

Основан в 1995 г.

**Журнал входит
в Перечень ведущих рецензируемых
научных журналов и изданий,
выпускаемых в Российской Федерации,
в которых рекомендуется публикация
основных результатов диссертаций
на соискание ученых степеней
доктора и кандидата наук**

Учредитель:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» (НИУ «БелГУ»)

Издатель:

НИУ «БелГУ».
Издательско-полиграфический комплекс
НИУ «БелГУ»

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охраны культурного наследия. Свидетельство о регистрации средства массовой информации ПИ № ФС 77-21121 от 19 мая 2005 г.

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ
ЖУРНАЛА**

Главный редактор

О.Н. Полухин,
и.о. ректора НИУ «БелГУ»,
доктор политических наук, профессор

Зам. главного редактора

И.С. Константинов,
и.о. проректор по научной и инновационной деятельности НИУ «БелГУ»,
доктор технических наук,
профессор

Ответственные секретари:

В.М. Московкин,
доктор географических наук, профессор
кафедры мировой экономики
НИУ «БелГУ»

О.В. Шевченко,
зам. начальника УНИД НИУ «БелГУ»,
канд. исторических наук,

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ
СЕРИИ ЖУРНАЛА**

Главный редактор

Ю.П. Вирченко,
доктор физико-математических
наук (НИУ «БелГУ»)

Заместители главного редактора:

Н.В. Малай,
доктор физико-математических наук
(НИУ «БелГУ»)

А.М. Мејрманов,
доктор физико-математических наук,
профессор (НИУ «БелГУ»)

Ответственный секретарь

М.Н. Бекназаров,
кандидат физико-математических наук
(НИУ «БелГУ»)

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

О задаче типа Дирихле в бесконечной полуполосе для двuosесимметричного уравнения Гельмгольца.
А.А. Абашкин 5

Об уравнениях Вольтерра в пространстве частично дифференцируемых функций с операторами частично интегрирования. **И.В. Барышева, А.С. Калитвин 15**

Обобщенные степенные ряды. **Чан Куанг Вьонг 24**

Необходимое условие разрешимости задачи Коши для абстрактного уравнения Эйлера-Пуассона-Дарбу.
А.В. Глушак, О.А. Покручин 29

О разрешимости задачи диффузии-конвекции в пороупругой среде на микроскопическом уровне. **А.М. Мејрманов, Р.Н. Зимин, О.В. Гальцева, О.А. Гальцев 38**

О кратности собственных значений в задаче Штурма-Лиувилля на графах. **Адель Т. Диаб, О.М. Пенкин, В.Л. Прядиев 48**

О преобразовании меры в вариационной задаче для стилттьесовой струны. **Н.Н. Рябцева, А.С. Харченко 60**

Топологическое описание одномерных сепарабельных замкнутых множеств. **Ю.П. Вирченко, О.Л. Шпилинская 67**

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА,
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Общий метод построения лагранжиана взаимодействия для процессов электромагнитного расщепления нелокальных полей. **Г.И. Канюк, Ю.А. Касаткин, И.К. Кириченко, О.Д. Пташный 72**

Влияние расхода газа и силы тока на конфигурацию плазменных струй в двухструйной электрической дуге.
Э.Б. Кулумбаев, Т.Б. Никулчева 93

Теория фильтра Дарси. **В.П. Бушланов, И.В. Бушланов, Е.Н. Сентякова 103**

Серендиповы аппроксимации. Поучительные ошибки и контрпримеры. **И.А. Астионенко, Е.И. Литвиненко, А.Н. Хомченко 110**

О свойстве внешних границ полных кластеров на квадратной решетке. **Ю.П. Вирченко 116**

ФИЗИКА

Аппаратно-программный комплекс для автоматизированной регистрации электрических характеристик объемных и пленочных образцов полупроводников и диэлектриков. **А.Ю. Алейников, В.С. Захвалинский, И.В. Каменев 120**

Члены редколлегии:

С.В. Блажевич, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

И.Е. Внуков, доктор физико-математических наук (НИУ «БелГУ»)

А.В. Глушак, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

С.А. Гриценко, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

В.В. Красильников, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

Н.Н. Насонов, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

О.М. Пенкин, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

Г.А. Салищев, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

А.П. Солдатов, доктор физико-математических наук, профессор (НИУ «БелГУ»)

В.В. Сыщенко, доктор физико-математических наук (НИУ «БелГУ»)

Подготовка к изданию *Т.Г. Лагутина*
Компьютерная верстка
Ю.П. Вирченко, Ю.А. Лазебная

E-mail: virch@bsu.edu.ru

Подписано в печать 29.06.2012

Формат 60×84/8

Гарнитура Georgia

Усл. п. л. 26,39

Тираж 1000 экз.

Заказ 203

Подписный индекс в каталоге агентства
«Роспечать» – 81631

Оригинал-макет тиражирован
в Издательско-полиграфическом комплексе
НИУ «БелГУ»
Адрес: 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Влияние давления прессования на структуру и механические свойства керамики $ZrO_2-8\%Y_2O_3$. **В.В. Сирота, Е.В. Груздева, А.В. Иванисенко** 127

Получение и свойства наноструктурных термоэлектрических материалов методами сольвотермального синтеза и горячего изостатического прессования. **О.Н. Иванов, В. Лойковски, Р.А. Лобушкин, О.Н. Марадудина** 134

Эффект «ионного ветра» в нематической ячейке с кремниевой подложкой. **С.И. Кучеев, Ю.С. Тучина** 140

Изменение макроструктуры и физико-механических свойств технически чистого никеля в процессе отжига в диапазоне $20^\circ C - 600^\circ C$. **Н.В. Камышанченко, А.В. Гальцев, О.А. Печерина** 145

Особенности структурно-фазового состояния композиционных наноструктурных покрытий на основе ZR-TI-SI-N, полученных методом вакуумно-дугового осаждения. **В.М. Береснев, В.В. Грудницкий, Д.А. Колесников, Е.В. Крыцына, А.Д. Погребняк, М.С. Прозорова, О.В. Соболев** 149

Характеризация углеродных покрытий, полученных импульсным вакуумно-дуговым методом. **А.Я. Колпаков, А.И. Поплавский, И.В. Суджанская, М.Е. Галкина, С.С. Манохин, И.Ю. Гончаров, А.Ю. Алейников, Е.Н. Бондарева** 154

Эффект поля, индуцированный подвижными ионами в жидкокристаллической ячейке с кремниевой подложкой. **С.И. Кучеев, В.Ю. Новиков, Ю.С. Тучина** 165

Отрицательная энергия межфазной границы Cu/Nb. **А.Г. Липницкий, Д.Н. Марадудин, А.И. Картамьшев, И.В. Неласов** 169

Синтез, характеристики и кислотные свойства поверхности цирконий-фосфатных катализаторов с медью, кобальтом и никелем. **И.И. Михаленко, Е.И. Поварова, А.И. Пылинкина** 177

Прогнозирование температурной зависимости показателя преломления с помощью формулы Онсагера-Беттхера. **А.В. Полянский, Ю.А. Неручев** 184

Влияние микроструктуры на механические свойства при растяжении высокоэнтропийного сплава AlCoCrCuFeNi. **А.В. Кузнецов, Г.А. Салищев, О.Н. Сеньков, Н.Д. Степанов, Д.Г. Шайсултанов** 191

Исследование влияния режима работы двухструйного дугового плазматрона на температуру и электронную концентрацию плазмы. **Е.А. Тагильцева** 206

Годоскоп сцинтилляционных счетчиков для экспериментов на выведенном пучке нуклотрона ОИЯИ. **А.А. Терехин, В.П. Ладыгин, И.Е. Внуков, С.М. Пищидин, С.Г. Резников, А.Н. Хренов** 216

Информация для авторов 223

№11 (130) 2012

Issue 27

SCIENTIFIC PEER-REVIEWED JOURNAL

Belgorod State University
Scientific bulletin
Mathematics & Physics

Founded in 1995

Journal is included into the list of leading peer-reviewed journals and publications coming out in Russian Federation that are recommended for publishing key results of theses for Doktor and Kandidat degree-applicants.

Founder:

Federal state autonomous educational establishment of higher professional education
«Belgorod National Research University»

Publisher:

Belgorod National Research University.
Belgorod National Research University Press

The journal is registered in Federal service of control over law compliance in the sphere of mass media and protection of cultural heritage

Certificate of registration of mass media
ПИ № ФС 77-21121 May 19, 2005.

EDITORIAL BOARD OF JOURNAL

Editor-in-chief

O.N. Poluchin,

Acting Rector of Belgorod National Research University, doctor of political sciences, Professor

Deputy editor-in-chief

I.S. Konstantinov,

Acting Vice-Rector on Scientific and Innovative Work of Belgorod National Research University, Doctor of Technical Sciences, Professor

Assistant Editors

V.M. Moskovkin,

Doctor of geographical sciences,
Professor of world economy department

O.V. Shevchenko,

Deputy Head of department
of scientific and innovative activity of
Belgorod National Research University,
candidate of historical sciences

**EDITORIAL BOARD OF JOURNAL
SERIES**

Editor-in-chief

Yu.P. Virchenko,

doctor of physico-mathematical sciences,
professor of Belgorod National Research
University

Deputies of editor-in-chief

N.V. Malay,

doctor of physico-mathematical sciences,
professor of Belgorod National Research
University

A.M. Meirmanov,

doctor of physico-mathematical sciences,
professor (Belgorod National Research
University)

НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ

Белгородского государственного университета

Математика Физика

Contents

MATHEMATICS

About Dirichlet's problem in infinite half-string for biaxial symmetric Helmholtz equation. **A.A. Abashkin 5**

About Volterra equations with partial integrals in space of partially differential functions. **И.В. Barysheva, A.S. Kalitvin 15**

Generalized power series. **Tran Quang Vuong 24**

Necessary condition of solvability of the Cauchy problem for abstract Euler-Poisson-Darboux equation. **A.V. Glushak, O.A. Pokruchin 29**

Solvability of diffusion and convection problem in porous-elastic media at microscopic level. **A.M. Meirmanov R.N. Zimin, O.V. Galtseva, A.O. Galtsev 38**

About eigenvalue multiplicity in Sturm-Liouville's problem on graphs. **Adel T. Diab, O.M. Penkin, V.L. Pryadiev 48**

On measure transformations in variational problem for Stieltjes' string. **N.N. Riabceva, A.S. Kharchenko 60**

Topological description of one-dimensional closed separable sets. **Yu.P. Virchenko, O.L. Shpilinskaya 67**

**MATHEMATICAL PHYSICS,
MATHEMATICAL MODELING**

General method of interaction lagrangian constructing for electromagnetic processes of nonlocal fields splitting. **G.I. Kanyuk, Yu.A. Kasatkin, I.K. Kirichenko, O.D. Ptashny 72**

Influence of gas flow rate and current effects on configuration of plasma jets in two-jet electric arc. **E.B. Kulumbaev, T.B. Nikulicheva 93**

Darsi's filter theory. **V.P. Bushlanov, I.V. Bushlanov, E.N. Sentyakova 103**

Serendipity approximations. Didactic mistakes and counterexamples. **I.A. Astionenko, Ye.I. Litvinenko, A.N. Khomchenko 110**

On the property of external boundaries of entire clusters on square lattice. **Yu.P. Virchenko 116**

PHYSICS

Hardware-software system for automated registration of the electrical characteristics of bulk samples and thin -film semiconductors and dielectrics. **A.U. Aleynikov, V.S. Zakhvalinskii, I.V. Kamenev 120**

Responsible secretary

M.N. Beknazarov,

candidate of physico-mathematical sciences (Belgorod National Research University)

Members of editorial board

S.V. Blazhevich,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

I.E. Vnukov,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

A.V. Glushak,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

S.A. Gritsenko,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

V.V. Krasilnikov,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

N.N. Nasonov,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

O.M. Penkin,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

G.A. Salishchev,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

A.P. Soldatov,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

V.V. Syshchenko,

doctor of physico-mathematical sciences, professor (Belgorod National Research University)

Prepared for release *T.G. Lagutina*

Dummy layout by *Yu.P. Virchenko,*

Y.A. Lazebnaya

e-mail: virch@bsu.edu.ru

Passed for printing 29.03.2012

Format 60x84/8

Typeface Georgia

Printer's sheets 26,39

Circulation 1000 copies

Order 203

Subscription reference in Rospechat' agency catalogue – 81631

Dummy layout is replicated at

Belgorod State University Publishing House

Address: 85, Pobedy str., Belgorod, Russia,

308015

Influence of compaction pressure on structure and mechanical properties of ceramics ZrO₂-8%Y₂O₃. **V.V. Sirota, E.V. Gruzdeva, V.V. Ivanisenko** 127

Nanostructural thermoelectric materials obtained by solvothermal syntheses and hot isostatic pressure. **O.N. Ivanov, . Lojkowski, . A. Lyubushkin, .N. Maradudina** 134

Ion wind effect in nematic cell with silicon substrate. **S.I. Kucheev, Yu.S. Tuchina** 140

Change of macrostructure, physical and mechanical properties of pure technical nickel during the process of annealing in the range 20C-600C. **N.V. Kamyshanchenko, A.V. Galtsev, O.A. Pecherina** 145

Features of the structurally –phase state of nanocomposition coatings on the basis of ZR-TI-S₂-N system formed by the method of the vacuum-arc deposition. **V.M. Beresnev, V.V. Grudnitskiy, D.A. Kolesnikov, E.V. Krytsóna, A.D. Pogrebnik, M.S. Prozorova, O.V. Sobol** 149

Characterization of carbon coatings obtained by pulsed vacuum-arc deposition. **A. Ya. Kolpakov, A.I. Poplavsky, I.V. Sudzhanskaya, M.E. Galkina, S.S. Manokhin, I.Yu. Goncharov, A.Yu. Aleinikov, E.N. Bondareva** 154

Field effect induced mobile ions in liquid crystal cell with silicon substrate. **S.I. Kucheev, V. Yu. Novikov, Yu.S. Tuchina** 165

Negative energy of Cu/Nb interface. **A.G. Lipnitskii, D.N. Maradudin, A.I. Kartamishev, I.V. Nelasov** 169

Synthesis, characteristics and acid properties of the zirconium – phosphate catalysts surface with copper, cobalt and nickel. **I.I. Mikhalenko, E.I. Povarova, A.I. Pylinina** 177

Prediction of temperature dependence of refractive index with formula Onsager-Boettcher. **A.V. Polyansky, Yu.A. Neruchev** 184

Microstructure influence on tensile mechanical properties of an AlCoCrCuFeNi high-entropy alloy. **A.V. Kuznetsov, G.A. Salishchev, O.N. Senkov, N.D. Stepanov, D.G. Shaysultanov** 191

Influence of two-jet arc plasmotron mode on temperature and electron density of plasma. **E.Á. Tagiltseva** 206

Hodoscope of scintillator counters for experiments with extracted beam of nuclotron JINR. **A.A. Terekhin, V.P. Ladygin, I.E. Vnukov, S.M. Piyadin, S.G. Reznikov, A.N. Hrenov** 216

Information for authors 223



УДК 517.956

О ЗАДАЧЕ ТИПА ДИРИХЛЕ В БЕСКОНЕЧНОЙ ПОЛУПОЛОСЕ ДЛЯ ДВУОСЕСИММЕТРИЧНОГО УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА

А.А. Абашкин

Самарский Государственный Архитектурно-строительный Университет
ул. Молодогвардейская, 194, Самара, 443001, Россия, e-mail: samcosaa@rambler.ru

Аннотация. Для обобщенного двусесимметричного уравнения Гельмгольца исследована краевая задача, граничные условия которой зависят от значения параметров уравнения. Доказана ее однозначная разрешимость. Методом разделения переменных, используя разложение в ряд Фурье-Бесселя и преобразование Ханкеля, найден явный вид решения.

Ключевые слова: уравнение Гельмгольца, ряд Фурье-Бесселя, преобразование Ханкеля, функции Бесселя.

1. Постановка задачи

Поставим следующую задачу для уравнения

$$H_{\mu,p}^{\lambda} u = u_{xx} + u_{yy} + \frac{2\mu}{x} u_x + \frac{2p}{y} u_y - \lambda^2 u = 0, \quad p > 0, \quad \lambda > 0. \quad (1)$$

Найти функцию $u(x, y) \in C([0, a] \times [0, \infty)) \cap C^2((0, a) \times (b, \infty))$ при $\mu, p < \frac{1}{2}$ и $u(x, y) \in C((0, a] \times (0, \infty)) \cap C^2((0, a) \times (b, \infty))$ при других значениях параметров p и μ , удовлетворяющую условиям:

$$H_{\mu,p}^{\lambda} u(x, y) \equiv 0, \quad u(a, y) = q_2(y), \quad \lim_{y \rightarrow \infty} u(x, y) = 0 \quad \text{при } x \in (0, 1); \quad (2)$$

$$u(x, 0) = \varphi(x) \quad \text{при } x \in [0, a], \quad p < \frac{1}{2}; \quad (3)$$

$$\lim_{y \rightarrow 0+} y^{2p-1} u(x, y) = \varphi(x) \quad \text{при } x \in [0, a], \quad p > \frac{1}{2}; \quad (4)$$

$$\lim_{y \rightarrow 0+} \frac{u(x, y)}{\ln y} = \varphi(x) \quad \text{при } x \in [0, a], \quad p = \frac{1}{2}; \quad (5)$$

$$u(0, y) = q_1(y) \quad \text{при } y \in (0, \infty), \quad \mu < \frac{1}{2}; \quad (6)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0+} x^{2\mu-1} u(x, y) = q_1(y) \quad \text{при } y \in (0, \infty), \quad \mu > \frac{1}{2}, \quad (7)$$



$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{u(x, y)}{\ln x} = q_1(y) \quad \text{при } y \in (0, \infty), \quad \mu = \frac{1}{2}, \quad (8)$$

где $q_i(y)$ и $\varphi(x)$ – известные функции достаточной степени гладкости, такие, что $q_1(0) = \varphi(0)$ при $p < 1/2$ и $\mu < 1/2$, $q_2(0) = \varphi(a)$ при $p < 1/2$, а также $\lim_{y \rightarrow \infty} q_i(y) = 0$, $i = 1, 2$.

Отметим, что краевая задача в четверти плоскости для уравнения (1) была исследована в публикации [1], нелокальная краевая задача в полуполосе для частного случая уравнения (1) при $\mu = 0$ – в статьях [2,3], однозначная разрешимость задачи подобной задаче (2), (3), (6), но для уравнения $y^m u_{xx} + u_{yy} + \frac{\beta_0}{y} u_y - \lambda^2 y^m u = 0$, $m > 0$ была доказана в работе [4]. В монографии [5] рассмотрены краевые задачи для уравнения

$$u_{xx} + u_{yy} + \frac{2\mu}{x} u_x + \frac{2p}{y} u_y + \lambda^2 u = 0.$$

2. Единственность решения

Теорема 1. Если решение задачи с условиями (2)-(7) при $p < 1/2$, $\mu \neq 1/2$ существует, то оно единственно.

□ Для начала рассмотрим случай $\mu < 1/2$.

Допустим, что решение задачи (2), (3), (6) при $\varphi(x) \equiv 0$, $q_i(y) \equiv 0$ принимает наибольшее значение, не равное нулю во внутренней точке (x_0, y_0) полуполосы $[0, a] \times [0, \infty)$. Тогда $u_x(x_0, y_0) = 0$ и $u_y(x_0, y_0) = 0$. Точно также имеет место $\Delta u(x, y) < 0$. Поскольку на границе области решение равно нулю, то $u(x_0, y_0) > 0$. Откуда следует, что $H_{\mu, p}^\lambda u(x_0, y_0) = \Delta u(x_0, y_0) + \lambda u(x_0, y_0) < 0$, что указывает на имеющееся противоречие.

Применяя аналогичные рассуждения, можем утверждать, что решение не может принимать наименьшее значение во внутренней точке области. Таким образом, мы получили, что наибольшее и наименьшее значения функция $u(x, y)$ принимает на границе или при $y \rightarrow \infty$. Поскольку на границе и в бесконечности решение тождественно равно нулю, то и в области D решение равно нулю. Что и доказывает единственность решения задачи (2), (3), (6).

Ввиду второго из принципов соответствия для оператора $H_{\mu, p}^\lambda$ [5, с.164],

$$H_{\mu, p}^\lambda (y^{1-2p} u(x, y)) = H_{\mu, 1-p}^\lambda (u(x, y)), \quad H_{\mu, p}^\lambda (x^{1-2\mu} u(x, y)) = H_{1-\mu, p}^\lambda (u(x, y)), \quad (9)$$

существует биекция между решениями краевой задачи с условиями (2), (3), (6) и краевой задачи с условиями:

$$H_{1-\mu, p}^\lambda u(x, y) \equiv 0, \quad u(a, y) = a^{2\mu-1} q_2(y), \quad \lim_{y \rightarrow \infty} u(x, y) = 0, \quad \text{при } x \in (0, 1); \quad (10)$$

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} u(x, y) = x^{2\mu-1} \varphi(x), \quad \text{при } x \in [0, a]; \quad (11)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} x^{2\mu-1} u(x, y) = q_1(y), \quad \text{при } y \in (0, \infty). \quad (12)$$



Условия (10)-(12) после соответствующих переименований обретают вид (2), (3), (7). Вследствие этого доказанная выше единственность решения задачи (2), (3), (6) влечет единственность решения задачи (2), (4), (6). ■

Теорема 2. *Решение задачи с условиями (2)-(7) и дополнительным условием на искомую функцию*

$$\lim_{y \rightarrow \infty} y^{2p-1} u(x, y) = 0 \quad (13)$$

единственно при $p > \frac{1}{2}$.

□ Первый из принципов соответствия (9) приводит во взаимно-однозначное соответствие решения краевой задачи с условиями (2), (3), (6) и решения краевой задачи со следующими условиями: Первый из принципов соответствия (9) приводит во взаимно-однозначное соответствие решения краевой задачи с условиями (2), (3), (6) и решения краевой задачи со следующими условиями:

$$H_{\mu, 1-p}^\lambda u(x, y) \equiv 0, \quad u(a, y) = y^{2p-1} q_2(y), \quad \lim_{y \rightarrow \infty} u(x, y) = 0 \quad \text{при } x \in (0, 1); \quad (14)$$

$$\lim_{y \rightarrow 0+} y^{1-2p} u(x, y) = \varphi(x) \quad \text{при } x \in [0, a]; \quad (15)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0+} u(x, y) = y^{2p-1} q_1(y) \quad \text{при } y \in (0, \infty). \quad (16)$$

После соответствующих переименований, при выполнении условия (13), задача (14) - (16) превращается в задачу с условиями (2), (4), (6) и дополнительным условием (13). ■

3. Существование решения

Теорема 3. *Если функции $x^{\mu_1} \varphi(x)$ и $y^{p_1} q_i(y)$, $i = 1, 2$, где $\mu_1 = \mu - 1/2$, $p_1 = p - 1/2$, непрерывны, первая из них имеет ограниченную вариацию на любом интервале (b, c) , $0 < b < c < a$, а вторые – на любом интервале $(0, R)$, и выполняются условия:*

$$\int_0^a |x^\mu \varphi(x)| dx < \infty, \quad \int_0^{+\infty} |y^p q_i(y)| dy < \infty, \quad i = 1, 2,$$

то решение задачи (2)-(7) существует.

□ В силу принципа соответствия (9), достаточно рассмотреть случай $p \geq 1/2$, $\mu \geq 1/2$. Будем искать решение задачи с условиями (2), (4), (7) в виде

$$u(x, y) = V_1(x, y) + V_2(x, y),$$

где $V_1(x, y)$ и $V_2(x, y)$ удовлетворяют условиям:

$$H_{\mu, p}^\lambda V_1(x, y) \equiv 0, \quad V_1(a, y) = q_2(y), \quad \lim_{y \rightarrow \infty} V_1(x, y) = 0 \quad \text{при } x \in (0, 1); \quad (17)$$

$$\lim_{y \rightarrow 0+} y^{2p-1} V_1(x, y) = 0 \quad \text{при } x \in [0, a], \quad p > \frac{1}{2}; \quad (18)$$



$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{V_1(x, y)}{\ln y} = 0 \quad \text{при } x \in [0, a], \quad p = \frac{1}{2}; \quad (19)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} x^{2\mu-1} V_1(x, y) = q_1(y) \quad \text{при } y \in (0, \infty), \quad \mu > \frac{1}{2}; \quad (20)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{V_1(x, y)}{\ln x} = q_1(y) \quad \text{при } y \in (0, \infty), \quad \mu = \frac{1}{2}; \quad (21)$$

$$H_{\mu, p}^\lambda V_2(x, y) \equiv 0, \quad V_2(a, y) = 0, \quad \lim_{y \rightarrow \infty} V_2(x, y) = 0 \quad \text{при } x \in (0, 1); \quad (22)$$

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} y^{2p-1} V_2(x, y) = \varphi(x) \quad \text{при } x \in (0, a], \quad p > \frac{1}{2}; \quad (23)$$

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{V_2(x, y)}{\ln y} = \varphi(x) \quad \text{при } x \in (0, a], \quad p = \frac{1}{2}; \quad (24)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} x^{2\mu-1} V_2(x, y) = 0 \quad \text{при } y \in (0, \infty), \quad \mu > \frac{1}{2}; \quad (25)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{V_2(x, y)}{\ln x} = 0 \quad \text{при } y \in (0, \infty), \quad \mu = \frac{1}{2}. \quad (26)$$

Вычисление функции $V_1(x, y)$. Функцию $V_1(x, y)$ будем искать в виде

$$V_1(x, y) = \int_0^\infty x^{-\mu_1} [b_1(\gamma) K_{\mu_1}(\xi(\gamma)x) + b_2(\gamma) I_{\mu_1}(\xi(\gamma)x)] y^{-p_1} J_{p_1}(\gamma y) d\gamma, \quad (27)$$

где $\xi(\gamma) = \sqrt{\gamma^2 + \lambda^2}$, $J_\nu(z)$ – функция Бесселя первого рода [6, с.132],

$$J_\nu(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \left(\frac{z}{2}\right)^{2m+\nu}}{m! \Gamma(m + \nu + 1)}, \quad \nu \neq 0, -1, -2, \dots, \quad (28)$$

$I_\nu(z)$, $K_\nu(z)$ – модифицированные функции Бесселя [6, с.139],

$$I_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k}}{\Gamma(k+1) \Gamma(k+\nu+1)},$$

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin \nu\pi}, \quad \nu \notin Z, \quad K_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} K_\nu(z), \quad n \in Z,$$

$b_1(\gamma)$, $b_2(\gamma)$ – неизвестные функции, подлежащие определению.

Формула (27) получается, если искать решение уравнения (1) с разделенными переменными, удовлетворяющее условиям (18), (19) и третьему равенству условия (17) с последующим интегрированием этого решения по константе разделения. Поэтому функция $V_1(x, y)$ будет соответствовать условию (18), (19) и первому и третьему равенствам условия (17) при равномерной сходимости соответствующих интегралов.



Подставим формулу (27) в условия (20), предполагая интеграл равномерно сходящимся, с учетом асимптотики модифицированной функции Бесселя [6,с.173]:

$$K_\nu(z) \simeq \frac{\Gamma(|\nu|)}{2^{1-|\nu|}z^{|\nu|}}, \quad z \rightarrow 0, \tag{29}$$

при $\mu_1 > 1/2$ получим

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} x^{2\mu-1} V_1(x, y) = y^{-p_1} \int_0^{+\infty} b_1(\gamma) \frac{2^{p_1-1} \Gamma(p_1)}{\xi^{\mu_1}(\gamma)} J_{p_1}(\gamma y) d\gamma = q_1(y).$$

После применения к последнему равенству формулы обращения для преобразования Ханкеля [6, с.166] имеем:

$$b_1(\gamma) \frac{2^{p_1-1} \Gamma(p_1)}{\xi^{\mu_1}(\gamma) \gamma} = \int_0^{+\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma \tau) d\tau,$$

откуда

$$b_1(\gamma) = \frac{\xi^{\mu_1}(\gamma) \gamma}{2^{p_1-1} \Gamma(p_1)} \int_0^{+\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma \tau) d\tau. \tag{30}$$

Таким же образом, при $\mu = 1/2$ получаем:

$$b_1(\gamma) = -\gamma \int_0^{+\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma \tau) d\tau. \tag{31}$$

Аналогично, используя второе равенства в условии (17), находим выражение для $b_2(\gamma)$:

$$b_2(\gamma) = \frac{a^{\mu_1} \gamma \int_0^{+\infty} \eta^{p_1+1} q_2(\eta) J_{p_1}(\gamma \eta) d\eta - b_1(\gamma) K_{\mu_1}(\xi(\gamma) a)}{I_{\mu_1}(\xi(\gamma) a)}, \quad \mu > \frac{1}{2}. \tag{32}$$

Для того чтобы интеграл (27) являлся решением уравнения (1), достаточно чтобы равномерно сходились интегралы от частных производных 1-го и 2-го порядков подинтегральной функции интеграла (27) на множествах $[\varepsilon_1, a - \delta] \times [\varepsilon_2, \infty)$, где $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \delta$ – произвольно малые положительные постоянные.

Найдем интеграл от производной по x подинтегральной функции в (27), используя формулу дифференцирования для модифицированной функции Бесселя [6, с.141]:

$$(z^{-\nu} K_\nu(z))' = -z^{-\nu} K_{\nu+1}(z), \tag{33}$$

разобьем его следующим образом: $I = x^{-\mu_1} y^{-p_1} (-I_1 + I_2 - I_3)$, где

$$I_1 = \int_0^{+\infty} \frac{\xi^{\mu_1+1}(\gamma) \gamma}{2^{p_1-1} \Gamma(p_1)} K_{\mu_1+1}(\xi(\gamma) x) J_{p_1}(\gamma y) \int_0^{+\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma \tau) d\tau d\gamma,$$



$$I_2 = \int_0^{\infty} a^{\mu_1} \gamma \xi(\gamma) \int_0^{\infty} \eta^{p_1+1} q_2(\eta) J_{p_1}(\gamma\eta) d\eta \frac{I_{\mu_1+1}(\xi(\gamma)x)}{I_{\mu_1}(\xi(\gamma)a)} J_{p_1}(\gamma y) d\gamma,$$

$$I_3 = \int_0^{\infty} \frac{\xi^{\mu_1+1}(\gamma)\gamma}{2^{p_1-1}\Gamma(p_1)} K_{\mu_1}(\xi(\gamma)a) \frac{I_{\mu_1+1}(\xi(\gamma)x)}{I_{\mu_1}(\xi(\gamma)a)} J_{p_1}(\gamma y) \left(\int_0^{\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma\tau) d\tau \right) d\gamma.$$

Функция $K_{\nu}(z)$ положительна и убывает при $z > 0$, поэтому при $x > \varepsilon_1$ верно неравенство $K_{\mu_1+1}(\xi(\gamma)\varepsilon_1) > K_{\mu_1+1}(\xi(\gamma)x)$. Пусть $j = \sup_{z>0} |J_{p_1}(z)|$. Тогда

$$\int_0^{\infty} \left| \frac{\xi^{\mu_1+1}(\gamma)\gamma}{2^{p_1-1}\Gamma(p_1)} K_{\mu_1+1}(\xi(\gamma)x) J_{p_1}(\gamma y) \int_0^{\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma\tau) d\tau \right| d\gamma \leq$$

$$\leq \int_0^{\infty} j \left| \frac{\xi^{\mu_1+1}(\gamma)\gamma}{2^{p_1-1}\Gamma(p_1)} \int_0^{\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma\tau) d\tau \right| K_{\mu_1+1}(\xi(\gamma)\varepsilon_1) d\gamma.$$

Интеграл стоящий справа сходится, в силу асимптотики

$$K_{\nu}(z) \simeq \frac{e^{-z}}{\sqrt{z}}, \quad z \rightarrow \infty \quad (34)$$

и стремления к нулю функции $\left| \int_0^{\infty} \tau^{p_1+1} q_1(\tau) J_{p_1}(\gamma\tau) d\tau \right|$ при $\gamma \rightarrow \infty$. По признаку Вейерштрасса интеграл I_1 сходится равномерно.

Интеграл I_2 сходится равномерно, так как его подинтегральное выражение состоит из интегрируемой функции $\gamma J_{p_1}(\gamma y) \int_0^{\infty} \eta^{p_1+1} q_2(\eta) J_{p_1}(\gamma\eta) d\eta$ и множителя, имеющего экспоненциальный характер убывания на бесконечности при $x \in [0, \delta]$, что следует из асимптотики [6, с.173]

$$I_{\nu}(z) \simeq \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}}, \quad z \rightarrow \infty. \quad (35)$$

Равномерная сходимост ь интеграла I_3 и интегралов от второй производной по x и первой и второй производных по y доказывается аналогично.

