Таблица 1

Внедренный атом	Локализация заряда на внедренных атомах (в единицах модуля заряда электрона)			
	На оси		Возле стенки	
	(7,7)	(8,8)	(7,7)	(8,8)
Li	0,005	–0,009	0,823	0,817
Na	0,029	–0,002	0,933	0,933
Mg	–0,009	–	–	–
Al	–0,015	–0,007	0,666	0,772
Si	–0,011	–	–	–
Cl	–0,997	–0,999	–0,983	–0,983

В табл. 2 приведены значения величины энергетической щели НОМО–LUMO для изученных систем. Полученные данные свидетельствуют о том, что в случае отсутствия переноса заряда, то есть практически свободных атомов, находящихся внутри нанотрубки, энергетическая щель в несколько раз меньше, чем в случае локализации этих же атомов возле стенки, сопровождающейся переносом заряда, а, следовательно, и возникновением ионной связи. Интересно, что для случая внедрения атомов магния и кремния равновесного положения этих атомов возле стенки не было обнаружено. Нанотрубки, содержащие указанные атомы на своей оси имеют величину щели НОМО–LUMO, сравнимую с аналогичной величиной для локализованных у стенки других атомов. Таким образом, величина щели НОМО–LUMO является мерой стабильности системы.

Таблица 2

Внедренный атом	Величина энергетической щели НОМО–LUMO (эВ)			
	На оси		Возле стенки	
	(7,7)	(8,8)	(7,7)	(8,8)
Li	0,656	0,509	2,095	2,038
Na	0,520	0,411	1,973	1,820
Mg	3,934	–	–	–
Al	0,512	0,302	1,954	1,763
Si	1,712	–	–	–
Cl	2,272	1,965	2,272	1,962

Выводы

Таким образом, первая попытка систематического анализа состояний одиночных атомов, внедренных внутрь однослойных углеродных нанотрубок, показывает:

- при поиске положений равновесия необходимо учитывать деформацию каркаса трубки, возникающую вследствие внедрения атомов: в модели «жесткого» каркаса могут отсутствовать положения равновесия вблизи оси трубок, предсказываемые моделью «мягкого» каркаса для атомов лития, натрия, алюминия и хлора. Более того, эти положения являются глобальными положениями равновесия для указанных только что атомов, а также для атомов магния и кремния;
- когда внедренные атомы располагаются вблизи стенки, происходит перенос заряда на стенку от атомов металла и от стенки на внедренный атом галогена, так что связь атом–стенка становится существенно ионной. Такой перенос заряда совместно с локальной деформацией каркаса приводит к увеличению в несколько раз энергетической щели между занятыми и свободными орбиталями по сравнению с таковой для случая, когда внедренные атомы располагаются на оси.

Литература

1. Burghard, M. Electronic and vibrational properties of chemically modified single-wall carbon nanotubes / M. Burghard // Surface science reports. – 2005. – Т. 58. – С. 1–109.
2. Zhao, M. Diffusion and condensation of lithium atoms in single-walled carbon nanotubes / M. Zhao, Y. Xia, L. Mei // Physical review B. – 2005. – Т. 71. – С. 165413.
3. Nishio, K. Formation of silicon-fullerene-linked nanowires inside carbon nanotubes: A molecular-dynamics and first-principles study / K. Nishio, T. Ozaki, T. Morishita, M. Mikami // Physical review B. – 2008. – Т. 77. – С. 201401R.
4. Granovsky, A. A. Firefly version 7.1.G, [http:// www.classic.chem.msu.su/gran/firefly/-index.html](http://www.classic.chem.msu.su/gran/firefly/-index.html)
5. Interaction and concerted diffusion of lithium in a (5,5) carbon nanotube / M. Khantha, N.A. Cordero, J.A. Alonso, M. Cawkwell, L.A. Girifalco // Physical review B. – 2008. – Т. 78. – С. 115430.
6. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: квантовая теория / Р. Бейдер. – М.: Мир, 2001. – 532 с.

Поступила в редакцию 17 марта 2010 г.

INTERACTION OF CARBON NANOTUBES (7,7) AND (8,8) WITH EMBEDDED ATOMS

The paper presents the results of *ab initio* modeling of carbon nanotubes «armchair» (7,7) and (8,8) containing atoms of lithium, sodium, magnesium, aluminum, silicon and chlorine with the density functional theory using the code Firefly. We have made calculations of the stable positions of interstitial atoms, their influence on the energy gap between the occupied and unoccupied orbitals and electron density distribution in the systems.

Keywords: carbon nanotubes, embedded atoms, density of electrons, the density functional theory.

Созыкин Сергей Анатольевич – студент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

Sozykin Sergey Anatolevich – student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

e-mail: sergey.sozykin@gmail.ru

Beskachko Valeriy Petrovich – Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Бескачко Валерий Петрович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТНОЙ ВОЛНЫ ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ В ОСТРОУГОЛЬНОМ КЛИНЕ

Х.Б. Толипов

Рассматривается теоретическая модель распространения поверхностной волны в остроугольном клине. При этом неизвестные параметры в акустических уравнениях раскрываются на основе приближенного решения уравнений движения и граничных условий. Полученное решение позволяет в рамках акустики выявить новые особенности, характерные при распространении этих волн в клине.

Ключевые слова: клиновидная среда, неоднородная волна, дифракция, волновое поле, теория упругости.

Введение

Известно [1], что по своей структуре волна Рэлея представляет неоднородную волну, в которой смещения затухают по мере удаления от поверхности, по которой распространяется волна. При этом пространственная структура и параметры волны в процессе движения остаются неизменными.

Совершенно иной характер распространения этой волны в клиновидной среде. При движении волны Рэлея по поверхности одной грани клина в направлении ребра при углах раствора $\alpha < 90^\circ$ происходит изменение как амплитуды, так и скорости падающей акустической волны.

Причина этого феномена кроется в том, что при движении волны изменяются условия распространения: смещения волны в какой-то момент времени начинают достигать противоположной грани клина. Взаимодействие с поверхностью этой грани клина обуславливает расщепление волны на независимые поверхностную и объемную компоненты [2]. Энергия распространяющейся волны начинает уменьшаться, так как объемные волны, оттекающие с поверхности в глубь среды, уносят с собой часть энергии.

Так же изменяется структура волны: при взаимодействии с поверхностями обеих граней клина происходит расщепление исходной волны Рэлея на независимые симметричную и антисимметричную моды.

Следовательно, при распространении волны Рэлея в клине в некоторой области, прилегающей к ребру, имеет место потеря ее устойчивости (стационарности). При этом возникает особый тип поверхностной волны, сопровождающийся в ходе движения непрерывной перестройкой акустического поля и излучением объемных волн.

Рассмотрим в рамках плосковолновой модели для изотропного твердого тела подход, позволяющий определить параметры волны.

Малые возмущения, распространяющиеся вдоль поверхности и состоящие из продольных и поперечных акустических волн, можно найти из стандартных уравнений акустики:

$$\Delta U_\ell + k_\ell^2 U_\ell = 0, \quad \Delta U_t + k_t^2 U_t = 0. \quad (1)$$

Введение продольного и поперечного потенциалов, связанных со смещениями U_ℓ в продольных и U_t в поперечных волнах соотношениями $U_\ell = \text{grad } \Phi, U_t = \text{rot } \Psi$, позволяющее перейти от векторных уравнений к скалярным, преобразует систему (1) к виду:

$$\Delta \Phi + k_\ell^2 \Phi = 0, \quad \Delta \Psi + k_t^2 \Psi = 0. \quad (2)$$

В двумерной геометрии потенциалы зависят только от двух пространственных координат x, z и от времени t и решение (2) разыскиваем в виде:

$$\begin{aligned} \Phi &= A \exp(ik_r x - i\omega t + iq_r z), \\ \Psi &= A_p \exp(ik_r x - i\omega t + is_r z). \end{aligned} \quad (3)$$

В выражениях (3) величины q_r, s_r , имеющие смысл коэффициентов амплитудного спадания смещений с удалением от границы, определяются равенствами:

$$q_r = \sqrt{k_r^2 - k_\ell^2}, \quad s_r = \sqrt{k_r^2 - k_t^2},$$

а коэффициент p , выражающий связь между потенциалами соотношением:

$$p = -i\sqrt{q_r/s_r}.$$

В этих формулах k_t , k_ℓ , k_r – соответственно волновые числа продольных, поперечных и искомых волн, ω – круговая частота.

Амплитуда смещений A задается источником возбуждения и считается величиной известной, а определяемым параметром является волновое число k_r . Для его нахождения дополнительно используются стандартные граничные условия [1].

В классическом случае скорость волны, определяемой из соотношения $V = \omega/k_r$, и начальная амплитуда смещений A являются величинами конечными и неизменными в ходе движения волны.

Для клиновидной среды ситуация совершенно другая. В ходе движения изменяются с координатой волновое число и амплитуда смещений, зависимости которых неизвестны, и решить уравнения (2) для функций Φ и Ψ не представляется возможным. Однако при медленном изменении этих величин в пределах локальной длины волны можно воспользоваться приближенными методами. На малых интервалах изменения x и t возмущения общего вида можно рассматривать как состоящие из элементарных решений, зависимости которых имеют вид:

$$\Phi(x) = A_0 \exp[ik(x) - \omega t], \quad \Psi(x) = A_0 p \exp[ik(x) - \omega t].$$

Волновое число в этих соотношениях выражается в комплексном виде: $k(x) = k_1(x) + ik_2(x)$, где действительная часть этого числа характеризует скорость волны $V(x) = \omega/k_1(x)$, а мнимая – амплитуду $A(x) = A_0 \exp[-k_2(x)]$.

Постановка задачи

Рассмотрим теоретическую модель распространения волны Рэлея из бесконечности к ребру клина. Для расчета параметров волны воспользуемся цилиндрической системой координат (рис. 1), которая приводит уравнения (2) к виду:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} + k_\ell^2 \Phi = 0,$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + k_t^2 \Psi = 0,$$

(4)

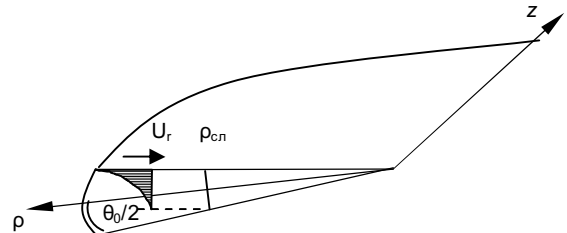


Рис. 1. Система координат (U_r – падающая волна).

и дополним стандартными граничными условиями, выражающими отсутствие напряжений на поверхностях клина:

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\rho\theta} = 0, \text{ при } \theta = \pm\theta_0, \theta = 2\alpha. \quad (5)$$

Решения (4) целесообразно искать в виде комбинаций функции Ханкеля первого рода:

$$\begin{aligned} \Phi &= A_0 H_{\nu_1}^{(1)}(k_\ell \rho) \cos(\nu_1 \theta) + C_0 H_{\nu_1}^{(1)}(k_\ell \rho) \sin(\nu_1 \theta), \\ \Psi &= A_1 H_{\nu_2}^{(1)}(k_t \rho) \sin(\nu_2 \theta) + C_1 H_{\nu_2}^{(1)}(k_t \rho) \cos(\nu_2 \theta), \end{aligned} \quad (6)$$

поскольку эти функции удовлетворяют условию погашаемости, т.е. обращаются в нуль при бесконечном значении комплексного аргумента.

В этих формулах ν_1, ν_2 – угловые волновые числа, которые предполагаем медленно изменяющимися на локальной длине волны.

Как известно [3], компоненты тензора напряжений в криволинейной системе координат имеют вид:

$$\sigma_{\rho\theta} = \mu \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial U_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial U_\theta}{\partial \rho} - \frac{U_\theta}{\rho} \right), \quad (7)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \lambda \left(\frac{U_\rho}{\rho} + \frac{\partial U_\rho}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial U_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) + 2\mu \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial U_\theta}{\partial \theta} + \frac{U_\rho}{\rho} \right).$$

Если использовать связь смещений с потенциалами:

$$U_\rho = \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad U_\theta = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} - \frac{\partial \psi}{\partial \rho}, \quad (8)$$

то соотношение (7) в терминах волновых потенциалов можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \sigma_{\rho\theta} &= \mu \left(\frac{2}{\rho} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \rho \partial \theta} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi_1}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \theta^2} \right), \\ \sigma_{\theta\theta} &= 2\mu \left[-\frac{k_t^2}{2} \Phi - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \rho^2} - \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta} \right) \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Подстановка выражений (6) в граничные условия (5) приводит к системе однородных алгебраических уравнений. С учетом соотношений для цилиндрических функций [4]:

$$2\nu Z_\nu(z) = zZ_{\nu-1} - zZ_{\nu+1}, \quad 2Z'_\nu(z) = -Z_{\nu-1} - Z_{\nu+1}$$

определители полученной системы уравнений принимают компактный вид:

$$\frac{H_{\nu_1}^+ - 2 \left(\frac{k_t^2}{k_\ell^2} - 1 \right) H_{\nu_1}(k_\ell \rho)}{H_{\nu_1}^- H_{\nu_2}^-} H_{\nu_2}^+ - \left[\frac{\text{th } \nu_2 \theta}{\text{th } \nu_1 \theta} \right]^m = 0, \quad (10)$$

$$H_{\nu_j}^\pm(x_j) = H_{\nu_j-2}^{(1)}(x_j) \pm H_{\nu_j+2}^{(1)}(x_j), \quad j=1,2, \quad x_1 = k_\ell \rho, \quad x_2 = k_t \rho, \quad m = \pm 1$$

и имеют смысл дисперсионных соотношений для симметричной ($m=1$) и антисимметричной ($m=-1$) мод поверхностной волны. Штрихами в этих формулах помечены производные по координате цилиндрических функций.