Нахождение функции $V_2(x, y)$. Будем искать функцию $V_2(x, y)$ методом разделения переменных:

$$V_2(x, y) = V(x)W(y).$$

В результате приходим к следующим уравнениям:

$$V'' + \frac{2\mu}{x}V' + \gamma^2V = 0, \quad (36)$$

$$W'' + \frac{2p}{y}W' - (\gamma^2 + \lambda^2)W = 0, \quad (37)$$



где γ^2 – константа разделения.

Уравнение (36) заменой $V(x) = x^{-\mu_1} F(\gamma x)$ сводится к уравнению Бесселя, общее решение которого можно записать в виде [6, с.132-135]:

$$F(z) = C_1 J_{\mu_1}(z) + C_2 Y_{\mu_1}(z),$$

где $Y_\nu(z)$ – функция Бесселя второго рода,

$$Y_\nu(z) = \frac{J_\nu(z) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\sin \nu\pi}, \quad \nu \notin Z, \quad Y_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} Y_\nu(z), \quad n \in Z.$$

Тогда общим решением уравнения (36) будет функция

$$V(x) = C_1 x^{-\mu_1} J_{\mu_1}(\gamma x) + C_2 x^{-\mu_1} Y_{\mu_1}(\gamma x).$$

В силу условия (25) и асимптотик функций Бесселя первого и второго рода [6, с.172],

$$J_\nu(z) \simeq \frac{x^\nu}{2^\nu \Gamma(1 + \nu)}, \quad z \rightarrow 0,$$

$$Y_\nu(z) \simeq -\frac{2^\nu \Gamma(\nu)}{\pi x^\nu}, \quad \nu > 0, \quad z \rightarrow 0,$$

необходимо положить $C_2 = 0$.

Для того чтобы функция $u(x, y)$ удовлетворяла второму равенству условия (22), необходимо выполнение равенства $J_{\mu_1}(\gamma a) = 0$. Если обозначить посредством r_n , $n = 1, 2, \dots$ все положительные корни уравнения $J_{\mu_1}(x) = 0$, пронумерованные в порядке возрастания, то $\gamma a = r_n$ для некоторого номера n , откуда получаем $\gamma = \frac{r_n}{a}$. Тогда $V(x)$ принимает следующий вид:

$$V_n(x) = A_n x^{-\mu_1} J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right).$$

Уравнение (37) заменой $V(x) = x^{-\mu_1} F(\gamma x)$ сводится к модифицированному уравнению Бесселя [6, с.141], его общим решением будет функция

$$W_n(y) = C_3 y^{-p_1} K_{p_1}(\xi_n y) + C_4 y^{-p_1} I_{p_1}(\xi_n y),$$

где $\xi_n = \sqrt{\left(\frac{r_n}{a}\right)^2 + \lambda^2}$.

Для того, чтобы выполнялось условие (22), в силу асимптотики в функций $K_\nu(z)$ и $I_\nu(z)$ при $z \rightarrow \infty$ (34), (35) необходимо положить $C_4 = 0$. В результате, мы можем составить ряд

$$V_2(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n x^{\mu_1} y^{-p_1} J_{-\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right) K_{p_1}(\xi_n y). \quad (38)$$

Определим коэффициенты B_n так, чтобы ряд (38) являлся решением задачи (22) - (26). Подставив этот ряд в условия (23), (24) с учётом асимптотики функции $K_\nu(z)$ (29) получим:

$$x^{\mu_1} \varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \frac{\Gamma(p_1)}{2^{1-p_1} \xi_n^{p_1}} J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right), \quad p > \frac{1}{2},$$



$$x^{\mu_1} \varphi(x) = - \sum_{n=1}^{\infty} B_n J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right), \quad p = \frac{1}{2}.$$

При выполнении условий теоремы 3 можно разложить $x^{\mu_1} \varphi(x)$ в ряд Фурье-Бесселя [6, с.165]:

$$x^{\mu_1} \varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right), \quad (39)$$

где c_n определяются по формуле [6, с.164]

$$c_n = \frac{2}{a^2 J_{\mu_1+1}^2(r_n)} \int_0^a \varphi(x) x^{\mu_1+1} J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right) dx, \quad n = 1, 2, \dots \quad (40)$$

Тогда имеет место следующие равенства:

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \frac{\Gamma(-p_1)}{2^{p_1+1} \xi_n^{p_1+1}} J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right), \quad p > \frac{1}{2};$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right) = - \sum_{n=1}^{\infty} B_n J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right), \quad p = \frac{1}{2}.$$

Выразив из этого равенства B_n , получим

$$B_n = c_n \frac{\xi_n^{p_1}}{\Gamma(p_1) 2^{p_1-1}}, \quad p > \frac{1}{2}; \quad (41)$$

$$B_n = -c_n, \quad p = \frac{1}{2}, \quad (42)$$

где коэффициенты c_n определяются равенством (40).

Для того, чтобы формальное решение в виде ряда (38), коэффициенты которого определяются по формуле (41), было решением уравнения (1), необходимо доказать равномерную сходимость на множествах $[\varepsilon_1, a - \delta] \times [\varepsilon_2, \infty)$, где $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \delta$ – произвольно малые положительные постоянные ряда (38) и ряда, получающегося почленным его дифференцированием по x и по y .

Пусть $j = \sup_{x>0} J_{\mu_1}(x)$. Принимая во внимание, что $K_{p_1}(x)$ убывает при $x > 0$, имеем следующие оценки:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \left| c_n \frac{\xi_n^{p_1}}{\Gamma(p_1) 2^{p_1-1}} x^{-\mu_1} y^{-p_1} J_{-\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right) K_{p_1}(\xi_n y) \right| &\leq \\ &\leq \sum_{n=1}^{\infty} |c_n| \frac{\xi_n^{p_1}}{\Gamma(p_1) 2^{p_1-1}} \varepsilon_1^{-\mu_1} \varepsilon_2^{-p_1} j K_{p_1}(\xi_n \varepsilon_2). \end{aligned}$$



Ряд, стоящий справа, сходится, вследствие экспоненциального убывания последовательности $K_{p_1}(\xi_n \varepsilon_2)$ при $n \rightarrow \infty$ и стремления к нулю коэффициентов c_n . Таким образом, равномерная сходимость ряда (38) доказана.

Доказательство сходимости рядов, получающихся почленным дифференцированием ряда (38) по x и по y , проводится аналогично.

Чтобы решение, выражаемое формулой (38), удовлетворяло условию (25), достаточно равномерной сходимости ряда, получающегося умножением ряда (38) на $x^{2\mu_1}$, этот факт также доказывается аналогичным способом.

Для того чтобы выполнялось условие (23) для ряда (38), достаточно доказать равномерную сходимость ряда

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n(y) J_{\mu_1} \left(\frac{r_n}{a} x \right), \quad (43)$$

где $c_n(y) = B_n y^{p_1} K_{p_1}(\xi_n y)$. Ряд (43), в котором y мы рассматриваем как параметр, является разложением функции $x^{\mu_1} y^{2p_1} u(x, y)$ по ортогональной с весом системе функций $\{J_{\mu_1}(\frac{r_n}{a} x)\}$. Ряд, получающийся из ряда (43) предельным переходом при $y \rightarrow 0$, сходится равномерно, если выполняются условия теоремы.

Изучим поведение коэффициентов $c_n(y)$ при изменении y . Для этого найдем производную по y от коэффициентов $c_n(y)$, используя формулу дифференцирования (33)

$$(B_n y^{p_1} K_{p_1}(\xi_n y))' = B_n \xi_n y^{p_1} K_{p_1-1}(\xi_n y).$$

Выражение, стоящее справа, не имеет положительных корней, так как их не имеет функция $K_\nu(z)$. Принимая во внимание, что $K_\nu(z)$ убывает экспоненциально при $z \rightarrow \infty$, можно сделать вывод, что коэффициенты как функции от y монотонно убывают на всей положительной полуоси, стремясь к нулю. Поэтому из равномерной сходимости ряда (38) при $y \rightarrow 0$ следует равномерная сходимость ряда (43) при всех остальных значениях y , а из этого факта следует сходимость ряда (38).

Таким образом, существование решения задачи (2)-(7) для $\mu > 1/2$, $p > 1/2$ доказано. А значит, вследствие формулы (9), и для значений параметров $\mu > 1/2$ и (или) $p > 1/2$. Чтобы получить формулы, явно выражающие решение краевой задачи с условиями (2), (3), (7), необходимо в формулах (27), (30), (31), (32), (38), (40), (41), (42) заменить p_1 на $-p_1$, $q_i(y)$ на $y^{2p-1} q_i(y)$, $i = 1, 2$ и умножить правые части равенств в формулах (27) и (38) на y^{-2p_1} .

Аналогично для получения формул выражающих решение задачи (2), (4), (6), нужно в формулах (27), (30), (31), (32), (38), (40), (41), (42) заменить μ_1 на $-\mu_1$, $q_2(y)$ на $a^{2\mu-1} q_2(y)$, $\varphi(x)$ на $x^{2\mu-1} \varphi(x)$ и умножить правые части формул (27) и (38) на $x^{-2\mu_1}$. ■

Литература

1. Лернер М.Е., Репин О.А. О задаче Дирихле для обобщенного двусесимметрического уравнения Гельмгольца в первом квадранте // Вестник Самарского Технического Университета. – 1998. – 6. – С.5-8.



2. Лернер М.Е., Репин О.А. Нелокальные краевые задачи в вертикальной полуполосе для обобщенного осесимметрического уравнения Гельмгольца // Дифференциальные уравнения. – 2001. – 37. – С.1562-1564.
3. Моисеев Е.И. О разрешимости одной нелокальной краевой задачи // Дифференциальные уравнения. – 2001. – 37. – С.1565-1567.
4. Рузиев М.Х. Задача Дирихле в вертикальной полуполосе для вырождающегося эллиптического уравнения // Материалы конференции «Дифференциальные уравнения, теория функций и приложения», 2007. – С.268-269.
5. Маричев О.И., Килбас А.А., Репин О.А. Краевые задачи для уравнений в частных производных с разрывными коэффициентами / Самара: Изд-во СГЭУ, 2008. – 275 с.
6. Лебедев Н.Н. Специальные функции и их приложения. СПб.: Лань, 2010. – 368 с.

ABOUT DIRICHLET'S PROBLEM IN INFINITE HALF-STRING FOR BIAxIAL SYMMETRIC HELMHOLTZ EQUATION

A.A. Abashkin

Samara State University of Architecture and Civil Engineering,
Molodogvardeyskaya St., 194, Samara, 443001, Russia, e-mail: samcocaa@rambler.ru

Abstract. Boundary problem for the biaxial symmetric Helmholtz equation is studied. Boundary conditions of this problem depend on equation's parameters. Existence and uniqueness of the solution are proved. Formulas for solution of this boundary problem are found with help of Fourier-Bessel's expansion and Hankel's transformation.

Key words: Helmholtz's equation, Fourier-Bessel's expansion, Hankel's transformation, Bessel's functions.



УДК 517.968

ОБ УРАВНЕНИЯХ ВОЛЬТЕРРА В ПРОСТРАНСТВЕ ЧАСТИЧНО ДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫХ ФУНКЦИЙ С ОПЕРАТОРАМИ ЧАСТИЧНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

И.В. Барышева, А.С. Калитвин

Липецкий государственный педагогический университет,
ул. Ленина 42, Липецк, 398020, Россия, e-mail: barysheva_iv@mail.ru

Аннотация. Получены условия обратимости линейных уравнений Вольтерра с интегралами частного вида в пространстве частично дифференцируемых функций. Дана оценка приближённого решения таких уравнений. Показано, что однородное линейное интегральное уравнение Вольтерра второго рода с интегралами, рассматриваемого типа, определяющимися непрерывными ядрами, имеет только нулевое суммируемое решение, но может иметь несуммируемые решения.

Ключевые слова: интегро-дифференциальные уравнения, уравнения Вольтерра, пространства частично дифференцируемых функций, спектральный радиус, резольвентные ядра.

1. Введение

В работе изучается интегральное уравнение

$$\lambda x = Kx + f, \tag{1}$$

где оператор K определяется равенством

$$\begin{aligned} (Kx)(t, s) = & \int_0^t l(t, s, \tau)x(\tau, s)d\tau + \\ & + \int_0^s m(t, s, \sigma)x(t, \sigma)d\sigma + \int_0^t \int_0^1 n(t, s, \tau, \sigma)x(\tau, \sigma)d\sigma d\tau, \end{aligned} \tag{2}$$

в котором $(t, s) \in D = [0, 1] \times [0, 1]$, $0 \leq \tau \leq t$, $0 \leq \sigma \leq s$, $l(t, s, \tau)$, $m(t, s, \sigma)$ и $n(t, s, \tau, \sigma)$ – заданные функции и интегралы понимаются в смысле Лебега.

Наличие в правой части равенства (2) интегралов, в которых функция $x(t, s)$ интегрируется по части переменных (одномерных частных интегралов), приводит к принципиальному отличию оператора Вольтерра с частными интегралами K от обычных интегральных операторов Вольтерра

$$(Ax)(t) = \int_0^t l(t, \tau)x(\tau)d\tau, \quad (Bx)(t, s) = \int_0^t \int_0^1 n(t, s, \tau, \sigma)x(\tau, \sigma)d\sigma d\tau.$$



Например, оператор K с частными интегралами и ненулевыми непрерывными ядрами l, m, n не является компактным ни в пространстве непрерывных по совокупности переменных функций, ни в пространствах $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$), тогда как интегральные операторы Вольтерра A и B с непрерывными ядрами компактны в таких же пространствах функций одной и двух переменных соответственно.

Линейные операторы Вольтерра с одномерными частными интегралами исследовались в [1,2], в [3] изучались линейные и нелинейные операторы Вольтерра с одномерными и многомерными частными интегралами. Для изучаемых в этих работах линейных операторов получены условия обращения в нуль их спектрального радиуса. При этом линейные операторы Вольтерра с частными интегралами рассматриваются в пространствах непрерывных функций, в пространствах $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$), в банаховых идеальных пространствах (БИП) и в других пространствах, а линейные интегральные уравнения с такими операторами имеют единственное решение в рассматриваемых пространствах.

Приводимый ниже пример показывает, что, наряду с решениями в выбранных пространствах, уравнения Вольтерра с частными интегралами вида (1) могут иметь решения, которые не принадлежат таким пространствам. Поэтому выбор заранее пространства, в котором отыскиваются решения уравнений Вольтерра с частными интегралами, может привести к потере решений.

Пусть заданные функции $l(t, s, \tau)$, $m(t, s, \sigma)$ и $n(t, s, \tau, \sigma)$ непрерывны. При этом условии оператор K непрерывен в пространстве $C(D)$ — непрерывных на D функций и в пространствах $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$), а его спектральный радиус равен нулю: $r(K) = 0$ [1,2]. Поэтому при каждом $\lambda \neq 0$ и любой функции $f \in C(D)$ уравнение (1) имеет единственное непрерывное решение.

Следующий пример показывает, что уравнение (1) может иметь несуммируемые решения.

Пример. Пусть в уравнении (1) $\lambda = 2$, $f(t, s) = 0$ на D , $l(t, s, \tau) = a(t, \tau)$, $m(t, s, \sigma) = 0$, $n(t, s, \tau, \sigma) = a(t, \tau)$, где

$$a(t, \tau) = \begin{cases} 0 & , \text{ если } t = 0, \\ \tau e^{1/t^2 - 1} & , \text{ если } 0 \leq \tau \leq te^{1-1/t^2}, \\ t & , \text{ если } te^{1-1/t^2} \leq \tau \leq 1. \end{cases}$$

Непосредственно проверяется непрерывность функции $a(t, \tau)$. Тогда $r(K) = 0$, если оператор K рассматривается в $C(D)$ или в $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$) [1,2]. Поэтому уравнение $2x = Kx$ имеет в $C(D)$ и в $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$) только нулевое решение.

Функция

$$y(t) = \begin{cases} 0 & , \text{ если } t = 0, \\ t^{-1} & , \text{ если } 0 < t \leq 1, \end{cases}$$



является решением уравнения [4, с. 14]

$$y(t) = \int_0^t a(t, \tau)y(\tau)d\tau$$

и не суммируема. Легко убедиться, что функция $x(t, s) = y(t)$ есть несуммируемое решение уравнения $2x = Kx$, однако $x \in L^p(D)$ при $0 < p < 1$.

В приведённом примере оператор K не действует в пространстве $L^p(D)$ при $0 < p < 1$, но он действует в некотором его нетривиальном подпространстве, при этом $r(K) \neq 0$.

Действительно, пусть u_0 — некоторая положительная функция из $X = L^p(D)$ ($0 < p < 1$), т.е. $u_0 \in X$ и $u_0(t, s) > 0$ почти всюду на D . Через E_{u_0} обозначим множество функций из X , удовлетворяющих неравенству $|x(t, s)| \leq \alpha u_0(t, s)$, где постоянная α зависит от x . E_{u_0} является банаховым идеальным пространством [4] относительно нормы

$$\|x\|_{E_{u_0}} = \inf \{ \alpha : |x(t, s)| \leq \alpha u_0(t, s), \quad x \in L^p(D), \quad 0 < p < 1 \} .$$

Положим $u_0(t, s) = y(t)$. Тогда оператор K действует, следовательно, и непрерывен в E_{u_0} [1], причём его спектральный радиус $r(K) \geq 2$, а пространства $C(D)$ и $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$) не вложены в E_{u_0} . Поэтому для нахождения множества решений уравнения (1) полезно использовать более широкие пространства, например, сумму пространств $G = L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$) и $H = E_{u_0}$.

Отметим, что под суммой Z БИП G и H с носителем D [1,5] понимается множество функций z , представимых в виде суммы $g + h$, где $g \in G$, а $h \in H$. При этом Z является БИП [5] относительно нормы

$$\|z\| = \inf \{ \|g\|_G + \|h\|_H : z = g + h, \quad g \in G, \quad h \in H \} .$$

Легко видеть, что оператор

$$(Kx)(t, s) = \int_0^t a(t, \tau)x(\tau, s)d\tau + \int_0^t \int_0^1 a(t, \tau)x(\tau, \sigma)d\sigma d\tau \tag{3}$$

действует в пространстве $Z = G + H$, если $G = L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$) и $H = E_{u_0}$, при этом его спектральный радиус удовлетворяет неравенству $r(K) \geq 2$, а уравнение $2x = Kx + f$ с $f \in C(D)$ имеет в Z единственное непрерывное решение x_0 и бесконечное множество решений вида

$$x(t, s) = x_0(t, s) + cy(t),$$

где c — произвольная постоянная.

Интегральные операторы Вольтерра A и B с непрерывными ядрами $l(t, s, \tau) = a(t, \tau)$ и $n(t, s, \tau, \sigma) = a(t, \tau)$ компактны в $C([0, 1])$, $L^p([0, 1])$ ($1 \leq p \leq \infty$) и в $C(D)$, $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$) соответственно. Существуют примеры некомпактных в этих пространствах интегральных операторов Вольтерра A и B , для которых $r(A) = r(B) = 0$.

Различные условия обращения в ноль спектрального радиуса линейного оператора Вольтерра с частными интегралами (2) можно найти в [1-3].



2. О разрешимости и приближённом решении уравнения Вольтерра с частными интегралами в пространстве частично дифференцируемых функций

К интегральным уравнениям Вольтерра с частными интегралами приводятся задачи теории упругих оболочек [6], дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений с частными производными [6-9] и некоторые другие задачи [6,8]. Постановка ряда таких задач приводит к необходимости изучения понимаемых в различных смыслах решений соответствующих интегральных уравнений. В частности, для интегрального уравнения Вольтерра с частными интегралами теории упругих оболочек рассматриваются голоморфные решения [6].

Изучение понимаемых в классическом смысле решений интегро-дифференциальных уравнений Барбашина приводит к изучению непрерывных на D вместе со своей частной производной по одной из переменных решений уравнений Вольтерра с частными интегралами.

Действительно, рассмотрим линейное интегро-дифференциальное уравнение Барбашина

$$\frac{\partial x(t, s)}{\partial t} = c(t, s)x(t, s) + \int_0^1 k(t, s, \sigma)x(t, \sigma)d\sigma + h(t, s), \quad (4)$$

где $t, s, \sigma \in [0, 1]$, $c(t, s)$, $k(t, s, \sigma)$ и $h(t, s)$ – заданные непрерывные функции, а неизвестная функция $x(t, s)$ непрерывна вместе со своей частной производной по переменной t на $D = [0, 1] \times [0, 1]$. Это уравнение изучалось в книге [9]. Пусть функция $x(t, s)$ удовлетворяет начальному условию $x(t_0, s) = x_0(s)$, где $t_0 \in [0, 1]$ и $x_0(s)$ – заданная непрерывная функция. Проинтегрировав (4) по отрезку $[t_0, t] \subset [0, 1]$, получим уравнение

$$x(t, s) = \int_{t_0}^t c(\tau, s)x(\tau, s)d\tau + \int_{t_0}^t \int_0^1 k(\tau, s, \sigma)x(\tau, \sigma)d\sigma d\tau + g(t, s), \quad (5)$$

где $g(t, s) = \int_{t_0}^t h(\tau, s)d\tau + x_0(s)$. Уравнение (4) с начальным условием $x(t_0, s) = x_0(s)$, очевидно, равносильно уравнению (5), если под решением этих уравнений понимается непрерывная на D вместе со своей частной производной по t функция $x(t, s)$.

Уравнение (5) представляет собой частный случай уравнения Вольтерра с частными интегралами (1). В связи с этим и приведённым выше примером представляет интерес рассмотрение уравнения (1) в пространстве частично дифференцируемых функций двух переменных, т.е. в пространстве непрерывных на D вместе со своей частной производной по t функций $x(t, s)$.

Через U обозначим множество функций $x(t, s)$, непрерывных на D вместе с частной производной по переменной t . U – банахово пространство относительно нормы

$$\|x\|_U = \sup_{s,t} \sum_{k=0}^1 \left| \frac{\partial^k x(t, s)}{\partial t^k} \right| = \sup_s \sup_t \sum_{k=0}^1 \left| \frac{\partial^k x(t, s)}{\partial t^k} \right|.$$

Очевидно неравенство $\|x\|_{C(D)} \leq \|x\|_U$ ($x \in U$), которое показывает, что пространство U непрерывно вложено в $C(D)$.



Теорема 1. Пусть заданные в уравнении (1) функции $l(t, s, \tau)$, $m(t, s, \sigma)$ и $n(t, s, \tau, \sigma)$ непрерывны вместе со своими частными производными по t . Тогда для любой функции $f \in U$ уравнение (1) имеет в U единственное решение.

□ При сделанных предположениях относительно ядер операторы

$$(Lx)(t, s) = \int_0^t l(t, s, \tau)x(\tau, s)d\tau, \quad (Mx)(t, s) = \int_0^s m(t, s, \sigma)x(t, \sigma)d\sigma,$$

$$(Nx)(t, s) = \int_0^t \int_0^1 n(t, s, \tau, \sigma)x(\tau, \sigma)d\tau d\sigma$$

и $K = L + M + N$ действуют в пространстве U [10, 11], а также в пространстве $C(D)$, и их спектральные радиусы равны нулю, если они рассматриваются в $C(D)$ [1-3]. Тогда при любой непрерывной функции f уравнение (1) имеет единственное решение

$$\begin{aligned} x(t, s) = f(t, s) + \int_0^t \varphi(t, s, \tau)f(\tau, s)d\tau + \int_0^s \psi(t, s, \sigma)f(t, \sigma)d\sigma + \\ + \int_0^t \int_0^1 \phi(t, s, \tau, \sigma)f(\tau, \sigma)d\tau d\sigma, \end{aligned} \tag{6}$$

где резольвентные ядра φ , ψ , ϕ определяются равенствами [2,3]

$$\begin{aligned} \varphi(t, s, \tau) = \sum_{j=1}^{\infty} l^{(j)}(t, s, \tau), \quad \psi(t, s, \sigma) = \sum_{j=1}^{\infty} m^{(j)}(t, s, \sigma), \\ \phi(t, s, \tau, \sigma) = \sum_{j=1}^{\infty} n^{(j)}(t, s, \tau, \sigma), \end{aligned} \tag{7}$$

$$l^{(1)}(t, s, \tau) = l(t, s, \tau), \quad l^{(j)}(t, s, \tau) = \int_{\tau}^t l(t, s, u)l^{(j-1)}(u, s, \tau)du,$$

$$m^{(1)}(t, s, \sigma) = m(t, s, \sigma), \quad m^{(j)}(t, s, \sigma) = \int_{\sigma}^s m(t, s, v)m^{(j-1)}(t, v, \sigma)dv,$$

$$n^{(1)}(t, s, \tau, \sigma) = n(t, s, \tau, \sigma),$$

$$n^{(j)}(t, s, \tau, \sigma) = l(t, s, \tau)m^{(j-1)}(\tau, s, \sigma) + m(t, s, \sigma)l^{(j-1)}(t, \sigma, \tau) +$$

$$+ \int_{\tau}^t l(t, s, u)n^{(j-1)}(u, s, \tau, \sigma)du +$$

$$+ \int_0^1 m(t, s, v)n^{(j-1)}(t, v, \tau, \sigma)dv + \int_{\tau}^t n(t, s, u, \sigma)l^{(j-1)}(u, \sigma, \tau)du +$$



$$+ \int_0^1 n(t, s, \tau, v) m^{(j-1)}(\tau, v, \sigma) dv + \int_\tau^t \int_0^1 n(t, s, u, v) n^{(j-1)}(u, v, \tau, \sigma) dudv,$$

причём функции $\varphi(t, s, \tau)$, $\psi(t, s, \sigma)$ и $\phi(t, s, \tau, \sigma)$ непрерывны и имеют непрерывные частные производные по переменной t . Отсюда и из равенства (6) следует, что при любой функции $f \in U$ единственное решение уравнения (1) принадлежит U . ■

В условии теоремы спектральный радиус оператора K равен нулю. Поэтому в пространстве U обратимо уравнение (1), т.е. обратим рассматриваемый в U оператор $I - K$, а решение уравнения может быть получено методом последовательных приближений.

Спектральный радиус действующего в пространстве U оператора (2) обращается в нуль и при более общих условиях на ядра.

Через $BC(L^1(\Omega))$, где $\Omega = [0, 1]$ или $\Omega = D$, обозначим множество ограниченных измеримых функций $c(t, s, \omega)$, которые непрерывны по $(t, s) \in D$ как функции со значениями в $L^1(\Omega)$. $BC(L^1(\Omega))$ — банахово пространство относительно нормы $\|c\| = \sup_D \int_\Omega |c(t, s, \omega)| d\omega$. В этом пространстве всюду плотно множество многочленов.

Аналогично теореме 1 доказывается более общая

Теорема 2. Если функции l , m , l'_t и m'_t принадлежат пространству $BC(L^1([0, 1]))$, а функции n и n'_t — пространству $BC(L^1(D))$, то при любой функции $f \in U$ уравнение (1) обратимо в U , а его решение может быть найдено методом итераций.

□ Непосредственно проверяется, что операторы L , M , N и K действуют в пространстве U , функции $l^{(j)}$, $m^{(j)}$ и $n^{(j)}$ ($j = 1, 2, \dots$) принадлежат пространствам $BC(L^1([0, 1]))$ и $BC(L^1(D))$ соответственно, а ряды (7) и соответствующие им ряды из производных по t мажорируются сходящимися числовыми рядами. Следовательно, функции φ , ψ , φ'_t и ψ'_t принадлежат пространству $BC(L^1([0, 1]))$, функции ϕ и ϕ'_t — пространству $BC(L^1(D))$. Тогда оператор R , определяемый правой частью равенства (6), действует в пространстве U , а единственное решение уравнения (1) в U находится по формуле $x = Rf$, где f — произвольная функция из U . Поэтому оператор R является обратным к оператору $I - K$, т.е. уравнение (1) обратимо в U . ■

В условии теоремы 1 уравнение (1) имеет единственное решение не только в пространстве U , но и в более широких пространствах $C(D)$ и $L^p(D)$ ($1 \leq p \leq \infty$), так как спектральный радиус действующего в этих пространствах оператора K равен нулю. В перечисленных случаях единственное решение уравнения (1) суммируемо на D . Пример показывает, что уравнение (1) с непрерывными ядрами может иметь не суммируемые решения.

Отметим, что свойства оператора (2) в пространствах E_{u_0} и $Z = G + H$ фактически не изучались. Из общей теории линейных операторов с частными интегралами в БИП [1,9] вытекает, что если оператор (2) действует из E_{u_0} в E_{u_1} , где E_{u_1} определяется аналогично E_{u_0} , или действует из $Z = G + H$ в $Z_1 = G_1 + H_1$, где G_1 и H_1 — БИП с носителем D [1,9], то оператор (2) непрерывен, а его регулярность [1,9] означает действие в рассматриваемых пространствах оператора (2) с функциями $|l|$, $|m|$, $|n|$ вместо функций l , m , n .



При приближённом решении уравнение (1) с $\lambda = 1$ заменяется уравнением

$$x(t, s) = \int_0^t \tilde{l}(t, s, \tau)x(\tau, s)d\tau + \int_0^s \tilde{m}(t, s, \sigma)x(t, \sigma)d\sigma + \int_0^t \int_0^1 \tilde{n}(t, s, \tau, \sigma)x(\tau, \sigma) d\sigma d\tau + \tilde{f}(t, s) \equiv (\tilde{K}x)(t, s) + \tilde{f}(t, s). \quad (8)$$

Важную роль при этом играют оценки нормы резольвент и решений уравнений (1) и (8), которые могут быть получены с применением схем, рассмотренных в [1] в случае пространства непрерывных функций.

Будем предполагать, что l, m, n, f и $\tilde{l}, \tilde{m}, \tilde{n}, \tilde{f}$ – непрерывные вместе со своими частными производными по переменной t функции. Тогда операторы K и \tilde{K} действуют в пространстве U . Пусть \tilde{L}, \tilde{M} и \tilde{N} – операторы L, M и N с ядрами \tilde{l}, \tilde{m} и \tilde{n} вместо ядер l, m и n соответственно.

При сделанных предположениях относительно ядер операторы $L, M, N, K, \tilde{L}, \tilde{M}, \tilde{N}$ и \tilde{K} действуют в пространстве непрерывных на $[0, 1] \times [0, 1]$ функций и их спектральные радиусы равны нулю [1-3]. Поэтому спектр этих операторов состоит из единственной точки ноль. Так как перечисленные операторы действуют в U , то из работы [12] следует, что и в U спектр этих операторов состоит из нуля. Поэтому уравнения (1) и (8) обратимы в U . Пусть $\mathcal{K} = (I - K)^{-1}$, $\tilde{\mathcal{K}} = (I - \tilde{K})^{-1}$, а x и \tilde{x} – решения уравнений (1) и (8). Очевидно неравенство

$$\|\tilde{\mathcal{K}} - \mathcal{K}\| \leq \|\tilde{\mathcal{K}}\| \|\mathcal{K}\| \|K - \tilde{K}\| \leq c \|K - \tilde{K}\|, \quad (9)$$

где c – некоторая константа.

Тогда

$$\begin{aligned} \|\tilde{\mathcal{K}} - \mathcal{K}\| \leq c \cdot \sup_{t,s} & \left[\int_0^t |(l - \tilde{l})(t, s, \tau)| d\tau + \int_0^t \left| \frac{\partial(l - \tilde{l})(t, s, \tau)}{\partial t} \right| d\tau + \right. \\ & + |(l - \tilde{l})(t, s, t)| + 2 \int_0^s |(m - \tilde{m})(t, s, \sigma)| d\sigma + \int_0^s \left| \frac{\partial(m - \tilde{m})(t, s, \sigma)}{\partial t} \right| d\sigma + \\ & + \int_0^t \int_0^1 |(n - \tilde{n})(t, s, \tau, \sigma)| d\sigma d\tau + \int_0^t \int_0^1 \left| \frac{\partial(n - \tilde{n})(t, s, \tau, \sigma)}{\partial t} \right| d\sigma d\tau + \\ & \left. + \int_0^1 |(n - \tilde{n})(t, s, t, \sigma)| d\sigma \right]. \quad (10) \end{aligned}$$

Если теперь

$$\left| \frac{\partial^i(l - \tilde{l})(t, s, \tau)}{\partial t^i} \right| < \frac{\varepsilon}{9c}, \quad \left| \frac{\partial^i(m - \tilde{m})(t, s, \sigma)}{\partial t^i} \right| < \frac{\varepsilon}{9c}, \quad (11)$$

$$\left| \frac{\partial^i(n - \tilde{n})(t, s, \tau, \sigma)}{\partial t^i} \right| < \frac{\varepsilon}{9c} \quad (i = 0, 1),$$



то из (9) и (10) следует неравенство $\|\tilde{\mathcal{K}} - \mathcal{K}\| < \varepsilon$. Таким образом, резольвенты уравнений (1) и (8) отличаются по норме сколь угодно мало, если ядра уравнения (8) «достаточно близки» к соответствующим ядрам уравнения (1).

Из (9) и неравенства

$$\|x - \tilde{x}\|_U \leq \|\mathcal{K}\| (\|\tilde{\mathcal{K}}\| \|K - \tilde{K}\| \|\tilde{f}\|_U + \|f - \tilde{f}\|_U)$$

вытекает следующая оценка:

$$\|x - \tilde{x}\|_U \leq c \|K - \tilde{K}\| \|\tilde{f}\|_U + \|\mathcal{K}\| \|f - \tilde{f}\|_U,$$

где $c = \|\mathcal{K}\| \|\tilde{\mathcal{K}}\|$, которая показывает, что число $\|x - \tilde{x}\|_U$ достаточно мало, если выполнены условия (11) и \tilde{f} выбрано достаточно близко к f . В частности, если $\tilde{f} = f \neq 0$ и в (11) в качестве ε выбрано $\frac{\varepsilon}{c\|f\|_U}$, то $\|x - \tilde{x}\|_U < \varepsilon$.

Литература

1. Калитвин А.С. Линейные операторы с частными интегралами / Воронеж: ЦЧКИ, 2000. – 252 с.
2. Калитвин А.С., Фролова Е.В. Линейные операторы с частными интегралами. C -теория / Липецк: ЛГПУ, 2004. – 196 с.
3. Калитвин А.С., Калитвин В.А. Интегральные уравнения Вольтерра и Вольтерра-Фредгольма с частными интегралами / Липецк: ЛГПУ, 2007. – 178 с.
4. Красносельский М.А. и др. Интегральные операторы в пространствах суммируемых функций / М.: Наука, 1966. – 552 с.
5. Крейн С.Г., Петунин Ю.И., Семёнов Е.М. Интерполяция линейных операторов / М.: Наука, 1978. – 400 с.
6. Векуа И.Н. Новые методы решения эллиптических уравнений / М.-Л.: ОГИЗ, Гостехиздат, 1948. – 296 с.
7. Бицадзе А.В. Краевые задачи для эллиптических уравнений второго порядка / М.: Наука, 1966. – 204 с.
8. Мюнтц Г. Интегральные уравнения. Т.1 / ГТТИ, 1934. – 332 с.
9. Appell J.M., Kalitvin A.S., Zabrejko P.P. Partial Integral Operators and Integro-Differential Equations / New York-Basel: Marcel Dekker inc., 2000. – 560 p.
10. Барышева И.В. О действии операторов с частными интегралами в пространстве $C(C^1(t))$ // Операторы с частными интегралами: Сб. науч. тр. / Липецк: ЛГПИ, 1999. – Вып.3. – С.3-7.
11. Барышева И.В. Аппроксимации операторов Вольтерра с частными интегралами // Операторы с частными интегралами: Сб. науч. тр. / Липецк: ЛГПУ, 2003. – Вып.6. – С.39-51.
12. Halberg J.R., Taylor A.E. On the spectra of linked operators // Pacific J. Math. – 1956. – 6;6. – P.283-289.



**ABOUT VOLTERRA EQUATIONS WITH PARTIAL INTEGRALS
IN SPACE OF PARTIALLY DIFFERENTIABLE FUNCTIONS**

I.V. Barysheva, A.S. Kalitvin

Lipetsk State Pedagogical University,
Lenina, str. 42, Lipetsk, 398020, Russia, e-mail: barysheva_iv@mail.ru

Abstract. Inversability conditions of Volterra's linear equations with partial integrals in the space of partially differentiable functions are obtained. Estimates of approximate solutions of these equations are given. It is shown that the homogeneous linear Volterra equation of second type with partial integrals and with the continuous kernels has only trivial integrable solution and it can have a not integrable solution.

Key words: Volterra's operators and equations with partial integrals, integro-differential equations, spaces of partially differentiable functions, spectral radius, resolvent kernels.



УДК 517.9

ОБОБЩЕННЫЕ СТЕПЕННЫЕ РЯДЫ

Чан Куанг Вьонг

Белгородский государственный университет,
ул. Победы 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: misuto6174@yahoo.com

Аннотация. В статье представлены результаты о равномерной сходимости обобщенных степенных рядов.

Ключевые слова: обобщенные степенные ряды, система Коши-Римана, аналитические функции, равномерная сходимость.

В теории эллиптических систем первого порядка важное место занимают системы вида

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} - J \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

где $l \times l$ -матрица $J \in C^{l \times l}$ не имеет вещественных собственных значений. Системы этого вида впервые были изучены А.Дуглисом [1] для числовой матрицы J в рамках так называемых гиперкомплексных чисел. Позднее было обнаружено [2, 3], что эти системы играют важную роль в теории эллиптических систем 2-го и более высоких порядков.

При $J = i$ система (1) составляет известное условие Коши-Римана, описывает классические аналитические функции. По аналогии с обычными степенными рядами, возникающими в теории аналитических функций, можно ввести и обобщенные ряды, играющие аналогичную роль для системы (1).

Пусть $\sigma(J) = \{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k\}$ – спектр матрицы J . С комплексным числом $z = x + iy \neq 0$ свяжем $l \times l$ - матрицу $z = x + Jy$, где 1 означает единичную матрицу. В случае комплексного числа

$$\nu = \alpha + i\beta, \quad \beta \neq 0, \quad (2)$$

аналогичное обозначение определяет комплексное число $z_\nu = x + \nu y = x + \alpha y + i\beta y$. Очевидно, равенство $|z_\nu| = r$ на плоскости переменных $z = x + iy$ описывает эллипс

$$x^2 + 2\alpha xy + |\nu|^2 y^2 = R^2, \quad (3)$$

внутренность и внешность которого обозначим, соответственно, $G(\nu, R)$ и $G'(\nu, R)$. Пусть $a_0(\nu)$ и $a_1(\nu)$ означают, соответственно, малую и большую полуоси этого эллипса с $R = 1$. Матрица

$$J = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \alpha & |\nu|^2 \end{pmatrix}$$

квадратичной формы в (3) положительно определена и ее собственные значения λ_0 и λ_1 являются корнями характеристического уравнения $(\lambda - 1)(\lambda - |\nu|^2) = \alpha^2$. Величины, обратные к ним, совпадают с квадратами a_0^2 и a_1^2 полуосей.



Таким образом, полуоси эллипса (3) даются равенствами

$$a_0 = \frac{R\sqrt{2}}{\sqrt{1 + |\nu|^2 - \sqrt{(1 - |\nu|^2)^2 + 4\alpha^2}}}, \quad (4)$$

$$a_1 = \frac{R\sqrt{2}}{\sqrt{1 + |\nu|^2 + \sqrt{(1 - |\nu|^2)^2 + 4\alpha^2}}}.$$

Обобщенными степенными рядами называется выражение вида

$$\sum_{n=0}^{\infty} z_J^n c_n, \quad c_n \in \mathbb{R}^l. \quad (5)$$

Введем для элементов $A \in \mathbb{C}^{l \times l}$ и $\xi \in \mathbb{C}^l$ соответствующих конечномерных пространств нормы по формулам

$$\|A\| = \max_{1 \leq i \leq l} \left\{ \sum_{1 \leq j \leq l} |a_{ij}| \right\}, \quad \|\xi\| = \max_{1 \leq i \leq l} |\xi_i|. \quad (6)$$

Тогда справедливы соотношения

$$\|A\xi\| \leq \|A\| \|\xi\|, \quad \|AB\| \leq \|A\| \|B\|. \quad (7)$$

В частности, ряд (5) сходится абсолютно (по норме) в точке z , если

$$\sum_{n=0}^{\infty} \|z_J\|^n \|c_n\| < \infty. \quad (8)$$

Лемма 1. Пусть r есть степень минимального многочлена матрицы J . Тогда справедлива оценка

$$\|z_J^n\| \leq C \max_{\nu \in \sigma(J)} |z_\nu|^n (1 + |n|)^{r-1}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (9)$$

где постоянная $C > 0$ зависит только от J .

□ Пусть ν_1, \dots, ν_k – все различные собственные значения матрицы J . Как известно из линейной алгебры [4], матрица J может быть приведена к жордановой форме. Другими словами, существует такая обратимая матрица B , что $J^0 = B^{-1}AB$ имеет блочно-диагональный вид $\text{diag}(J_1, J_2, \dots, J_n)$, где J_k есть блочно-диагональная матрица, составленная из некоторого числа ν_k -клеток Жордана. При этом порядок каждой из этих матриц не превосходит r . Все элементы матрицы $J_k - \nu_k$ равны нулю, кроме некоторых элементов на первой диагонали над главной, которые равны 1. Таким образом, с учетом (6)

$$\|J_k - \nu_k\| = 1, \quad (J_k - \nu_k)^r = 0. \quad (10)$$



Пусть функция $f(u)$ аналитична в окрестности всех точек ν_k . Тогда согласно [4] значение этой функции от матрицы J_k вычисляется по формуле

$$f(J_k) = \sum_{j=0}^{r-1} \frac{f^{(j)}(\nu_k)}{j!} (J_k - \nu_k)^j.$$

Совместно с (7), (10) отсюда

$$\|f(J_k)\| \leq \sum_{j=0}^{r-1} \frac{|f^{(j)}(\nu_k)|}{j!}. \quad (11)$$

С другой стороны,

$$f(J) = B^{-1}f(J^0)B, \quad f(J^0) = \text{diag}[f(J_1), \dots, f(J_k)],$$

так что с учетом (7), (11)

$$\|f(J)\| \leq \|B\| \cdot \|B^{-1}\| \max_{\nu \in \sigma(J)} \sum_{j=0}^{r-1} \frac{|f^{(j)}(\nu)|}{j!}. \quad (12)$$

Очевидно,

$$f(J) = z_J^n, \quad f(u) = (x + uy)^n.$$

Для рассматриваемой функции имеем:

$$\frac{f^{(j)}(\nu)}{j!} = z_\nu^n \binom{n}{j} \frac{y^j}{z_\nu^j}, \quad \frac{|f^{(j)}(\nu)|}{j!} = |z_\nu|^n \binom{n}{j} \frac{1}{|\text{Im } \nu|^j},$$

с биномиальным коэффициентом

$$\binom{n}{j} = \frac{n(n-1) \cdots (n-j+1)}{j!}.$$

Подставляя эти выражения в (12), приходим к оценке (9). ■

С помощью леммы 1 нетрудно описать области сходимости обобщенного степенного ряда (5). На основании этой леммы рассматриваемый ряд мажорируется по норме классическим степенным рядом

$$C \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n q^n, \quad (13)$$

где положено

$$q = \max_{\nu \in \sigma(J)} |z_\nu|, \quad \alpha_n = (1+n)^{r-1} \|c_n\|.$$

Хорошо известно [5], что радиус сходимости этого степенного ряда дается равенством

$$R = \frac{1}{\overline{\lim} \sqrt[n]{\|c_n\|}}. \quad (14)$$



Следовательно, в области

$$\max_{\nu \in \sigma(J)} |z_\nu| < R \quad (15)$$

ряд (5) сходится абсолютно для каждого z , а аналогичной области с заменой R на $r < R$ он сходится равномерно. В принятых выше обозначениях область (15) на плоскости $z = x + iy$ представляет собой пересечение эллипсов

$$G(J, R) = \bigcap_{\nu \in \sigma(J)} G(\nu, R). \quad (16)$$

Сформулируем полученный результат.

Теорема 1. В обозначениях (14) область (16) содержится в области абсолютной сходимости ряда (5) и формально продифференцированного ряда

$$\sum_{n \geq 1} n z_J^{n-1} c_n.$$

На каждом компакте $K \subseteq G(J, R)$ эти ряды сходятся равномерно.

Из теоремы следует, что сумма $\phi(z)$ ряда (5) в области (16) как функция переменных x, y непрерывно дифференцируема и удовлетворяет системе (1).

Аналогичным образом можно рассмотреть обобщенный ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty} z_J^{-n} c_n \quad (17)$$

по отрицательным степеням матрицы z_J . В силу леммы 1 этот ряд мажорируется соответствующим степенным рядом

$$C \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n^1 q^{-n},$$

где как и выше

$$q = \max_{\nu \in \sigma(J)} |z_\nu|, \quad \alpha_n^1 = (1+n)^{r-1} \|c_n\|.$$

Этот ряд имеет область сходимости

$$\max_{\nu \in \sigma(J)} |z_\nu| > R^1, \quad R^1 = \overline{\lim} \sqrt[r]{\|c_n\|}, \quad (18)$$

что приводит к следующему предложению.

Теорема 2. Область (18), представляющая собой пересечение

$$G'(J, R^1) = \bigcap_{\nu \in \sigma(J)} G'(\nu, R^1)$$

внешностей эллипсов, содержится в области абсолютной сходимости ряда (17) и формально продифференцированного ряда

$$\sum_{n \geq 1} (-n) z_J^{-n-1} c_n.$$



На каждом компакте $K' \subseteq G'(J, R^1)$ эти ряды сходятся равномерно.

В качестве иллюстрации рассмотрим случай когда $k = 2$, когда матрица J имеет два собственных значений. Области $G(J, R)$ и $G'(J, R^1)$ абсолютной сходимости этих рядов изображены на следующем рис. 1.

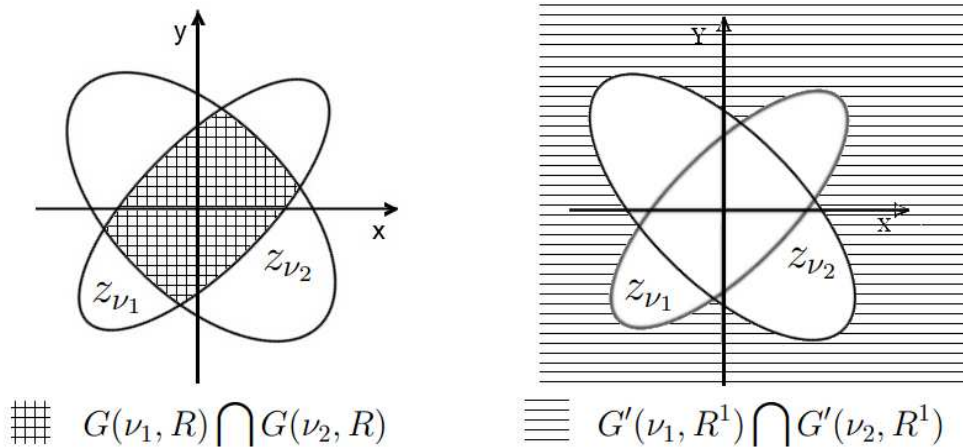


Рис. 1. Случай $k = 2$

Литература

1. Douglis A.A. A function-theoretic approach to elliptic systems of equations in two variables // Comm. Pure Appl. Math. – 1953. – 6. – P.259-289.
2. Солдатов А.П. Эллиптические системы высокого порядка // Дифференц. уравн. – 1989. – 25;1. – С.136-144.
3. Yeh R.Z. Hyperholomorphic functions and higher order partial differential equations in the plane // Pacific Journ. of Mathem. – 1990. – 142;2. – P.379-399.
4. Мальцев Н.И. Основы линейной алгебры (3-е изд.) / М.: Наука, 1970.
5. Бицадзе А.В. Основы теории аналитических функций / М.: Наука, 1984. – 320 с.

GENERALIZED POWER SERIES

Tran Quang Vuong

Belgorod State University,
Pobedy st., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: misuto6174@yahoo.com

Abstract. Results on the uniform convergence of generalized power series are presented.

Key words: generalized power series, Cauchy-Riemann's system, analytic functions, uniform convergence.



УДК 517.983

НЕОБХОДИМОЕ УСЛОВИЕ РАЗРЕШИМОСТИ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ АБСТРАКТНОГО УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА-ПУАССОНА-ДАРБУ ¹⁾

А.В. Глушак, О.А. Покручин

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: Glushak@bsu.edu.ru,
pokru4in.oleg@yandex.ru

Аннотация. Устанавливаются свойства решений задачи Коши для уравнения Эйлера-Пуассона-Дарбу и доказано необходимое условие ее разрешимости.

Ключевые слова: абстрактная задача Коши, уравнение Эйлера-Пуассона-Дарбу, операторная функция Бесселя, необходимое условие разрешимости.

Пусть A — замкнутый оператор в банаховом пространстве E с плотной в E областью определения $D(A)$. При $k > 0$ рассмотрим абстрактную задачу Коши для уравнения Эйлера-Пуассона-Дарбу

$$u''(t) + \frac{k}{t}u'(t) = Au(t), \quad t > 0, \quad (1)$$

$$u(0) = u_0, \quad u'(0) = 0. \quad (2)$$

Случай $k = 0$ подробно рассмотрен в [1]. В этой статье установлено, что задача (1), (2) при $k = 0$ равномерно корректна только тогда, когда оператор A является генератором операторной косинус-функции $C(t)$ или косинус-оператор-функции (КОФ). По поводу терминологии см. [2] и обзорные работы [3], [4]. В этих же работах приводятся необходимые и достаточные условия того, что оператор A является генератором КОФ, которые формулируются в терминах оценки нормы резольвенты $R(\lambda) = (\lambda I - A)^{-1}$ оператора A и ее производных.

Задача (1), (2) исследовалась ранее в работе [5], в которой необходимое и достаточное условия разрешимости сформулированы в терминах оценки нормы резольвенты $R(\lambda)$ и ее весовых производных. В настоящей работе получено необходимое условие на резольвенту оператора A , которое, в отличие от [5], формулируется в терминах дробной степени резольвенты и ее, как и в случае КОФ, невесовых производных.

Обозначим через $C^n(I, E_0)$ пространство n раз сильно непрерывно дифференцируемых при $t \in I$ функций со значениями в $E_0 \subset E$.

Определение 1. Решением уравнения (1) называется функция $u(t)$, которая при $t \geq 0$ дважды сильно непрерывно дифференцируема, при $t > 0$ принимает значения, принадлежащие $D(A)$, то есть, $u(t) \in C^2(\bar{R}_+, E) \cap C(R_+, D(A))$, и удовлетворяет уравнению (1).

¹Работа первого автора выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 10-01-00276.



Определение 2. Задача (1), (2) называется равномерно корректной, если существуют заданная на E коммутирующая с A операторная функция $Y_k(t)$ и числа $M \geq 1$, $\omega \geq 0$, такие, что для любого $u_0 \in D(A)$ функция $Y_k(t)u_0$ является ее единственным решением и при этом

$$\|Y_k(t)\| \leq M \exp(\omega t), \quad (3)$$

$$\|Y'_k(t)u_0\| \leq M \exp(\omega t) \|Au_0\|. \quad (4)$$

Функцию $Y_k(t)$ назовем операторной функцией Бесселя (ОФБ) задачи (1), (2), а множество операторов, для которых задача (1), (2) равномерно корректна, обозначим через G_k .

Приведем доказательства некоторых свойств решений задачи (1), (2), которые понадобятся нам в дальнейшем.

Теорема 1. Пусть задача (1), (2) равномерно корректна, $A \in G_k$, и $u_0 \in D(A)$. Тогда эта задача равномерно корректна и для $m > k$, то есть $A \in G_m$, при этом соответствующая ОФБ $Y_m(t)$ имеет вид

$$Y_m(t)u_0 = \frac{2}{B(k/2 + 1/2, m/2 - k/2)} \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k-2)/2} s^k Y_k(ts)u_0 ds, \quad (5)$$

где $B(a, b)$ – бета-функция Эйлера.

□ Тот факт, что функция $Y_m(t)u_0$ удовлетворяет уравнению

$$u''(t) + \frac{m}{t}u'(t) = Au(t) \quad (6)$$

и начальным условиям (2) мы докажем позже (см. формулу (26)).

Оценки

$$\|Y_m(t)\| \leq M_1 \exp(\omega t),$$

$$\|Y'_m(t)u_0\| \leq M_1 \exp(\omega t) \|Au_0\|, \quad u_0 \in D(A)$$

для $Y_m(t)$, очевидно, вытекают из (3) и (4).

Доказательство единственности решения задачи (6), (2) будем вести от противного. Пусть $u_1(t)$ и $u_2(t)$ – два решения задачи (6), (2). Рассмотрим функцию двух переменных $w(t, s) = f(Y_k(s)(u_1(t) - u_2(t)))$, где $f \in E^*$ (E^* – сопряженное пространство), $t, s \geq 0$. Она, очевидно, удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \frac{k}{t} \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial^2 w}{\partial s^2} + \frac{k}{s} \frac{\partial w}{\partial s}, \quad t, s > 0 \quad (7)$$

и условиям

$$w(0, s) = \frac{\partial w(0, s)}{\partial t} = 0. \quad (8)$$

Задача (7), (8) заменой $t_1 = (t + s)^2/4$, $s_1 = (t - s)^2/4$ сводится (см. [6], §5, п. 3) к задаче, единственность которой в классе дважды непрерывно дифференцируемых при $t, s \geq 0$ функций установлена в [6] (§5, п. 2). Кроме того, требуемое нам утверждение о



единственности содержится также в теореме 6.1 работы [7], в которой рассматривается даже более общее уравнение нежели уравнение (7).

Из полученной в [6] явной формулы для решения указанной задачи следует $w(t, s) \equiv 0$. В силу произвольности $f \in E^*$ при $s = 0$ получаем $u_1(t) \equiv u_2(t)$, и единственность решения установлена.

Таким образом, операторная функция $Y_m(t)$ удовлетворяет неравенствам вида (3), (4), а функция $Y_m(t)u_0$ является единственным решением задачи (6), (2), следовательно, задача (6), (2) равномерно корректна. ■

Пусть $K_\nu(z)$ – функция Макдональда или модифицированная функция Бесселя третьего рода порядка ν , в дальнейшем всегда $\nu = (k - 1)/2$.

Теорема 2. Если задача (1), (2) равномерно корректна и $\operatorname{Re} \lambda > \omega$, то $\lambda^2 \in \rho(A)$ и для любого $x \in E$ справедливо представление

$$\lambda^{(1-k)/2} R(\lambda^2)x = \frac{2^{(1-k)/2}}{\Gamma((k+1)/2)} \int_0^\infty K_\nu(\lambda t) t^{(k+1)/2} Y_k(t)x \, dt. \quad (9)$$

□ Заметим, что интеграл в правой части (9) можно рассматривать как K -преобразование (или преобразование Мейера) функции $t^{k/2} Y_k(t)x$, а сходимость этого интеграла вытекает из оценки (3) и асимптотического поведения функции $K_\nu(z)$ при $z \rightarrow 0$ и $z \rightarrow \infty$ (см. [8], с. 217).

Правую часть равенства (9) умноженную на $\lambda^{(k-1)/2}$ обозначим через $Q(\lambda)$ и проверим, что $(\lambda^2 I - A)Q(\lambda) = Q(\lambda)(\lambda^2 I - A) = I$. Пусть $\operatorname{Re} \lambda > \omega$ и $x \in D(A)$. Тогда

$$\begin{aligned} (\lambda^2 I - A)Q(\lambda)x &= \frac{\lambda^{2+\nu}}{\Gamma(\nu+1)2^\nu} \int_0^\infty K_\nu(\lambda t) t^{\nu+1} Y_k(t)x \, dt - \\ &- \frac{\lambda^\nu}{\Gamma(\nu+1)2^\nu} \int_0^\infty K_\nu(\lambda t) t^{\nu+1} \left(\frac{d^2}{dt^2} + \frac{k}{t} \frac{d}{dt} \right) Y_k(t)x \, dt. \end{aligned} \quad (10)$$

Учитывая экспоненциальный рост ОФБ $Y_k(t)$, интегрированием по частям установим равенство

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty K_\nu(\lambda t) t^{\nu+1} \left(\frac{d^2}{dt^2} + \frac{k}{t} \frac{d}{dt} \right) Y_k(t)x \, dt = \\ &= - \int_0^\infty \left(-\nu t^\nu K_\nu(\lambda t) + t^{\nu+1} \frac{d}{dt} K_\nu(\lambda t) \right) Y_k'(t)x \, dt = \\ &= - \int_0^\infty t^{\nu+1} \left(\frac{d^2}{dt^2} + \frac{1}{t} \frac{d}{dt} - \left(\frac{\nu}{t} \right)^2 \right) K_\nu(\lambda t) Y_k(t)x \, dt + \\ &\quad + x \lim_{s \rightarrow 0} \left(-\nu t^\nu K_\nu(\lambda t) + \lambda t^{\nu+1} K_\nu'(\lambda t) \right) = \\ &= \lambda^2 \int_0^\infty K_\nu(\lambda t) t^{\nu+1} Y_k(t)x \, dt + \lambda^{-\nu} x \lim_{s \rightarrow 0} \left(-\nu s^\nu K_\nu(s) + s^{\nu+1} K_\nu'(s) \right). \end{aligned} \quad (11)$$



Из (10) и (11) вытекает равенство

$$(\lambda^2 I - A)Q(\lambda)x = \frac{2^{-\nu}}{\Gamma(\nu + 1)} \lim_{s \rightarrow 0} (\nu s^\nu K_\nu(s) - s^{\nu+1} K'_\nu(s)). \quad (12)$$

Используя определение функции $K_\nu(t)$, предел в правой части равенства (12) вычисляется, и мы приходим к равенству

$$(\lambda^2 I - A)Q(\lambda)x = x, \quad x \in D(A).$$

Поскольку в определении равномерной корректности задачи (1), (2) входит требование коммутирования операторов A и $Y_k(t)$, то равенство $Q(\lambda)(\lambda^2 I - A)x = x$, $x \in D(A)$ доказывается аналогично.

Из оценки (3) вытекает ограниченность оператора $Q(\lambda)$ при $\operatorname{Re} \lambda > \omega$. Таким образом, при $x \in D(A)$ имеем $Q(\lambda)x = (\lambda^2 I - A)^{-1}x$.

Если $x \in E$, то в силу плотности $D(A)$ в E возьмем последовательность $x_n \in D(A)$, такую, что $x_n \rightarrow x$ при $n \rightarrow \infty$. Тогда, по доказанному, при $n \rightarrow \infty$ будем иметь

$$(\lambda^2 I - A)Q(\lambda)(x_n - x) \rightarrow x - (\lambda^2 I - A)Q(\lambda),$$

и требуемое равенство $Q(\lambda)x = (\lambda^2 I - A)^{-1}x$ для любого $x \in E$ вытекает из замкнутости оператора A . ■

Теорема 3. Пусть задача (1), (2) равномерно корректна и пусть $Y_k(t)$ – ОФБ для этой задачи. Тогда оператор A является генератором C_0 -полугруппы $T(t)$ и для этой полугруппы справедливо представление

$$T(t)x = \frac{1}{2^k \Gamma((k+1)/2) t^{(k+1)/2}} \int_0^\infty s^k \exp(-s^2/(4t)) Y_k(s)x ds, \quad x \in E. \quad (13)$$

□ Проверим, что резольвента $R(\mu)$ оператора A удовлетворяет условиям теоремы Хилле-Иосида (см. [9], с. 68). Из равенства (9) следует, что при $\mu > \omega^2$

$$\begin{aligned} R^n(\mu)x &= \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{d\mu^{n-1}} R(\mu, A)x = \\ &= \frac{(-1)^{n-1} 2^{-\nu}}{(n-1)! \Gamma(\nu+1)} \int_0^\infty \frac{d^{n-1}}{d\mu^{n-1}} (\mu^{k/4-1/4} K_\nu(\sqrt{\mu}t)) t^{\nu+1} Y_k(t)x dt = \\ &= \frac{(-1)^{n-1} 2^{-\nu-n+1}}{(n-1)! \Gamma(\nu+1)} \int_0^\infty \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^{n-1} (z^\nu K_\nu(z)) t^{2n-1} Y_k(t)x dt, \end{aligned}$$

где $z = t\sqrt{\mu}$.

Учитывая известную формулу

$$\left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right) (z^\nu K_\nu(z)) = (-1)^{n-1} z^{\nu-n+1} K_{\nu-n+1}(z),$$



выведем оценку для $R^n(\mu)x$. Имеем

$$\begin{aligned} \|R^n(\mu, A)x\| &= \frac{1}{2^{n+\nu-1}(n-1)!\Gamma(\nu+1)\mu^{n/2-k/4}} \left\| \int_0^\infty t^{\nu+n} K_{\nu-n+1}(t\sqrt{\mu}) Y_k(t)x \, dt \right\| \leq \\ &\leq \frac{M \|x\|}{2^{n+\nu-1}(n-1)!\Gamma(\nu+1)\mu^{n/2-k/4}} \int_0^\infty t^{\nu+n-1/2} \exp((\omega - \sqrt{\mu})t) \, dt. \end{aligned} \quad (14)$$

Вычислив полученный в (14) интеграл, придем к оценке

$$\|R^n(\mu)x\| \leq \frac{M_1(k)\Gamma(n+k/2) \|x\|}{2^{n+\nu-1}(n-1)!\Gamma(\nu+1)(\sqrt{\mu} - \omega)^{n+k/2}\mu^{n/2-k/4}}. \quad (15)$$

С учетом предельного соотношения

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (n^{k/2} B(n, k/2)) = \Gamma(k/2),$$

из (15) выводим

$$\|R^n(\mu, A)\| \leq \frac{M_2(k)}{(4/3)^n B(n, k/2)(\mu - \omega_1)^n} \leq \frac{M(k)}{(\mu - \omega_1)^n}, \quad \mu > \omega_1 = \frac{9\omega^2}{8}, \quad M(k) > 0.$$

Следовательно, в силу теоремы Хилле-Йосиды, оператор A является генератором C_0 -полугруппы $T(t)$.

Непосредственной проверкой, используя тот факт, что функция $Y_k(t)x$ удовлетворяет уравнению (1), можно убедиться в том, что правая часть равенства (13) является решением следующей задачи Коши

$$v'(t) = Av(t), \quad v(0) = x, \quad x \in D(A). \quad (16)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} AT(t)x &= \frac{1}{2^k \Gamma(k/2 + 1/2) t^{(k+1)/2}} \int_0^\infty s^k \exp\left(-\frac{s^2}{4t}\right) AY_k(s)x \, ds = \\ &= \frac{1}{2^k \Gamma(k/2 + 1/2) t^{(k+1)/2}} \int_0^\infty s^k \exp\left(-\frac{s^2}{4t}\right) \left(Y_k''(s)x + \frac{k}{s} Y_k'(s)x\right) ds = \\ &= \frac{-1}{2^k \Gamma(k/2 + 1/2) t^{(k+1)/2}} \int_0^\infty (s^k \exp(-s^2/4t))' Y_k'(s)x \, ds + \\ &+ \frac{k}{2^k \Gamma(k/2 + 1/2) t^{(k+1)/2}} \int_0^\infty s^{k-1} \exp(-s^2/4t) Y_k'(s)x \, ds = \\ &= \frac{1}{2^{k+1} \Gamma(k/2 + 1/2) t^{(k+3)/2}} \int_0^\infty s^{k+1} \exp\left(-\frac{s^2}{4t}\right) Y_k'(s)x \, ds = \\ &= -\frac{k+1}{2^{k+1} \Gamma(k/2 + 1/2) t^{(k+3)/2}} \int_0^\infty s^k \exp\left(-\frac{s^2}{4t}\right) Y_k(s)x \, ds + \end{aligned}$$



$$+ \frac{1}{2^{k+2}\Gamma(k/2 + 1/2)t^{(k+5)/2}} \int_0^\infty s^{k+2} \exp\left(-\frac{s^2}{4t}\right) Y_k(s)x \, ds = T'(t)x.$$

Проверим теперь, что $T(t)x$ удовлетворяет условию $T(0)x = x$. После замены переменных в правой части равенства (13) получим

$$\begin{aligned} T(0)x &= \frac{1}{\Gamma((k/2 + 1/2))} \int_0^\infty \tau^{k/2-1/2} \exp(-\tau) Y_k(0)x \, ds = \\ &= \frac{x}{\Gamma(k/2 + 1/2)} \int_0^\infty \tau^{k/2-1/2} \exp(-\tau) d\tau = x. \end{aligned}$$

Отсюда, в силу теоремы единственности для решения задачи (16), и следует представление (13). ■

Теорема 3 позволяет при нахождении критерия равномерной корректности задачи (1), (2) ограничиться классом операторов, которые являются генераторами C_0 -полугрупп $T(t)$. Обозначим этот класс операторов через G .