Для решения полученных комплексных дисперсионных уравнений применим для функций Ханкеля асимптотические выражения Лангера [4], которые при произвольном $\nu \gg 1$ дают в интервале $0 < z < \infty$ равномерные представления:

$$H_\nu^{(1)}(z) \approx \sqrt{\lambda} e^{-i\frac{2\pi}{3}} H_{\frac{1}{3}}^{(2)}(i\nu\omega\lambda), \quad (11)$$

$$\omega = \sqrt{1 - \frac{z^2}{\nu^2}}; \quad \lambda = \frac{1}{\omega} \text{Artn}(\omega) - 1$$

и далее, используя (11) и известную асимптотику Ханкеля [4]:

$$H_\nu^{(2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp \left[-i \left(z - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right],$$

окончательно получаем:

$$\begin{aligned} H_{\nu_1}^{(1)}(k_\ell \rho) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi k_\ell \rho}} \exp \left[-ik_\ell \rho - i\nu_1 \text{Artn} \left(\frac{\nu_1}{k_\ell \rho} \right) \right], \\ H_{\nu_2}^{(1)}(k_t \rho) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi k_t \rho}} \exp \left[-ik_t \rho - i\nu_2 \text{Artn} \left(\frac{\nu_2}{k_t \rho} \right) \right], \\ \frac{\nu_1}{\rho} &= \sqrt{k^2 + k_\ell^2}, \quad \frac{\nu_2}{\rho} = \sqrt{k^2 + k_t^2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Расчет показал, что решение этой задачи существует только при комплексных значениях вектора k . Следовательно, для удовлетворения условия отсутствия напряжений на поверхностях граней клина, волновой вектор k должен принимать комплексные значения, что соответствует физическим представлениям. В предельном случае $\rho \rightarrow \infty$ получается асимптотическое решение Рэлея, согласующееся с экспериментальными наблюдениями. Поскольку при больших значениях

пространственных координат исчезает влияние противоположной грани клина, поэтому в процессе распространения структура и параметры волны Рэлея не изменяются.

Кривые дисперсии фазовой скорости, рассчитанные по формуле (10), представлены на рис. 2.

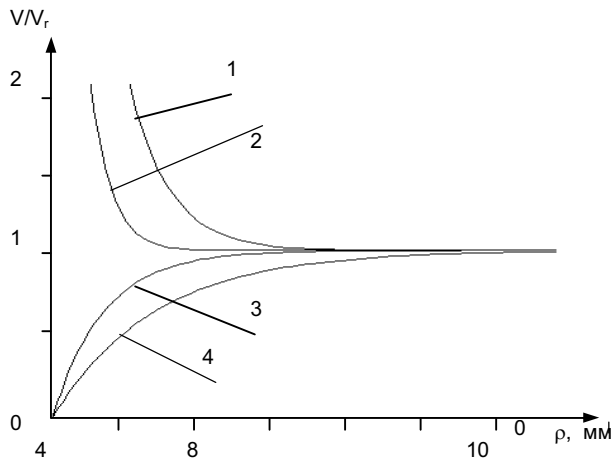


Рис. 2. Зависимость относительной скорости волны от расстояния до ребра для симметричных (1 и 2) и антисимметричных (3 и 4) мод. Углы клина: 1 и 2 – $\theta_0 = 4,5^\circ$; 3 и 4 – $\theta_0 = 5,7^\circ$

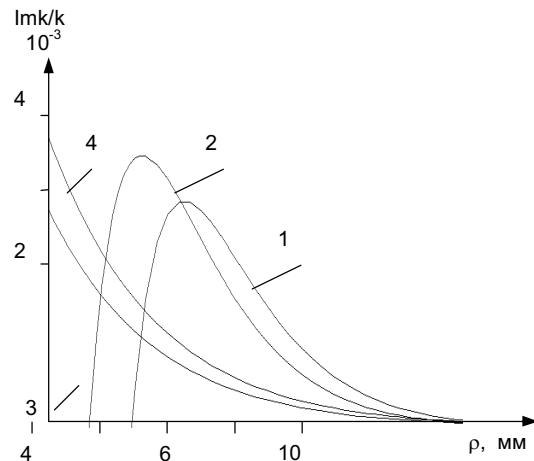


Рис. 3. Зависимость коэффициента затухания волны от расстояния до ребра для тех же углов клина

Отметим здесь особый характер пространственных зависимостей скоростей этих мод. С приближением к ребру до точки $\rho_{\text{сл}}$ имеем устойчивое стационарное распространение поверхностной волны, а после этой точки происходит потеря устойчивости, сопровождающаяся возникновением двух мод. При этом оказывается, что скорости распространения этих мод при приближении к ребру будут изменяться различным образом. Скорость симметричной моды стремится к скорости продольной волны, а антисимметричной – к нулю. Схожая картина наблюдается в плоскопараллельной пластине при монотонно уменьшающейся толщине [1].

Как было выяснено в полученном решении, волновой вектор состоит из двух слагаемых: $k = k_1 + ik_2$. Следовательно, сомножитель $\exp(-k_2\rho)$ в соотношении (12) определяет затухающие возмущения, связанные с оттоком энергии при возникновении объемных волн. Коэффициенты затуханий волн монотонно возрастают с приближением к ребру (рис. 3).

Рассмотренные выше особенности возникают в области, протяженность которой очень резко зависит от угла раствора клина (рис. 4). Так, например, при изменении угла от 5° до 25° эта область сокращается в 10 раз.

Выводы

Анализ акустических характеристик поверхностной волны в клине, проведенных в рамках классического подхода, приводит к выводу о том, что исследования выявили особый тип поверхностных волн, сопровождающийся в ходе движения непрерывной перестройкой акустического поля. Отметим также, что представленная модель позволяет понять физические процессы, происходящие при распространении поверхностной волны в остроугольном клине.

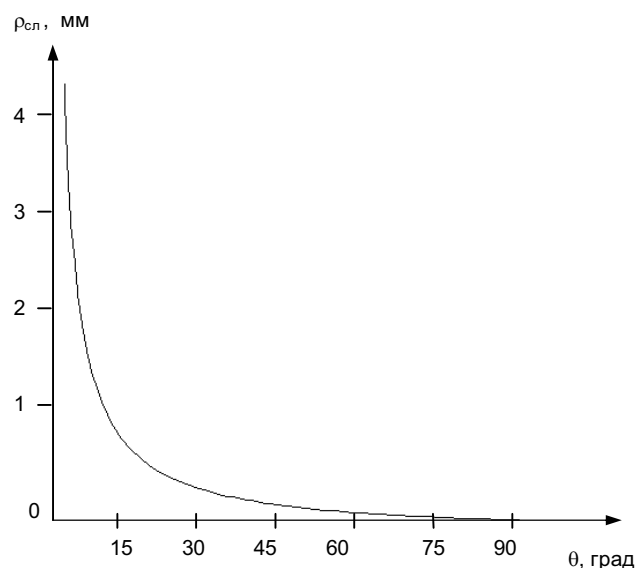


Рис. 4. Зависимость протяженности области неустойчивого распространения волны от угла клина

Литература

1. Викторов, И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Рэлея и Лэмба в технике / И.А. Викторов. – М.: Наука. – 1966. – 165 с.
2. Гуревич, С.Ю. Особенности дифракции поверхностных волн на ребре клине / С.Ю. Гуревич, Х.Б. Толипов // ПМТФ. – 2003. – № 5. – С. 161–168.
3. Новацкий, В. Теория упругости / В. Новацкий. – М.: Мир, 1975. – 872 с.
4. Янке, Е. Специальные функции: Формулы, графики, таблицы / Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. – М.: Наука, 1977. – С. 225.

Поступила в редакцию 10 января 2009 г.

CHANGE OF STRUCTURE OF A SUPERFICIAL WAVE AT DISTRIBUTION TO AN ACUTE-ANGLED WEDGE

The theoretical model of distribution of a surface wave in an acute-angled wedge is considered. Thus unknown parameters in the acoustic equations reveal on the basis of the approached decision of the equations of movement and boundary conditions. The received decision allows revealing within the limits of acoustics new features, characteristic at distribution of these waves to a wedge.

Keywords: wedge-shaped medium, inhomogeneous wave, diffraction, wave's field, theory of elasticity.

Tolipov Khoris Borisovich – Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.

Толипов Хорис Борисович – кандидат технических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: thb@susu.ac.ru

ВЫБОР ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МАКСИМАЛЬНО ТОЧНОЙ МОДЕЛИ ОЦК-ЖЕЛЕЗА

А.В. Урсаева, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев

С помощью программного пакета WIEN2k проведено первопринципное моделирование равновесной структуры и свойств ОЦК-железа. Получены оптимальные параметры, позволяющие построить наиболее точную модель.

Ключевые слова: первопринципное моделирование, α -железо.

Введение

Железо является одним из самых распространенных и используемых металлов в современном мире. Оно лежит в основе важнейших конструкционных материалов, таких как стали и чугуны. Благодаря уникальным ферромагнитным свойствам, сплавы железа имеют широкое применение в электротехнике. Поэтому повышение достоверности и точности прогнозирования структуры и свойств как чистого железа, так и сплавов на его основе является насущной задачей. Первопринципное моделирование ОЦК-железа проводилось неоднократно, существует множество работ по этой теме. В большинстве работ отсутствует объяснение причины выбора тех или иных значений параметров моделирования. Задача выбора оптимальных параметров системы для моделирования электронных и магнитных свойств является чрезвычайно важной, поскольку от них зависит точность полученных результатов. В связи с этим настоящая работа посвящена выбору оптимальных параметров для построения модели ОЦК-железа в программном пакете WIEN2k, обеспечивающей точность расчета полной энергии не хуже 1 мРу.

Метод

Расчет электронной структуры проведен методом линейных присоединенных плоских волн (LAPW) с учетом обобщенного градиентного приближения (GGA). Это один из наиболее мощных методов в рамках теории функционала плотности (DFT), используемых в настоящее время. Он позволяет достигать приемлемого совпадения экспериментальных и теоретических данных при определении не только собственных значений энергии, но и параметров кристаллической решетки. Этот метод реализован в виде комплекса программ WIEN2k, с помощью которого проводились все необходимые вычисления.

В методе LAPW [1] волновые функции, зарядовая плотность и потенциал разлагаются по сферическим гармоникам в неперекрывающихся атомных сферах радиуса R_{mt} и по плоским волнам в остальной области элементарной ячейки. Состояние системы рассчитывается в приближении сферического потенциала; предполагается, что оно имеет сферически-симметричную зарядовую плотность, почти полностью заключенную внутри *muffin-tin* сферы радиуса R_{mt} . Волновые функции в междоузлии раскладываются по плоским волнам с вектором обрезания K_{max} . Эта величина является одним из основных параметров, влияющих на точность, так как она определяет число базисных функций (размер матриц). Данный параметр определяется из задаваемого произведения $R_{mt}K_{max}$ при фиксированном R_{mt} . Еще одним немаловажным параметром является количество k -точек, N_k – величина, характеризующая дискретную сетку, используемую для численного интегрирования по зоне Бриллюэна. Чем больше это значение, тем больше точек учитывается при интегрировании, тем выше точность. Однако это значение нельзя бесконечно увеличивать, нужно остановиться, когда значения энергии стабилизируются.

В данной работе проведены вычисления, с помощью которых определены оптимальные параметры, позволяющие обеспечить высокую точность расчетов с приемлемыми затратами компьютерных ресурсов. В первую очередь была выполнена оптимизация количества k -точек, так как этот параметр не зависит от других. Были взяты значения, задаваемые по умолчанию: $a = 5,41$ а.е., $R_{mt} = 1,9$ а.е., $E_{cut} = -6$ Ру, $R_{mt}K_{max} = 7,0$. На рис. 1 представлен график зависимости энергии системы от количества k -точек.

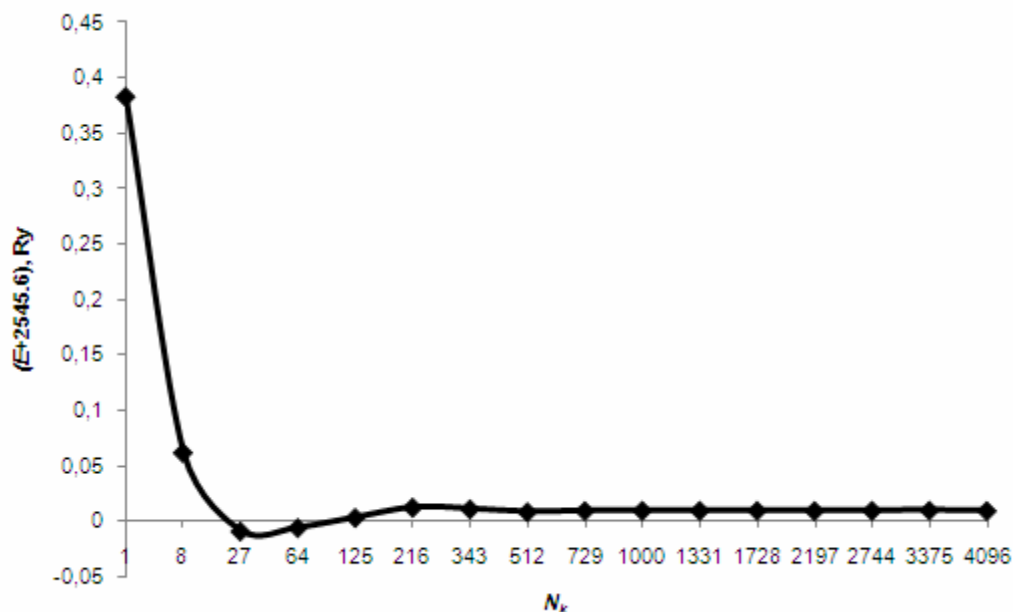


Рис. 1. Зависимость энергии системы от количества k -точек

Как видно из рис. 1, увеличение N_k выше 512 не приводит к изменению величины полной энергии, следовательно, оптимальным значением количества k -точек является $N_k = 512$.

После выбора количества k -точек был оптимизирован параметр $R_{mt}K_{\max}$, значение которого контролирует сходимость. Для этого были введены следующие параметры: $a = 5,41$ а.е., $R_{mt} = 1,9$ а.е., $E_{cut} = -6$ Ry, $N_k = 512$. Из графика зависимости энергии системы от значения $R_{mt}K_{\max}$ (рис. 2) видно, что при значении $R_{mt}K_{\max} > 9,5$ энергия системы практически не изменяется, поэтому оптимальным значением данного параметра является $R_{mt}K_{\max} = 9,5$.