В работе [10] показано, что если $A \in G$, то при $\operatorname{Re} \lambda > \omega$ для $\alpha > 0$ существует дробная степень резольвенты $R(\lambda)$, которая имеет вид

$$R^\alpha(\lambda)x = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty t^{\alpha-1} \exp(-\lambda t) T(t)x \, dt, \quad x \in E. \quad (17)$$

Установим далее необходимое условие равномерной корректности задачи (1), (2).

Теорема 4. Если задача (1), (2) равномерно корректна и $\operatorname{Re} \lambda > \omega$, то λ^2 принадлежит резольвентному множеству $\rho(A)$ оператора A , для дробной степени резольвенты справедливо представление

$$R^{1+k/2}(\lambda^2) = \frac{\sqrt{\pi} 2^{-k}}{\Gamma(k/2 + 1)\Gamma(k/2 + 1/2)\lambda} \int_0^\infty s^k \exp(-\lambda s) Y_k(s) \, ds \quad (18)$$

и при этом выполняются оценки

$$\left\| \frac{d^n}{d\lambda^n} (\lambda R^{1+k/2}(\lambda^2)) \right\| \leq \frac{\sqrt{\pi} 2^{-k} M \Gamma(k+n+1)}{\Gamma(k/2 + 1) \Gamma(k/2 + 1/2) (\operatorname{Re} \lambda - \omega)^{k+n+1}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (19)$$

□ Если задача (1), (2) равномерно корректна и $\operatorname{Re} \lambda > \omega$, то в теореме 2 установлено, что λ^2 принадлежит резольвентному множеству $\rho(A)$ оператора A .

Воспользовавшись равенствами (17) и (13), запишем представление

$$\begin{aligned} R^{1+k/2}(\lambda^2) &= \frac{1}{\Gamma(k/2 + 1)} \int_0^\infty t^{k/2} \exp(-\lambda^2 t) T(t) \, dt = \\ &= \frac{1}{2^k \Gamma(k/2 + 1) \Gamma(k/2 + 1/2)} \int_0^\infty t^{-1/2} \exp(-\lambda^2 t) \left(\int_0^\infty s^k \exp(-s^2/4t) Y_k(s) \, ds \right) dt = \\ &= \frac{\sqrt{\pi} 2^{-k}}{\Gamma(k/2 + 1) \Gamma(k/2 + 1/2) \lambda} \int_0^\infty s^k \exp(-\lambda s) Y_k(s) \, ds. \end{aligned} \quad (20)$$



Учитывая оценку (3), из (20) получим

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d^n}{d\lambda^n} (\lambda R^{1+k/2} (\lambda^2)) \right\| &\leq \frac{\sqrt{\pi} 2^{-k}}{\Gamma(k/2 + 1)\Gamma(k/2 + 1/2)} \int_0^\infty s^{k+n} \exp(-\operatorname{Re}\lambda s) \|Y_k(s)\| ds \leq \\ &\leq \frac{M\sqrt{\pi} 2^{-k}}{\Gamma(k/2 + 1)\Gamma(k/2 + 1/2)} \int_0^\infty s^{k+n} \exp(-\operatorname{Re}\lambda s + \omega s) ds = \\ &= \frac{M\sqrt{\pi} 2^{-k} \Gamma(k + n + 1)}{\Gamma(k/2 + 1)\Gamma(k/2 + 1/2)(\operatorname{Re}\lambda - \omega)^{k+n+1}}, \end{aligned}$$

что и устанавливает справедливость неравенств (19). ■

В заключение рассмотрим задачу отыскания решения неоднородного уравнения

$$u''(t) + \frac{m}{t}u'(t) + \frac{c}{t^2}u(t) = Au(t) + \frac{c}{t^2}u_0, \quad t > 0, \quad (21)$$

удовлетворяющего условиям (2), где $A \in G_k$, $m > k$, $c \leq \frac{(m-1)^2}{4}$. Отметим, что при $c = 0$ уравнение (21) превращается в уравнение Эйлера-Пуассона-Дарбу.

Будем искать решение $u(t)$ задачи (21), (2) в виде

$$u(t) = \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k-2)/2} s^k Q(s) Y_k(ts) u_0 ds$$

аналогичном (5), с подлежащей определению функцией $Q(s)$.

Вычислив $u'(t)$, $u''(t)$ и $Au(t)$, после элементарных преобразований будем иметь

$$\begin{aligned} u''(t) + \frac{m}{t}u'(t) + \frac{c}{t^2}u(t) - Au(t) &= \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k-2)/2} s^{k+2} Q(s) Y_k''(ts) u_0 ds + \\ &+ \frac{m}{mt - kt} \left(k \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k-2)/2} s^{k-1} Q(s) Y_k'(ts) u_0 ds + \right. \\ &+ t \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k)/2} s^k Q(s) Y_k''(ts) u_0 ds + \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k)/2} s^k Q'(s) Y_k'(ts) u_0 ds \left. \right) - \\ &- \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k-2)/2} s^k Q(s) Y_k''(ts) u_0 ds - \frac{k}{t} \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k-2)/2} s^{k-1} Q(s) Y_k'(ts) u_0 ds = \\ &= \frac{k}{m - k} \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k)/2} s^k Q(s) A Y_k(ts) u_0 ds - \frac{k}{t} \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k-2)/2} s^{k+1} Q(s) Y_k'(ts) u_0 ds + \\ &+ \frac{m}{m - k} \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k)/2} s^k Q'(s) Y_k'(ts) u_0 ds = \frac{1}{t} \int_0^1 (1 - s^2)^{(m-k)/2} s^k Q'(s) Y_k'(ts) u_0 ds = \\ &= -\frac{u_0}{t^2} \lim_{s \rightarrow 0} s^k Q'(s) - \frac{1}{t^2} \int_0^1 \frac{d}{ds} \left((1 - s^2)^{(m-k)/2} s^k Q'(s) \right) Y_k(ts) u_0 ds. \quad (22) \end{aligned}$$



Подберем функцию $Q(s)$ так, чтобы

$$\frac{d}{ds} \left((1-s^2)^{(m-k)/2} s^k Q'(s) \right) = c (1-s^2)^{(m-k-2)/2} s^k Q(s). \quad (23)$$

Легко убедиться, что уравнению (21) удовлетворяет функция

$$Q(s) = \beta {}_2F_1(p, q; (m-k)/2; 1-s^2),$$

где ${}_2F_1$ – гипергеометрическая функция Гаусса, p, q – действительные корни уравнения $x^2 + \frac{1-m}{2}x + \frac{c}{4} = 0$, так как $c \leq \frac{(m-1)^2}{4}$, β – постоянная.

Выберем постоянную β так, чтобы функция $u(t)$ удовлетворяла начальным условиям (2). Используя интеграл 2.21.1.6 в [11] получим

$$\beta = \frac{2\Gamma(p+1)\Gamma(q+1)}{\Gamma(k/1+1/2)\Gamma(m/2-k/2)}. \quad (24)$$

Вычислим теперь предел, входящий в равенство (22). С учетом формул 7.2.1.10, 7.2.1.7, 7.2.1.2 из [11] и (24), будем иметь

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow 0} s^k Q'(s) &= -2\beta \lim_{s \rightarrow 0} s^{k+1} {}_2F_1'(p, q; (m-k)/2; 1-s^2) = \\ &= -4\beta \frac{pq}{m-k} \lim_{s \rightarrow 0} s^{k+1} {}_2F_1'(p+1, q+1; (m-k)/2+1; 1-s^2) = \\ &= -\frac{\beta c}{m-k} \lim_{s \rightarrow 0} {}_2F_1(m/2-k/2-p, m/2-k/2-q; (m-k)/2+1; 1-s^2) = -c. \end{aligned}$$

Итак, из (22) – (24) окончательно получим

$$u(t) = \frac{2\Gamma(p+1)\Gamma(q+1)}{\Gamma((k+1)/2)\Gamma((m-k)/2)} \int_0^1 (1-s^2)^{(m-k-2)/2} s^k {}_2F_1(p, q; (m-k)/2; 1-s^2) Y_k(ts) u_0 ds. \quad (25)$$

Отметим ряд частных случаев формулы (25). Если $p = (m-k)/2$, $q = (k-1)/2$, то (25) примет вид

$$u(t) = 2p \int_0^1 (1-s^2)^{p-1} s Y_k(ts) u_0 ds.$$

При $c = 0$ функция $Q(s) \equiv 1$ и (25) превращается в

$$u(t) = \frac{2}{B(k/2+1/2, m/2-k/2)} \int_0^1 (1-s^2)^{(m-k-2)/2} s^k Y_k(ts) u_0 ds. \quad (26)$$

Литература

1. Fattorini H.O. Ordinary differential equations in linear topological space, II // J. Different. Equat. – 1969. – 6. – P.50-70.



2. Голдстейн Дж. Полугруппы линейных операторов и их приложения / Киев: Выща школа, 1989.
3. Васильев В.В., Крейн С.Г., Пискарев С.И. Полугруппы операторов, косинус-оператор функции и линейные дифференциальные уравнения // Итоги науки и техники. Серия Математический анализ. ВИНТИ. – 1990. – 28. – С.87-202.
4. Васильев В.В., Пискарев С.И. Дифференциальные уравнения в банаховом пространстве II. Теория косинус оператор-функций // <http://www.srcc.msu.su>
5. Глушак А.В. Операторная функция Бесселя // ДАН. – 1997. – 352;5. – С.587-589.
6. Левитан Б.М. Разложение по функциям Бесселя в ряды и интегралы Фурье // УМН. – 1951. – 1;2(42). – С.102-143.
7. Bragg L.R. Fundamental solutions and properties of solutions of the initial value radial Euler-Poisson-Darboux // J. Math. Mech. – 1969. – 18. – P.607-616.
8. Земанян А.Г. Интегральные преобразования обобщенных функций / М.: Наука, 1974.
9. Крейн С.Г. Линейные дифференциальные уравнения в банаховом пространстве / М.: Наука, 1967.
10. Fattorini Н.О. A note on fractional derivatives of semigroups and cosine functions // Pacific J. Math. – 1983. – 109;2. – P.335-347.
11. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Дополнительные главы / М.: Наука, 1986.

NECESSARY CONDITION OF SOLVABILITY OF THE CAUCHY PROBLEM FOR ABSTRACT EULER-POISSON-DARBOUX EQUATION

A.V. Glushak, O.A. Pokruchin

Belgorod State University,
Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail: Glushak@bsu.edu.ru,
pokru4in.oleg@yandex.ru

Abstract. Some properties of Cauchy's problem solutions of the Euler-Poisson-Darboux equation and also necessary condition of its solvability are proved.

Key words: abstract Cauchy problem, Euler-Poisson-Darboux's equation, operational Bessel function, solvability necessary condition.



УДК 517.958:531.72, 517.958:539.3(4)

О РАЗРЕШИМОСТИ ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ - КОНВЕКЦИИ В ПОРОУПРУГОЙ СРЕДЕ НА МИКРОСКОПИЧЕСКОМ УРОВНЕ ²⁾

А.М. Мейрманов, Р.Н. Зимин, О.В. Гальцева, О.А. Гальцев

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: reshat85@mail.ru

Аннотация. В работе рассматривается начально-краевая задача для системы, состоящей из уравнений Стокса, описывающих движение несжимаемой вязкой жидкости в поровом пространстве твердого «скелета» и уравнений Ламе. Рассматриваемая система дополняется конвективным уравнением диффузии для примеси в жидкости. Считается, что плотность жидкости зависит от концентрации примеси. Доказывается существование по крайней мере одного обобщенного решения.

Ключевые слова: система уравнений Стокса и Ламе, конвективное уравнение диффузии.

1. Постановка задачи

Пусть $\Omega \in R^3$ ограниченная связная область с липшицевой границей S , полученная периодическим повторением элементарной ячейки $\varepsilon\bar{Y}$, где $\varepsilon > 0$ малый параметр,

$$\bar{Y} = Y_f \cup Y_s \cup \gamma \cup \partial Y, \quad Y = (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1), \quad \varepsilon Y = (0, \varepsilon) \times (0, \varepsilon) \times (0, \varepsilon),$$

где $\gamma = \partial Y_f \cap \partial Y_s$ – липшицева граница между множествами Y_f и Y_s . Область Y_f будем считать симметричной относительно поворотов на $\pi/2$ (рис. 1.).

Через $\bar{\Omega}_f^\varepsilon$ обозначим периодическое повторение элементарной ячейки $\varepsilon\bar{Y}_f$, а через $\bar{\Omega}_s^\varepsilon$ – периодическое повторение $\varepsilon\bar{Y}_s$. Тогда

$$\Omega = \Omega_f^\varepsilon \cup \Omega_s^\varepsilon \cup \Gamma^\varepsilon,$$

где $\Gamma^\varepsilon = \partial\Omega_f^\varepsilon \cap \partial\Omega_s^\varepsilon$ – периодическое повторение границы $\varepsilon\gamma$.

В области Ω рассматривается следующая система дифференциальных уравнений:

$$\nabla \cdot \left(\chi^\varepsilon \mu_0 \mathbb{D} \left(x, \frac{\partial \mathbf{w}^\varepsilon}{\partial t} \right) + (1 - \chi^\varepsilon) \lambda_0 \mathbb{D} (x, \mathbf{w}^\varepsilon) - p^\varepsilon \mathbb{I} \right) + \rho(\varphi(c^\varepsilon)) \mathbf{F} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{w}^\varepsilon = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_0 \nabla c^\varepsilon - \varphi(c^\varepsilon) \frac{\partial \mathbf{w}^\varepsilon}{\partial t} \right), \quad \mathbf{x} \in \Omega_f^\varepsilon, \quad t > 0, \quad (3)$$

²⁾Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (госконтракт №02.740.11.0613).



дополненная следующими начальными и граничными условиями:

$$\mathbf{w}^\varepsilon(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in S = \partial\Omega, \quad t > 0; \quad (4)$$

$$D_0 \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial \mathbf{n}} - \varphi(c^\varepsilon) \frac{\partial \mathbf{w}^\varepsilon}{\partial t} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Gamma^\varepsilon, \quad t > 0; \quad (5)$$

$$\int_{\Omega} p^\varepsilon d\mathbf{x} = 0, \quad t > 0; \quad (6)$$

$$\chi^\varepsilon \mathbf{w}^\varepsilon(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Omega; \quad (7)$$

$$c^\varepsilon(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}) \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Omega_f^\varepsilon, \quad (8)$$

где функция $\varphi(c^\varepsilon) \in \mathbb{C}^2(-\infty, \infty)$, такая что

$$\varphi(c^\varepsilon) = \begin{cases} -1/2 & , \quad c^\varepsilon < -1/2; \\ c^\varepsilon & , \quad 0 \leq c^\varepsilon \leq 1; \\ 3/2 & , \quad c^\varepsilon > 3/2, \end{cases}$$

$\mathbf{w}^\varepsilon(\mathbf{x}, t) = (w_1^\varepsilon(\mathbf{x}, t), w_2^\varepsilon(\mathbf{x}, t), w_3^\varepsilon(\mathbf{x}, t))$ – вектор перемещения сплошной среды, $p^\varepsilon(\mathbf{x}, t)$ – давление в сплошной среде, $c^\varepsilon(\mathbf{x}, t)$ – концентрация примеси, $\mathbb{D}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ – симметрическая часть градиента вектора \mathbf{v} (тензор напряжений), \mathbb{I} – единичная матрица, $\chi^\varepsilon(\mathbf{x})$ – характеристическая функция порового пространства,

$$\rho(c^\varepsilon) = \chi^\varepsilon \delta \varphi(c^\varepsilon),$$

μ_0 – безразмерная вязкость жидкости, λ_0 – безразмерная постоянная Ламэ, δ – положительная постоянная, \mathbf{n} – единичный вектор внешней нормали к Γ^ε , D_0 – коэффициент диффузии.

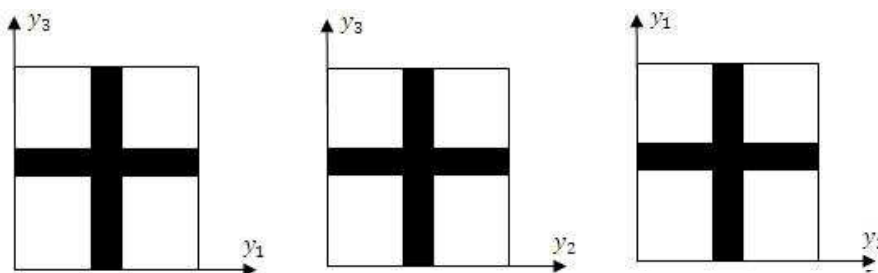


Рис. 1. Проекция на взаимно-ортогональные плоскости геометрии элементарной ячейки

Обзор результатов по данной задаче можно найти в ([6]).



2. Основной результат

Определение 1. Тройка $\{\mathbf{w}^\varepsilon(\mathbf{x}, t), p^\varepsilon(\mathbf{x}, t), c^\varepsilon(\mathbf{x}, t)\}$ называется обобщенным решением задачи (1)-(8) в области $\Omega_T = \Omega \times (0, T)$, если

$$1) p^\varepsilon \in L^2(\Omega_T), \quad \mathbf{w}^\varepsilon \in W_2^{1,1}(\Omega_f^\varepsilon \times (0, T)) \cap W_2^{1,0}(\Omega_s^\varepsilon \times (0, T)),$$

$$c^\varepsilon \in L_\infty(\Omega_f^\varepsilon \times (0, T)) \cap W_2^{1,0}(\Omega_f^\varepsilon \times (0, T));$$

2) почти всюду в области Ω_T выполнены уравнение (2) и условие (6);

3) $\mathbf{w}^\varepsilon, p^\varepsilon$ и c^ε удовлетворяют интегральным тождествам

$$\int_{\Omega_T} \left[\chi^\varepsilon \mu_0 \mathbb{D}\left(x, \frac{\partial \mathbf{w}^\varepsilon}{\partial t}\right) : \mathbb{D}(x, \boldsymbol{\phi}) + (1 - \chi^\varepsilon) \lambda_0 \mathbb{D}(x, \mathbf{w}^\varepsilon) : \mathbb{D}(x, \boldsymbol{\phi}) - p^\varepsilon \nabla \cdot \boldsymbol{\phi} \right] dxdt = \int_{\Omega_T} \rho(\varphi(c^\varepsilon)) \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\phi} dxdt \quad (9)$$

для произвольной гладкой вектор-функции $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}, t)$, равной нулю на границе S и при $t = T$, и

$$\int_0^T \int_{\Omega_f^\varepsilon} \left(c^\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} + \varphi(c^\varepsilon) \frac{\partial \mathbf{w}^\varepsilon}{\partial t} \cdot \nabla \psi - D_0 \nabla c^\varepsilon \cdot \nabla \psi \right) dxdt = - \int_{\Omega_f^\varepsilon} c_0(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, 0) dx \quad (10)$$

для произвольной гладкой функции $\psi(\mathbf{x}, t)$, равной нулю при $t = T$.

Здесь используется обозначение: $A : B \equiv \text{tr}(AB^T)$, где A и B – квадратные матрицы. Верна следующая

Теорема 1. Пусть

$$0 \leq c_0(\mathbf{x}) \leq 1, \quad (11)$$

$$\int_{\Omega_T} \left| \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \right|^2 dxdt \leq F^2, \quad \max_{\Omega_T} \mathbf{F} \leq F. \quad (12)$$

Тогда задача (1)-(8) имеет хотя бы одно обобщенное решение и для него справедливы оценки:

$$\max_{0 < t < T} \lambda_0 \int_{\Omega} (1 - \chi^\varepsilon) |\mathbb{D}(x, \mathbf{w}^\varepsilon)|^2 dx + \int_{\Omega_T} \left(\mu_0 \chi^\varepsilon \left| \mathbb{D}\left(x, \frac{\partial \mathbf{w}^\varepsilon}{\partial t}\right) \right|^2 + |p^\varepsilon|^2 \right) dxdt \leq MF^2, \quad (13)$$

$$\max_{0 < t < T} \int_{\Omega_f^\varepsilon} |c^\varepsilon|^2 dx + D_0 \int_0^T \int_{\Omega_f^\varepsilon} |\nabla c^\varepsilon|^2 dxdt \leq MF^2. \quad (14)$$



3. Доказательство Теоремы 1

Для упрощения записи, если не оговорено противное, индекс ε опускаем.

Рассмотрим следующую вспомогательную начально-краевую задачу, состоящую из системы уравнений Стокса и системы уравнений Ламэ

$$\nabla \cdot \left(\mu_0 \chi \mathbb{D} \left(x, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) + \lambda_0 (1 - \chi) \mathbb{D}(x, \mathbf{u}) - q \mathbb{I} \right) + \chi \delta \varphi(c) \mathbf{F} = 0, \quad (15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (16)$$

в области Ω при $t > 0$, и конвективного уравнения диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_0 \nabla c - \varphi(c) \mathbb{M}^{(h)} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) \right) \quad (17)$$

для концентрации примеси в области Ω_f при $t > 0$.

Задача дополняется следующими начальными и граничными условиями

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in S; \quad (18)$$

$$\int_{\Omega} q \, dx = 0, \quad (19)$$

$$D_0 \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} - \varphi(c) \mathbb{M}^{(h)} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Gamma; \quad (20)$$

$$\chi \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Omega; \quad (21)$$

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}) \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Omega_f, \quad (22)$$

где

$$\mathbb{M}^{(h)}(\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)) = \frac{1}{h^4} \int_t^{t+h} d\tau \int_{R^3} \eta \left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}{h} \right) \mathbf{v}(\mathbf{y}, \tau) \, d\mathbf{y}$$

– оператор сглаживания по переменным \mathbf{x} и t и ядро усреднения $\eta(s) \in \mathbb{C}(R^3)$ – четная неотрицательная функция, $\eta(\mathbf{x}) = 0$, если $|\mathbf{x}| \geq 1$; $\int_{|\mathbf{x}| \leq 1} \eta(|\mathbf{x}|) \, ds = 1$. Сглаженные функции являются гладкими, финитными и при $h \rightarrow 0$ сходятся по норме $L_2(\Omega'_{T-\beta})$ в любой строго внутренней подобласти $\Omega'_{T-\beta} \subset \Omega_T$, $h \leq \beta$ (см. [1]).

Для решения задачи (15) – (22) воспользуемся теоремой Шаудера о неподвижной точке. А именно, фиксируем множество $\mathfrak{M} = \{\bar{c}(\mathbf{x}, t) \in L_2(\Omega_f \times (0, T))\}$. Пусть $\mathbf{v} = \mathbb{E}_{\Omega_f}(\partial \mathbf{u} / \partial t)$ есть продолжение $\partial \mathbf{u} / \partial t$ из области Ω_f в Ω такое, что

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \quad \mathbf{x} \in \Omega_f,$$

$$\int_{\Omega} |\mathbf{v}|^2 \, dx \leq C \int_{\Omega_f} \left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|^2 \, dx,$$

$$\int_{\Omega} |\mathbb{D}(x, \mathbf{v})|^2 \, dx \leq C \int_{\Omega_f} \left| \mathbb{D} \left(x, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) \right|^2 \, dx$$



с постоянной C не зависящей от ε .

В первую очередь решим задачу (15), (16), (18) (19), (21) с $\rho = \rho(\varphi(\bar{c}))$, где $\bar{c} \in \mathfrak{M}$. Полученное решение определяет оператор $\bar{\mathbf{u}} = \mathbb{A}(\bar{c})$, действующий из пространства \mathfrak{M} в пространство \mathfrak{N} с нормой

$$\|\mathbf{u}\|_{\mathfrak{N}}^2 = \max_{0 < t < T} \int_{\Omega} (1 - \chi) |\mathbb{D}(x, \mathbf{u})|^2 dx + \int_{\Omega_T} \chi |\mathbb{D}(x, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t})|^2 dx dt.$$

Вектор функции из \mathfrak{N} так же удовлетворяют условиям

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0, \mathbf{x} \in S,$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = 0, \mathbf{x} \in \Omega_f.$$

Легко показать, что справедливы следующие неравенства

$$\|\mathbf{u}\|_{2, \Omega_T}^2 + \|\nabla \mathbf{u}\|_{2, \Omega_T}^2 \leq C \|\mathbf{u}\|_{\mathfrak{N}},$$

$$\left\| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right\|_{2, \Omega_f \times (0, T)} \leq C \|\mathbf{u}\|_{\mathfrak{N}}. \quad (23)$$

Подставляя $\bar{\mathbf{u}} = \mathbb{A}(\bar{c})$ в уравнение (17) приходим к следующей начально-краевой задаче об определении функции $c(\mathbf{x}, t)$:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D_0 \nabla c - \varphi(c) \mathbb{M}^{(h)}(\bar{\mathbf{v}})), \mathbf{x} \in \Omega_f, t > 0, \quad (24)$$

$$D_0 \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} - \varphi(c) \mathbb{M}^{(h)}(\bar{\mathbf{v}}) \cdot \mathbf{n} = 0, \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (25)$$

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega_f, \quad (26)$$

которая определяет оператор на множестве \mathfrak{N} : $c = \mathbb{B}(\bar{\mathbf{u}})$. Полученная задача при каждом фиксированном $h > 0$, имеет единственное решение, для которого справедливо энергетическое неравенство

$$\max_{0 < t < T} \int_{\Omega_f} |c|^2 dx + D_0 \int_0^T \int_{\Omega_f} |\nabla c|^2 dx dt \leq M \int_0^T \int_{\Omega_f} |\bar{\mathbf{v}}|^2 dx dt. \quad (27)$$

Здесь и всюду ниже через M обозначаем постоянные, не зависящие от ε и от параметра сглаживания h .

Суперпозиция

$$c = \mathbb{B} \circ \mathbb{A}(\bar{c}) = \Phi(\bar{c})$$

есть искомый оператор, неподвижные точки которого $c_h = \Phi(c_h)$ определяют решение задачи (15) – (22) $c = c_h$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}_h$, $q = q_h$.

Оценка (27) показывает, что оператор Φ переводит множество \mathfrak{M} в себя:

$$\Phi : \mathfrak{M} \rightarrow \mathfrak{M}.$$



Если мы докажем, что оператор Φ вполне непрерывен, то согласно теореме Шаудера он имеет неподвижную точку. Для этого воспользуемся следующими вспомогательными утверждениями.

Лемма 1. В условиях Теоремы 1 для каждого фиксированного $\bar{c}(x, t) \in \mathfrak{M}$ задача (15), (16), (18) (19), (21) имеет единственное обобщенное решение $\bar{\mathbf{u}}$ и для него справедлива оценка:

$$\max_{0 < t < T} \lambda_0 \int_{\Omega} (1 - \chi) |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{u}})|^2 dx + \int_{\Omega_T} \left(\mu_0 \chi \left| \mathbb{D} \left(x, \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} \right) \right|^2 + |\bar{q}|^2 \right) dx dt \leq MF^2. \quad (28)$$

□ Доказательство существования единственного обобщенного решения задачи (15), (16), (18) (19), (21) и получение оценки (28) повторяет аналогичные доказательства в ([4]), ([5]). ■

Лемма 2. Оператор \mathbb{A} непрерывный.

□ Пусть

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{u}}_1 &= \mathbb{A}(\bar{c}_1), \quad \bar{\mathbf{u}}_2 = \mathbb{A}(\bar{c}_2), \quad \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}_1 - \bar{\mathbf{u}}_2, \\ \bar{c} &= \bar{c}_1 - \bar{c}_2, \quad \bar{q} = \bar{q}_1 - \bar{q}_2, \quad \overline{\varphi(c)} = \varphi(c_1) - \varphi(c_2), \\ \bar{\mathbf{v}}_1 &= \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_1}{\partial t}, \quad \bar{\mathbf{v}}_2 = \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_2}{\partial t}, \quad \bar{\mathbf{v}} = \bar{\mathbf{v}}_1 - \bar{\mathbf{v}}_2. \end{aligned}$$

Тогда для разности $\bar{\mathbf{u}}$ имеем:

$$\nabla \cdot (\mu_0 \chi \mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{v}}) + \lambda_0 (1 - \chi) \mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{u}}) - \bar{q} \mathbb{I}) = -\chi \delta \overline{\varphi(c)} \mathbf{F}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0, \quad (29)$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0,$$

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in S,$$

$$\chi \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad \int_{\Omega} \bar{q} \mathbf{x} = 0.$$

Умножим уравнение (29) на функцию $\bar{\mathbf{v}}$ и проинтегрируем по области Ω

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \lambda_0 (1 - \chi) |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{u}})|^2 dx + \int_{\Omega} \mu_0 \chi |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{v}})|^2 \leq \left| - \int_{\Omega} \chi \delta \overline{\varphi(c)} \mathbf{F} \cdot \bar{\mathbf{v}} dx \right| = I.$$

Функция $\varphi(c)$ является гладкой по определению и для нее справедлива теорема Лагранжа, другими словами:

$$I \leq M_1 \int_{\Omega} \chi \delta |\bar{c} \mathbf{F} \cdot \bar{\mathbf{v}}| dx.$$

Применив к последнему последовательно неравенство Гельдера и неравенство Коши, получим

$$I \leq \left(\int_{\Omega} M_2 \chi |\bar{c} \mathbf{F}|^2 dx \right)^{1/2} \left(\int_{\Omega} \chi |\bar{\mathbf{v}}|^2 dx \right)^{1/2} \leq \frac{M_2}{2\eta} \int_{\Omega} \chi |\bar{c} \mathbf{F}|^2 dx + \frac{\eta}{2} \int_{\Omega} \chi |\bar{\mathbf{v}}|^2 dx.$$



Оценим второе слагаемое, для этого вектор функцию $\bar{\mathbf{v}}$ продолжим из области Ω_f в Ω , как говорилось выше, с сохранением дифференциальных свойств. К продолженной функции применим последовательно неравенство Пуанкаре-Фридрихса, а затем неравенство Корна и воспользуемся свойством продолжения.

В итоге получим

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \lambda_0(1 - \chi) |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{u}})|^2 dx + \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \chi |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{v}})|^2 dx \leq \frac{M_2}{2\eta} \int_{\Omega_f} |\bar{c}|^2 |\mathbf{F}|^2 dx + \frac{C\eta}{2} \int_{\Omega} \chi |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{v}})|^2 dx.$$

Возьмем в качестве $\eta = \mu_0/2C$. Тогда

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \lambda_0(1 - \chi) |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{u}})|^2 dx + \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \chi |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{v}})|^2 dx \leq M \int_{\Omega_f} |\bar{c}|^2 |\mathbf{F}|^2 dx. \quad (30)$$

Проинтегрировав (30) по t и учитывая условие (12), имеем

$$\max_{0 < t < T} \int_{\Omega} \lambda_0(1 - \chi) |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{u}})|^2 dx + \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega_f} \chi |\mathbb{D}(x, \bar{\mathbf{v}})|^2 dx \leq MF^2 \int_{\Omega_f} |\bar{c}|^2 dx.$$

Окончательно, учитывая нормы пространств \mathfrak{M} и \mathfrak{N} , получим

$$\|\bar{\mathbf{u}}\|_{\mathfrak{N}} \leq MF^2 \|\bar{c}\|_{\mathfrak{M}},$$

что и означает непрерывность оператора \mathbb{A} . ■

Лемма 3. Оператор \mathbb{B} непрерывный.