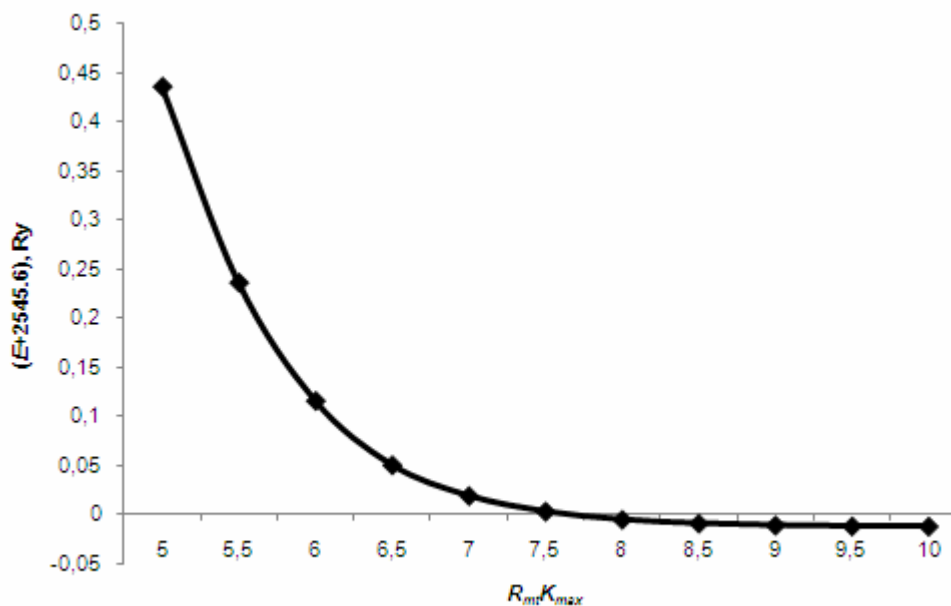


Рис. 2. Зависимость энергии системы от $R_{mt}K_{\max}$

В большинстве работ отсутствует объяснение причины выбора того или иного значения параметра R_{mt} . Считается, что наиболее важной характеристикой является параметр $R_{mt}K_{max}$. Необходимо было понять, из каких же предположений нужно брать тот или иной R_{mt} . Для этого были получены зависимости полной энергии системы и магнитного момента от R_{mt} . Для расчетов введены следующие параметры: $a = 5,41$ а.е., $R_{mt}K_{max} = 9,5$, $E_{cut} = -7$ Ry, $N_k = 512$. Результаты представлены в виде графиков (рис. 3 и 4).

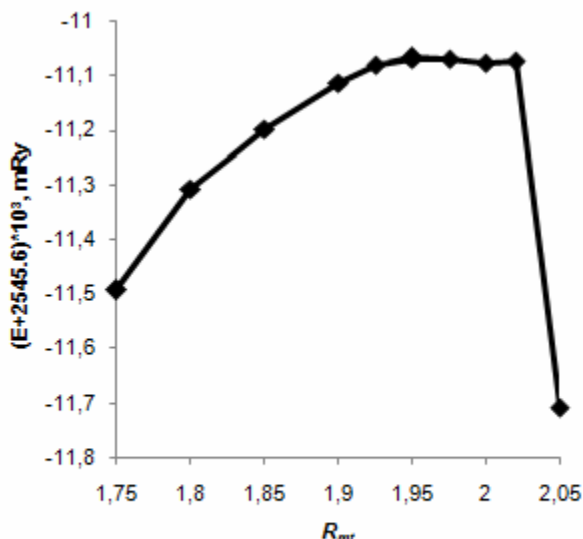


Рис. 3. Зависимость энергии системы от R_{mt} при фиксированном $R_{mt}K_{max} = 9,5$

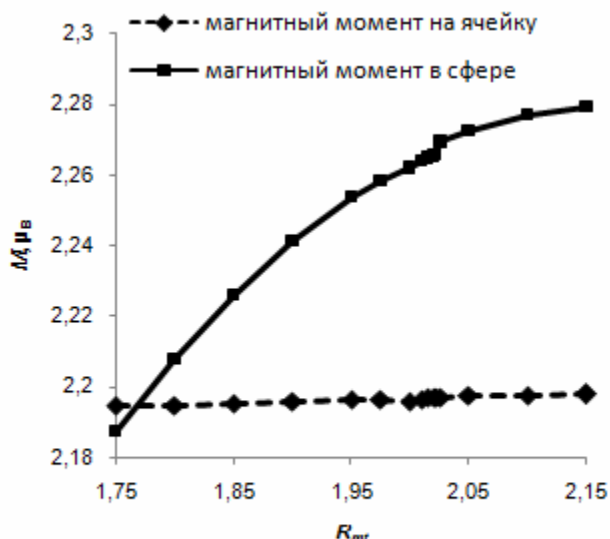


Рис. 4. Зависимость магнитного момента системы от R_{mt} при фиксированном $R_{mt}K_{max} = 9,5$

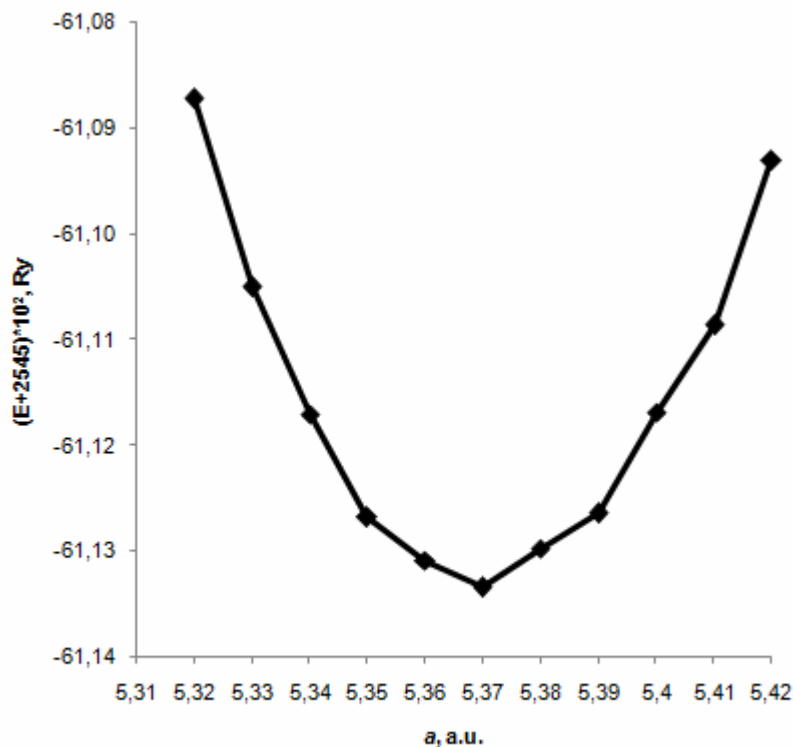


Рис. 5. Зависимость энергии системы от параметра решетки

Из рис. 3 видно, что на интервале $R_{mt} = 1,85...2,02$ энергия системы изменяется плавно, а в точке 2,02 происходит резкий скачок в пределах 1 мРy. В этой же точке происходит скачок магнитного момента (рис. 4). Таким образом, наиболее оптимальным является значение параметра $R_{mt} = 1,85...2,02$.

При полученных значениях параметров проведена серия расчетов, позволяющая определить параметр решетки равновесной структуры ОЦК-железа (рис. 5). Как видно из рис. 5, значение параметра $a = 5,37$ а.е. является равновесным. Данной равновесной структуре соответствует магнитный момент $M = 2,17 \mu_B$.

В таблице приведено сравнение полученных результатов с экспериментальными и с результатами, представленными в других работах.

Таблица

Сравнение полученных результатов						
	R_{mt} , а.е.	$R_{mt}K_{max}$	E_{cut} , Ry	N_k	a , а.е.	M , μ_B
[2]	2.2	9.0	—	8000	5.365	2.17
[3]	2.1	9.0	-7	165	5.33	2.2
Данная работа	2	9.5	-7	512	5.37	2.17
Эксперимент	—	—	—	—	5.4169	2.22

Заключение

Таким образом, в ходе данной работы показано, что оптимальным параметрам для получения максимально точных результатов соответствуют следующие значения:

- количество k -точек $N_k = 512$,
- параметр, контролирующий сходимость, $R_{mt}K_{max} = 9,5$,
- радиус атомной сферы $R_{mt} = 1,85...2,02$.

При данном выборе параметров обеспечивается наилучшая согласованность с экспериментом по равновесному параметру решетки при высокой точности определения магнитного момента.

Литература

1. Cottenier, S. Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction/ S. Cottenier, 2004.
2. Herper, H.C. *Ab initio* full-potential study of the structural and magnetic phase stability of iron/ H.C. Herper, E. Hoffmann, P. Entel // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 60. – P. 3839.
3. Iglesias, R. *Ab initio* studies on the magnetic phase stability of iron/ R. Iglesias, S.L. Palacios// Acta Materialia. – 2007. – V. 55. – P. 5123.

Поступила в редакцию 3 февраля 2010 г.

SELECTION OF OPTIMAL PARAMETERS FOR FORMATION THE MOST ACCURATE MODEL OF BCC IRON

First-principles modeling of the equilibrium structure and properties of bcc iron are carried out by WIEN2k code. Optimal parameters that allow forming the most accurate model are obtained.

Keywords: first-principles modeling, bcc iron.

Ursaeva Anastasia Vladimirovna – student of South Ural State University.

Урсаева Анастасия Владимировна – студентка, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: ursaeva@physics.susu.ac.ru

Ruzanova Galina Evgenyevna – student of South Ural State University.

Рузанова Галина Евгеньевна – студентка, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: ruzanova@physics.susu.ac.ru

Mirzoev Aleksandr Aminulaevich – Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Мирзоев Александр Аминулаевич – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

РАСЧЕТ ТЕПЛОЕМКОСТИ И СРЕДНЕКВАДРАТИЧНЫХ СМЕЩЕНИЙ ПО ФОНОННЫМ СПЕКТРАМ ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ С ОЦК И ГЦК РЕШЕТКОЙ

В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина, Е.А. Кульченков

Исследуется динамика моноатомных кубических кристаллических решеток под воздействием межатомных сил, имеющих ван-дер-ваальсовскую природу. В адиабатическом приближении получена и решена система уравнений, описывающая колебания моноатомных ОЦК и ГЦК решеток, реализован принцип длинных волн, что позволило выразить силовые константы динамической модели через упругие константы рассматриваемого вещества и произвести расчеты фононных спектров, температурных зависимостей теплоемкости и среднеквадратичных смещений для некоторых кристаллов с ОЦК и ГЦК решеткой.

Ключевые слова: динамическая модель, диполь, кристаллическая решетка, упругие константы, фононный спектр, теплоемкость, среднеквадратичное смещение.

Введение

Как известно, динамические процессы, происходящие в веществе, так или иначе определяются тем, каким образом взаимодействуют между собой отдельные атомы.

В настоящее время существуют два подхода к построению количественного описания механизма межатомного взаимодействия, позволяющего построить динамическую модель и произвести необходимые расчеты – первопринципный и полуэмпирический. Первый основан на определении волновых функций электронов в кристалле и последующем решении уравнения Шредингера для системы электронов и ядер (или ионных остовов) всего кристалла. Однако решение подобной задачи осложняется наличием огромного числа взаимодействующих частиц и практически невозможно без каких-либо упрощений и привлечения эмпирических поправок или свободных параметров. Все это так или иначе приводит к исчезновению самой сути первопринципного подхода. Полуэмпирический подход имеет ряд возможностей для своей реализации и тем самым сохраняет свою актуальность по сей день. При его использовании важно определить механизм межатомного взаимодействия таким образом, чтобы, во-первых, построенная на его основе динамическая модель не приводила к сверхсложным расчетам, а ее выводы давали достаточно хорошее совпадение с экспериментом, и, во-вторых, не исключалась возможность расчета параметров модели из первых принципов.

Настоящая работа представляет собой продолжение исследований, начатых в [1] и [2], где была построена динамическая модель для ОЦК и ГЦК кристаллических решеток, использующая силы межатомного взаимодействия, имеющие ван-дер-ваальсовскую природу, и произведены расчеты дисперсионных кривых и фононных спектров для ряда элементов 1–5 групп таблицы Д.И. Менделеева без каких бы то ни было подгоночных параметров.

Согласно принципам, сформулированным в этих работах, атом кристалла рассматривается как структуризованный объект, состоящий из ионного остова и электронов на внешних оболочках. Считается, что остов колеблется как единое целое, а колебания электронов на внешних оболочках сводятся к колебаниям их центра заряда. Положение центра заряда внешних электронных оболочек (в.э.о.) атома A определяется взаимным расположением его остова и остовов его соседей, находящихся на первой и второй координационных сферах, и не обязано совпадать с положением остова атома A . В результате внутри атома наводится дипольный момент, действующий с некоторой силой на его остов. На остов атома действует сила, вызванная излучением диполей остальных атомов решетки, которая, изменяя положение центра заряда в.э.о., наводит в атоме A дополнительный дипольный момент, частично экранирующий эту силу. Атом A , представляющий собой динамический диполь, излучает электромагнитную энергию, которую можно рассматривать как работу силы реакции на его излучение. Как показано в [3], в первом приближении

сила реакции пропорциональна плечу диполя. В состоянии термодинамического равновесия на любом временном промежутке средняя энергия, поглощаемая атомом, совпадает со средней энергией, излучаемой им. Данное условие будет выполнено, если считать, что внешняя, частично экранированная, кулоновская сила уравнивается силой реакции. Тогда движение остова атома будет происходить лишь под действием силы внутреннего диполя, наведенного соседними атомами и имеющего квантово-механическую природу своего возникновения.

В настоящей работе получено и решено уравнение динамики для ГЦК решетки с учетом фактора её плотной упаковки и малого порядка симметрии относительно оси вращения в направлении [110]. В отличие от работ [1, 2], здесь считается, что перекрытие электронных оболочек возможно лишь между атомами, лежащими друг относительно друга на первой координационной сфере, при этом степени перекрытия электронных оболочек при тангенциальных перемещениях атомов в направлении [100] и [110] отличаются друг от друга. С использованием принципа длинных волн определены силовые константы динамической модели и произведены расчеты фононных спектров, а также температурных зависимостей теплоемкости и среднеквадратичных смещений. Используя результаты работ [1, 2], также рассчитаны температурные зависимости теплоемкости и среднеквадратичных смещений для некоторых элементов с ОЦК решеткой.

1. Уравнение динамики ГЦК решетки

Рассмотрим моноатомную кристаллическую решетку и обозначим через μ – массу остова каждого ее атома, через q – его заряд и пусть $\beta = q^2 / 4\pi\epsilon_0$.

Пусть Λ – какое-нибудь множество индексов, с помощью которого можно занумеровать все атомы решетки. Для каждого $\xi \in \Lambda$ обозначим через A_ξ соответствующий атом решетки, через P_ξ – узел, являющийся положением равновесия атома A_ξ , а через u_ξ – смещение остова атома A_ξ из положения равновесия в некоторый момент времени t . Обозначим, далее, через $S_l(\xi)$ – множество индексов из Λ , нумерующих атомы решетки, находящиеся на l -той координационной сфере атома A_ξ . Пусть $A_{\xi'}$ – атом, соседний с атомом A_ξ . Перемещение остовов атомов A_ξ и $A_{\xi'}$ относительно друг друга вызывает изменение степени перекрытия орбиталей их в. э. о., что приводит к возникновению у этих атомов соответствующих дипольных моментов.

Обозначим через $e_{\xi\xi'}$ единичный направляющий вектор вектора $P_\xi P_{\xi'}$, а через $w_{\xi\xi'} = u_{\xi'} - u_\xi$ – вектор относительного перемещения остовов атомов A_ξ и $A_{\xi'}$. Пусть $r_{\xi\xi'} = e_{\xi\xi'} \langle e_{\xi\xi'}, w_{\xi\xi'} \rangle$ – радиальная, а $\tau_{\xi\xi'} = w_{\xi\xi'} - r_{\xi\xi'}$ – тангенциальная составляющие вектора $w_{\xi\xi'} = -w_{\xi\xi'}$, где в скобках обозначено скалярное произведение векторов $e_{\xi\xi'}$ и $w_{\xi\xi'}$. В случае ГЦК решетки тангенциальная составляющая $\tau_{\xi\xi'}$ может быть разложена на два слагаемых $\tau_{\xi\xi'}^1$ и $\tau_{\xi\xi'}^2$, где вектор $\tau_{\xi\xi'}^1$ направлен вдоль одной из координатных осей, а вектор $\tau_{\xi\xi'}^2$ ортогонален векторам $r_{\xi\xi'}$ и $\tau_{\xi\xi'}^1$. В этом случае плечо дипольного момента $p_{\xi\xi'}$, наведенного в атоме A_ξ со стороны атома $A_{\xi'}$, лежащего на его первой координационной сфере, может быть определено формулой

$$p_{\xi\xi'} = \kappa_{1r} r_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \tau_{\xi\xi'}^1 + \kappa_{2t} \tau_{\xi\xi'}^2, \quad (1)$$

где κ_{1r} , κ_{1t} , κ_{2t} – числовые параметры, постоянные для данного кристалла.

Плечо p_ξ полного дипольного момента, наведенного в атоме A_ξ со стороны всех его соседей, вычисляется путем суммирования по всем соседним атомам:

$$p_\xi = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} p_{\xi\xi'}. \quad (2)$$

В формуле (2) удобно от суммирования по координационной сфере перейти к суммированию по полусфере. Для этого обозначим через $A_{\bar{\xi}}$ атом, соседний к A_ξ , противоположно расположенный по отношению к атому $A_{\xi'}$. Тогда формула (2) может быть записана так:

$$P_{\xi} = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} (P_{\xi\xi'} + P_{\xi\xi'}), \quad (3)$$

где $\bar{S}_1(\xi)$ – какая-нибудь полусфера координационной сферы $S_1(\xi)$.

С учетом сказанного выше и работы [2], в состоянии термодинамического равновесия уравнение движения остова атома принимает вид

$$\mu \ddot{\mathbf{r}}_{\xi} = -\frac{\beta}{\alpha} P_{\xi}, \quad (4)$$

где α – поляризуемость атома.

Будем считать, что рассматриваемый кристалл имеет форму куба, содержащего n^3 элементарных кубических ячеек, и обозначим через a параметр решетки. Положим $N = \{1, 2, \dots, 2n\}$ и зададим в пространстве систему кристаллографических координат $Oxyz$ с единичными направляющими векторами $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ координатных осей так, чтобы положение каждого узла $P = P_{ijk}$ решетки могло быть задано по формуле

$$OP_{ijk} = \frac{a}{2} (i\mathbf{e}_x + j\mathbf{e}_y + k\mathbf{e}_z), \quad (5)$$

где $i, j, k \in N$ – некоторый набор чисел. Обозначим через Λ подмножество в N^3 , образованное всеми такими наборами (i, j, k) , для которых формула (5) определяет узел решетки. Тогда для ГЦК решетки

$$\Lambda = \{(i, j, k) \in N^3 \mid \text{сумма } i + j + k \text{ нечетна}\}.$$

Положение равновесия каждого атома $A_{\xi'}$, находящегося на первой координационной сфере атома A_{ξ} , лежит в некоторой плоскости (100), проходящей через узел P_{ξ} . Тем самым, множество индексов $S_1(\xi)$ распадается на три составляющих $S_{1x}(\xi)$, $S_{1y}(\xi)$, $S_{1z}(\xi)$, где, например, при $\xi' \in S_{1x}(\xi)$ узел $P_{\xi'}$ лежит в плоскости, ортогональной оси Ox . Пусть $\xi' \in S_{1x}(\xi)$, а $w_{\xi\xi',x}$, $w_{\xi\xi',y}$, $w_{\xi\xi',z}$ – проекции вектора $\mathbf{w}_{\xi\xi'}$ на координатные оси. Тогда $\tau_{\xi\xi'}^1 = w_{\xi\xi',x} \mathbf{e}_x$, а формула (1) принимает вид

$$P_{\xi\xi'} = \kappa_{1r} \mathbf{r}_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} w_{\xi\xi',x} \mathbf{e}_x + \kappa_{2t} (w_{\xi\xi',y} \mathbf{e}_y + w_{\xi\xi',z} \mathbf{e}_z - \mathbf{r}_{\xi\xi'}) = (\kappa_{1r} - \kappa_{2t}) \mathbf{r}_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} w_{\xi\xi',x} \mathbf{e}_x + \kappa_{2t} (w_{\xi\xi',y} \mathbf{e}_y + w_{\xi\xi',z} \mathbf{e}_z). \quad (6)$$

В других случаях аналогичные формулы получаются путем круговой перестановки индексов.

Подставляя (1) в (4), полагая $\sigma_{1r} = \beta \kappa_{1r} / \alpha$, $\sigma_{1t} = \beta \kappa_{1t} / \alpha$, $\sigma_{2t} = \beta \kappa_{2t} / \alpha$ и занося знак « $\rightarrow$ » под знак суммы, приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \mu \ddot{\mathbf{r}}_{\xi} = & \sum_{\xi' \in S_{1x}(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{w}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} w_{\xi\xi',x} \mathbf{e}_x + \sigma_{2t} (w_{\xi\xi',y} \mathbf{e}_y + w_{\xi\xi',z} \mathbf{e}_z)] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_{1y}(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{w}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} w_{\xi\xi',y} \mathbf{e}_y + \sigma_{2t} (w_{\xi\xi',x} \mathbf{e}_x + w_{\xi\xi',z} \mathbf{e}_z)] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_{1z}(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{w}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} w_{\xi\xi',z} \mathbf{e}_z + \sigma_{2t} (w_{\xi\xi',x} \mathbf{e}_x + w_{\xi\xi',y} \mathbf{e}_y)] \end{aligned} \quad (7)$$

Пусть $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ и $\xi' = (i', j', k') \in S_1(\xi)$. Положим $\varepsilon_{ii'} = i' - i$, $\varepsilon_{jj'} = j' - j$, $\varepsilon_{kk'} = k' - k$, $\rho = \sqrt{2}$. Тогда вектор $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$, указывающий направление от узла P_{ξ} к узлу $P_{\xi'}$, равен $\mathbf{e}_{\xi\xi'} = (\varepsilon_{ii'} \mathbf{e}_x + \varepsilon_{jj'} \mathbf{e}_y + \varepsilon_{kk'} \mathbf{e}_z) / \sqrt{2}$. Выражая проекцию уравнения (7) на ось Ox и используя суммирование по полусферам, приходим к уравнению:

$$\begin{aligned} \mu \ddot{r}_{\xi,x} = & \sum_{\xi' \in S_{1x}(\xi)} \sigma_{1t} (w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\xi',x}) + \frac{1}{2} \sum_{\xi' \in S_{1y}(\xi)} \{(\sigma_{1r} + \sigma_{2t}) (w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\xi',x}) + (\sigma_{1r} - \sigma_{2t}) \varepsilon_{ii'} \varepsilon_{kk'} (w_{\xi\xi',z} + w_{\xi\xi',z})\} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\xi' \in S_{1z}(\xi)} \{(\sigma_{1r} + \sigma_{2t}) (w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\xi',x}) + (\sigma_{1r} - \sigma_{2t}) \varepsilon_{ii'} \varepsilon_{jj'} (w_{\xi\xi',y} + w_{\xi\xi',y})\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Проекция уравнения (7) на другие координатные оси получаются аналогично.

Принцип длинных волн

Рассмотрим уравнение (8), считая, что оно описывает колебания в длинноволновом диапазоне. В этом случае колебания решетки могут быть заданы функцией $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}_\xi(t)$, которая плавно меняется при изменении аргумента $\mathbf{r} = OP_\xi$ на величину порядка межатомного расстояния. Пусть $P_{\xi'}$ – один из узлов, соседних к P_ξ . Положим $\Delta\mathbf{r} = P_\xi P_{\xi'}$. Тогда $\mathbf{u}_{\xi'} = \mathbf{u}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, t)$, $w_{\xi\xi'} = \mathbf{u}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. Для вычисления приращений проекций функции $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ на координатные оси при переходе в соседний узел решетки можно воспользоваться формулой Тейлора до дифференциалов второго порядка. Считая момент времени t постоянным и опуская его в обозначениях, получим

$$w_{\xi\xi',x} = u_x(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) - u_x(\mathbf{r}) = \nabla u_x \Delta\mathbf{r} + \frac{1}{2} \langle \Delta\mathbf{r}, (\nabla' u_x) \Delta\mathbf{r} \rangle, \quad (9)$$

$$w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\xi'',x} = \langle \Delta\mathbf{r}, (\nabla' u_x) \Delta\mathbf{r} \rangle. \quad (10)$$

где ∇u_x – градиент функции u_x , а $(\nabla' u_x)$ – матрица, строки которой соответственно равны $\nabla \frac{\partial u_x}{\partial x}, \nabla \frac{\partial u_x}{\partial y}, \nabla \frac{\partial u_x}{\partial z}$.

Для произвольного узла решетки, положение которого определяется вектором $\mathbf{r}$, вектор $\Delta\mathbf{r}$ смещения в положение соседнего узла равен

$$\Delta\mathbf{r} = \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'} = \frac{a}{2} (\varepsilon_{ii'} \mathbf{e}_x + \varepsilon_{jj'} \mathbf{e}_y + \varepsilon_{kk'} \mathbf{e}_z).$$

Подставляя $\Delta\mathbf{r}$ в выражение $\langle \Delta\mathbf{r}, (\nabla' u_x) \Delta\mathbf{r} \rangle$, приходим к равенству

$$\begin{aligned} \langle \Delta\mathbf{r}, (\nabla' u_x) \Delta\mathbf{r} \rangle = & \frac{a^2}{4} \{ \varepsilon_{ii'}^2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \varepsilon_{jj'}^2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \varepsilon_{kk'}^2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} + 2\varepsilon_{ii'} \varepsilon_{jj'} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \\ & + 2\varepsilon_{ii'} \varepsilon_{kk'} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} + 2\varepsilon_{jj'} \varepsilon_{kk'} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial z} \}. \end{aligned} \quad (11)$$

Подставляя равенства (10), (11) и подобные им в (8), приходим к уравнению

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{a^2}{4} \{ 2(\sigma_{1r} + \sigma_{2t}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + (\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t} + \sigma_{2t}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + 2(\sigma_{1r} - \sigma_{2t}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) \}. \quad (12)$$

Согласно принципу длинных волн [4], уравнение (12) должно переходить в классическое уравнение распространения упругих волн деформаций в кристаллах. В проекциях на ось Ox для ГЦК решетки это уравнение имеет вид [5]:

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = a^2 \left(\frac{aC_{11}}{4} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{aC_{44}}{4} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{a(C_{12} + C_{44})}{4} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) \right), \quad (13)$$

где C_{11}, C_{12}, C_{44} – упругие константы рассматриваемого вещества.

Сравнивая уравнение (12) с (13), приходим к соотношениям между коэффициентами динамической модели и упругими константами для ГЦК решетки:

$$\sigma_{1r} = \frac{a}{4} (C_{11} + C_{12} + C_{44}), \quad \sigma_{1t} = \frac{a}{4} (2C_{44} - C_{11}), \quad \sigma_{2t} = \frac{a}{4} (C_{11} - C_{12} - C_{44}). \quad (14)$$

Расчет фононных спектров и теплоемкости

Согласно общепринятым представлениям будем искать решение уравнения (4) динамики решетки в виде бегущих волн, заданных формулой

$$\mathbf{u}_\xi = u_\xi(\mathbf{r}, t) \mathbf{g},$$

где $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, $\mathbf{r} = \frac{a}{2}(ie_x + je_y + ke_z)$ – радиус-вектор узла решетки, $u_\xi = \sin(\mathbf{K}\mathbf{r} - \omega t)$ (или $u_\xi = \cos(\mathbf{K}\mathbf{r} - \omega t)$), $\mathbf{g} = g_x\mathbf{e}_x + g_y\mathbf{e}_y + g_z\mathbf{e}_z$ – единичный вектор, указывающий направление поляризации волны, а $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{na}(k_x\mathbf{e}_x + k_y\mathbf{e}_y + k_z\mathbf{e}_z)$ – волновой вектор.