□ Пусть

$$c_1 = \mathbb{B}(\bar{\mathbf{u}}_1), \quad c_2 = \mathbb{B}(\bar{\mathbf{u}}_2), \quad c = c_1 - c_2, \quad \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}_1 - \bar{\mathbf{u}}_2;$$

$$\bar{\mathbf{w}}_1 = \mathbb{M}^{(h)}\left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_1}{\partial t}\right), \quad \bar{\mathbf{w}}_2 = \mathbb{M}^{(h)}\left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_2}{\partial t}\right), \quad \bar{\mathbf{w}} = \bar{\mathbf{w}}_1 - \bar{\mathbf{w}}_2, \quad \overline{\varphi(c)} = \varphi(c_1) - \varphi(c_2).$$

Тогда разность $c(\mathbf{x}, t)$ является решением следующей начально-краевой задачи:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D_0 \Delta c + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{w}}_1 \overline{\varphi(c)} - \bar{\mathbf{w}} \varphi(c_2)) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega_f, \quad t \in (0, T); \quad (31)$$

$$D_0 \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} - (\bar{\mathbf{w}}_1 \overline{\varphi(c)} - \bar{\mathbf{w}} \varphi(c_2)) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad t > 0;$$

$$c(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega_f.$$

Умножим (31) на $c(\mathbf{x}, t)$ и проинтегрируем по области Ω_f , применяя формулу интегрирования по частям:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega_f} |c|^2 dx + D_0 \int_{\Omega_f} |\nabla c|^2 dx = \int_{\Omega_f} \bar{\mathbf{w}}_1 \cdot (\overline{\varphi(c)} \nabla c) dx + \int_{\Omega_f} \bar{\mathbf{w}} \cdot (\varphi(c_2) \nabla c) dx.$$



Функции $\varphi(c_2)$ и $\bar{\mathbf{w}}_1$ ограничены по построению. Оценим правую часть:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_f} \bar{\mathbf{w}}_1 \cdot (\overline{\varphi(c)} \nabla c) dx + \int_{\Omega_f} \bar{\mathbf{w}} \cdot (c_2 \nabla c) dx &\leq N_1 \left(\int_{\Omega_f} (c \nabla c) dx + \int_{\Omega_f} \bar{\mathbf{w}} \cdot \nabla c dx \right) \\ &\leq \frac{N_1}{2\eta} \left(\int_{\Omega_f} |c|^2 dx + \int_{\Omega_f} |\bar{\mathbf{w}}|^2 dx \right) + N_1 \eta \int_{\Omega_f} |\nabla c|^2 dx. \end{aligned}$$

Взяв $\eta = D_0/2N_1$, получим следующее неравенство

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega_f} |c|^2 dx + D_0 \int_{\Omega_f} |\nabla c|^2 dx &\leq N_2 \left[\int_{\Omega_f} |\bar{\mathbf{w}}|^2 dx + \int_{\Omega_f} |c|^2 dx \right], \\ c(\mathbf{x}, 0) &= 0. \end{aligned}$$

Используя неравенство Гронуолла, окончательно имеем:

$$\int_{\Omega_f} |c|^2 dx \leq N_3 \int_0^T \int_{\Omega_f} |\bar{\mathbf{w}}|^2 dx dt.$$

Последнее неравенство, учитывая неравенство (23), можно переписать следующим образом:

$$\|c\|_{\mathfrak{M}} \leq N \|\bar{\mathbf{u}}\|_{\mathfrak{M}},$$

что и означает непрерывность оператора \mathbb{B} . ■

Лемма 4. *Оператор Φ вполне непрерывен.*

□ Оператор Φ является непрерывным, как суперпозиция непрерывных операторов.

Из уравнения (20) следует, что взяв последовательность функций $\{\bar{c}^k(\mathbf{x}, t)\}$, ограниченную, в норме множества \mathfrak{M} , получаем последовательность функций ограниченную в $L_\infty((0, T); L_2(\Omega_f)) \cap W_2^{1,0}(\Omega_f \times (0, T))$ с последовательностью производных по времени $\{\partial c^\varepsilon / \partial t\}$ ограниченной в $L_2((0, T); W_2^{-1}(\Omega_f))$. Согласно теореме Аубина (см. ([2])) такая последовательность сходится сильно в $L_2(\Omega_f \times (0, T))$. Следовательно, оператор Φ является вполне непрерывным. ■

Так же легко показать, что множество \mathfrak{M} является выпуклым.

Итак, существует неподвижная точка оператора Φ , обозначим ее как c_h ,

$$c_h = \Phi(c_h),$$

и пусть $\mathbf{u}_h = \mathbb{A}(c_h)$. Тогда c_h является решением следующей задачи:

$$\nabla \cdot (\mu_0 \chi \mathbb{D}(x, \mathbf{v}_h) + \lambda_0 (1 - \chi) \mathbb{D}(x, \mathbf{u}_h) - q_h \mathbb{I}) + \chi \delta \varphi(c_h) \mathbf{F} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0; \quad (32)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_h = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0; \quad (33)$$

$$\frac{\partial c_h}{\partial t} = \nabla \cdot (D_0 \nabla c_h - \varphi(c_h) \mathbb{M}^{(h)}(\mathbf{v}_h)), \quad \mathbf{x} \in \Omega_f, \quad t \in (0, T); \quad (34)$$



$$\mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in S, t > 0; \quad (35)$$

$$\chi \mathbf{u}_h(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Omega; \quad (36)$$

$$\int_{\Omega} q_h dx = 0; \quad (37)$$

$$D_0 \frac{\partial c_h}{\partial \mathbf{n}} - \varphi(c_h) \mathbb{M}^{(h)}(\mathbf{v}_h) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Gamma; \quad (38)$$

$$c_h(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}) \quad \text{при } \mathbf{x} \in \Omega_f, \quad (39)$$

где (34) понимается как интегральное тождество:

$$\int_0^T \int_{\Omega_f} \left(c_h \frac{\partial \psi}{\partial t} + \varphi(c_h) \mathbb{M}^{(h)}(\mathbf{v}_h) \cdot \nabla \psi - D_0 \nabla c_h \cdot \nabla \psi \right) dx dt = - \int_{\Omega_f} c_0 \psi(\mathbf{x}, 0) dx,$$

для произвольной гладкой функции $\psi(\mathbf{x}, t)$, равной нулю при $t = T$.

Лемма 5. *Решение (\mathbf{w}, p, c) исходной задачи (1)-(8) есть предел при $h \rightarrow 0$ решений (\mathbf{u}_h, q_h, c_h) задачи (32)-(39).*

□ Умножим (32) на произвольную гладкую вектор-функцию $\phi(\mathbf{x}, t)$, равную нулю на границе S и при $t = T$, и проинтегрируем по области Ω_T

$$\int_{\Omega_T} (\mu_0 \chi \mathbb{D}(x, \mathbf{v}_h) : \mathbb{D}(x, \phi) + \lambda_0 (1 - \chi) \mathbb{D}(x, \mathbf{u}_h) : \mathbb{D}(x, \phi) - q_h \nabla \cdot \phi) dx dt = \int_{\Omega_T} \chi \delta \varphi(c_h) \mathbf{F} \cdot \phi dx dt. \quad (40)$$

Пусть $h \rightarrow 0$. Легко видеть, что оценки (27)-(28) справедливы для всех h , с постоянными, не зависящими от h и ε .

Оценки (27), (28) позволяют из последовательностей $\{\mathbf{u}_h\}$, $\{q_h\}$ и $\{c_h\}$ выбрать подпоследовательности такие, что

$$\mathbf{u}_h \rightharpoonup \mathbf{w} \quad \text{слабо в } W_2^{1,1}(\Omega_f \times (0, T)) \cap W_2^{1,0}(\Omega_s \times (0, T)),$$

$$q_h \rightharpoonup p \quad \text{слабо в } L_2(\Omega_T),$$

$$c_h \rightharpoonup c \quad \text{слабо в } W_2^{1,0}(\Omega_f \times (0, T)).$$

Более того, согласно теореме Аубина из [2]

$$c_h \rightarrow c \quad \text{сильно в } L_2(\Omega_f \times (0, T)).$$

В силу непрерывности функции φ , имеем

$$\varphi(c_h) \rightarrow \varphi(c) \quad \text{сильно в } L_2(\Omega_f \times (0, T)).$$



Переходя к пределу в неравенствах (27)-(28), получим требуемые в условии теоремы оценки.

В интегральном тождестве (40) предельный переход стандартный.

Аналогично поступим с уравнением (34), то есть умножим на произвольную гладкую функцию $\psi(\mathbf{x}, t)$ равной нулю при $t = T$ и проинтегрируем по цилиндру $\Omega_f \times (0, T)$:

$$\int_0^T \int_{\Omega_f} \left(c_h \frac{\partial \psi}{\partial t} + \varphi(c_h) \mathbb{M}^{(h)}(\mathbf{v}_h) \cdot \nabla \psi - D_0 \nabla c_h \cdot \nabla \psi \right) dx dt = - \int_{\Omega_f} c_0 \psi(\mathbf{x}, 0) dx. \quad (41)$$

В слагаемых интегрального тождества (41) предельный переход стандартен. ■

Из доказанных лемм следует утверждение теоремы 1.

Литература

1. Adams R.E. Sobolev spaces / New York: Academic Press, 1975. – 268 p.
2. Лионс Ж.-Л. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач / М.: Мир, 1972. – 587 с.
3. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уралцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического вида / М.: Мир, 1967. – 736 с.
4. Meirmanov A., Nguetseng's two-scale convergence method for filtration and seismic acoustic problems in elastic porous media // Siberian Mathematical Journal. – 2007. – 48. – P.519-538.
5. Meirmanov A., Homogenized models for filtration and for acoustic wave propagation in thermo-elastic porous media // Euro Journal of Applied Mathematics. – 2008. – 19. – P.259-284.
6. Meirmanov A., Zimin R. Mathematical models of a diffusion-convection in porous media // Submitted to Electronic Journal of Differential Equations. – 2012.

SOLVABILITY OF DIFFUSION AND CONVECTION PROBLEM IN POROUS-ELASTIC MEDIA AT MICROSCOPIC LEVEL

A.M. Meirmanov R.N. Zimin, O.V. Galtseva, O.A. Galtsev

Belgorod State University,
Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail: reshat85@mail.ru

Abstract. The model describing the joint motion of incompressible viscous liquid and incompressible elastic skeleton is under consideration. It is assumed that liquid density depends on the admixture concentration. The system is completed by the diffusion- convection equation for the admixture in the liquid domain. Existence of weak solution of initial-boundary problem for the system in bounded domain is proved.

Key words: Stokes' and Lamé's equations, diffusion-convection equation.



УДК 517.956.4

О КРАТНОСТИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ В ЗАДАЧЕ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ НА ГРАФАХ

*Адель Т. Диаб, **О.М. Пенкин, **В.Л. Прядиев

* Университет Айн Шамс,

Каир, Египет, e-mail: Adeldiab80@hotmail.com

**Белгородский государственный университет,

ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: penkin@bsu.edu.ru, pryadiev@bsu.edu.ru

Аннотация. Определяется специальный класс линейных пространств на графах и дается оценка их размерностей. На этой основе, получаются новые результаты о геометрической кратности собственных значений задачи Штурма-Лиувилля на графе.

Ключевые слова: задача Штурма-Лиувилля, спектр, граф.

В настоящей работе мы даем точные оценки геометрической кратности собственных значений задачи Штурма-Лиувилля на графах. Давно замечено (см., например, [4]), что кратность, если только граф не вырождается в отрезок или цепочку присоединенных друг к другу ребер, не зависит от порядка дифференциального оператора. Оказывается (см., например, [6], [7]), что она зависит, главным образом, от топологического устройства графа. Однако, в литературе отсутствуют какие-либо общие результаты, дающие объяснение этому факту. В упомянутых работах рассматривается случай только непрерывных решений. Однако, существуют и другие интересные классы решений уравнений на графах; некоторые из них можно найти в работах [1], [2, 3]. Здесь, мы приводим результаты, пригодные для всех физически осмысленных классов решений.

1. Основные определения. Графом Γ мы называем связное подмножество \mathbb{R}^n , составленное из конечного числа попарно не пересекающихся интервалов

$$e_i = \{x \in \mathbb{R}^n : x = a_i + t(b_i - a_i)/l, t \in (0; l), l = \|b_i - a_i\|\}, \quad (1)$$

параметризованных натуральным параметром t и называемых далее ребрами графа Γ , а также всех их концов v_j – вершин графа Γ (в (1) вершинами являются a_i и b_i). Множество всех вершин обозначим через V , а множество всех ребер графа – E . Через $E(v)$ обозначим множество ребер, примыкающих к вершине v . Количество элементов в $E(v)$ называется степенью (или кратностью) вершины v и обозначается через $\deg v$.

Связное подмножество $\Gamma_0 \subset \Gamma$ назовем подграфом, если он состоит из некоторого числа ребер исходного графа и концевых вершин этих ребер. Тем самым подграф всегда является замкнутым подмножеством исходного графа в топологии, индуцированной на Γ стандартной топологией пространства \mathbb{R}^n .

Через F обозначим множество всех функций $u : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$, имеющих равномерно непрерывные производные на каждом ребре (в литературе по дифференциальным уравнениям на графах это множество часто обозначается через $C_e^1(\Gamma)$). Тогда в каждой вершине



$v \in V$ определены пределы $u_e(v) = \lim_{X \rightarrow v, X \in e} u(X)$ ($e \in E(v)$) и аналогичные пределы производных $u'_e(v)$. Производные вычисляются с помощью натуральной параметризации, фиксированной в (1), т.е.

$$u'(X) = \frac{d}{dt} u(a_i + t(b_i - a_i)/l) \Big|_{t=\|X-a_i\|}.$$

Очевидно, что F является линейным пространством над полем вещественных чисел (в этой работе в качестве поля скаляров всегда используется \mathbb{R}).

2. Оценка размерности пространства V_0 . Обозначим через V_0 такое подмножество в V , что объединение V_0 и множества всех точек ребер графа связно. Далее V_0 называется множеством внутренних вершин графа Γ , а остальная часть – $V \setminus V_0$ – множеством граничных вершин. Следует заметить, что разбиение множества вершин на внутренние и граничные не является однозначным (например, всегда можно взять предельный случай $V_0 = V$).

Обыкновенное линейное дифференциальное уравнение второго порядка на графе определяется как набор таких уравнений на отдельных ребрах, согласованных во внутренних вершинах так называемыми условиями трансмиссии (или "склейки"). Под решением понимается функция на графе, удовлетворяющая на ребрах упомянутым уравнениям, а во внутренних вершинах – условиям трансмиссии. В качестве условий трансмиссии в большинстве работ рассматривают условия непрерывности во внутренних вершинах и равенство нулю линейных комбинаций производных решения во внутренних вершинах по направлениям примыкающих к ним ребер.

В граничных вершинах (если таковые имеются), в основном, ставятся условия Дирихле.

В данной работе конкретный вид условий трансмиссии и граничных условий роли не играет; мы будем считать, что и те и другие имеют вид $l_i^v(u) = 0$, где l_i^v – линейная комбинация пределов функции u и пределов производных этой функций при стремлении аргумента к v вдоль ребер, примыкающих к этой вершине. Главное, чтобы пространство F_0 решений краевой задачи удовлетворяло определяемым далее условиям $a)$ и $b)$. Для их формулировки введем некоторые обозначения.

Основным объектом исследования в настоящей работе является линейное подпространство $F_0 = F_0(\Gamma)$ пространства F , удовлетворяющее следующим требованиям:

- a) Для любой вершины $v \in V$ и функции $u \in F_0$ равенство $\vec{u}(v) = 0$ влечет $u \equiv 0$ на звезде $S(v) = \{v\} \cup (\bigcup_{e \in E(v)} e)$.
- b) В произвольной вершине v с $\deg v = n$ существует базисный набор, состоящий из n координат. Кроме того, при $n = 1$ одна из координат x_1, x_2 обязательно является базисной, а при $n > 1$ любую пару x_{2k-1}, x_{2k} ($k \leq n$), привязанную к ребру e_k можно дополнить до базисного набора, состоящего из n координат, взяв недостающие $n - 2$ координаты, привязанными к любым попарно не совпадающим ребрам из $E(v)$, отличным от ребра e_k .



Замечание 1. Если $\deg v = 2$, то условие *b)* означает, что любая пара x_{2k-1}, x_{2k} ($k = 1, 2$) является базисной. Более того, в вершине v степени m любой набор координат, состоящий из $m - 1$ пар вида x_{2k-1}, x_{2k} является базисом. Он, конечно, довольно переполнен, но в ряде случаев будет использован в доказательствах.

В приложениях к дифференциальным уравнениям на графах, подпространства F_0 задаются некоторыми линейными на множестве F условиями $l_i(u) = 0$ ($i = 1, \dots, n + 1$) в вершинах $v \in V$ степени n . При этом каждое $l_i(u)$ является линейной комбинацией $2n + 1$ величин $x_1(\vec{u}), \dots, x_{2n+1}(\vec{u})$, т.е. является локальной формой. Пусть $L(v) - (n + 1) \times (2n + 1)$ -матрица, составленная из коэффициентов этих форм, стоящих при $x_k(\vec{u})$, упорядоченных как описано выше. Предполагается, что все формы линейно независимы, т.е. ранг матрицы $L(v)$ равен $n + 1$. Возьмем какой-нибудь базисный минор. Тогда базисным оказывается набор n координат, номера которых не совпадают с номерами столбцов базисного набора.

Рассмотрим следующий пример. Пусть, например, линейные формы в вершине v , кратности большей единицы, таковы: $l_0(u) = \sum_{i=1}^n u'_{e_i}(v)$, $l_i(u) = u(v) - u_{e_i}(v)$ ($i=1, \dots, n$). Пусть все эти формы обращаются в нуль на некоторой функции u . Тогда, например, обращение в нуль $n - 1$ производных $u'_{e_i}(v)$ и обращение в нуль одной из величин $u_{e_i}(v)$, ($i = 1, \dots, n$) или $u(v)$ влечет обращение в нуль всех рассматриваемых величин. Т.е. в данном примере в качестве базисного набора координат можно взять $\{x_{2k-1}, x_2, x_4, \dots, x_{2n-2}\}$ ($k \leq n + 1$). С другой стороны, взяв произвольно пару (x_{2k-1}, x_{2k}) можно дополнить ее до базисного набора следующим образом:

$$\{x_2, x_4, \dots, x_{2k-1}, x_{2k}, x_{2k+2}, \dots, x_{2n-2}\}.$$

Такой тип линейных условий в вершинах графа, кратность которых не меньше двух, рассматривается в подавляющем большинстве работ по теории дифференциальных уравнений на графах. Он отвечает непрерывной склейке решения уравнения на графе из решений дифференциальных уравнений на отдельных ребрах. В вершинах единичной кратности, обычно называемых граничными, рассматриваются условия Дирихле $x_1(\vec{u}) = x_3(\vec{u}) = 0$. Здесь базисной является координата $x_2(\vec{u})$, поскольку обращение ее в нуль означает обращение в нуль всех трех координат.

Следующий тип линейных условий в вершинах не предполагает непрерывности решения в целом на графе.

Пусть в вершинах графа степени $n > 1$ задаются линейные условия на функции $u \in F$ следующего вида:

$$u'_{e_i}(v) + C_i(u(v) - u_{e_i}(v)) = 0 \quad (i = 1, \dots, n),$$

$$\sum_{i=1}^n C_i(u(v) - u_{e_i}(v)) = 0.$$

Здесь в качестве базисного набора координат можно взять $\{x_1, x_3, \dots, x_{2n-3}, x_{2n-1}\}$. Дополняемость до базисного набора любой пары x_{2k-1}, x_{2k} очевидна. Например, пару x_1, x_2 можно дополнить до базисного набора $\{x_1, x_2, x_3, x_5, \dots, x_{2n-3}\}$.



В вершинах единичной кратности можно взять пару условий $u'_e(v) + C_1(u(v) - u_e(v)) = 0$, $u(v) = 0$. Здесь базисной является любая из координат x_1, x_2 .

Проверка условия а) в рассматриваемом контексте тривиальна.

В заключительной части мы приведем еще один пример краевой задачи с разрывными решениями, в котором условия а), б) выполняются. К настоящему моменту авторам не известны примеры физически осмысленных локальных склеек (т.е. когда линейные формы, фигурирующие в них, являются локальными), в которых бы не выполнялись требования а), б).

Вершину $v \in \Gamma$ назовем дефектной, если $\dim v < \deg v$.

Наряду с $F_0 = F_0(\Gamma)$ мы будем также рассматривать его подпространства $F_0(\hat{\Gamma})$, состоящие из функций из F_0 , обращающихся в нуль тождественно на $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}$. Когда мы говорим, что на $\hat{\Gamma}$ выполняются условия а), б), мы рассматриваем его как самостоятельное пространство на графе $\hat{\Gamma}$, являющемся подграфом графа Γ . Степень вершины $v \in \Gamma$ относительно $\hat{\Gamma}$ будет обозначаться через $\deg_{\hat{\Gamma}} v$. Величина $\dim_{\hat{\Gamma}} v$ обозначает размерность вершины v по отношению к пространству $F_0(\hat{\Gamma})$.

Далее часто используется следующее утверждение.

Лемма 1. Пусть $\hat{\Gamma}$ подграф графа Γ , тогда подпространство $F_0(\hat{\Gamma}) \subset F_0$, описанное выше, удовлетворяет условиям а), б) относительно $\hat{\Gamma}$. Более того, все вершины графа $\hat{\Gamma}$, к которым примыкают ребра из $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}$ являются дефектными.

□ Проверять условия а), б) нужно только в вершинах лежащих в $\overline{(\Gamma \setminus \hat{\Gamma})} \cap \hat{\Gamma}$ (черта означает замыкание в топологии индуцированной на Γ из объемлющего пространства \mathbb{R}^n). Пусть v – одна из таких вершин и пусть e_i ($i = 1, \dots, m$) – ребра, примыкающие к ней. Будем предполагать, что первые k ребер лежат в $\hat{\Gamma}$, а остальные – в $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}$. В силу свойства б) (на $F_0(\Gamma)$) пару x_{2m-1}, x_{2m} , привязанную к последнему ребру, а потому принадлежащую $\hat{\Gamma}$, можно дополнить до базисного набора

$$\{x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_{k-1}}, x_{i_k}, \dots, x_{i_{m-2}}, x_{2m-1}, x_{2m}\}.$$

Причем можно считать, что координаты x_{i_j} при $j \geq k$ привязаны к ребрам из $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}$ (это следует из второй части условия б)).

Т.к. все координаты, привязанные к ребрам из $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}$ обращаются в нуль на функции $u \in F_0(\hat{\Gamma})$ (поскольку на таких ребрах функция u обращается в нуль тождественно), то равенства $x_{i_j} = 0$ при $j \leq k - 1$ влекут равенство нулю всех координат $\{x_1, \dots, x_{2m+1}\}$ и тем более части этих координат $\{x_1, \dots, x_{2k+1}\}$, относящейся к ребрам из $\hat{\Gamma}$. Последнее как раз и означает, что в рассматриваемой вершине имеется базис (по отношению к $F_0(\hat{\Gamma})$) из $k - 1$ элементов, т.е. $\dim_{\hat{\Gamma}} v < \deg_{\hat{\Gamma}} v$.

Проверка второй части условия б) осуществляется аналогичными рассуждениями. Это относится и к условию а). ■

Имеет место следующее тривиальное утверждение.

Лемма 2. Пусть $\deg v = n$, $u \in F_0$ и n координат некоторого базисного набора координат равны нулю в рассматриваемой вершине. Тогда $u \equiv 0$ на звезде

$$S(v) = \{v\} \cup \left(\bigcup_{e \in E(v)} e \right).$$



Из него получаем следующую лемму.

Лемма 3. Пусть Γ является графом-цепочкой, т.е. представляет собой множество, составленное из точек ребер e_1, \dots, e_n , последовательно соединенных в вершинах v_0, \dots, v_n . Тогда, если в вершине v_0 базисная координата функции $u \in F_0$ равна нулю, то $u \equiv 0$ на Γ .

□ В силу леммы 2 $u \equiv 0$ на звезде $S(v_0)$. Но тогда в вершине v_1 имеем $u_{e_1} = u'_{e_1} = 0$. Но эта пара является базисной в этой вершине, поэтому в силу леммы 2 $u \equiv 0$ на звезде $S(v_1)$. Продолжая это рассуждение, получим $u \equiv 0$ на любой звезде кроме, возможно, последней – $S(v_n)$. Но $u \equiv 0$ на e_n (т.к. $u \equiv 0$ на $S(v_{n-1})$), а потому в последней вершине v_n имеем $x_1(\vec{u}) = x_2(\vec{u}) = 0$. Одна из этих координат является базисной (в силу б), т.к. степень этой вершины равна 1), поэтому и $u(v_n) = 0$, что завершает доказательство. ■

Замечание 2. Допустим, что условия а), б) выполняются во всех вершинах цепочки, кроме вершины v_n . Тогда равенство $u(v_n) = 0$ в условиях леммы 3 не обязательно выполняться. Однако, из доказательства видно, что $u \equiv 0$ на $\Gamma \setminus \{v_n\}$.

Отсюда легко получаем такое следствие.

Лемма 4. Пусть Γ является графом-цепочкой. Тогда $\dim F_0 \leq 1$.

□ Предположим, вопреки доказываемому, что имеется линейно независимое семейство, состоящее из двух функций $u, w \in F_0$. Возьмем в начальной вершине v рассматриваемой цепочки базисную координату x_k . Если $x_k(w) = 0$, то из предыдущей леммы следует, что $w \equiv 0$, а это невозможно. В противном случае возьмем нетривиальную линейную комбинацию $z = u - (x_k(u)/x_k(w))w$ для которой $x_k(z) = 0$. В силу леммы 3 эта линейная комбинация тождественно равна нулю, что вновь невозможно (в силу предположения о линейной независимости набора u, w). ■

Следующая лемма в контексте задачи Штурма-Лиувилля на графе с непрерывными склейками решений в вершинах (см. пример выше) была доказана Ю.В. Покорным (см., например, [1]).

Лемма 5. Пусть Γ является деревом. Тогда если во всех вершинах с единичной кратностью, исключая, возможно, одну из них – v_0 , базисные координаты обращаются в нуль на функции $u \in F_0$ (точнее, на порождаемом ей векторе $\vec{u}(v)$), то $u \equiv 0$ на Γ .

□ Пусть v_0, v_1, \dots, v_k – все вершины кратности единица. Если дерево не является цепочкой, то v_1 обязательно является концевой вершиной некоторой цепочки γ (промежуточные вершины которой имеют кратность два в исходном графе), соединяющей v_1 с некоторой вершиной v , кратность которой больше двух. В силу замечания 2, $u \equiv 0$ на $\gamma \setminus \{v\}$.

Положим $\hat{\Gamma} = \Gamma \setminus (\gamma \setminus \{v\})$. В силу леммы 1, пространство $F_0(\hat{\Gamma})$ удовлетворяет условиям а), б). Заметим также, что количество вершин кратности единица в графе $\hat{\Gamma}$ меньше, чем в исходном графе. Поскольку это будут в точности вершины v_0, v_2, \dots, v_k , то на графе $\hat{\Gamma}$ выполнены все условия доказываемого утверждения. Теперь можно повторить это рассуждение, начиная с вершины v_2 . Продолжая этом процесс мы придем



к графу-цепочке, соединяющей v_0 с v_k . Остается сослаться на лемму 3 (в которой роль v_0 сейчас играет v_k), в силу которой $u \equiv 0$ на этой последней цепочке. ■

Замечание 3. Как и в предыдущем замечании можно отметить, что если вместо функции из F_0 взять функцию из F , удовлетворяющую условиям а), б) в вершинах из $V \setminus \{v_0\}$, то при обращении в нуль базисных координат векторов $\vec{u}(v)$ в вершинах из $V \setminus \{v_0\}$ с единичными кратностями, будем иметь $u \equiv 0$ на $\Gamma \setminus \{v_0\}$.

Из доказанного утверждения получаем следующую теорему.

Теорема 1. Пусть граф Γ является деревом. Тогда $\dim F_0 \leq d_1 - 1$, где d_1 – количество вершин степени 1.

□ Предположив противное можно найти линейно независимое семейство d_1 функций из F_0 . Линейными комбинациями, как и в лемме 4 из них можно построить ненулевую функцию, обращающую в нуль $d_1 - 1$ базисных координат в вершинах единичной кратности. Но это противоречит предыдущей лемме. ■

Пусть теперь Γ – произвольный граф. Вершину v , лежащую на каком-либо цикле, назовем разбивающей, если $\Gamma \setminus \{v\}$ не является связным. Пусть G_i^v – одна из получающихся компонент связности множества $\Gamma \setminus \{v\}$. Множество $G_i = G_i^v \cup \{v\}$ является подграфом графа Γ , который также может иметь циклы. Он также может разбиваться на связные компоненты некоторыми вершинами лежащими на его циклах. После такого разбиения снова образуем подграфы типа G_i , присоединяя к ним вершины, с помощью которых они разбивались. Продолжая этот процесс и далее мы получим некоторое количество подграфов. Каждый из них является либо деревом, либо является связным объединением циклов, не допускающим дальнейшего разбиения описанного выше типа. Такое объединение циклов назовем гнездом. Гнездо $\Gamma_0 \subset \Gamma$ назовем граничным, если ему принадлежит лишь одна разбивающая вершина. Количество таких гнезд обозначим через $\mu(\Gamma)$. Остальные гнезда назовем внутренними (их количество не играет принципиальной роли для дальнейшего). Будем также граф называть графом-гнездом, если он имеет циклы, но не имеет разбивающих вершин.

Если компонента G_i является деревом и примыкает только к одной разбивающей вершине v , то $G_i \setminus \{v\}$ называется ветвью.

На приведенном ниже рисунке имеется три разбивающих вершины и два граничных гнезда; $\mu(\Gamma) = 2$.

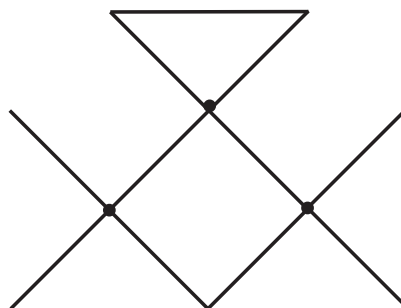


Рис. 1. $\nu(\Gamma) = 3, \mu(\Gamma) = 2$



Через $\nu(\Gamma)$ обозначим количество циклов в графе Γ . Это значит, что последовательно удаляя ребра из циклов (не нарушая связности графа), можно за $\nu(\Gamma)$ шагов получить дерево (так называемое остовное дерево), но нельзя сделать этого за меньшее число шагов. На приведенном рисунке $N = 3$. В теории графов $\nu(\Gamma)$ называют цикломатическим числом (см. [5]). Из формулы Эйлера для графов легко следует, что для связных графов

$$\nu(\Gamma) = |V| - |E| + 1. \quad (2)$$

Здесь, $|V|$ и $|E|$ – количество вершин и, соответственно, ребер.

Получить оценку размерности F_0 в случае графа с циклами значительно сложнее, чем это было в случае графа-дерева. Мы начнем со следующего утверждения.

Теорема 2. Пусть $d_1(\Gamma) = 0$, $\mu(\Gamma) = 0$ (т.е. Γ является графом-гнездом). Тогда $\dim F_0 \leq \nu(\Gamma) + 1$.

□ Для наглядности будем иллюстрировать наши рассуждения рис. 2. Фиксируем произвольную вершину v_0 кратности k_0 . Обозначая $d = \dim F_0(\Gamma)$ мы можем (переходя, как обычно, к линейным комбинациям) из d линейно независимых функций пространства $F_0(\Gamma)$ построить $(d - k_0)$ линейно независимых функций u_i , обращающихся в нуль на звезде $S(v_0)$.

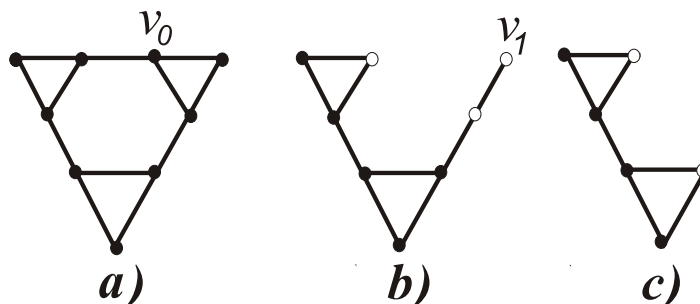


Рис. 2. $d_1(\Gamma) = \mu(\Gamma) = 0$

В графе $\Gamma_1 = \Gamma \setminus S(v_0)$ – он изображен на рисунке b) – могут быть вершины единичной кратности (на рисунке это вершина v_1), но они заведомо дефектные, поскольку являются концевыми вершинами звезды $S(v_0)$, на которой рассматриваемые функции обращаются в нуль тождественно. Все такие вершины лежат на некоторых ветвях (на рисунке такая ветвь оказалась цепочкой), прикрепленных к вершинам, лежащим на некоторых циклах. В силу замечания 3 на таких ветвях функции u_i обращаются в нуль (исключая, возможно, точки прикрепления к циклам). Устраняя эти ветви (опять же исключая точки прикрепления) из Γ_1 мы приходим к графу $\hat{\Gamma}_1$ у которого количество циклов $\nu(\hat{\Gamma}_1)$ равно $\nu(\Gamma) - (k_0 - 1)$.