Пусть P_ξ – какой-либо узел решетки, $\mathbf{r}_\xi$ – его радиус-вектор, а $P_{\xi'}$ и $P_{\bar{\xi}'}$ – два соседних противоположно расположенных к нему узла. Пусть далее $\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'} = P_\xi P_{\xi'} = \frac{a}{2}(\varepsilon_{ii'}\mathbf{e}_x + \varepsilon_{jj'}\mathbf{e}_y + \varepsilon_{kk'}\mathbf{e}_z)$ – вектор смещения из узла P_ξ в узел $P_{\xi'}$. Тогда

$$w_{\xi\xi'} + w_{\xi\bar{\xi}'} = \{\sin(\mathbf{K}(\mathbf{r}_\xi + \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}) - \omega t) + \sin(\mathbf{K}(\mathbf{r}_\xi - \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}) - \omega t) - 2\sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi - \omega t)\}\mathbf{g} = -4\sin^2 \frac{\mathbf{K}\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}}{2} u_\xi, \quad (15)$$

Проецируя равенство (15), например, на ось Ox , получим

$$w_{\xi\xi',x} + w_{\xi\bar{\xi}',x} = -4\sin^2 \frac{\mathbf{K}\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}}{2} u_\xi g_x = -4u_\xi g_x \sin^2 \frac{\pi(\varepsilon_{ii'}k_x + \varepsilon_{jj'}k_y + \varepsilon_{kk'}k_z)}{2n}. \quad (16)$$

С другой стороны, также справедливо равенство

$$\ddot{u}_{\xi,x} = -\omega^2 u_\xi g_x. \quad (17)$$

С учетом (16), (17) уравнение (8) принимает вид

$$\begin{aligned} \mu\omega^2 g_x &= 4 \sum_{\xi' \in S_{1x}(\xi)} \sigma_{1t} g_x \sin^2 \frac{\pi(\varepsilon_{ii'}k_x + \varepsilon_{jj'}k_y + \varepsilon_{kk'}k_z)}{2n} + \\ &+ 2 \sum_{\xi' \in S_{1y}(\xi)} \{(\sigma_{1r} + \sigma_{2t})g_x + (\sigma_{1r} - \sigma_{2t})\varepsilon_{ii'}\varepsilon_{kk'}g_z\} \sin^2 \frac{\pi(\varepsilon_{ii'}k_x + \varepsilon_{jj'}k_y + \varepsilon_{kk'}k_z)}{2n} + \\ &+ 2 \sum_{\xi' \in S_{1z}(\xi)} \{(\sigma_{1r} + \sigma_{2t})g_x + (\sigma_{1r} - \sigma_{2t})\varepsilon_{ii'}\varepsilon_{jj'}g_y\} \sin^2 \frac{\pi(\varepsilon_{ii'}k_x + \varepsilon_{jj'}k_y + \varepsilon_{kk'}k_z)}{2n} \end{aligned} \quad (18)$$

Рассматривая проекции уравнения (7) на другие координатные оси, приходим к системе из трех линейных уравнений относительно неизвестных g_x, g_y, g_z , которая после соответствующих преобразований приводится к виду

$$\begin{aligned} c_x g_x - b_z g_y - b_y g_z &= (\sigma_0 - \lambda) g_x \\ -b_z g_x + c_y g_y - b_x g_z &= (\sigma_0 - \lambda) g_y, \\ -b_y g_x - b_x g_y + c_z g_z &= (\sigma_0 - \lambda) g_z, \end{aligned} \quad (19)$$

где $c_x + c_y + c_z = 0$, а $\lambda = \mu\omega^2$. Полученная система линейных уравнений является однородной и имеет симметрическую матрицу. Следовательно, ее собственные числа $\gamma = \sigma_0 - \lambda$ действительные, а собственные векторы $\mathbf{g} = g_x\mathbf{e}_x + g_y\mathbf{e}_y + g_z\mathbf{e}_z$, отвечающие различным собственным числам, ортогональны. Для нахождения собственных чисел матрицы системы (19) необходимо решить характеристическое уравнение

$$\gamma^3 + (c_x c_y + c_y c_z + c_x c_z - b_x^2 - b_y^2 - b_z^2)\gamma + b_x^2 c_x + b_y^2 c_y + b_z^2 c_z - c_x c_y c_z + 2b_x b_y b_z = 0. \quad (20)$$

Решая уравнение (20), мы можем найти зависимость частоты бегущей волны от набора чисел k_x, k_y, k_z , определяющих величину и направление волнового вектора $\mathbf{K}$. При этом наборы чисел k_x, k_y, k_z должны выбираться так, чтобы были учтены все бегущие волны и ни одна из них не повторялась бы дважды. В случае ГЦК решетки можно считать, что $k_x = -n+1, \dots, n$, $k_y = 0, \dots, n-1$, тогда как $k_z = -\left[\frac{n-1}{2}\right], \dots, \left[\frac{n}{2}\right]$. В результате можем найти фононный спектр кристалла.

Для вычисления фононного спектра удобно ввести сокращенные обозначения. Положим

$c(k) = \cos \frac{\pi k}{n}$, $s(k) = \sin \frac{\pi k}{n}$. Тогда, с учетом формул (14), приходим к следующим выражениям для коэффициентов уравнение (20):

$$\begin{aligned} c_x &= \frac{2a}{3}(C_{11} - C_{44})(2c(k_z)c(k_y) - c(k_x)c(k_y) - c(k_x)c(k_z)), \\ b_x &= a(C_{12} + C_{44})s(k_y)s(k_z), \\ \sigma_0 &= \frac{a}{3}(C_{11} + 2C_{44})(3 - c(k_x)c(k_y) - c(k_y)c(k_z) - c(k_x)c(k_z)), \end{aligned} \quad (21)$$

а остальные коэффициенты вычисляются путем перестановки индексов x, y, z .

Выражения для коэффициентов c_x, b_x, σ_0 в случае ОЦК решетки приведены в [2].

Положим

$$\begin{aligned} -3p &= c_x c_y + c_y c_z + c_x c_z - b_x^2 - b_y^2 - b_z^2, \\ -q &= b_x^2 c_x + b_y^2 c_y + b_z^2 c_z - c_x c_y c_z + 2b_x b_y b_z, \end{aligned}$$

тогда уравнение (20) запишется в виде

$$\gamma^3 - 3p\gamma - q = 0, \quad (22)$$

а его решения выразятся формулой

$$\gamma_m = 2\sqrt{p} \cos \frac{\varphi + 2\pi m}{3}, \quad m = 0, 1, 2,$$

где $\varphi = \arccos \frac{q}{2\sqrt{p^3}}$ (или что то же $\varphi = \frac{\pi}{2} - \arctg \frac{q}{\sqrt{4p^3 - q^2}}$).

Таким образом, частоты фононного спектра выражаются формулой

$$\omega = \sqrt{(\sigma_0 - \gamma_m) / \mu}. \quad (23)$$

Это позволило построить температурные зависимости теплоемкости и среднеквадратичных смещений атомов для ряда веществ с кубической решеткой согласно формулам:

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = \frac{3N_a h^2}{kT^2} \int_0^{v_{\max}} \frac{e^{h\nu/kT} \nu^2 g(\nu) d\nu}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}, \quad (24)$$

$$[u^2] = \frac{h}{4\pi^2 \mu} \int_0^{v_{\max}} \frac{g(\nu) d\nu}{\nu(e^{h\nu/kT} - 1)}, \quad (25)$$

где N_a – постоянная Авогадро, h – постоянная Планка, $\nu = \omega / 2\pi$ – циклическая частота моды колебаний, $g(\nu)d\nu$ – вероятность обнаружения моды колебаний с частотой ν в интервале $[\nu, \nu + d\nu]$. Если частоту фононного спектра измерять в терагерцах, то формулы (24), (25) приводятся к виду:

$$C_v = \frac{57439,5}{T^2} \int_0^{\tau_{\max}} \frac{e^{48\tau/T} \tau^2 g_1(\tau) d\tau}{(e^{48\tau/T} - 1)^2}, \quad (26)$$

$$[u^2] = \frac{10^{-20}}{m} \int_0^{\tau_{\max}} \frac{g_1(\tau) d\tau}{\tau(e^{48\tau/T} - 1)}, \quad (27)$$

где $\tau = \frac{1}{10^{12}} \nu$, $g_1(\tau) = 10^{12} g(\nu)$, m – атомная масса.

На рис. 1–10 приведены фононные спектры для Al и Cu при 4 К, температурные зависимости теплоемкости и среднеквадратичных смещений для этих же элементов и для Na и V при температуре 78 К, исходные данные для расчета которых взяты из работы [2]. Сравнение полученных кривых с экспериментальными данными из [6], [7], как это видно из приведенных рисунков, показывает хорошее соответствие теоретических кривых экспериментальным данным (экспериментальные данные нанесены точками).

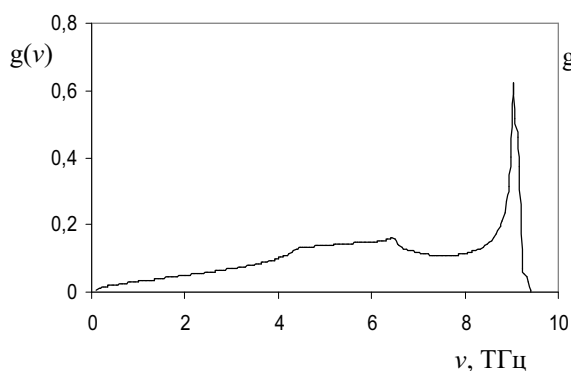


Рис. 1. Фононный спектр Al

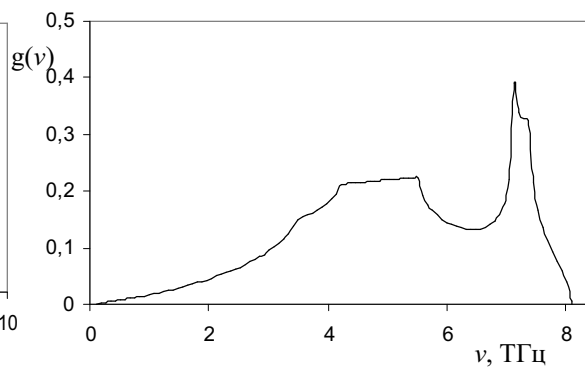


Рис. 2. Фононный спектр Cu

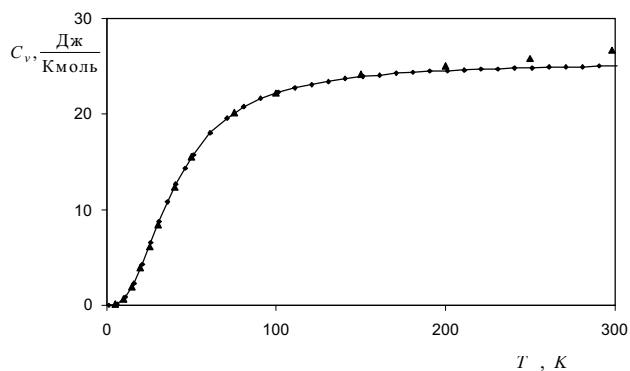


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости для Na

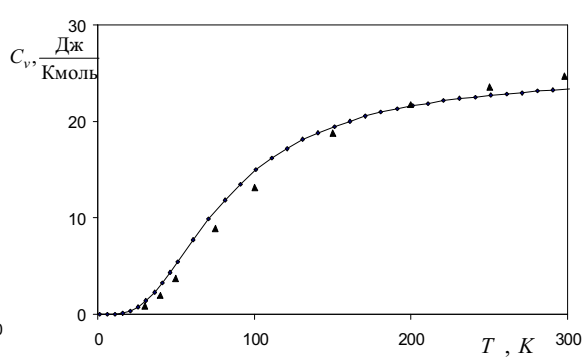


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости для V

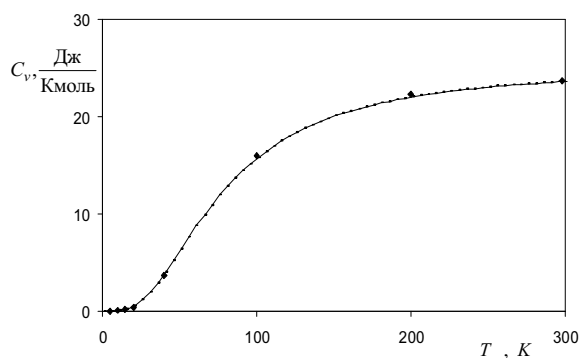


Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости для Si

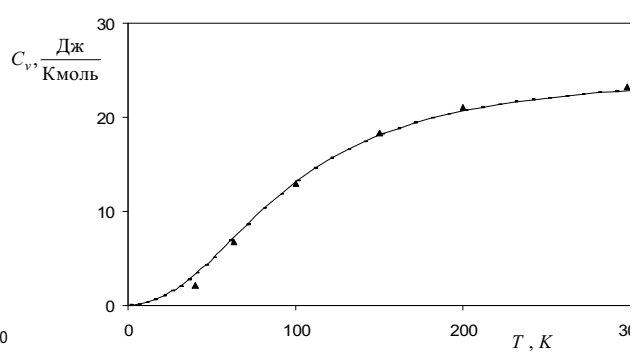


Рис. 6. Температурная зависимость теплоемкости для Al

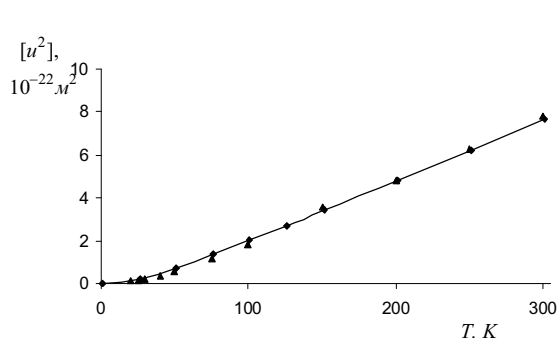


Рис. 7. Среднеквадратичное смещение Na

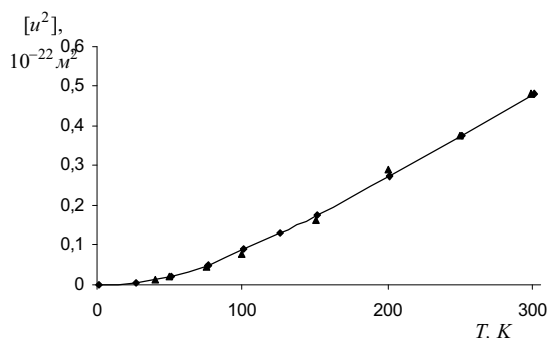


Рис. 8. Среднеквадратичное смещение V

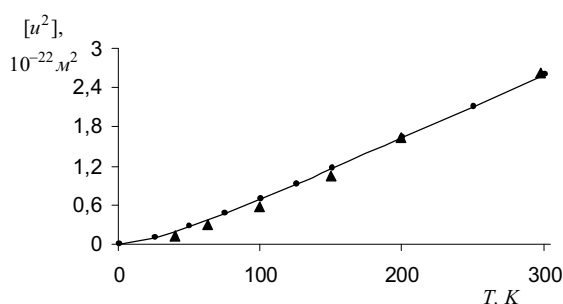


Рис. 9. Среднеквадратичное смещение Al

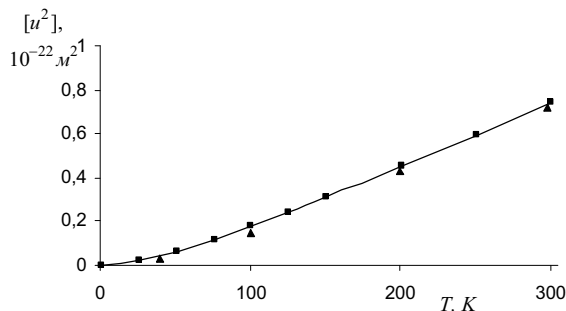


Рис. 10. Среднеквадратичное смещение Si

Статья выполнена при поддержке программы ФА по образованию «Развитие научного потенциала высшей школы» (грант РНП 2.1.1.7071).

Литература

1. Холодовский, В.Е. Дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решеток в модели диполь–дипольных взаимодействий / В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина, Е.А. Кульченков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2009. – Вып.12. – №10(143). – С.92–99.
2. Холодовский, В.Е. Принцип длинных волн и фоновые спектры кубических кристаллических решеток / В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22. – С. 109–116.
3. Холодовский, В.Е. Поток энергии и сила реакции на излучение подвижного диполя / В.Е. Холодовский, И.О. Сергеева // Вестник БГУ. Серия «Естественные и точные науки». – 2005. – Вып. 12. – № 4(273). – С. 266–268.
4. Борн, М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, К. Хуан. – М.: ИЛ, 1958. – 488 с.
5. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1978. – 792 с.
6. Hultgren, R. Selected values of the thermodynamic properties of the elements / R. Hultgren, P. Desai // American society for metals, Metals Park, Ohio 44073.
7. Справочник. Свойства элементов. Часть 1. Физические свойства / под ред. Г.В. Самсонова – М.: Металлургия, 1976. – 600 с.

Поступила в редакцию 24 декабря 2009 г.

CALCULATION OF HEAT CAPACITY AND MEAN-SQUARE DEVIATIONS ON PHONON SPECTRA FOR CRYSTALS WITH BCC AND FCC LATTICES

The paper considers the dynamics of monatomic cubic crystal lattices under the influence of the interatomic forces of Van der Waals nature. Using the adiabatic approximation, the authors received and solved a system of equations describing vibrations of monatomic bcc and fcc lattices, realized the long-wave principle, which allowed to express the force constants of the dynamical model in terms of elastic constants of a given substance and to calculate phonon spectra and temperature dependences of heat capacity and mean-square deviations for some crystals with bcc and fcc lattices.

Keywords: dynamic model, dipole, crystal lattice, elastic constants, phonon spectrum, heat capacity, mean-square deviation.

Kholodovsky Vladimir Evgenievich is Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor of the Mathematical Analysis Department, I.G.Petrovsky Bryansk State University.

Холодовский Владимир Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического анализа, Брянский государственный университет им. академика И.Г. Петровского.

e-mail: tfbgubry@mail.ru

Machikhina Inna Olegovna is Post-Graduate Student at the Theoretical Physics Department, I.G.Petrovsky Bryansk State University.

Мачихина Инна Олеговна – аспирант кафедры теоретической физики, Брянский государственный университет им. академика И.Г. Петровского.

e-mail: ingibordit@yandex.ru

Kulchenkov Evgeny Aleksandrovich is senior lecturer of General Physics Department, I.G.Petrovsky Bryansk State University.

Кульченков Евгений Александрович – старший преподаватель кафедры общей физики, Брянский государственный университет им. академика И.Г. Петровского.

e-mail: evgeniy2000@mail.ru

ФОТОСТИМУЛИРОВАННОЕ ОКИСЛЕНИЕ КАРБИНОИДОВ

**С.С. Чеботарев, В.П. Андрейчук, Л.А. Песин, П.С. Семочкин,
М.Н. Соколова, С.Е. Евсюков, И.В. Грибов, Н.А. Москвина, В.Л. Кузнецов**

Методами ИК, УФ-Вид и РФЭС спектроскопии проведен комплексный анализ молекулярной и атомной карбонизированных пленок поливинилиденфторида (ПВДФ). Представлены результаты выявления признаков и исследования скорости старения синтезированных химическим дегидрофторированием ПВДФ образцов в течение длительного времени их хранения. Обнаружено явление окисления карбонизованного слоя ПВДФ при хранении на свету.

Ключевые слова: фотостимулированное окисление, карбиноиды, УФ-Вид, ИК спектроскопия.

Введение

Поливинилиденфторид является одним из первых известных полимеров, обладающих пьезоэлектрическими и сегнетоэлектрическими свойствами. Он широко используется в промышленности для производства дешевых электромеханических устройств (датчиков, преобразователей) [1, 2], микропористых мембран [3, 4], композитных полимерных электролитов [5] и т.д. Благодаря своим замечательным физическим свойствам (прочности, твердости, термостойкости, устойчивости к УФ излучению) и высокой химической инертности ПВДФ находит применение в медицине [6], в пищевом и текстильном оборудовании и других отраслях.

Явление деградации поверхности полимерной пленки поливинилиденфторида под влиянием рентгеновского излучения, электронной и ионной бомбардировки наблюдалось многими исследователями [7–12]. Модификация материала при таком воздействии заключается в одновременном отщеплении атомов фтора и водорода от полимерной цепи и элиминации их с поверхности пленки в составе молекулы HF [10] (дегидрофторирование – ДГФ). Этот процесс приводит к образованию на поверхности обогащенного углеродом слоя, поэтому деградацию такого рода уместно назвать радиационной карбонизацией [11]. Такое поведение ПВДФ демонстрирует перспективу создания полупроводниковых одномерных карбиноидных наноструктур на его основе.

Более старым, но также перспективным является метод химического ДГФ ПВДФ, который позволяет модифицировать поверхность пленки значительно большей площади и с более высокой скоростью. Метод химического ДГФ ПВДФ хорошо известен [13, 14], и химическая карбонизация гораздо дешевле радиационной обработки в условиях высокого вакуума. Однако многие детали этого процесса до сих пор неясны, как и молекулярная структура карбонизированных производных ПВДФ. Например, до настоящего времени практически отсутствует надежная информация о химическом составе и характере атомного упорядочения в карбонизованном слое и глубине проникновения дегидрофторизирующей смеси.

Для практического использования карбиноидных наноструктур, синтезированных с помощью карбонизации ПВДФ в микро- и наноэлектронике ключевое значение имеет стабильность их физико-химических свойств. Поэтому выявление признаков и характера старения этих материалов, факторов, влияющих на процесс старения при хранении и/или использовании, представляется актуальным.

В данной работе использовались методы ИК, УФ-Вид и РФЭС спектроскопии для комплексного анализа молекулярной и атомной структуры карбонизированных пленок ПВДФ. Впервые представлены результаты выявления признаков и исследования скорости старения синтезированных химическим дегидрофторированием ПВДФ образцов в течение длительного времени их хранения.

Образцы и условия эксперимента

Исходным материалом для получения карбиноидов была пленка частично кристаллического ПВДФ (Kynar, толщина 50 мкм, тип 720), полученная методом экструзии и любезно предоставленная фирмой Atofina (Франция).

Образцы были синтезированы химическим ДГФ в течение 1 и 24 часов по стандартной методике [18] (соответственно пленки 1 и 2). В результате реакции первоначально прозрачная бесцветная пленка ПВДФ приобрела интенсивный коричневый цвет, более темный в случае большей продолжительности синтеза.

Сразу после синтеза были получены ИК спектры карбонизованных пленок. Предварительно каждая из них разрезалась пополам. Далее одна из половин хранилась в полной темноте в течение трех с половиной месяцев (образцы 1т и 2т), извлекаясь лишь для измерений ИК спектров. Другая половина прикреплялась к оконному стеклу, где в промежутки времени между измерениями подвергалась воздействию естественного освещения в течение такого же периода (образцы 1с и 2с). ИК спектры всех четырех образцов измерялись ежедневно в течение первых 15 дней, затем раз в неделю.

Цвет пленок 1т и 2т за время хранения не изменился, в то время как образцы 1с и 2с светлели, желтели и становились прозрачнее. Этот процесс был более заметен для образца 2с. По истечении трех с половиной месяцев после синтеза все четыре пленки промывались в мыльной воде. При этом для очистки их поверхностей от возможных загрязнений применялась поролоновая губка. Затем образцы последовательно прополаскивались в этиловом спирте и дистиллированной воде. На очищенных таким образом образцах проведены измерения ИК и УФ-Вид поглощения. Полученные ИК спектры показали отсутствие существенных изменений в случае образцов 1т и 2т, в то время как спектры пленок 1с и 2с радикально изменились. Далее все образцы хранились в темноте в идентичных условиях.

Для изучения элементного состава и электронной структуры пленок проведены измерения спектров электронной эмиссии, возбужденных рентгеновским излучением. При длительном (более 400 мин) воздействии мягкого рентгеновского излучения поверхность образцов модифицируется. Тем не менее это, как и последующее хранение пленок в темноте, не привело к дальнейшему изменению формы ИК спектров.

Методика измерений

Измерения ИК поглощения проводили с помощью спектрометра Specord 75 IR двухлучевым методом на пропускание в интервале волновых чисел $1200\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ при комнатной температуре. Погрешность прибора в определении волновых чисел не превышает $\pm 2\text{ см}^{-1}$, а интенсивности – 1,5 %.

Спектры УФ-Вид поглощения были получены с помощью спектрометра СФ-56 по методике на пропускание с эталонированием относительно воздуха в интервале длин волн от 190 до 1100 нм. Погрешность прибора в определении длины волны не превышает $\pm 1,0\text{ нм}$, а при измерении коэффициента пропускания – $\pm 1\%$.

Спектры электронной эмиссии получены с помощью спектрометра ЭС ИФМ-4 [15]. В качестве энергоанализатора в нём используются две цилиндрические коаксиальные токовые катушки, формирующие магнитное поле необходимой конфигурации вдоль направления распространения фотоэлектронов. При измерении прибор был настроен на энергию пропускания 320 эВ. Остаточное давление газов в вакуумной камере не превышало 10^{-9} мм рт. ст. Возбуждение спектров осуществлялось монохроматическим характеристическим рентгеновским излучением алюминиевого катода, отфильтрованным алюминиевой фольгой. Максимальную интенсивность в спектре этого излучения имеют фотоны $\text{Al K}\alpha_{1,2}$ (1486,6 эВ).

Серия измерений электронной эмиссии включала регистрацию следующих линий и полос:

обзорных спектров в интервале энергий связи 0–1270 эВ; спектров остовных фотоэлектронов углерода (270–330 эВ), состоящих из собственно C1s-пика и широкого сателлита энергетических потерь; оже-спектров (1170–1270 эВ); спектров валентных электронов в интервале 0–45 эВ.

В данной работе использованы результаты анализа лишь обзорных спектров, полученных в начале серии измерений.

Спектры пленок 1 и 2, полученные сразу после синтеза различны (рис. 1). Наиболее характерные отличия наблюдаются в интервале волновых чисел $1450\text{--}1750$ и $3100\text{--}3700\text{ см}^{-1}$ (полосы колебаний двойных углерод-углеродных связей, карбонильных и ОН групп). В интервалах слабого поглощения ($1750\text{--}2850$ и $3100\text{--}4000\text{ см}^{-1}$) во всех спектрах наблюдается интерференция, характерная для тонких пленок. В интервале $1450\text{--}1750\text{ см}^{-1}$ спектры имеют сложную структуру. Исследования, проведенные ранее [16], показывают наличие трёх

составляющих в этой полосе. Одна из них соответствует колебаниям карбонильных групп, а остальные – колебаниям двух типов двойных углерод-углеродных связей. Сразу после химического синтеза сосуществуют два типа двойных углерод-углеродных связей: галогензамещённые полиеновые структуры и кумуленовые цепочки. Частотное положение этих компонент соответственно $1500\text{--}1512\text{ см}^{-1}$ и $1610\text{--}1620\text{ см}^{-1}$ [17–19].