Если граф $\hat{\Gamma}_1$ пуст, то мы получаем, что $d \leq k_0$. Но из формулы (2) следует $k_0 = \nu(\Gamma) + 1$, и мы приходим к доказываемому утверждению.

Если же граф $\hat{\Gamma}_1$ непуст, то он обязательно имеет циклы. Если он является графом-гнездом, то мы можем повторить предыдущее рассуждение. При этом начальную вершину – обозначим ее v_1 – нужно взять дефектной. Пусть ее кратность равна k_1 . Поскольку исходная вершина дефектна, то на первом этапе мы линейными комбинациями



строим $d - k_0 - (k_1 - 1)$ линейно независимых функций, обращающихся в нуль на $S(v_1)$. А далее рассуждение проводится без изменений.

Если граф $\hat{\Gamma}_1$ не является графом гнездом, то он обязательно имеет разбивающие вершины и, как следствие, имеет, по крайней мере, одно граничное гнездо χ , прикрепленное к остальной части графа в некоторой разбивающей вершине v . Мы утверждаем, что на этом гнезде имеется по крайней мере одна дефектная вершина v_1 – это будет одна из вершин, примыкающая к выброшенной на первом шаге части $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}_1$, отличная от v . В самом деле, в противном случае гнездо χ не имело бы контакта с $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}_1$, но тогда v была бы разбивающей вершиной исходного графа Γ , что по условию теоремы невозможно. Как и в предыдущем абзаце обозначим через k_1 кратность вершины v_1 и после повторения приведенного там рассуждения получим $d - k_0 - (k_1 - 1)$ линейно независимых функций, обращающихся в нуль на звезде $S(v_1)$. Далее рассуждая как в начале доказательства, придем к графу $\hat{\Gamma}_2$ на котором также найдется неразбивающая дефектная вершина.

В конечном итоге мы придем к пустому графу и, как следствие, получим оценку $d \leq k_0 + (k_1 - 1) + \dots + (k_l - 1)$. Остается заметить, что на каждом этапе нашего рассуждения число k_i (степень вершины v_i) равнялось $\nu_i + 1$, где ν_i равно количеству циклов, устраненных на i -ом шаге. Но тогда очевидно, что $d \leq k_0 + (k_1 - 1) + \dots + (k_l - 1) \leq \nu_0 + 1 + \nu_1 + \dots + \nu_l = \nu(\Gamma) + 1$. ■

Замечание 4. Если на графе-гнезде Γ изначально существует дефектная вершина, то из доказательства видно, что $\dim F_0 \leq \nu(\Gamma)$.

Некоторый аналог следующей теоремы был анонсирован М.Г. Завгородним и вторым из авторов настоящей статьи (см. [6]). Значительно позже, аналогичная теорема была приведена в [7], но в этих работах рассматривались только непрерывные решения задачи Штурма-Лиувилля при специальных условиях согласования описанных нами в первом примере, иллюстрирующем требование б). Приводимый нами результат не зависит от конкретного типа условий согласования, а потому пригоден для очень широкого их класса, подпадающего только под требования а), б).

Теорема 3. Если Γ не является графом-гнездом, то $\dim F_0 \leq \mu(\Gamma) + \nu(\Gamma) + d_1(\Gamma) - 1$.

□ Пусть $d = \dim F_0(\Gamma)$. Доказательство теоремы разбивается на несколько однотипных шагов.

Если $d_1(\Gamma) > 0$, то фиксируем одну из вершин v_0 единичной кратности. Из исходного набора d линейно независимых функций линейным комбинированием строим $d - (d_1(\Gamma) - 1)$ линейно независимых функций u_i , обращающих в нуль базисные координаты во всех вершинах единичной кратности, кроме v_0 . Заметим, что при этом все функции u_i обратятся в нуль на всех ветвях, не содержащих вершину v_0 . Обозначим через Γ_1 подграф графа Γ , полученный удалением этих ветвей.

Теперь начинаем «разорять» граничные гнезда. Взяв любое такое гнездо χ_1 (если они есть) и фиксировав на нем вершину v_1 , не являющуюся разбивающей, действуя как в доказательстве теоремы 2 (отправляясь от вершины v_1) из набора функций u_i мы можем построить набор $d - (d_1(\Gamma) - 1) - (\nu(\chi_1) + 1)$ функций из $F_0(\Gamma)$, обращающихся



в нуль на χ_1 , кроме разбивающей вершины лежащей на нем. Точно также поступим с остальными граничными гнездами. В итоге, получим $d - (d_1(\Gamma) - 1) - (\nu(\chi_1) + 1) - \dots - (\nu(\chi_{\mu(\Gamma)} + 1))$ линейно независимых функций w_i из пространства $F_0(\Gamma)$, которые обращаются в нуль на всех граничных гнездах. Обозначим через Γ_2 граф, полученный из Γ_1 (или из Γ , если первый шаг отсутствовал в силу $d_1(\Gamma) = 0$) удалением граничных гнезд (исключая точки прикрепления этих гнезд к остальной части графа). Заметим, что новый граф может иметь ветви, отличные от ветви, содержащей v_0 , но в этом случае все их вершины единичной кратности дефектны, а потому функции w_i обращаются в нуль на этих ветвях. Обозначая через $\hat{\Gamma}$ граф, полученный из Γ_2 удалением этих ветвей, получим $w_i \equiv 0$ на $\Gamma \setminus \hat{\Gamma}$.

Все, что мы до этого сделали иллюстрирует следующий рисунок.

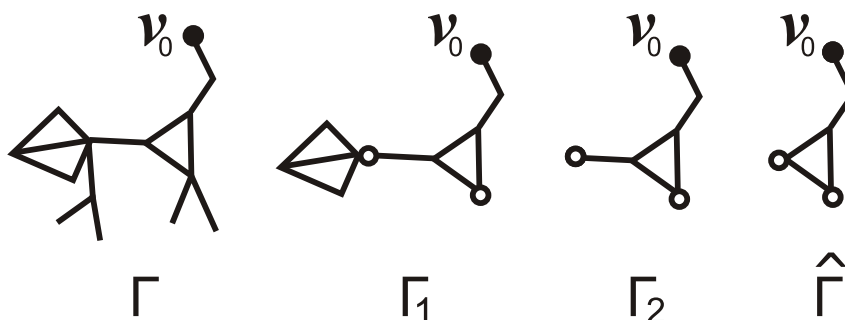


Рис. 3. Индуктивный шаг

Теперь заметим, что для нового графа все рассуждения приведенные выше могут быть повторены. Нужно только заметить, что граничные гнезда графа $\hat{\Gamma}$ заведомо имеют неразбивающие дефектные вершины (на рисунке они изображены пустыми кружками), а ветвей, не содержащих v_0 нет. В силу замечания к предыдущей теореме «разрушение» такого гнезда $\hat{\chi}_i$ приводит к сокращению набора линейно независимых функций на $\nu(\hat{\chi}_i)$ единиц. Поэтому в конечном итоге мы придем к набору линейно независимых функций в количестве $d - (d_1(\Gamma) - 1) - (\nu(\chi_1) + 1) - \dots - (\nu(\chi_{\mu(\Gamma)} + 1) - \nu(\hat{\chi}_1) - \dots - \nu(\hat{\chi}_l))$ (l – количество внутренних гнезд), отличных от нуля только на ветви, содержащей v_0 . Но на этой ветви только одна вершина (это v_0) может не быть дефектной, а поэтому и на этой ветви все функции, полученные на последнем шаге, обращаются в нуль. Следовательно последняя сумма неположительна. Но поскольку $\nu(\chi_1) + \dots + \nu(\chi_{\mu(\Gamma)} + \nu(\hat{\chi}_1) + \dots + \nu(\hat{\chi}_l) = \nu(\Gamma)$, то получаем, наконец, $d = \dim F_0 \leq \mu(\Gamma) + \nu(\Gamma) + d_1(\Gamma) - 1$. ■

3. Приложение к задаче Штурма - Лиувилля

В множестве функций $F = C_e^1(\Gamma)$ определим подмножество $C_e^2(\Gamma)$, состоящее из функций, имеющих на каждом ребре непрерывную вторую производную. Через $F_0 \subset C_e^2(\Gamma) \subset F$ обозначим множество решений следующей задачи:

$$[(pu)'] - (q - \lambda\rho)u(X) = 0 \quad (X \in e \subset \Gamma), \quad (3)$$

$$l_i^v(u)(v) = 0 \quad (i = 1, \dots, \deg v) \quad v \in V_0, \quad (4)$$



$$l_i^v(u) = 0 \quad (i = 1, 2) \quad v \in \partial\Gamma_0. \quad (5)$$

Через $\partial\Gamma_0$ здесь обозначено множество, называемое далее множеством граничных вершин, состоящее из вершин единичной кратности. Так принято в большинстве работ по уравнениям на графах. Через V_0 обозначим множество остальных – называемых далее внутренними – вершин графа.

Очевидно, что F_0 является линейным подпространством пространства F , поскольку оно определяется линейными условиями.

Здесь коэффициент $p \in C_e^1(\Gamma)$ предполагается неотрицательной функцией, строго положительной на каждом ребре. Коэффициенты q, ρ предполагаются равномерно непрерывными на каждом ребре графа, причем, коэффициент ρ предполагается неотрицательным на $\Gamma_0 = \Gamma \setminus \partial\Gamma_0$ и строго положительным на каждом ребре графа. Строгая положительность на ребре или на графе означает здесь наличие оценки вида $u \geq \epsilon > 0$. Через l_i^v обозначены некоторые линейные функционалы на $C_e^1(\Gamma)$. Мы предполагаем, что функционал, «привязанный» к вершине v , зависит лишь от величин $u(v), u_e(v), u'_e(v)$ ($e \in E(v)$).

Условия 5 принято называть краевыми, а условия 4 – условиями трансмиссии.

В качестве очевидного следствия теоремы 3 получаем следующее утверждение.

Теорема 4. Пусть множество решений краевой задачи (3)-(5) обладает свойствами *a), b)*. Тогда геометрические кратности собственных значений этой задачи не превосходят $d_1(\Gamma) + \nu(\Gamma) + \mu(\Gamma) - 1$.

Приведем конкретный пример, имеющий целью показать, с одной стороны, что проверка условий *a), b)* не представляет большого труда, а с другой – проиллюстрировать общность получаемых результатов.

Пусть, например, на границе требуется непрерывное выполнение условия Дирихле (т.е. $u(v) = u_e(v) = 0$). Очевидно тогда, что равенство координаты $x_2 = u'(v) = 0$ влечет равенство нулю всех остальных (поскольку равенство их нулю включено в определение F_0). Иными словами координата x_2 является базисной.

Пусть далее, во внутренних вершинах условия трансмиссии имеют вид:

$$(-1)^{\sigma(i)} u'_i(v) + \sum_{j \neq i} c_{ij} (u_j(v) - u_i(v)) = 0 \quad (i = 1, \dots, \text{deg } v), \quad (6)$$

где $u_i(v)$ обозначает $u_{e_i}(v)$ и аналогично $u'_i(v)$ означает $u'_{e_i}(v)$; для простоты предполагается, что к вершине v примыкают подряд занумерованные ребра e_1, \dots, e_m . Число $\sigma(i)$ равно нулю, если ребро ориентировано (напомним, что ориентация фиксировалась при определении производной на ребре), и $\sigma(i) = 1$ в противном случае.

Подобная задача возникает при моделировании малых поперечных деформаций струнной сетки, связанной в виде графа. В местах стыковки (внутренних вершинах графа) не предполагается, что каждая струна является продолжением другой. Вместо этого, считается, что некоторые струны попарно соединены пружинками, которые могут скользить по вертикальной проволоке без трения. Из физической постановки следует, что матрица $[c_{ij}]$ должна быть симметрична, а число c_{ij} – жесткость пружины, соединяющей i -ю и j -ю струны – должно быть неотрицательно.



Значение функции u в вершине v в данной задаче несущественно, но мы положим его равным нулю с тем, чтобы выполнялось условие б). То, что это условие при данном соглашении выполняется, легко проверяется. В самом деле, в качестве базисного набора координат можно взять, например, $x_1, x_3, \dots, x_{2m-3}, x_{2m}$. Действительно, из m -го уравнения тогда получим $x_{2m-1} = u_m(v) = 0$. Но тогда из остальных уравнений немедленно следует $x_2 = \dots, x_{2m-2} = 0$. Последняя координата x_{2m+1} равна нулю, потому что мы ее так определили. Дополняемость любой пары x_{2k-1}, x_{2k} проверяется столь же просто.

Условие а) следует из того, что если $u_i(v) = u'_i(v) = 0$, то в силу того, что u является решением обыкновенного линейного дифференциального уравнения (3) на ребре e_i , то $u_i \equiv 0$ на этом ребре.

Как видим, симметричность матрицы $[c_{ij}]$ и неотрицательность оказались принципиальными.

Во всех известных нам физически осмысленных типах стыковок струн во внутренних вершинах, условие а), б) оказались выполненными для решений соответствующих краевых задач.

Вместо условий Дирихле на границе тоже можно рассматривать другие типы условий.

Литература

1. Покорный Ю.В., Пенкин О.М., Прядиев В.Л. и др. Дифференциальные уравнения на геометрических графах / М.:Физматлит, 2004. – 272 с.
2. Kuchment P. Quantum graphs I. Some basic structures // Waves in Random media. – 2004. – 14. – P.107-128.
3. Kuchment P., Quantum graphs II. Some spectral properties of quantum and combinatorial graphs // J.Phys. A. – 2005. – 38. – P.4887-4900.
4. Пенкин О.М., Покорный Ю.В., Провоторова Е.Н. Об одной векторной краевой задаче // Краевые задачи / Пермь, 1983. – С.64-70.
5. Татт У. Теория графов / М.:Мир, 1988 – 424 с.
6. Завгородний М.Г., Пенкин О.М., Об оценках кратностей собственных значений / Современные методы в теории краевых задач, 1992 / Тез. докладов, Воронеж: ВГУ, 1992. – С.46.
7. Lubary J.A. On the geometric and algebraic multiplicities for eigenvalue problems on graphs / Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics / Marcel Dekker, 2001, 219. – P.135-146.
8. Пенкин О.М., Покорный Ю.В., О некоторых качественных свойствах уравнений на одномерном клеточном комплексе // Матем. заметки. – 1996. – 64;5. – С.777-780.
9. Покорный Ю.В., Пенкин О.М. Теоремы Штурма для уравнений на графах // ДАН СССР. – 1989. – 309;6. – С.1306-1308.



ABOUT EIGENVALUE MULTIPLICITY
IN STURM-LIOUVILLE'S PROBLEM ON GRAPHS

*Adel T. Diab, **O.M. Penkin, **V.L. Pryadiev

*Ain Shams University,
Cairo, Egypt, e-mail: Adeldiab80@hotmail.com,

**Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: penkin@bsu.edu.ru, pryadiev@bsu.edu.ru

Abstract. Some special linear spaces on graphs are defined and estimates of their dimensions are proved. Moreover, some new results about geometric multiplicity of eigenvalues connected with Sturm-Liouville's problem on the graph are obtained.

Key words: Sturm-Liouville's problem, spectrum, graph.



УДК 517.927

О ПРЕОБРАЗОВАНИИ МЕРЫ В ВАРИАЦИОННОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ СТИЛТЬЕСОВОЙ СТРУНЫ

Н.Н. Рябцева, А.С. Харченко

Белгородский университет кооперации, экономики и права,
ул. Садовая, 116-а, Белгород, 308000, Россия, e-mail: riabceva-nn@yandex.ru,
rkharchenko-as@yandex.ru

Аннотация. Исследуется вариационная задача стилтьесовой струны, в которой, ввиду невозможности пользования методов теории распределений, применяется преобразование меры. Это преобразование существенно при построении аналога условия Якоби и анализе вариационных условий второго порядка.

Ключевые слова: дифференцирование по мере, интегральный функционал, уравнение Эйлера, вторая вариация, уравнение Якоби, теорема Якоби.

1. Будем рассматривать поперечные деформации в одной плоскости невесомой упругой нити с жестко закрепленными концами, натянутой вдоль отрезка $[0, l]$ с натяжением $p(x) > 0$. Рассмотрим ее функционал энергии, зависящий от отклонения $u(x)$ точки x от положения равновесия под влиянием внешней силы, общую величину которой слева от точки x обозначим через $F(x)$. Так как на элемент $[x, x + dx]$ струны действует сила $dF(x) = F(x + dx) - F(x)$, совершающая работу $u dF$ при смещении элемента $[x, x + dx]$ на $u(x)$, то для изменения энергии в результате перемещения, вызванного действием силы F , равно $\int_0^l u dF$. Поэтому функционал имеет вид

$$\Phi(u) = \int_0^l \frac{pu'^2}{2} dx + \int_0^l \frac{u^2}{2} dQ - \int_0^l u dF, \quad (1)$$

где $Q(x)$ определяет распределение упругой реакции внешней среды.

Функционал (1) представляет собой частный случай функционала

$$\Phi(u) = \int_0^l \frac{pu'^2}{2} dx + \int_0^l R u u' dx + \int_0^l \frac{u^2}{2} dS + \int_0^l u dM \quad (2)$$

при $R = 0$, $S = Q$, $M = -F$.

Всюду далее p , R , S и M – функции ограниченной вариации на $[0, l]$, причем $\inf_{[0, l]} p > 0$.

В этом случае функционал (2) определен на множестве E абсолютно непрерывных функций, удовлетворяющих условиям $u(0) = A$, $u(l) = B$, и производные которых имеют на $[0, l]$ ограниченную вариацию. Интегралы понимаются по Стильтесу.



2. Согласно принципу Лагранжа-Гамильтона, реальная форма струны $u_0(x)$ должна являться минималью функционала (2). На $u_0(x)$ первая вариация должна быть нулевой, что приводит к равенству

$$\delta\Phi(u_0)h = \int_0^l pu'_0 dh - \int_0^l u_0h dR + \int_0^l u_0h dS + \int_0^l h dM = 0, \quad (3)$$

где h – произвольные функции из $E_0 = \{h \in E \mid h(0) = 0 = h(l)\}$. Равенство (3) нам позволит получить аналог уравнения Эйлера. Методами, аналогичными [1, 2], на основе подхода, изложенного в [3, гл. 7] и [4], доказывается следующая теорема о преобразовании меры.

Теорема 1. Пусть λ и μ – меры Лебега-Стилтьеса (т. е. λ и μ порождены функциями ограниченной вариации), причем μ является абсолютно непрерывной, и пусть функции f и $\frac{d\mu}{d\lambda}$ непрерывны на $[0, l]$, где $\frac{d\mu}{d\lambda}$ означает производную Радона-Никодима. Тогда для любого μ -измеримого множества A

$$\int_A f d\mu = \int_A f \frac{d\mu}{d\lambda} d\lambda.$$

Прежде чем воспользоваться этим результатом для интеграла с переменным верхним пределом $\int_0^x \varphi d\mu$, где функция $\varphi(x)$ непрерывна на отрезке $[0, l]$, а порождающая меру μ функция $\mu(x)$ имеет ограниченную вариацию на $[0, l]$ и непрерывна на концах, дадим необходимые пояснения относительно множества, пробегаемого переменной x . В самом деле, если ξ – точка разрыва функции $\mu(x)$, то интеграл $\int_0^\xi \varphi d\mu$ не имеет смысла. Имеется ввиду следующая конструкция. Обозначим через $S(\mu)$ множество точек разрыва функции $\mu(x)$. Каждую точку $\xi \in S(\mu)$ заменим парой $\{\xi - 0; \xi + 0\}$ и обозначим полученное множество $[\overline{0, l}]_\mu$. Тогда для любой точки $x \in [\overline{0, l}]_\mu$ интеграл $\int_0^x \varphi d\mu$ однозначно определен. Причем, если ξ – точка разрыва $\mu(x)$, то $\int_0^{\xi-0} \varphi d\mu$ совпадает с интегралом Лебега-Стилтьеса по полуинтервалу $\int_{[0, \xi)} \varphi d\mu$, а $\int_0^{\xi+0} \varphi d\mu = \int_{[0, \xi]} \varphi d\mu$. Теперь уже стандартными рассуждениями устанавливается следующая теорема.

Теорема 2. Пусть $\omega(x) = \int_0^x \varphi d\mu + const$, где $x \in [\overline{0, l}]_\mu$, функция $\varphi(x)$ непрерывна на отрезке $[0, l]$, а $\mu(x)$ имеет ограниченную вариацию на $[0, l]$ и непрерывна в точках $x = 0$ и $x = l$. Пусть функция $f(x)$ непрерывна на $[0, l]$. Тогда для всех $x \in [\overline{0, l}]_\mu$ справедливо равенство

$$\int_0^x f d\omega = \int_0^x f\varphi d\mu.$$



3. Опираясь на теорему 2, мы можем выписать для функционала (2) аналог уравнения Эйлера. Обозначим

$$g(x) = \int_0^x u_0 dR, \quad \varphi(x) = \int_0^x u_0 dS.$$

Согласно теореме 2 будем иметь

$$\int_0^l h dg = \int_0^l hu_0 dR, \quad \int_0^l h d\varphi = \int_0^l hu_0 dS.$$

Проинтегрировав второе, третье и четвертое слагаемые в (3) по частям, перепишем равенство (3) в виде

$$\int_0^l \left(p(x)u'_0(x) + \int_0^x u dR - \int_0^x u dS - M(x) \right) dh(x) = 0.$$

Из произвольности выбора функции $h \in E_0$ следует, что реальная форма струны $u_0(x)$ должна удовлетворять уравнению

$$p(x)u'(x) + \int_0^x u dR - \int_0^x u dS - M(x) = p(0)u'(0) - M(0). \quad (4)$$

Полученное уравнение (4) является уравнением Эйлера. Приведем необходимые пояснения относительно этого уравнения. Обозначим через $\Delta z(x)$ скачок функции z в точке x , т.е. $\Delta z(x) = z(x+0) - z(x-0)$. Пусть S_Z – множество всех точек, в которых хотя бы одна из функций $p(x)$, $R(x)$, $S(x)$ и $M(x)$ имеет ненулевой простой скачок, то есть имеет несовпадающие левый и правый пределы. Заметим, что производная $u'(x)$ существует во всех $x \notin S_Z$. Если же $\xi \in S_Z$, то существуют левая и правая производные $u'_-(\xi)$ и $u'_+(\xi)$. Выбросив S_Z из $[0; l]$, заменим каждую точку $\xi \in S_Z$ парой символов $\{\xi - 0, \xi + 0\}$ и обозначим полученное множество $[0; l]_Z$. Тогда уравнение (4) на множестве $[0; l]_Z$ однозначно определено. Из (4) для всякой $\xi \in S_Z$ вытекает справедливость равенства

$$p(\xi + 0)u'(\xi + 0) - p(\xi - 0)u'(\xi - 0) + u(\xi)\Delta R(\xi) - u(\xi)\Delta S(\xi) - \Delta M(\xi) = 0,$$

где $p(\xi + 0) = \lim_{x \rightarrow \xi+0} p(x)$, $p(\xi - 0) = \lim_{x \rightarrow \xi-0} p(x)$, $u'(\xi + 0) = u'_+(\xi)$, $u'(\xi - 0) = u'_-(\xi)$.

4. Вторая вариация функционала (2) является квадратичным функционалом

$$I(h) = \int_0^l ph^2 dx - \int_0^l h^2 dR + \int_0^l h^2 dS, \quad (5)$$

где h – произвольные функции из E_0 . Заметим: если функция $Q(x) = S(x) - R(x)$ монотонно не убывает на $[0, l]$, то функционал $I(h)$ неотрицателен для всех $h \in E_0$.



Обратимся к общему случаю, когда $Q(x)$ – произвольная функция ограниченной вариации. Выпишем условие, достаточное для неотрицательности (5). Перепишем функционал (5) следующим образом:

$$\begin{aligned} & \int_0^l (ph'^2 + 2phh'z + pz^2h^2 - 2phh'z - pz^2h^2) dx + \int_0^l h^2 dQ = \\ & = \int_0^l p(h' + zh)^2 dx - \int_0^l (2phh'z + pz^2h^2) dx + \int_0^l h^2 dQ. \end{aligned}$$

где $z(x)$ – некоторая допустимая функция, определяемая ниже. Для неотрицательности $I(h)$ достаточно подобрать такую функцию ограниченной вариации $z(x)$, чтобы для всех $h \in E_0$

$$\int_0^l h^2 dQ - \int_0^l (2phh'z + pz^2h^2) dx = 0. \quad (6)$$

Учитывая, что $d(h^2) = 2hh' dx$, и интегрируя по частям, перепишем равенство (6) в виде

$$\int_0^l h^2(x) d \left(Q(x) + p(x)z(x) - \int_0^x p(s)z^2(s) ds \right) = 0.$$

Таким образом, для неотрицательности $I(h)$ достаточно, чтобы

$$Q(x) + p(x)z(x) - \int_0^x p(s)z^2(s) ds = \text{const}. \quad (7)$$

Выпишем условие, достаточное для существования функции $z(x)$, удовлетворяющей (7). Для этого будем искать $z(x)$ в виде $z(x) = -\frac{\omega'(x)}{\omega(x)}$, где $\omega(x)$ – строго положительная и абсолютно непрерывная на $[0, l]$ функция, такая, что $\omega'(x)$ является функцией ограниченной вариации. Подставив это представление в (7), получим равенство

$$Q(x) - \int_0^x \frac{1}{\omega(s)} d(p(s)\omega'(s)) = \text{const}. \quad (8)$$

Применим к (8) теорему 2, взяв в качестве функции $f(x)$ (из теоремы 2) функцию $\omega(x)$. Получим, что (8) эквивалентно равенству

$$\int_0^x \omega dQ = \int_0^x \frac{1}{\omega} \cdot \omega d(p\omega'),$$

или

$$p(x)\omega'(x) - \int_0^x \omega dQ = \text{const}.$$

Следовательно, для неотрицательности $I(h)$ достаточно, чтобы уравнение

$$p(x)u'(x) - \int_0^x u dQ = \text{const} \quad (9)$$



имело решение без нулей в классе абсолютно непрерывных функций, производные которых являются функциями ограниченной вариации.

Итак, нами доказана следующая теорема.

Теорема 3. Пусть уравнение (9) имеет решение без нулей на $[0, l]$. Тогда для любого $h \in E_0$ выполнено $I(h) \geq 0$.

Уравнение (9) является аналогом уравнения Якоби.

Будем называть уравнение (9) неосциллирующим на $[0, l]$, если всякое его нетривиальное решение имеет на $[0, l]$ не более одного нуля. Заметим, что для отсутствия осцилляций (9), достаточно, чтобы функция $Q(x)$ не убывала.

Далее нам потребуется следующий аналог теоремы Штурма о перемежаемости нулей, полученный в [3, гл. 7].

Теорема 4. Для любых двух линейно независимых решений φ_1, φ_2 уравнения (9) их нули в $[0, l]$ перемежаются, то есть между двумя соседними нулями φ_1 расположен по крайней мере один нуль φ_2 , и наоборот.

Теорема 5. Следующие свойства эквивалентны:

- 1) уравнение (9) имеет решение без нулей на $[0, l]$;
- 2) решение $u(x)$ уравнения (9) при условиях $u(0) = 0, u'(0) = 1$ не имеет других нулей;
- 3) уравнение (9) не осциллирует на $[0, l]$.

□ Докажем цепочку следствий $1) \Rightarrow 2) \Rightarrow 3) \Rightarrow 1)$.

$1) \Rightarrow 2)$. Пусть $\varphi(x)$ – решение уравнения (9) без нулей на $[0, l]$. Если решение $u(x)$ из 2) обращается в нуль в точке $\eta \in (0, l]$, то, по теореме 4, $\varphi(x)$ обязано иметь на $(0, \eta)$ нуль, что невозможно.

$2) \Rightarrow 3)$. Если существует решение $v(x)$, которое в точках η_1 и η_2 обращается в нуль, то, по теореме 4, функция $u(x)$ из 2) обязана иметь нуль на $(\eta_1, \eta_2]$, что невозможно.

$3) \Rightarrow 1)$. Пусть $u_1(x)$ – решение уравнения (9), удовлетворяющее условиям $u(0) = 0, u'(0) = 1$, а $u_2(x)$ – решение уравнения (9), удовлетворяющее условиям $u(l) = 0, u'(l) = -1$. Тогда $u(x) = u_1(x) + u_2(x)$ – решение уравнения (9) без нулей на $[0, l]$ (строго положительное). ■

Для функционала (5) справедлив следующий аналог усиленной теоремы Якоби.

Теорема 6. Пусть уравнение (9) не осциллирует на $[0, l]$. Тогда существует число $\alpha_0 > 0$ такое, что для всех $h \in E_0$

$$I(h) \geq \alpha_0 \cdot \int_0^l h^2 dx.$$

□ Достаточно рассмотреть функционал

$$I_\alpha(h) = \int_0^l (p - \alpha)h^2 dx + \int_0^l h^2 dQ$$

и заметить, что при достаточно малых α для $I_\alpha(h)$ выполнены те же условия, что и для $I(h)$. Единственная тонкость состоит в необходимости доказать корректность задачи Коши для уравнения (9). Но эта корректность установлена в [3, гл. 7]. ■



Аналогом классической теоремы Якоби оказывается следующая теорема.

Теорема 7. Пусть u_0 – допустимое решение уравнения (4), а уравнение (9) не осциллирует. Тогда u_0 дает минимум функционала (2) на множестве E_0 .

□ Пусть u_0 удовлетворяет уравнению (4) и условиям $u(0) = A$, $u(l) = B$. Достаточно показать, что $\Phi(u_0 + h) - \Phi(u_0) \geq 0$ для любой $h \in E_0$.

После несложных преобразований получим:

$$\begin{aligned} \Phi(u_0 + h) - \Phi(u_0) &= \int_0^l p u_0' dh - \int_0^l u_0 h dR + \int_0^l u_0 h dS - \\ &- \int_0^l M dh + \frac{1}{2} \left(\int_0^l p h'^2 dx + \int_0^l h^2 dS - \int_0^l h^2 dR \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Пусть

$$g(x) = \int_0^x u_0 dR, \quad \psi(x) = \int_0^x u_0 dS.$$

Тогда

$$\int_0^l u_0 h dR = \int_0^l h dg = (hg) \Big|_0^l - \int_0^l g dh, \quad (11)$$

$$\int_0^l u_0 h dS = \int_0^l h d\psi = (h\psi) \Big|_0^l - \int_0^l \psi dh. \quad (12)$$

Внеинтегральные члены в (11) и (12) равны нулю, так как $h \in E_0$. В результате (10) примет вид

$$\begin{aligned} \Phi(u_0 + h) - \Phi(u_0) &= \int_0^l \left(p u_0' + \int_0^x u_0 dR - \int_0^x u_0 dS - M \right) dh + \\ &+ \frac{1}{2} \left(\int_0^l p h'^2 dx + \int_0^l h^2 dS - \int_0^l h^2 dR \right). \end{aligned}$$

Выражение, стоящее под знаком первого интеграла, равно нулю в силу того, что u_0 удовлетворяет уравнению (4). Второе слагаемое неотрицательно в силу теоремы 3. ■

Литература

1. Данфорд Н., Шварц Дж.Т. Линейные операторы. I. Общая теория / М.: ИЛ, 1962. – 896 с.
2. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. – М.: Наука, 1976. – 544 с.
3. Покорный Ю.В., Пенкин О.М., Прядиев В.Л., Боровских А.В., Лазарев К.П., Шабров С.А. Дифференциальные уравнения на геометрических графах / М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 272 с.
4. Покорный Ю.В. Интеграл Стильтьеса и производные по мере в обыкновенных дифференциальных уравнениях // Докл. РАН. – 1999. – 364;2. – С.167–169.



ON MEASURE TRANSFORMATION IN VARIATIONAL PROBLEM
FOR STIELTJES' STRING

N.N. Riabceva, A.S. Kharchenko

Belgorod university of cooperation, economy and the right,
Sadovaya st., 116-a, Belgorod, 308000, Russia, e-mail: riabceva-nn@yandex.ru,
rkharchenko-as@yandex.ru

Abstract. The variation problem of Stieltjes' string type is studied. Due to using impossibility of distribution theory methods the measure transformation is applied. This transformation is essential when the analog of Jacobi's condition is constructed for analysis of variation conditions of second order.

Key words: differentiation on measure, integral functional, Euler's equation, second variation, Jacobi's equation, Jacobi's theorem.



УДК 531.1

ТОПОЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОДНОМЕРНЫХ СЕПАРАБЕЛЬНЫХ ЗАМКНУТЫХ МНОЖЕСТВ

Ю.П. Вирченко, О.Л. Шпилинская

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru
Институт монокристаллов НАНУ,
пр. Ленина, 60, Харьков, Украина, e-mail: spilolga@isc.kharkov.ua

Аннотация. Доказывается теорема об общем устройстве распределения вероятностей случайных замкнутых сепарабельных множеств, пространством погружения которых является отрезок действительной оси.

Ключевые слова: случайные замкнутые множества, множества сепарабельности, сепарабельные множества.

В теории случайных множеств особое место, в силу своей прикладной значимости, занимают замкнутые сепарабельные множества (см. [1]). Их определение состоит в том, что, для фиксированного топологического пространства T погружения этих множеств X , они замкнуты с вероятностью единица, и в T существует счетное всюду плотное множество $R \subset T$ точек такое, для которого с той же вероятностью выполняется условие

$$\text{cl}(X \cap R) = X, \quad (1)$$

$\text{cl}(\cdot)$ – операция замыкания. При построении конкретных моделей замкнутых сепарабельных множеств, то есть при явном определении соответствующего распределения вероятностей очень важна информация о том, как устроены типичные случайные реализации. В настоящей работе мы отвечаем на этот вопрос в том случае, когда пространством погружения T является отрезок действительной прямой. Ясно, что при этом достаточно ограничиться случаем, когда в качестве такого отрезка выбирается отрезок $[0, 1]$. При решении указанной чисто топологической задачи мы используем более сильное определение сепарабельности случайного множества, которое аналогично понятию сепарабельного случайного процесса (см. [2]). А именно, мы требуем чтобы условие (1) удовлетворялось для любого счетного плотного на $[0, 1]$ множества R . Оказывается, что множества X , удовлетворяющие такому жесткому ограничению, устроены очень просто с топологической точки зрения – их случайные реализации представимы с вероятностью единица однозначным образом в виде

$$X = \text{cl}\left(\bigcup_j (a_j, b_j)\right) \quad (2)$$

на основе, вообще говоря, счетного случайного множества интервалов. Так как формулировки условия (1) и результата (2) таковы, что они справедливы для случайных



реализаций с вероятностью единица, что в дальнейшем можно элиминировать вероятностную природу задачи – давать формулировки условия и результата, а также проводить все рассуждения в чисто топологической форме.

Доказательство основного утверждения основано на нескольких простых общих топологических фактах, которые мы сформулируем в виде отдельных лемм.

Лемма 1. Пусть U – открытое множество в топологическом пространстве T и D – плотное в T множество. Тогда

$$\text{cl}(D \cap U) = \text{cl}(U).$$

□ Так как $D \cap U \subset U$ и, следовательно, такое же включение имеет место для замыканий $\text{cl}(D \cap U) \subset \text{cl}(U)$, то нужно доказать выполнимость обратного включения.

Пусть $x \in \text{cl}(U)$. Так как U – открытое множество, то для любой окрестности V точки x выполняется $V \cap U \neq \emptyset$. Так как $V \cap U$ – открытое множество и D плотно в T , то $D \cap (V \cap U) \neq \emptyset$. Следовательно, для любой окрестности V точки x имеет место $V \cap (D \cap U) \neq \emptyset$ и, следовательно, $x \in \text{cl}(D \cap U)$. ■

Следствие. Пусть в условиях леммы для множества $X \subset T$ имеют место включения $U \subset X \subset \text{cl}(U)$. Тогда

$$\text{cl}(D \cap X) = \text{cl}(X).$$

□ Справедливость этого равенства следует из цепочки включений

$$U \cap D \subset X \cap D \subset X \subset \text{cl}(U)$$

применением операции замыкания

$$\text{cl}(U \cap D) \subset \text{cl}(X \cap D) \subset \text{cl}(X) \subset \text{cl}(\text{cl}(U)) = \text{cl}(U)$$

с использованием утверждения леммы. ■

Определение. Открытое множество U из топологического пространства T назовем исчерпывающим T , если $\text{cl}(U) = T$.

Лемма 2. Пусть X – замкнутое множество в топологическом пространстве T не имеет внутренних точек. Тогда $U = \mathbb{C}X$ исчерпывает T .

□ Так как $X \cup \mathbb{C}X = T$, то достаточно доказать, что любая точка $x \in X$ содержится в $\text{cl}(\mathbb{C}X)$. Допустим, что x не содержится в $\text{cl}(\mathbb{C}X)$. Тогда x содержится в открытом множестве $\mathbb{C}\text{cl}(\mathbb{C}X)$. Но это множество содержится в X , в чем убеждаемся применяя операцию дополнения к обеим частям включения $\mathbb{C}X \subset \text{cl}(\mathbb{C}X)$, $\mathbb{C}\text{cl}(\mathbb{C}X) \subset X$. Отсюда следует, что x – внутренняя точка X , что противоречит условию леммы. ■

Обратное, вообще говоря, неверно. Однако, такое утверждение справедливо, если топология порождается метрикой.

Лемма 3. Пусть T – метрическое пространство с расстоянием $\rho(\cdot, \cdot)$ и U исчерпывает T . Тогда $T \setminus U$ не имеет внутренних точек.



□ Наличие внутренней точки $x \in T \setminus U$ означает, что для достаточно малых $\varepsilon > 0$ для всех точек y , для которых имеет место $\rho(x, y) < \varepsilon$, выполняется $y \in T \setminus U$. А это противоречит наличию сходящейся последовательности $\langle y_n \in U; n \in \mathbb{N} \rangle$, $\rho(x, y_n) \rightarrow 0$. ■

Следствие. Если U исчерпывает метрическое пространство T и D – плотное в T множество, то множество $U \cap D$ плотно в T .

□ Пусть x – произвольная точка из U и V – ее окрестность. Рассмотрим открытое множество $U \cap V$. Оно не пусто в силу утверждения леммы. Так как D плотно в T , то существует точка $z \in D$, принадлежащая $V \cap U$. Тогда $z \in D \cap U$ и одновременно $z \in V$. Ввиду произвольности открытого множества заключаем, что $D \cap U$ – плотное множество в T . ■

Докажем теперь анонсированный выше результат.

Теорема. Для того чтобы множество $X \subset [0, 1]$ удовлетворяло равенству (1) для любого счетного плотного в $[0, 1]$ множества R необходимо и достаточно чтобы оно было представимо в виде (2). Причем существует единственное множество интервалов $\{\{a_i, b_i\}; i \in \mathbb{N}\}$, на основе которого строится представление (1).

Достаточность.

□ Обозначим

$$U = \bigcup_j (a_j, b_j).$$

Это множество открыто в $T = [0, 1]$. Воспользовавшись следствием Леммы 1, где в качестве D нужно положить множество R получим $\text{cl}(R \cap X) = \text{cl}(X)$. Но так как X , определяемое равенством (2), замкнуто, то имеет место (1). ■

Необходимость.

□ Пусть имеет место (1) для любого счетного плотного в $[0, 1]$ множества точек. Тогда $\mathbb{C}X$ открыто.

Рассмотрим два случая: $\text{Int}[X] = \emptyset$ и $\text{Int}[X] \neq \emptyset$.

Пусть имеет место $\text{Int}[X] = \emptyset$. Если множество $Y = \mathbb{C}\text{cl}(\mathbb{C}X)$ не пусто, то оно не имеет внутренних точек. Если бы в этом множестве существовала внутренняя точка z , то при достаточно малом $\varepsilon > 0$ выполнялось $\mathbb{C}\text{cl}(\mathbb{C}X) \supset \Delta_\varepsilon(z) \equiv (z - \varepsilon, z + \varepsilon)$. Отсюда следует $\text{cl}(\mathbb{C}X) \subset \mathbb{C}\Delta_\varepsilon(z)$, $\mathbb{C}X \subset \mathbb{C}\Delta_\varepsilon(z)$, $X \supset \Delta_\varepsilon(z)$, что противоречит пустоте $\text{Int}[X]$.

С другой стороны, согласно определению, множество Y открыто. В результате, получаем противоречие. Это означает, что $Y = \emptyset$, то есть $\text{cl}(\mathbb{C}X) = [0, 1]$, где множество $\mathbb{C}X$ открыто. Это означает, что множество $\mathbb{C}X$ исчерпывает $[0, 1]$.

Согласно следствию Леммы 3, можно сузить наперед заданное счетное, плотное в $[0, 1]$ множество R на $\mathbb{C}X$ и при этом такое сужение $R' = R \cap \mathbb{C}X$ останется плотным в $[0, 1]$. Для этого нужно положить в утверждении леммы $D = R$. Тогда $R' \cap X = \emptyset$, а это противоречит условию $\text{cl}(R' \cap X) = X$. Таким образом, в рассматриваемом случае $\text{Int}[X] = \emptyset$, удовлетворить условию (1) невозможно.

Пусть имеет место $\text{Int}[X] \neq \emptyset$. Открытое множество $\text{Int}[X]$ представимо в виде дизъюнктивного не более чем счетного дизъюнктивного объединения

$$\text{Int}[X] = \bigcup_j (a_j, b_j) \equiv U.$$



Причем такое представление единственно. Тот факт, что в нем не более чем счетного множество компонент следует из неравенства $\sum_j (b_j - a_j) < 1$.

Положим

$$Z = X \setminus \text{cl}(U).$$

Пусть $z \in Z$. Если при достаточно малом $\varepsilon > 0$ выполняется $\Delta_\varepsilon(z) \subset Z$, то $\Delta_\varepsilon(z) \subset X$ и, следовательно, $\Delta_\varepsilon(z) \subset \text{Int}[X] \subset \text{cl}(\text{Int}[X])$. Но, в этом случае, $\Delta_\varepsilon(z) \cap Z = \emptyset$. Полученное противоречие указывает на то, что множество Z не имеет внутренних точек, и поэтому $\text{Int}[\mathbb{C}Z] \neq \emptyset$.

Рассмотрим $\mathbb{C}\text{Int}[\mathbb{C}Z]$. Если для достаточно малого $\varepsilon > 0$ имеет место $\Delta_\varepsilon(z) \subset \mathbb{C}\text{Int}[\mathbb{C}Z]$, то есть $\Delta_\varepsilon(z) \cap \text{Int}[\mathbb{C}Z] = \emptyset$ для некоторой точки z . Тогда $\Delta_\varepsilon(z) \cap \mathbb{C}Z = \emptyset$ и, следовательно, $\Delta_\varepsilon(z) \subset Z$, то есть точка z внутренняя для Z , что по доказанному выше не так. Следовательно, предположение $\Delta_\varepsilon(z) \subset \mathbb{C}\text{Int}[\mathbb{C}Z]$ неверно. Это означает, что замкнутое множество $\mathbb{C}\text{Int}[\mathbb{C}Z]$ не имеет внутренних точек. Поэтому, согласно Лемме 2, множество $\text{Int}[\mathbb{C}Z]$ исчерпывает $[0, 1]$, $\text{cl}(\text{Int}[\mathbb{C}Z]) = [0, 1]$.

Согласно следствию Леммы 3, в множестве $\text{Int}[\mathbb{C}Z]$ имеется счетное, плотное в $[0, 1]$ множество точек $R'' = R \cap \text{Int}[\mathbb{C}Z]$, где R – рассматриваемое счетное, плотное в $[0, 1]$ множество. Тогда $R'' \subset \mathbb{C}Z$, и поэтому $R'' \cap Z = \emptyset$. Подставим в это равенство явное выражение множества Z ,

$$(R'' \cap X) \setminus (R'' \cap \text{cl}(\text{Int}[X])) = \emptyset.$$

Так как X замкнуто, то вычитаемое множество не шире чем $R'' \cap X$. Тогда отсюда следует

$$R'' \cap X = R'' \cap \text{cl}(\text{Int}[X]).$$

Применив к обеим частям этого равенства операцию замыкания и воспользовавшись (1), имеем

$$X = \text{cl}(R'' \cap X) = \text{cl}(R'' \cap \text{cl}(\text{Int}[X])).$$

В силу следствия Леммы 1, правая часть этого равенства принимает вид

$$\text{cl}(\text{cl}(\text{Int}[X])) = \text{cl}(\text{Int}[X]).$$

Отсюда следует, что

$$X = \text{cl}(\text{Int}[X]) = \text{cl}(U). \quad \blacksquare$$

Следствие. Из (2) следует, что замкнутое сепарабельное множество X не содержит изолированных точек.

Замечание. Так как $a_j, b_j \in \text{cl}(a_j, b_j)$, то из (2) получаются следующие, равноправные с (2) представления для замкнутого сепарабельного множества X ,

$$X = \text{cl}\left(\bigcup_j [a_j, b_j]\right), \quad X = \text{cl}\left(\bigcup_j [a_j, b_j)\right).$$



Литература

1. Matheron G. Random Sets and Integral Geometry / G.Matheron. – New York: John Wiley and Sons, 1975.
2. Булинский А.В., Ширяев А.Н. Теория случайных процессов / А.В. Булинский, А.Н. Ширяев. – М.: Физматлит, 2003.

TOPOLOGICAL DESCRIPTION OF ONE-DIMENSIONAL CLOSED SEPARABLE SETS

Yu.P. Virchenko, O.L. Shpilinskaya

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: virch@bsu.edu.ru
Single Crystal Institute of NASU,
Lenin Av., 60, Kharkov, Ukraine, e-mail: spilolga@isc.kharkov.ua

Abstract. The theorem concerning the general structure of probability distribution of random closed separable sets is proved when their embedding space is the segment of real axe.

Key words: random closed sets, separability sets, separable sets.



МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА,
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 539.12.01

ОБЩИЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ЛАГРАНЖИАНА
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО
РАСЩЕПЛЕНИЯ НЕЛОКАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ

Г.И. Канюк, Ю.А. Касаткин, И.К. Кириченко, О.Д. Пташный

Украинская инженеро-педагогическая академия,
ул. Университетская, 16, Харьков, 61003, Украина,
e-mail: YuKasatkin2007@yandex.ru, ikir238@rambler.ru

Аннотация. Дополнительное привлечение в рассмотрение свойства неотделимости понятий электрического заряда и массы для фундаментальных частиц, а также свойства индифферентности электромагнитных сил по отношению к структурообразующим взаимодействиям, позволяют сохранить в неизменном виде структуру группы калибровочных симметрий для нелокальных полей и обеспечить корректный выход за рамки локальной теории. Исследован структурный предел к локальному рассмотрению.

Ключевые слова: локальный лагранжиан, нелокальные взаимодействия, калибровочная инвариантность, функция Грина, импульсные распределения.

1. Введение. Локальная формулировка квантовой электродинамики не обеспечивает адекватных условий для корректного исследования структуры нелокальных полей материи в соответствии с требованиями релятивистской ковариантности и динамического сохранения калибровочной симметрии в течение всего времени взаимодействия. Существующий набор аксиоматических предложений квантовой электродинамики [1], ориентированный на использование методов производящего функционала, формализма S -матрицы и адиабатической гипотезы в отношении включения электромагнитного взаимодействия, а также применение методов стандартной теории возмущений испытывает непреодолимые трудности описания в рамках локального лагранжевого подхода процессов с участием нелокальных полей, особенно в тех случаях, когда в конечном состоянии выявляется их явная составная природа в виде регистрации различных наборов фрагментов.

Источник указанных трудностей связан с проявлением в процессах электромагнитного расщепления нелокальных полей дополнительного структурообразующего взаимодействия, которое в отличие от электромагнитного имеет ограниченную область действия и характеризуется большой интенсивностью. В настоящее время не представляется возможным «сконструировать» лагранжиан свободного нелокального поля с учетом его виртуальных составляющих фрагментов и неизвестным законом взаимодействия между ними, а затем локализовать в нем калибровочную симметрию для получения лагранжиана взаимодействия. Следовательно, использование «рецепта» квантовой



электродинамики по локализации калибровочной симметрии свободного лагранжиана нелокального поля, связанного с заменой в нем обычных производных на ковариантные производные невыполнимо.

Столь гармоничная последовательная схема описания взаимодействий в квантовой электродинамике становится неприменимой при попытке включения в её содержание нелокальных полей материи. На то существует ряд непреодолимых объективных причин, содержание которых сводится к необходимости адекватного описания целостной картины взаимодействия. При взаимодействии электромагнитного поля с локальным полем материи, частицы сохраняют свою индивидуальность до и после процесса взаимодействия, что изначально зафиксировано структурой локального лагранжиана. При взаимодействии с нелокальными полями материи проявляется явная составная природа частиц, поскольку в конечном состоянии регистрируются составляющие его фрагменты. Такую асимметрию между начальным и регистрируемым набором частиц в присутствии неизвестного сильного взаимодействия не удастся описать аксиоматическим набором положений квантовой электродинамики с применением лагранжевого формализма.

Формализм использования лагранжиана для системы взаимодействующих полей должен удовлетворять принципу асимптотической аддитивности. Согласно этому принципу взаимодействующие поля – заряженное материальное и электромагнитное, будучи разнесенными на достаточно большое расстояние, описываются в отдельности своими лагранжианами, которые отвечают их свободным состояниям. При включении дальнего электромагнитного поля процесс электромагнитного расщепления нелокального поля сопровождается дополнительным присутствием сильного взаимодействия, имеющего большую интенсивность и ограниченную область действия. Такое существенное изменение в системе взаимодействующих полей не позволяет удовлетворить принципу асимптотической аддитивности как следствие утраты информации о сильном взаимодействии при разведении взаимодействующих полей на значительное расстояние. Дополнительное препятствие вызвано различающимися наборами частиц в начальном и конечном состояниях. Применение адиабатической концепции квантовой электродинамики и использование традиционных методов теории возмущений не может откорректировать утраченную информацию о неизвестном взаимодействии, а, следовательно, вывести лагранжиан взаимодействия. Это приводит к неустранимому разрыву в исследованиях структуры локальных и нелокальных полей материи на основе использования единых методов построения квантовой электродинамики.

Актуальность решения этой глобальной проблемы связана с тем, что класс фундаментальных частиц ограничен набором лептонов и кварков, а многообразие адронного мира представлено большим количеством короткоживущих в свободном состоянии нелокальных полей материи. Неизвестная природа сильных взаимодействий отражает сложнейшую, нелинейную в математическом смысле, структурную иерархию строения материи от кварк-глюонных представлений на малых пространственно-временных масштабах до адронной асимптотики, синглетной по цветовым степеням свободы вне области конфайнмента, которая на привычном нуклон-мезонном языке описания при низких энергиях связана с ядерными силами. Непосредственное распространение ме-



тодов локальной квантовой электродинамики для исследования структуры нелокальных полей [2] связано с трудностью одновременного обеспечения калибровочной симметрии ковариантной амплитуды и учета в ней динамики вершин сильного взаимодействия. На основе выполнения требования калибровочной симметрии в работе [3] предложен метод введения калибровочных полей в массовый оператор эффективно нелокального лагранжиана на основе использования фазовой экспоненты (С. Bloch, 1950; S. Mandelstam [4], К. Wilson, 1974) для неабелевой калибровочной симметрии, что позволило учесть вклады ароматов кварков и голстоуновских бозонных полей. Одновременно, в работах [5-9], развивается эвристическое направление по совместному описанию процессов электромагнитного расщепления малонуклонных атомных ядер виртуальными и реальными фотонами. Обеспечивая точное сохранение электромагнитного адронного тока (в дополнение к уже сохраняющемуся лептонному), в амплитуде с виртуальным фотоном гарантируется конечный предел при стремлении квадрата переданного 4-импульса виртуального фотона к нулю, что позволило корректно исключить из рассмотрения нефизические вклады от скалярно и продольно поляризованных фотонов и перейти к матричному элементу фотопроцесса. В идейном плане по отношению к интерпретации понятия «нелокальности» развитый подход в [10-13] принципиально отличается от предложенного метода в [3].

Цель настоящей работы связана с обоснованием альтернативного построения квантовой электродинамики, обсуждения дополнительных требований, необходимых для обеспечения адекватного исследования структуры нелокальных сильносвязных полей материи в процессах электромагнитного расщепления, равно как и взаимодействий с локальными полями на основе использования единых принципов.

2. Вершины и амплитуды. Одна из возможностей построения теории нелокальных взаимодействий на основе уже существующей локальной теории изначально связана с выбором нелокальных конструкций, которые на определенном этапе рассмотрения допускают известный локальный структурный предел. В работах [10-13] показано, что согласование вида полевого оператора фундаментального поля материи со структурой пространственно-временного многообразия и присоединенного пространства с внутренней $U(1)$ -симметрией, связано с изменением зарядовой составляющей в присоединенном пространстве за счет введения «обобщенной зарядовой координаты» – фазовой экспоненты. P -упорядоченная фазовая экспонента определяет количественное изменение полевой функции заряженного поля материи

$$\left. \frac{dx_\mu(\tau)}{d\tau} \cdot D^\mu \Psi(x) \right|_{x=x(\tau)} = \left. \frac{dx_\mu(\tau)}{d\tau} \cdot (\partial^\mu - ieA^\mu) \Psi(x) \right|_{x=x(\tau)} = 0. \quad (1)$$

где τ – параметр собственной длины траектории $\xi_\mu(\tau)$, e – заряд частицы, A^μ – вектор-потенциал электромагнитного поля. Решение уравнения (1) имеет вид

$$\Psi(x') = P \cdot \exp \left(ie \int_x^{x'} A_\mu(\xi) d\xi^\mu \right) \Psi(x), \quad (2)$$

где P – оператор пространственно-временного упорядочения вдоль траектории $x_\mu(\tau)$.



Как показано в работах [10, 12-13], дополнительное присутствие фазового множителя в волновых функциях заряженного фермионного или скалярного полей выражения (2), при их подстановке в соответствующие лагранжианы свободного состояния, приводит к восстановлению локальной калибровочной симметрии, что находится в полном соответствии со стандартным построением локальной квантовой электродинамики. Вместе с этим открываются новые возможности, скрытые на этапе формулировки локальной теории, которые позволяют придать иную интерпретацию уже известным фактам.

Становится понятным, во-первых, происхождение «рецепта» заряженного фермионного или скалярного полей квантовой электродинамики для включения электромагнитного поля в лагранжиан за счет замены обычных производных на ковариантные, во-вторых, замена традиционного для квантовой электродинамики хронологического T-упорядочения операторов в вакуумных средних на хронологически-пространственное P-упорядочение. Это можно объяснить следующим образом. В локальной квантовой электродинамике фундаментальные заряженные поля материи в процессе взаимодействия с электромагнитным полем не изменяют своего зарядового и массового состояния, т.е. масса и заряд частицы остаются неизменными. Поэтому для обеспечения возможности сортировки частиц до и после процесса взаимодействия достаточно было их хронологически упорядочить. Иная картина возникает при взаимодействии с нелокальным полем, когда обобщенная зарядовая координата в присоединенном пространстве внутренних симметрий обеспечивает дополнительную возможность для описания разделения заряда нелокального поля между фрагментами и согласованного описания перемещения каждого заряда и соответствующей ему массы в базовом пространстве, что контролируется уже оператором пространственно-временного упорядочения. Следовательно, в локальной теории, в процессе взаимодействия, масса и соответствующий ей заряд сохраняются. Взаимодействие калибровочного поля с сохраняющимся зарядом определяется правилом (2) в присоединенном пространстве, а динамическая составляющая перемещения массы в пространственно-временном континууме происходит в соответствии с законами сохранения энергии-импульса. На этапе локального лагранжиана свободного электронного поля роль фазовой экспоненты сводится лишь к локализации калибровочной симметрии с выделением лагранжиана взаимодействия. При расщеплении нелокального поля фотоном эта симметрия обретает более широкую форму: в результате взаимодействия нелокальное поле в области неизвестного структурообразующего взаимодействия расщепляется и происходит перераспределение его массы и заряда между его наблюдаемыми фрагментами с аддитивными законами сохранения.

Математическая конструкция (1), описывающая трансляцию заряженного поля, имеет глубокое физическое содержание: понятие электрического заряда неотделимо от понятия массы для фундаментальных частиц. В природе не обнаружено заряда как самостоятельной сущности в отрыве от масс, т.е. все фундаментальные (локальные) поля материи – лептоны и кварки, которые формируют все многообразие адронного мира, массивны и заряжены. У составных частиц заряд может принимать значение равное нулю, а обобщенная зарядовая координата (2) для них равна единице.

Поскольку перераспределение масс и зарядов происходит в области действия струк-



турообразующих сил под действием возмущения вносимого электромагнитным полем, то необходимо учесть неизменность свойств электромагнитных сил по отношению к иным видам взаимодействий, т.е. их индифферентность к наличию всех известных в настоящее время взаимодействий и сохранить лишь их способность реагировать на сохраняющийся заряд, не выявляя при этом деталей происходящих структурных динамических изменений. Действительно, если область взаимодействия формируется, например, за счет обменов октета глюонных полей в области конфайнмента или определяется их асимптотикой – ядерными силами, вне этой области внутри атомного ядра, то ничто не препятствует фотону получать достоверную информацию об импульсных распределениях кварков или нуклонов в указанных областях. Подтверждением свойства индифферентности является отсутствие вершин взаимодействия фотона с глюоном или гравитоном, как следствие отсутствия у них электрического заряда. Электрический заряд сохраняется всегда и безотносительно от присутствия в процессе других взаимодействий. В локальной формулировке теории эти симметрии были не востребованы по причине неизменности массы и заряда материального поля в течение всего времени взаимодействия, например, наличия электрона в конце и начале взаимодействия с фотоном.

Альтернативное построение локальной квантовой электродинамики можно достичь на основе изначального использования нелокальной калибровочно-инвариантной двухточечной функции Грина (не ограничивая общности, рассмотрение проводим на примере скалярного поля) [10-13]

$$D_{\text{nonlocal}}(x, y; A) = i \left\langle P \left[\phi(x) \cdot \exp \left(ie \int_y^x A_\rho(\xi) d\xi^\rho \right) \cdot \phi^+(y) \right] \right\rangle, \quad (3)$$

не привлекая этапа конструирования лагранжиана взаимодействия и S -матрицы. Выражение для функции Грина (3) инвариантно относительно преобразования поля $\phi(x)$ и вектора-потенциала $A_\rho(\xi)$ электромагнитного поля

$$\phi(x) \Rightarrow \phi(x)e^{-ie\alpha(x)}, \quad \phi_1^+(y) \Rightarrow \phi_1^+(y)e^{ie_1\alpha(y)}, \quad A_\mu(\xi) \Rightarrow A_\mu(\xi) + \partial_\mu\alpha(\xi). \quad (4)$$

Обратим внимание, что если материальное поле $\phi(x)$ в выражении (3) нелокальное и при его перемещении из 4-точки x в 4-точку y в присутствии электромагнитного поля оно сохраняет свою целостность (индивидуальность), т.е. информация о структурообразующих силах остается за пределами рассмотрения, то оно неотлично от описания фундаментального поля этим же выражением.

Вычисление функциональной производной от функции Грина (3) по вектору-потенциалу калибровочного поля [11] приводит в импульсном представлении к выражению для соответствующей электромагнитной вершины с учетом статистики материального поля, которая согласована с функцией Грина свободной частицы до и после взаимодействия

$$\left. \frac{\delta D_{\text{nonlocal}}(x, y, A)}{\delta A_\mu(r)} \right|_{A=0} A_\mu(r) \Rightarrow$$



$$(2\pi)^4 e \delta(p+q-p') \varepsilon_\mu \int_0^1 \frac{\partial D(p+\lambda q)}{\partial(p+\lambda q)_\mu} d\lambda = (2\pi)^4 \delta(p+q-p') D(p+q) \{-e\varepsilon_\mu(p+p')^\mu\} D(p), \quad (5)$$

где $D(p) = 1/(p^2 - m^2 + i0)$ – функция Грина скалярной частицы.

Другими словами, вся информация об электромагнитных взаимодействиях в квантовой электродинамике в компактном виде содержится в нелокальных калибровочно-инвариантных структурах (3), независимо от того отвечают ли гайзенберговские поля в двухточечной функции Грина локальной или нелокальной частице, лишь бы ее масса и заряд оставались неизменными в течение всего времени взаимодействия.

Если скалярное поле $\phi(z)$ под действием электромагнитного поля распадается на два скалярных фрагмента $\phi_1(x)$, $\phi_2(y)$, то соответствующая трехточечная нелокальная калибровочно-инвариантная функция Грина, а точнее лишь ее сильносвязная вершинная часть имеет вид [11]

$$G(x, y, z; A) = \left\langle P \left(\phi(z) \cdot \exp \left(ie_1 \int_x^z A^\rho(r) dr_\rho \right) \cdot \phi_1^+(x) \cdot \exp \left(ie_2 \int_y^z A^\sigma(r) dr_\sigma \right) \cdot \phi_2^+(y) \right) \right\rangle. \quad (6)$$

Выражение (6) отвечает, например, расщеплению скалярного поля ϕ в 4-точке z под действием электромагнитного поля на два заряженных фрагмента с зарядами e_1 и e_2 в 4-точках x и y соответственно. Структура выражения (6) инвариантна относительно локальных преобразований $U(1)$ -калибровочной группы

$$\begin{aligned} \phi(z) &\Rightarrow \phi(z)e^{-ie\alpha(z)}, & \phi_1^+(x) &\Rightarrow \phi_1^+(x)e^{ie_1\alpha(x)}, & \phi_2^+(y) &\Rightarrow \phi_2^+(y)e^{ie_2\alpha(y)}, \\ A_\mu(r) &\Rightarrow A_\mu(r) + \partial_\mu\alpha(r) \end{aligned} \quad (7)$$

при условии сохранения заряда $e = e_1 + e_2$. Важно отметить, что вследствие свойства индифферентности электромагнитного сил по отношению к структурообразующим взаимодействиям, калибровочная симметрия выражения (6) обеспечена для нелокального поля в гайзенберговском представлении $\phi(z)$ и его фрагментов $\phi_1(x)$, $\phi_2(y)$ безотносительно конкретизации деталей сильного взаимодействия между ними. Кроме того, в функции Грина (6) прослеживается связь между требованием инвариантности по отношению к калибровочным преобразованиям (7) и аддитивным законом сохранения заряда.

Вычисляя функциональную производную в импульсном представлении от выражения (6) получаем [11]

$$\begin{aligned} &\frac{\delta G(x, y, z; A)}{\delta A_\mu(r)} \Big|_{A=0} A_\mu(r) \Rightarrow M_{\text{reg}} = \\ &= (2\pi)^4 \delta(p+q-p_1-p_2) \varepsilon_\mu \int_0^1 \left\{ e_1 \frac{\partial G(p_1-\lambda q; p_2)}{\partial(p_1-\lambda q)_\mu} + e_2 \frac{\partial G(p_1; p_2-\lambda q)}{\partial(p_2-\lambda q)_\mu} \right\} d\lambda, \end{aligned} \quad (8)$$

где $e_i, p_i, i = [1, 2]$ – заряд и масса фрагментов соответственно.

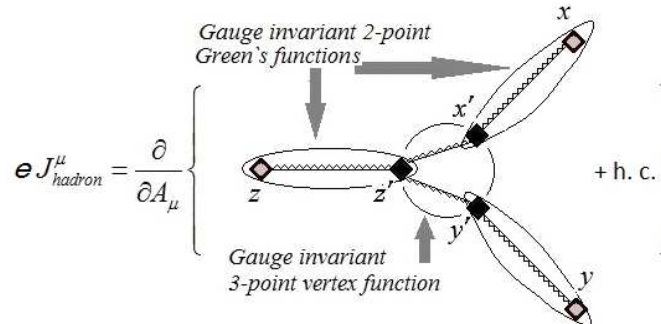


Рис. 1. Вывод нелокального адронного тока в процессе электромагнитного расщепления

Проводя аналогию с классическим лагранжевым описанием, исходное состояние нелокального поля до взаимодействия с электромагнитным полем, будем отождествлять с сильносвязной трехточечной функцией Грина (6) и рассматривать ее как аналог свободного лагранжиана. По сути трехточечная функция Грина является амплитудой вне массовой поверхности и описывает виртуальный переход нелокального поля в состояние его фрагментов и обратно (выражение в фигурных скобках на рис. 1). В результате взаимодействия с фотоном, энергия которого превосходит энергию связи связанного состояния, виртуальная амплитуда помещается на массовую поверхность и процесс расщепления становится реальным. Вывод лагранжиана взаимодействия получается в результате последовательного дифференцирования по вектору-потенциалу электромагнитного поля, как внешних концов трехточечной функции Грина, которыми являются двухточечные функции Грина, так и ее вершинной части (рис. 1) в соответствии с выражениями (5) и (8).