Экспериментальные результаты ИК спектроскопия

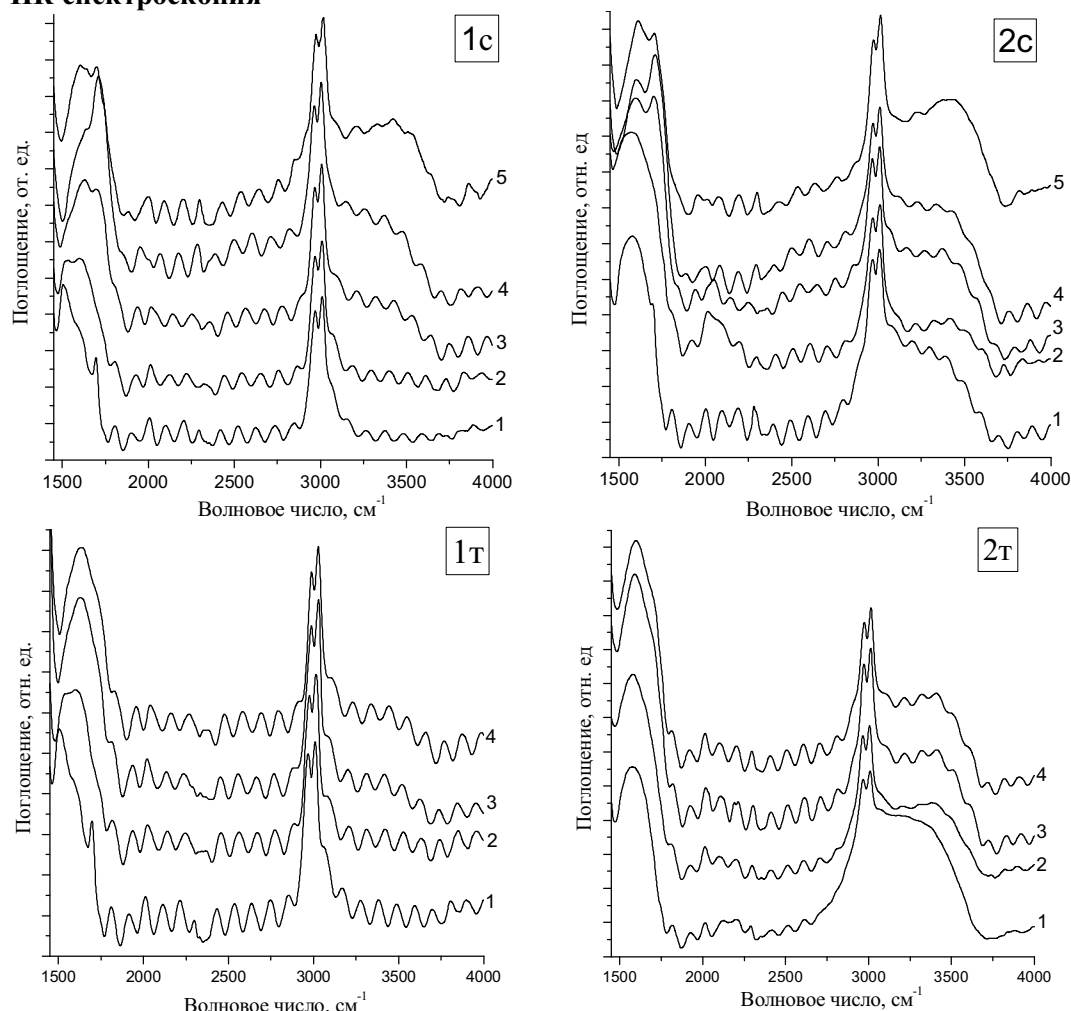


Рис. 1. Изменение ИК спектров образцов 1с, 1т и 2с, 2т при хранении. Нумерация кривых соответствует длительности хранения: 1 – 0,5, 2 – 212, 3 – 1628, 4 – 3264 часа. Кривые 5 соответствуют ИК спектрам, полученным после промывания образцов 1с и 2с в мыльной воде

Непосредственно после синтеза у образцов 1с и 1т наблюдается интенсивный пик, связанный с колебаниями СО групп $\sim 1720\text{ см}^{-1}$ и возникший, вероятно, вследствие неполного испарения ацетона, являющегося главным компонентом ДГФ смеси. В спектрах образцов 1с и 1т компонент, отвечающий за колебания двойных связей в галогензамещённых полиеновых структурах, наблюдается при 1550 см^{-1} . Интенсивность компонента при 1600 см^{-1} , наблюдаемого в спектрах в виде наплыва и связанного с колебаниями кумуленовых углеродных цепочек, значительно меньше. В спектрах образцов 2с и 2т первый из них явно не различим, а интенсивность второго существенно выше. Этот факт может быть объяснен увеличением времени ДГФ: содержание атомов фтора и водорода уменьшается, и поэтому после синтеза количество галогензамещённых полиеновых структур в образцах 2с и 2т меньше.

При хранении наблюдается изменение формы ИК спектров всех образцов. В интервале волновых чисел $1450\text{--}1750\text{ см}^{-1}$ происходит перераспределение интенсивностей различных спектральных компонент. Предположительно это связано с постепенно продолжающимся дегидрофторированием карбиноидов при хранении в результате отщепления фтора и водорода от галогензамещённых звеньев. Для спектров образцов 1с и 2с характерно существенное нарастание

пика, связанного с колебаниями СО-групп ($\sim 1700 \text{ см}^{-1}$), и увеличение интенсивности полос, связанных с наличием гидроксильных групп в интервале $3100\text{--}3700 \text{ см}^{-1}$. Для образца 1т этот эффект менее выражен, а в случае 2т с увеличением времени хранения наблюдается перераспределение относительной интенсивности компонент спектра в данном интервале волновых чисел.

На спектрах образцов 2с и 2т для малых времен хранения заметна особенность в полосе $2000\text{--}2250 \text{ см}^{-1}$, соответствующая колебаниям тройных углерод-углеродных связей, которые формируются, очевидно, при длительном ДГФ и распадаются с течением времени. После промывания в мыльной воде форма ИК спектров образцов 1с и 2с в интервале $1450\text{--}1900 \text{ см}^{-1}$ вновь изменилась: уменьшилась относительная интенсивность пика, связанного с колебаниями отдельных карбонильных групп (1720 см^{-1}) [13]. Интерференция в ИК спектрах была использована для измерения оптической толщины всех образцов и мониторинга ее изменения при длительном хранении пленок в темноте и на свету (методика измерений аналогична разработанной в [20]). Результаты представлены на рис. 2.

Как видно из рисунка, образцы 1с и 1т имеют практически одинаковую толщину сразу после синтеза. При последующем хранении толщина образца 1с уменьшается быстрее, чем 1т. Образцы 2с и 2т сразу после синтеза существенно толще, чем пара 1с и 1т, что может объясняться большим временем ДГФ и, как следствие, разбуханием пленок. Второе возможное объяснение этого факта заключается в том, что кусочки пленок 2с и 2т могли быть вырезаны из более толстого участка исходного листа ПВДФ. Поведение толщины образца 2т при хранении имеет более сложный характер: быстрое уменьшение вначале и медленное увеличение с насыщением в дальнейшем. Толщины всех образцов до и после мытья приведены в табл. 1. Погрешность измерений оптической толщины образцов определялась с помощью серии специально проведенных многократных измерений и оказалась равной $0,18 \text{ мкм}$.

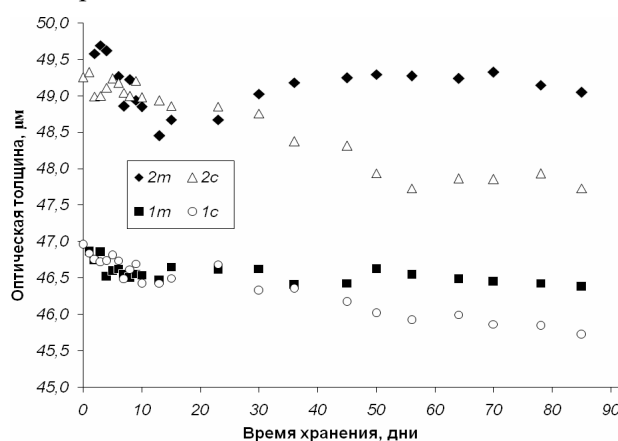


Рис. 2. Вариации оптической толщины образцов при длительном хранении

Таблица 1

Толщины всех образцов до и после мытья

Образец	1с	1т	2с	2т
Толщина до мытья, мкм	45,30	46,40	47,49	49,15
Толщина после мытья, мкм	45,18	46,39	44,69	49,05

УФ-Вид спектроскопия

УФ-Вид спектры всех четырех образцов, а также исходного ПВДФ (рис. 3) свидетельствуют, что образцы, имеющие более длительное время синтеза, менее прозрачны в интервале длин волн $600\text{--}1100 \text{ нм}$. Наибольшие изменения претерпел образец 2с. В волновом диапазоне $< 750 \text{ нм}$ он значительно прозрачнее образца, хранившегося в темноте (2т), а в интервале $450\text{--}535 \text{ нм}$ демонстрирует коэффициент пропускания даже больший, чем у образцов 1с и 1т. Этот факт, а также остальные особенности поведения спектров можно объяснить, предположив наличие неоднородности в структуре исследуемых пленок. При дегидрогалогенировании поверхностный слой, вступающий в химическую реакцию с раствором, обедняется фтором и водородом и карбонизируется. Карбонизованный слой характеризуется иным коэффициентом поглощения, нежели исходный ПВДФ. Очевидно, что толщина карбонизованного слоя будет тем больше, чем длительнее синтезировался образец. Образцы, хранившиеся на свету, могут отличаться от «темных» наличием дополнительного окисленного слоя, образующегося из предварительно карбонизованной части вещества вследствие фотостимулированного присоединения кислорода из воздуха. Таким образом, можно предположить, что образцы, хранившиеся в темноте, имеют в своем составе три слоя: слой исходного материала ПВДФ (основа), непрореагировавший с раствором, и два поверхност-

ных карбонизованных слоя, толщина которых растет с увеличением времени синтеза. Образцы, хранившиеся на свету, содержат пять слоев: внутренний слой ПВДФ, два карбонизованных слоя и два окисленных поверхностных слоя.

Учитывая наличие нескольких слоев вещества в исследуемых пленках, для интенсивности проходящего света в соответствии с законом поглощения можно записать:

$$I = I_0 \exp[-(K_1 X_1 + 2K_2 X_2 + 2K_3 X_3)], \quad (1)$$

где K_1 , K_2 , K_3 и X_1 , X_2 , X_3 – соответственно коэффициенты поглощения и толщины исходного (немодифицированного), карбонизованного и окисленного слоев.

Зависимость значений коэффициента поглощения K_1 от длины волны для исходного слоя была получена из экспериментального спектра ПВДФ. Выражение (1) позволяет варьируя параметры K_2 , K_3 , X_1 , X_2 , X_3 расчетным путем получить спектр поглощения каждого из исследуемых образцов. Значения толщин отдельных слоев должны удовлетворять общему условию: $X_1 + 2X_2 + 2X_3 = d$, где d – толщина пленки. Параметры K_2 и K_3 представлялись в виде $K_{2,3} = K_1^R \cdot N$, где R и N – некоторые числа. Результаты подгонки представлены на рис. 4.

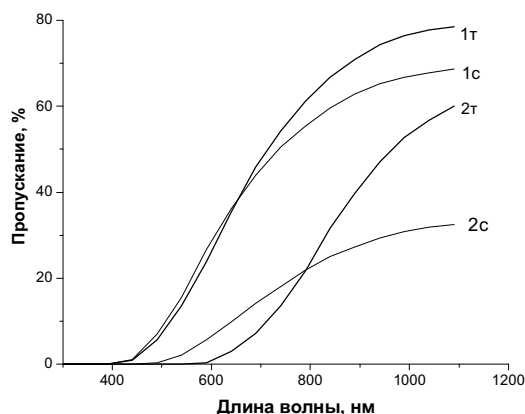


Рис. 4. Кривые, рассчитанные с использованием параметров, приведенных в табл. 2

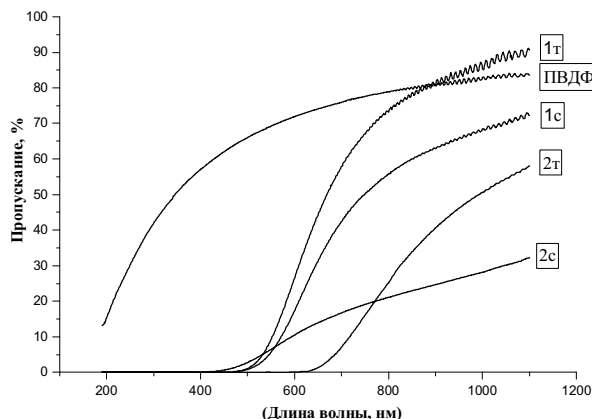


Рис. 3. Спектры УФ-Вид поглощения исследованных образцов

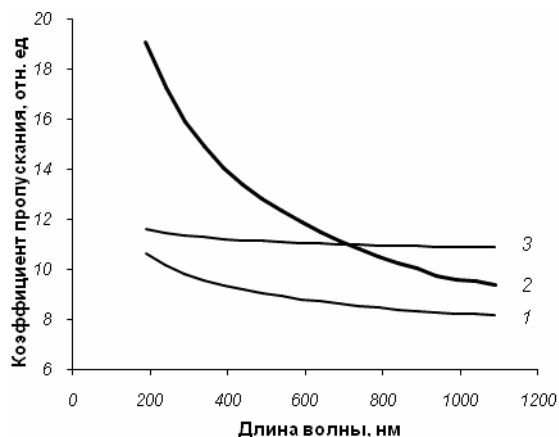


Рис. 5. Зависимость коэффициента пропускания от длины волны для различных слоев образца:
1 – слой непрореагировавшего ПВДФ; 2 – карбонизованный; 3 – окисленный

Видно, что расчетные спектры удовлетворительно соответствуют экспериментальным кривым. Расхождения могут быть обусловлены тем, что в реальном образце коэффициент поглощения в пределах одного слоя имеет не фиксированное значение, как это полагалось при расчетах, а изменяется в некоторых пределах. Это связано с тем, что некоторые реагенты ДГФ смеси проникают в более удаленные от поверхности слои ПВДФ, а это способствует увеличению времени их действия, что, в свою очередь, приводит к формированию неоднородного по глубине распределения атомов остаточного фтора.

Для всех образцов (за исключением 2с) в областях слабого поглощения характерно наличие интерференционной картины. Напомним, что интерференционная картина обнаруживается в определенных интервалах волновых чисел ($2000\text{--}2800\text{ см}^{-1}$) также и на ИК спектрах. Здесь удастся наблюдать интерференцию и у образца 2с, хотя она более слабо выражена, чем в остальных образцах.

Зависимость коэффициента пропускания от длины волны для каждого из рассмотренных слоев (исходного, карбонизованного и окисленного), полученные в ходе расчетов, приведены на рис. 5. Все кривые представляют собой монотонные убывающие зависимости. Анализируя их, можно сделать вывод, что карбонизованный слой оказывает определяющее влияние на прозрач-

ность образцов в коротковолновом интервале от 200 до 700 нм. В длинноволновой области (> 700 нм) прозрачность определяется в большей мере окисленным слоем.

Таблица 2

Значения толщины слоев пленки, использованные для расчета кривых на рис. 4

Образец	Толщина слоя (μм)			Общая толщина пленки
	Непрореагировавший ПВДФ X ₁	Карбонизованный X ₂	Окисленный X ₃	
1с	41	3	1,5	50
2с	10	8	9	44
1т	41	4,5	–	50
2т	10	20	–	50

Спектры электронной эмиссии. Химический состав поверхности

Для всех образцов был определен химический состав поверхности методом РФЭС. Анализ обзорных спектров, регистрировавшихся в начале серии измерений, показывает, что на поверхности образцов кроме углерода (пик 1s-электронов при энергии связи ~285 эВ) имеются также фтор и кислород (энергии связи соответственно ~688 и ~532 эВ). Для количественной оценки содержания атомов фтора и кислорода проводилась обработка РФЭС путем выделения из обзорного спектра C1s, F1s и O1s линий. Затем производилось вычитание фона по методу Ширли и измерение интегральной интенсивности. После этого отношения атомов фтора и кислорода к атомам углерода вычислялись по формуле [21]

$$C_X \approx \frac{I_{X1s}}{I_{C1s}} \frac{1}{\Omega_{X1s}} \left(\frac{E_{C1s}}{E_{X1s}} \right),$$

где C_X – относительная концентрация атомов исследуемого вещества в поверхностном слое образца, I_X и I_{C1s} – интегральные интенсивности РФЭС основных линий атомов X (F или O) и углерода, Ω_X – отношение сечений фотоионизации основных электронов атома X и углерода при используемой энергии фотонов. Величины Ω_X взяты из таблиц, приведенных в [22]. Для F1s- и O1s-оболочек они составляют 4,43, и 2,93 соответственно. Результаты химического анализа всех образцов приведены в табл. 3.

Таблица 3

Содержание фтора и кислорода в образцах

Образец	Относительное содержание фтора, %	Относительное содержание кислорода, %
1с	6,5	19,0
1т	16,6	19,0
2с	23,5	22,4
2т	9,6	21,8

Обсуждение

Постепенное проникновение дегидрофторизирующей смеси в глубь образцов приводит к неоднородному распределению химических элементов по глубине. Вследствие этого, фактическое время синтеза оказывается тем меньше номинального, чем дальше от поверхности располагается слой вещества. Таким образом, цепи исходного ПВДФ претерпевают неоднородную по глубине карбонизацию, что, в свою очередь, вызывает их неоднородное взаимодействие с молекулами атмосферной воды с нуклеофильным замещением остаточного фтора гидроксильными группами. Этому может способствовать эффект аллильной активации. Вторичные реакции гидроксильных групп по типу, например таутомеризации, приводят как к насыщению поверхностного слоя карбонильными группами, так и к образованию кислородных мостиков между соседними цепями. Сложность молекулярного состава дополняют молекулы свободной воды, адсорбирующиеся и удерживающиеся вследствие пористости карбонизованной поверхности. Вполне очевидно, что воздействие естественного освещения приводит к мощному дополнительному окислению цепей с образованием карбонильных групп.

Фотоны, падающие на поверхность материала, способны вызывать протекание в нем энергоемких реакций, идущих с разрывом прочных химических связей и образованием радикалов. Та-

кие термодинамически невыгодные реакции не могут протекать самопроизвольно, но идут за счет энергии поглощенных световых квантов и способны вызывать протекание в этой же системе других реакций, неосуществимых в отсутствие первой – фотохимической стадии. Согласно законам фотохимии, только поглощенный свет является фотохимически активным и поэтому видимый свет способен вызвать фотохимические превращения только в окрашенных веществах т.е. в веществах, поглощающих свет в видимой области спектра. Именно поэтому чистый ПВДФ очень устойчив к окислению (и в темноте, и на свету). Фотоокислению подвержена лишь карбонизованная поверхность пленок, способная к поглощению видимого света: она всегда содержит некоторое количество двойных углерод-углеродных связей, имеющих избыточную электронную плотность, фотоокисление которых может происходить по одному из механизмов, описанных, например в [23].

Насыщение валентных связей углерода кислородом вызывает деструкцию цепей, поэтому сильно окисленные фрагменты поверхности имеют пониженную механическую стойкость и легко удаляются с поверхности карбиноида при промывке вместе с некоторым количеством двойных углерод-углеродных связей как карбиноидных, так и фторзамещенных полиеновых участков цепи, оказавшихся внутри такого фрагмента. В результате происходит эрозия сильно окисленной части поверхности в наибольшей степени карбонизованной при синтезе. Сразу после синтеза карбонизация поверхности пленки 2 существенно превышает таковую пленки 1. Поэтому и количество материала, удаляемого при промывке фотоокисленного образца 2с, значительно больше. Это приводит к тому, что РФЭС, измеренные после промывки, фиксируют наименьшую степень карбонизации поверхности этого образца. Наоборот, минимальная концентрация фтора на поверхности образца 1с, скорее всего, обусловлена стимулированным естественным светом нуклеофильным замещением атомов фтора в частично карбонизованном слое гидроксильными группами. Увеличение концентрации последних очевидно демонстрирует сравнение ИК-спектров образцов 1т и 1с. Более высокая механическая стойкость этого слоя, по сравнению с таковым образца 2с, объясняется, по нашему мнению, меньшей концентрацией двойных связей, и, следовательно, меньшей вероятностью разрыва цепей при формировании СО-групп.

Выводы

Карбонизованный слой оказывает определяющее влияние на прозрачность образцов в коротковолновом интервале от 200 до 700 нм. В длинноволновой области (> 700 нм) прозрачность определяется в большей мере окисленным слоем. Обнаружено явление окисления карбонизованного слоя ПВДФ при хранении на свету.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Челябинской области (проект 07-02-96008p_урал_a).

Литература

1. Sathiyarayanan, S. Nonlinear and time-dependent electromechanical behavior of polyvinylidene fluoride / S. Sathiyarayanan, Srinivasan M. Sivakumar and C. Lakshmana Rao // *Smart Mater. Struct.* – 2006. – V. 15. – P. 767–781.
2. Jun, Lu. Fabrication and actuation of electro-active polymer actuator based on PSMI-incorporated PVDF / Jun Lu, Sang-Gyun Kim, Sunwoo Lee and Il-Kwon Oh // *Smart Mater. Struct.* – 2008. – V. 17. – P. 342–364.
3. Process for the preparation of microporous membranes made of polyvinylidene fluoride (PVDF) // European Patent Office. Classification international B01D71/34; B01D67/00; B01D71/00; B01D67/00. Application number: EP20070105134 20070328.
4. Tabary, N. Functionalization of PVDF membranes with carbohydrate derivatives for the controlled delivery of chlorhexidin / N. Tabary, S. Lepretre, F. Boschini *et al.* // *Biomolecular Engineering*. – 2007. – V. 24(5). – P. 472–476.
5. Yong Woo Kim. Single-step synthesis of proton conducting poly(vinylidene fluoride) (PVDF) graft copolymer electrolytes / Yong Woo Kim, Do Kyoung Lee, Kyung Ju Lee and Jong Hak Kim // *European Polymer Journal*. – 2008. – V. 44(3). – P. 932–939.

6. Foster, F.S. A history of medical and biological imaging with polyvinylidene fluoride (PVDF) transducers / F.S. Foster, K.A. Harasiewicz, M.D. Sherar // *IEEE Trans Ultrason Ferroelectr Freq Control*. – 2000. – V. 47(6). – P. 1363–1371.
7. Le Moel A. Modifications of poly(vinylidene fluoride) (PVDF) under high energy heavy ion, X-ray and electron irradiation studied by X-ray photoelectron spectroscopy / A. Le Moel, J.P. Duraud, E. Balanzat // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* – 1986. – V. 18, № 1. – P. 59–63.
8. Duca, M.D. Effect of X-rays on poly(vinylidene fluoride) in X-ray photoelectron spectroscopy / M.D. Duca, T.L. Plosceanu, T. Pop // *J. Appl. Polym. Sci.* – 1998. – V. 67, № 13. – P. 2125–9.
9. Okudaira, K.K. Photodegradation of poly (tetrafluoroethylene) and poly(vinylidene fluoride) thin films by inner shell excitation. / K.K. Okudaira, H. Yamane, K. Ito, M. Imamura, S. Hasegawa, N. Ueno // *Surf. Rev. Lett.* – 2002. – V. 9, № 1. – P. 335–340.
10. Morikawa, E. Photoemission study of direct photomicro machining in poly(vinylidene fluoride). / E. Morikawa, J. Choi, N.M. Manohara *et al.* // *J. Appl. Phys.* – 2000. – V. 87, № 8. – P. 4010–6.
11. Chebotaryov, S.S. Modification of X-ray excited photoelectron and C KVV Auger spectra during radiative carbonization of poly(vinylidene fluoride). / S.S. Chebotaryov, A.A. Volegov, L.A. Pesin *et al.* // *Physica E: Low dimensional systems and nanostructures*. – 2007. – V. 36, № 2. – P. 184–189.
12. Kuvshinov, A.M. Kinetics of radiation-induced carbonization of poly(vinylidene fluoride) film surface / A.M. Kuvshinov, L.A. Pesin, S.S. Chebotaryov *et al.* // *Polymer Degradation and Stability*. – 2008. – V. 93. – P. 1952–1955.
13. Коршак, В.В. Дегидрофторирование поливинилиденфторида в присутствии тетрагидрофурана / В.В. Коршак, Ю.П. Кудрявцев, Ю.В. Коршак // *ДАН СССР*. – 1987. – Т. 294, № 1. – С. 27–130.
14. Маргамов, И.Г. Инфракрасные спектры карбиноидных пленок, получаемых химическим путем / И.Г. Маргамов, С.Е. Евсюков, Л.А. Песин // *Журнал прикладной химии*. – 2003. – Т. 76. – Вып. 1. – С. 128–132.
15. Соколов О.Б. Развитие экспериментальных возможностей метода электронной спектроскопии с использованием магнитного энергоанализатора / О.Б. Соколов, В.Л. Кузнецов. – Челябинск.: ЧПИ., 1990. – 163 с.
16. Влияние старения карбиноидных материалов на форму инфракрасных спектров / Н.А. Хайруллина, М.Н. Соколова, И.Г. Маргамов и др. // *Известия Челябинского научного центра*. – В 4(30). – 2005. – С. 1–5.
17. Heimann, R.B. Carbyne and Carbynoid Structures / R.B. Heimann, S.E. Evsyukov, L. Kavan (Eds.). Kluwer Academic Publishers. Dordrecht, the Netherlands. – 1999. – 446 p.
18. Накамото, К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. / К. Накамото; пер. с англ. Л.В. Христенко. – М.: Мир. – 1991. – 535 с.
19. Günzler, H. IK-Spektroskopie / H. Günzler, H-U. Gremlich // *Verlag Wiley-Vch GmbH*. – 2003. – 352 p.
20. Влияние одноосного растяжения поливинилиденфторида на молекулярный состав продуктов его химического дегидрофторирования / М.Н. Соколова, А.А. Волегов, Л.А. Песин и др. // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия»*. – 2008. – Вып. 10. – № 7 (107). – С. 99–104.
21. Pesin, L.A. In situ observation of the modification of carbon hybridization in poly(vinylidene fluoride) during XPS/XAES measurements / L.A. Pesin, I.V. Gribov, V.L. Kuznetsov *et al.* // *Chemical Physics Letters*. – 2003. – V. 372 (5–6). – P. 825–830.
22. Elliott, I. Calculated core-level sensitivity factors for quantitative XPS using an HP 5950B spectrometer / I. Elliott, C. Doyle, J.D. Andrade // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. – 1983. – V. 28. – P. 303–316.
23. Ванников А.В. Фотохимия полимерных ДА-комплексов. / А.В. Ванников, А.Д. Гришина // М.: Наука. – 1984.

Поступила в редакцию 28 апреля 2009 г.

PHOTOINDUCED OXIDATION OF CARBYNOID FILMS

UV-Vis, IR and XPS experimental techniques have been used to obtain the comprehensive data about molecular and atomic structure of carbonized PVDF films to reveal a rate and features of ageing during a long period of time. The photo-oxidation phenomenon of carbonized layer of the samples after exposure to daylight is revealed.

Keywords: PVDF, photoinduced oxidation, carbynoid, carbonization, UV-Vis, IR spectroscopy.

Chebotaev Sergey Sergeevich – Candidate of Science (Physics and Mathematics), senior teacher, General and Theoretical Physics department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Чеботарев Сергей Сергеевич – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

e-mail: sergius2ch@yandex.ru

Andreychuk Vladimir Petrovich – Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Андрейчук Владимир Петрович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

Pesin Leonid Abramovich – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Instrument Production Technique department, South Ural State University.

Песин Леонид Абрамович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра технологии приборостроения, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: pesin@cspu.ru

Semochkin Pavel Sergeevich – Post-Graduate Student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Семочкин Павел Сергеевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

Sokolova Maria Nikolaevna – researcher, Ekaterinburg.

Соколова Мария Николаевна – исследователь, г. Екатеринбург.

Evsyukov Sergey Evgenievich – Candidate of Science (Chemistry), Synthesis Laboratory, Evonik Technochemie GmbH, Dossenheim, Germany.

Евсюков Сергей Евгеньевич – кандидат химических наук, лаборатория синтеза, Evonik Technochemie GmbH, Dossenheim, Germany.

Gribov Igor Vasilievich – Candidate of Science (Physics and Mathematics), senior staff scientist, Electric Phenomena Laboratory, Physics of Metals Institute of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences.

Грибов Игорь Васильевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, лаборатория электрических явлений, Институт физики металлов УрО РАН.

e-mail: gri@imp.uran.ru

Moskvina Natalia Anatolievna – Candidate of Science (Physics and Mathematics), scientific associate, Electric Phenomena Laboratory, Physics of Metals Institute of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences.

Москвина Наталья Анатольевна – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, лаборатория электрических явлений, Институт физики металлов УрО РАН.

Kuznetsov Vadim Lvovich – Doctor of Engineering Science, Electric Phenomena Laboratory, Physics of Metals Institute of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences.

Кузнецов Вадим Львович – доктор технических наук, лаборатория электрических явлений, Институт физики металлов УрО РАН.

ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word) версия работы, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

2. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (не более 500 знаков), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, ГОСТ 7.1–2003). После текста работы следует название, аннотация, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

3. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации, 11 pt. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

4. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

5. Рисунки все черно-белые. Если рисунок создан не средствами MS Office, то желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

6. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»: Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, физический факультет, кафедра ОиТФ, ответственному редактору профессору Бескачко Валерию Петровичу.

7. Адрес электронной почты: **vestnik@physics.susu.ac.ru**

8. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта ЮУрГУ (<http://www.susu.ac.ru>) следуя ссылкой: «Научные исследования», «Издательская деятельность», «Вестник ЮУрГУ», «Серии».

9. Подписной индекс журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Математика. Механика. Физика»: 29211, каталог «Пресса России». Интернет-каталог агентства «Книга-Сервис», подписной индекс: E29211.

ВЕСТНИК ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 9 (185) 2010

Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»
Выпуск 2

Редактор Н.М. Лезина

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 03.03.2010. Формат 60×84 1/8. Печать трафаретная.
Усл. печ. л. 12,55. Уч.-изд. л. 12,45. Тираж 500 экз. Заказ 70/166.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.