Аналитическое выражение для обобщенной калибровочно-замкнутой амплитуды в соответствие с принципом универсальности принимает стандартный вид

$$M = eA_\mu J_\mu^{\text{hadron}} = A_\mu \frac{\partial G(x, y, z; A)}{\partial A^\mu}, \quad eJ_\mu^{\text{hadron}} = \frac{\partial G(x, y, z; A)}{\partial A^\mu}. \quad (9)$$

Структура амплитуды представляет собой сумму традиционного полюсного ряда (левые три диаграммы на рис. 2), а включение фотона в вершинную часть треххвостки (8) приводит к регулярной части (оставшаяся диаграмма рис. 2) обобщенной калибровочно-замкнутой амплитуды.

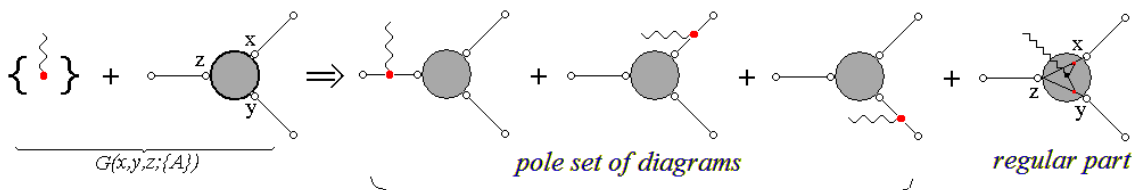


Рис. 2. Обобщенный набор полюсных калибровочно-инвариантных диаграмм



Аналитическое выражение, отвечающее диаграммам на рис. 2 принимает вид:

$$\begin{aligned}
 & \{D(p)G(p; p_1, p_2)D(p_1)D(p_2)\} + \{e\varepsilon_\mu\} \Rightarrow \\
 & \Rightarrow \left\{ -e\varepsilon_\mu z \int_0^1 \frac{\partial D(p + \lambda q)}{\partial (p + \lambda q)_\mu} d\lambda \right\} G(p + q; p_1, p_2)D(p_1)D(p_2) + \\
 & + D(p)G(p; p_1 - q, p_2) \left\{ -e\varepsilon_\mu z_1 \int_0^1 \frac{\partial D(p_1 - \lambda q)}{\partial (p_1 - \lambda q)_\mu} d\lambda \right\} D(p_2) + \\
 & + D(p)G(p; p_1, p_2 - q)D(p_1) \left\{ -e\varepsilon_\mu z_2 \int_0^1 \frac{\partial D(p_2 - \lambda q)}{\partial (p_2 - \lambda q)_\mu} d\lambda \right\} + \\
 & + D(p) \left\{ -e\varepsilon_\mu \int_0^1 \left\{ z_1 \frac{\partial G(p + (1 - \lambda)q; p_1 - \lambda q, p_2)}{\partial (p_1 - \lambda q)_\mu} + \right. \right. \\
 & \left. \left. z_2 \frac{\partial G(p + (1 - \lambda)q; p_1, p_2 - \lambda q)}{\partial (p_2 - \lambda q)_\mu} \right\} d\lambda \right\} D(p_1)D(p_2),
 \end{aligned}$$

а, оставшееся выражение, после удаления в формуле (10) вектора поляризации ε_μ фотона, соответствует выражению адронного тока J_μ^{hadron} (9). Каждое слагаемое в выражении (10) соответствует диаграмме на рис. 2, слева направо. В амплитуде (10) обеспечена непрерывность в описании электромагнитного фазы не только на асимптотических in- и out-состояниях (полюсная часть обобщенной амплитуды), но и согласовано ее изменение с областью действия структурообразующих сил (регулярная составляющая). Применение редукционной техники, позволяет записывать матричные элементы различных электромагнитных процессов.

Полная амплитуда расщепления нелокального поля получается в результате последовательного включения фотона во внешние концы трехточечной функции Грина, что приводит к традиционному полюсному ряду и включению фотона в сильносвязную вершинную часть (8) треххвостки. В результате, образуется регулярная часть обобщенной полюсной калибровочно-замкнутой амплитуды [11, 13].

Фазовая экспонента обеспечивает непрерывность изменения зарядовой координаты – электромагнитной фазы на протяжении всего времени взаимодействия. На важность выполнения этого требования было еще указано Вейлем в начале прошлого столетия. Согласование трансляций масс и соответствующих им зарядов в пространственно-временном многообразии и присоединённом зарядовом пространстве, а также сохранение структуры группы локальной калибровочной симметрии за счет фазовой экспоненты обеспечивает [10-13] в амплитуде согласование действий законов сохранения энергии-импульса и закона сохранения заряда. Кроме того, привлечение дополнительного свойства индифферентности позволяет сохранить свойство универсальности электромагнитных взаимодействий в терминах минимальной связи для нелокальных полей,



что позволяет отделить электромагнитный аспект в исследованиях нелокальных полей от структурного.

Характерной особенностью регулярной части обобщенной полюсной амплитуды является присутствие в ней производной от вершины сильного взаимодействия, т.е. регулярная часть амплитуды определяется скоростью изменения вершины. Полюсная часть амплитуды определяется лишь самой вершинной функцией. Сама амплитуда автоматически удовлетворяет требованию динамического сохранения полного адронного тока независимо от явного функционального вида самой вершины. Другими словами, вершинной функции сильного взаимодействия отводится роль свободного функционального параметра, что обеспечивает инвариантность амплитуды относительно иерархической эволюции структурообразующих взаимодействий и набора составляющих нелокального поля. Это свойство дает возможность находить вершинную функцию как решение точного уравнения Бете-Солпитера или его квазипотенциальных аналогов на каждом доступном масштабе строения материи в процессах электромагнитного расщепления.

2. Регулярная часть обобщенной полюсной амплитуды как мера нелокальности связанного состояния. Ядерный потенциал, в котором находится нуклон, представляет собой установившееся равновесное состояние, образующееся в результате сложнейшей иерархии различных видов взаимодействий: от кварк-глюонных внутри области конфайнмента до нуклон-мезонных конфигураций, синглетных по цветовым степеням свободы – адронной асимптотики.

Одним из источников получения информации о субъядерных взаимодействиях являются процессы электромагнитного расщепления атомных ядер и исследование импульсных распределений наборов составляющих, отвечающих различным структурным уровням строения материи. Сколь-нибудь адекватного аналитического выражения для ядерного потенциала, отвечающего всему энергетическому масштабу внутри ядра, а, следовательно, и ядерным вершинным функциям, в настоящее время не существует.

Импульсные распределения нуклонов в различных ядрах отражают их A -зависимость, а для фиксированного ядра высокоимпульсные «хвосты» указанных распределений содержат информацию об устройстве ядер на малых расстояниях. Все статические характеристики атомных ядер, определяются интегралами от импульсных распределений, величина которых более чем на 95% определяется низкоэнергетическим поведением. Поэтому указанные характеристики не пригодны для детализации взаимодействий на малых расстояниях. Сечения эксклюзивного расщепления ядер электронами с регистрацией ер-совпадений непосредственно определяются значениями вершинной функции, но при этом отрицательную роль при получении информации о нуклон-ядерном взаимодействии оказывают электромагнитные формфакторы.

Импульсные распределения составляющих в различных нелокальных полях материи индивидуальны и содержат всю информацию в интегральной форме об установившихся в связанной системе взаимодействиях, а также отражают ее пространственно-временную эволюцию на протяжении всего энергетического интервала.

Присутствие регулярной составляющей в полной амплитуде является следствием учета динамики в вершине сильного взаимодействия. Для изучения общих свойств ре-



гулярной части амплитуды и выявления физического смысла выполним иллюстративные расчеты расщепления скалярного нелокального поля, состоящего из двух скалярных «нуклонов». При этом будем акцентировать внимание лишь на электромагнитном аспекте взаимодействия для различных зарядовых конфигураций начального и конечного состояний. Значения величин масс, зарядов и удельную энергию связи в процессе фоторасщепления скалярного поля будем сопоставлять с конфигурацией нуклонного устройства дейтерия (см. рис. 1). Для скалярного поля выбор зависимости вершинной функции от квадрата относительного пространственно-подобного 4-импульса образовавшейся пары приводит к тому, что подынтегральное выражение в формуле (8) образует полный дифференциал и интеграл вычисляется [11]. Расчеты наблюдаемых для процессов двухчастичного электромагнитного расщепления ядер дейтерия и гелия в развитом подходе с учетом спиновой структуры и реалистической параметризации ядерных функций выполнены в работах [5-9].

Запишем матричный элемент фоторасщепления скалярного поля на два фрагмента [12, 13]

$$M = e \cdot \varepsilon_\mu \cdot J^\mu, \tag{11}$$

где $e = \sqrt{4\pi\alpha}$, $\alpha = 1/137$, а структура тока J^μ отвечает набору диаграмм нелокального адронного тока [14]:

$$J^\mu = J_{\text{pol}}^\mu + J_{\text{reg}}^\mu, \tag{12}$$

$$J_{\text{pol}}^\mu = z_s \frac{(d + d')^\mu}{s - m_d^2} G_s + z_t \frac{(p + p')^\mu}{t - m^2} G_t + z_u \frac{(n + n')^\mu}{u - m^2} G_u,$$

$$J_{\text{reg}}^\mu = \frac{k^\mu}{kq} (z_t G_t + z_u G_u - z_s G_s),$$

$z_{s,t,u}$ – заряды частиц в единицах элементарного заряда e , k_μ относительный пространственно-подобный 4-импульс pn -пары $k \equiv k_s = (p - n)/2 \stackrel{\text{с.н.м.}}{=} (0; p)$.

Вершинная функция $G_i \equiv G(-k_i^2)$, $i = [s, t, u]$ зависит от квадрата соответствующего канального относительного 4-импульса: $k_t = (p' - n)/2 = k_s - q/2$, $k_u = (p - n')/2 = k_s + q/2$, $q = (\omega, \boldsymbol{\omega})$ – 4-импульс фотона ($q^2 = 0$).

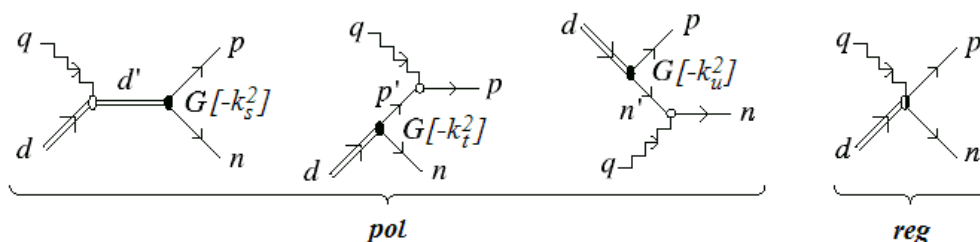


Рис. 3. Расщепление нелокального скалярного поля фотоном на два скалярных фрагмента

Нетрудно видеть, что полюсная часть полной амплитуды (11) описывает взаимодействие электромагнитного поля с асимптотически сформировавшимися в in- и out-



состояниях частицами (J_{pol}^{μ}). В то время как регулярная часть (J_{reg}^{μ}) той же амплитуды определяется “скоростью” изменения вершинной функции сильного взаимодействия G в соответствие с выражением (8), что в совокупности обеспечивает непрерывное изменение обобщенной зарядовой координаты – электромагнитной фазы в течение всего времени взаимодействия и в соответствии с законом сохранения заряда.

После перехода в систему центра масс начальных частиц с осью Oz , направленной вдоль импульса фотона и с векторами поляризации электромагнитного поля $\varepsilon_{\mu}^{(\parallel)} = (0; 1, 0, 0)$, $\varepsilon_{\mu}^{(\perp)} = (0; 0, 1, 0)$, в которой плоскость реакции совмещена с плоскостью xOy , а импульс протона направлен под углом θ к оси Oz , для дифференциального сечения на не поляризованном фотонном пучке получим

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{c.m.} = \frac{1}{64\pi^2 s} \frac{|p|}{|\omega|} |\overline{M}|^2 = \frac{\alpha}{32\pi s} \frac{|p|^3 \sin^2 \theta}{|\omega|} \left[\left(z_t \frac{G_t}{pq} - z_u \frac{G_u}{nq} \right) - \frac{(z_t G_t + z_u G_u - z_s G_s)}{kq} \right]^2, \quad (13)$$

$$M = e \cdot (\varepsilon_{\mu} k^{\mu}) \left[\left(z_t \frac{G_t}{pq} - z_u \frac{G_u}{nq} \right) - \frac{(z_t G_t + z_u G_u - z_s G_s)}{kq} \right],$$

$s = (d + q)^2$. Отметим, что полюсной части амплитуды отвечает выражение в круглых скобках, где отсутствует составляющая полюсного вклада от s -канала за счет выбора системы отсчета, в то время как в выражении регулярной части амплитуды (оставшееся выражение в квадратных скобках) вершинная функция от s -канала сохраняется.

Для выявления общих свойств регулярной составляющей амплитуды и выяснения ее физического смысла выполним численные расчеты энергетического поведения полного сечения расщепления скалярного поля в зависимости от выбора различных моделей для вершинной функции сильного взаимодействия. Модели для вершины сильного взаимодействия будем выбирать так, чтобы они имели различные «скорости убывания» с ростом импульса, но были нормированы общим условием:

$$\iiint \Psi^2(p^2) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} = 1, \quad (14)$$

Для низкоэнергетической асимптотики Юкавы полагаем ядерную вершину равной константе $G = \sqrt{\alpha_0/2\pi}$, а соответствующая ей волновая функция принимает вид

$$\Psi_{Yu}(p^2) = \sqrt{\frac{\alpha_0}{2\pi}} \frac{1}{(p^2 + \alpha_0^2)}, \quad \alpha_0 = \sqrt{m \cdot T_{CB}}. \quad (15)$$

Она изображена на рис. 4 точечной кривой. Нормировочный коэффициент найден из условия (14).

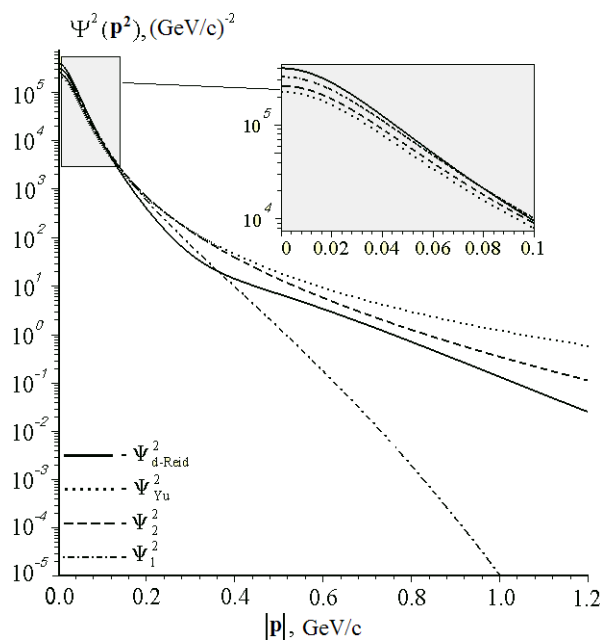


Рис. 4. Различные виды импульсного распределения составляющих в сильносвязной системе

Какое влияние будет оказывать регулярная часть амплитуды в реалистическом расчете сечения на дейтроне, исходя из его нуклонного устройства, можно будет уже качественно получить на этапе исследования поведения его импульсного распределения и сравнения с асимптотическим распределением Юкавы (15). На рис. 4 импульсное распределение нуклонов в дейтроне $\Psi_{d-Reid}^2(p^2) = u^2(p^2) + w^2(p^2)$ с учетом вкладов S - и D -волн в параметризации Рейда изображено сплошной кривой. Важным для дальнейшего обсуждения роли регулярной части амплитуды является то, что реалистическое распределение при импульсах больших 0,17 ГэВ/с расположено ниже точечной кривой.

Пунктирная кривая на рис. 4 занимает в высокоимпульсной области промежуточное положение по отношению к асимптотическому и реалистическому распределениям $G_2(p^2) = (\alpha_0 + 1)^{3/2} / (p^2 + 1)$. «Жесткое» распределение, в котором значительно «меньше» высокоимпульсной компоненты полагаем $G_1(p^2) = e^{-6p^2/m^2}$, $\Psi_1(p^2) = e^{-6p^2/m^2} / (p^2 + \alpha_0^2) \cdot 3.04\pi$.

В области малых относительных импульсов ($|p| \leq 200$ МэВ/с) функции импульсного распределения практически неотличимы, что обеспечивает надежное применение нерелятивистского импульсного приближения, которому отвечает полюсная часть амплитуды. Дополнительным соображением, в пользу сказанного, является отсутствие вклада контактной диаграммы, поскольку для постоянной вершинной функции (15) регулярная часть амплитуды обращается в ноль $\Psi(p^2) = G / (p^2 + \alpha_0^2)$, $J_{reg}^\mu = (k^\mu / kq)(z_t + z_u - z_s)$, т.е. в тех областях относительного импульса, где импульсные распределения неотличимы от асимптотического (15) для одночастичной волновой функции нуклона, которая



в координатном пространстве имеет вид

$$\Psi(p^2) \rightarrow \Psi(r) = \text{const} \cdot e^{-\alpha_0 r} / r. \quad (16)$$

В связи с этим устанавливается физический смысл контактного механизма в полной амплитуде: регулярная часть полюсной амплитуды учитывает динамическое отличие в поведении одночастичной нуклонной волновой функции от асимптотики Юкавы, т.е. показывает долю электрических многочастичных вкладов в полную амплитуду в дополнение к одночастичным механизмам, согласованных между собой требованием сохранения структурного электромагнитного тока.

Отметим, что вклады в сечение от регулярной части амплитуды для двух вариантов параметризации вершинной функции Ψ_1 и Ψ_2 имеют конструктивный характер (рис. 5).

Импульсное распределение (кривая $\Psi_2(p^2)$ на рис. 4) ближе к распределению соответствующему асимптотике Юкавы (точечная кривая), для которого вклад контактного механизма равен нулю, а, следовательно, полное сечение на рис. 5а фактически определяется лишь полюсной составляющей амплитуды при энергиях фотона от порога расщепления до 200 МэВ. Для распределения $\Psi_1(p^2)$ (рис. 5b) вклад регулярной части амплитуды значителен, а отличие полного сечения от полюсного вклада при энергии фотона 200 МэВ составляет три раза.

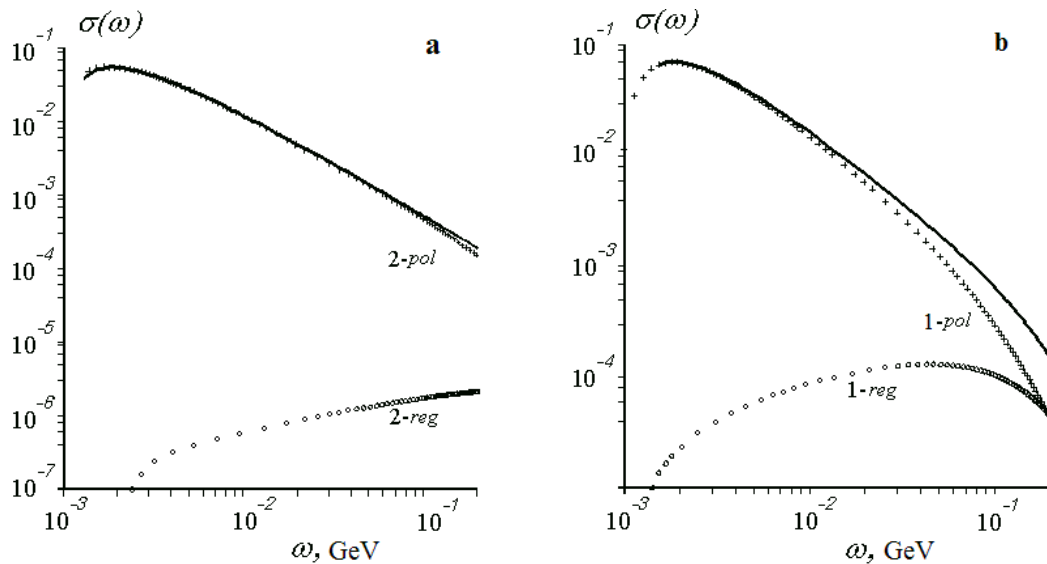


Рис. 5. Зависимость полного сечения (сплошная кривая) фоторасщепления скалярного дейтрона от энергии фотона в системе центра масс начальных частиц для импульсного распределения $\Psi_2(p^2)$. Вклады в сечение только от полюсной и регулярной частей амплитуды отмечены как 2-reg и 2-pol соответственно –(а); (b) – то же самое, что на позиции (а), но для импульсного распределения $\Psi_1(p^2)$. На обоих рисунках величины сечений представлены в одинаковых, но условных единицах.



Доля вклада регулярной части в полное сечение (включая интерференцию) на заданном интервале энергий фотона для импульсного распределения составляющих $\Psi_1(p^2)$ составляет 27%, а для $\Psi_2(p^2)$ – 3%.

Проведенный анализ в отношении выявления роли регулярной составляющей амплитуды на поведение энергетической зависимости полного сечения показал, что с ростом энергии фотона для различных импульсных распределений наблюдается сильная чувствительность к взаимному соотношению между вкладами полюсной и регулярной частями амплитуды.

В связи с уже установленными свойствами регулярной части при низких энергиях возникает интерес выявления тех ограничений на функциональную зависимость вершинной функции, которые не приводят к росту полных теоретических фотосечений на ядрах при асимптотически больших энергиях фотонов $1 \leq E_\gamma^{\text{л.с.}} \leq 100$ ГэВ за счет присутствия регулярной составляющей в амплитуде. Указанные сечения на ядрах ^{12}C и ^{82}Pb измерены на интервале энергий фотонов от 10 эВ до 100 ГэВ, а на ядре дейтерия до 20 ГэВ. Характерным для этих сечений является их выход на постоянную величину при энергиях больших 100 МэВ.

Для выявления роли регулярной части на формирование высокоэнергетического поведения сечения выполним разложение матричного элемента (12) по kq [10, 11] и приравняв его константе, получаем дифференциальное уравнение для вершинной функции

$$(z_t - z_u) \left(\frac{G(p^2)}{p^2 + \alpha_0^2} - \frac{\partial G(p^2)}{\partial p^2} \right) = \text{const}, \quad (17)$$

что обеспечит постоянство полного сечения при высоких энергиях. Его частное решение имеет вид

$$G(p^2) = c_1(p^2 + \alpha_0^2) - \frac{\text{const}}{z_t - z_u}(p^2 + \alpha_0^2) \ln(p^2 + \alpha_0^2),$$

где c_1 – константа интегрирования. Вводя квадрат полной энергии в с.д.и. получаем функцию

$$G(s) = \frac{c_1}{4}(s - 4m^2) - \frac{\text{const}}{z_t - z_u}(s - M^2) \ln \frac{(s - M^2)}{4\alpha_0^2}, \quad (18)$$

которая при $p = 0$ ($s = 4m^2$) удовлетворяет условию $G(4m^2) = 0$. Это условие означает, например, что «хвост» $q\bar{q}$ -распределений выходит за границы конфайнмента и исчезает на границах ядра.

Обращает внимание экспериментальный факт [17] поведения полных фотосечений на дейтроне и протоне, которые приведены на одном рисунке (рис. 6). Трудно указать механизм реакции, который бы на столь широком интервале энергий фотонов 1-20 ГэВ «удерживали» значения величин обоих полных сечений параллельными и практически с постоянными значениями. Аналогичная тенденция прослеживается для полных сечений сильновзаимодействующих частиц (pd и pn), ($\bar{p}d$ и $\bar{p}n$), (π^-d и π^-p), (K^-d и K^-p) [11] в более широких диапазонах импульсов налетающих пучков в лабораторной системе – от $\sim (1 \div 300)$ ГэВ/с.

Действительно, как следует из анализа поведения полных экспериментальных сечений фотопоглощения на дейтроне [17] при значениях импульса фотонного пучка в



интервале $1 \div 20$ ГэВ/с, в котором величина указанного сечения остается неизменным ($\sigma \sim 0,22\text{mb}$), а также его сопоставление с аналогичным сечением на протоне (промеженного до 200 ГэВ/с), позволяет сделать следующие выводы:

во-первых, невозможно указать механизм реакции, который бы столь длительно доминировал в амплитуде и обеспечивал постоянство полного сечения в широком интервале энергий;

во-вторых, если предположить, что концентрация кварк-глюонного состояния в области конфайнмента постоянна, а постоянство полных сечений на дейтроне и протоне связано, лишь с размерами геометрических сечений соответствующих сферических областей конфайнмента, то величина их отношения равна $\sqrt[3]{2^2} \approx 1,6$ (следствие свойства насыщения ядерных сил в теории ядра);

в-третьих, в пользу «одинакового устройства» протона и ядра дейтерия указывает поведение их полных фотосечений (рис. 6). Протон как $3q$ конфигурация сохраняет свою индивидуальность даже в связанном состоянии в ядре дейтерия. Когда длина волны зондирующего фотона становится меньше области локализации протона, доминирующим в структурном плане является трехкварковая конфигурация, с характерным набором собственных частот возбуждения. Можно предположить, что в области конфайнмента вблизи его внутренней границы сосредоточен не скомпенсированный положительный заряд как следствие кулоновского отталкивания одноименных зарядов, который на предыдущем ядерном масштабе энергии равен заряду числа протонов в ядре. Обесцвеченному по цветовым степеням свободы протону как связанной системе трех кварков со значением заряда равного $+e$ отвечает минимум энергии кварк-глюонной конфигурации в цветовом пространстве, в которой цветовые силы притяжения превосходят силы кулоновского отталкивания кварков.

Внутренняя область конфайнмента электрически нейтральна, т.е. избыточный дополнительный заряд в ней отсутствует. В структурном аспекте эта область состоит, по-видимому, из нейтральных по электрическому заряду и цветовым переменным двух кварковых диполей. Из релятивистской теории [18] известно, что энергия взаимодействия нейтральных атомов на достаточно больших расстояниях убывает по закону $\sim r^{-7}$, не имеющего ничего общего с законом Кулона. Цветовое взаимодействие внутри кварк-антикварковых диполей усиливает характер внешнего убывания их энергии взаимодействия с расстоянием, поскольку энергия цветовых сил внутри диполя сильно возрастает при раздвижении его составляющих, что дополнительно препятствует разрыву диполя на составляющие, приводя к еще большей его компактности и делая недоступным для электромагнитных взаимодействий. При энергиях фотона более 2 ГэВ достижим масштаб пространственно-временной локализации бесконечного числа почти нейтральных диполоподобных образований, распределенных по импульсам в соответствии с логарифмическим законом. Удержание величин полных сечений на протоне и дейтроне на постоянном значении можно объяснить за счет логарифмически возрастающего их закона импульсного распределения и увеличения числа кварковых диполей при продвижении к центру области конфайнмента.

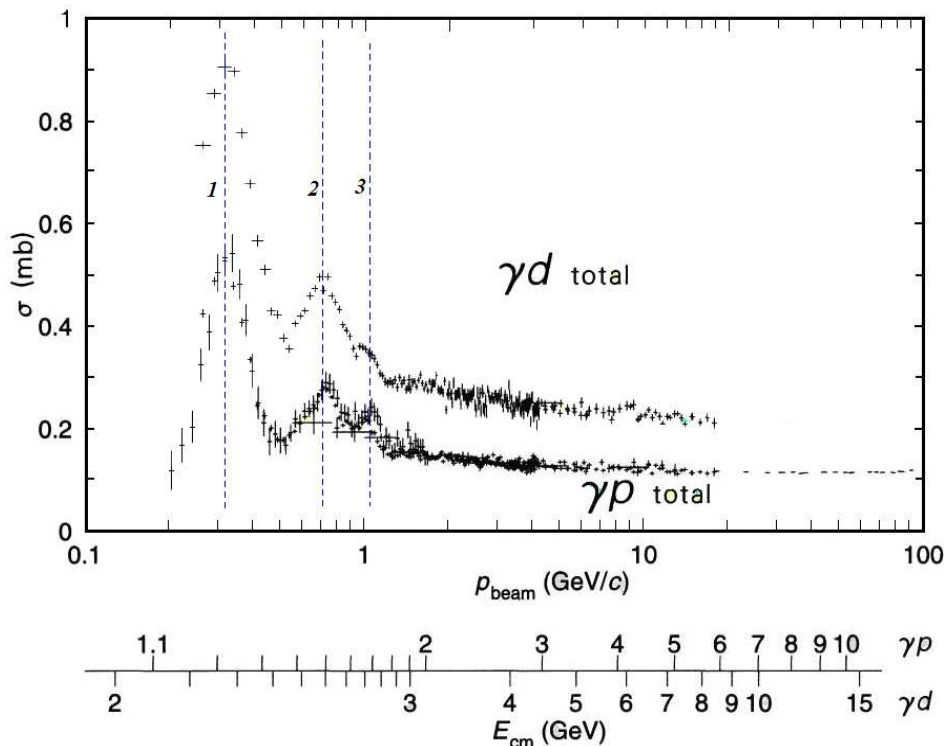


Рис. 6. Фото сечения на протоне и дейтроне в зависимости от импульса фотонов в лабораторной системе или полной энергии в системе центра масс [15]. Пунктирные вертикальные линии 1, 2 и 3 показывают основные резонансные пики возбуждения трех кварковых конфигураций в протоне и дейтроне.

Не имея аналитического выражения для вершинной функции, учитывающей структурные изменения при переходе от нуклонных представлений при малых энергиях к кварк-глюонным при высоких, выполним иллюстративный расчет полного сечения на основе матричного элемента (9-10) с привлечением резонансной модели и вершинной функции

$$G(-k^2) = 8\sqrt{2} \left[\sqrt{\alpha_0 \pi m} - 3,5 \cdot \frac{(\alpha_0^2 - k^2) \ln \left(1 - \frac{k^2}{\alpha_0^2} \right)}{(z_t - z_u)m} \right]. \quad (19)$$

В вершинной функции (19) первое выражение в квадратных скобках обеспечивает правильное низкоэнергетическое поведение полного сечения для электрически-дипольного поглощения на дейтроне у порога

$$\sigma^{(el)}(\omega) = \frac{8\pi}{3} \alpha (z_t - z_u)^2 \frac{\sqrt{T_d} (\omega - T_d)^{3/2}}{m\omega^3},$$

с добавлением выражения (19), чтобы описать тенденцию высокоэнергетического поведения ($E_\gamma^{л.с.} > 100$ ГэВ). Учет резонансов проведем в соответствии со стандартной



Брейт-Вигнеровской формой $(m \cdot \Gamma_e/2)/(E_R - E - i\Gamma_{\text{tot}}/2)$ (E – полная энергия в системе центра масс), которые аддитивно добавлены в сечение (4) в выражение квадратной скобки. Результаты расчета полного сечения приведены на рис. 7.

К описанию экспериментальных данных полного сечения можно подойти с другой стороны: использовать свойство инвариантности вида полной амплитуды по отношению к иерархическому масштабу структурообразования.

Пусть структура ядра дейтерия на малых пространственно-временных масштабах формируется скалярными нелокальными полями в виде нейтральных $q\bar{q}$ диполей (рис. 8). В этом случае, в отличие от выше рассмотренного случая, меняется зарядовая и массовая конфигурация процесса. Считаем, что цветовые степени свободы по-прежнему сокрыты в вершинной функции, а выделена лишь электромагнитная часть процесса.

Полный заряд диполя полагаем равным нулю ($z_s = 0$), заряды кварков $z_q = -z_{\bar{q}} = 1/3$, массы кварков полагаем равными $m_q = m_{\bar{q}} \equiv m = \text{МэВ}/c^2$, связанной пары $m_{q\bar{q}} = \text{МэВ}/c^2$. Вершинную функцию (19) фиксируем выбором констант $c_1 = 0$ и $\text{const} = 1$ соответственно. Такой выбор констант обеспечивает одновременное описание как низкоэнергетической области, базирующейся на чисто нуклонных представлениях, так и высокоэнергетической, где уже доминирует субъядерный масштаб строения материи. Распределению $q\bar{q}$ -пар при высоких энергиях соответствует в (19) логарифмическое выражение. Условно говоря проведена «сшивка» решений для вершинных функций, описывающих поведение импульсных распределений составляющих различных структурных уровней.

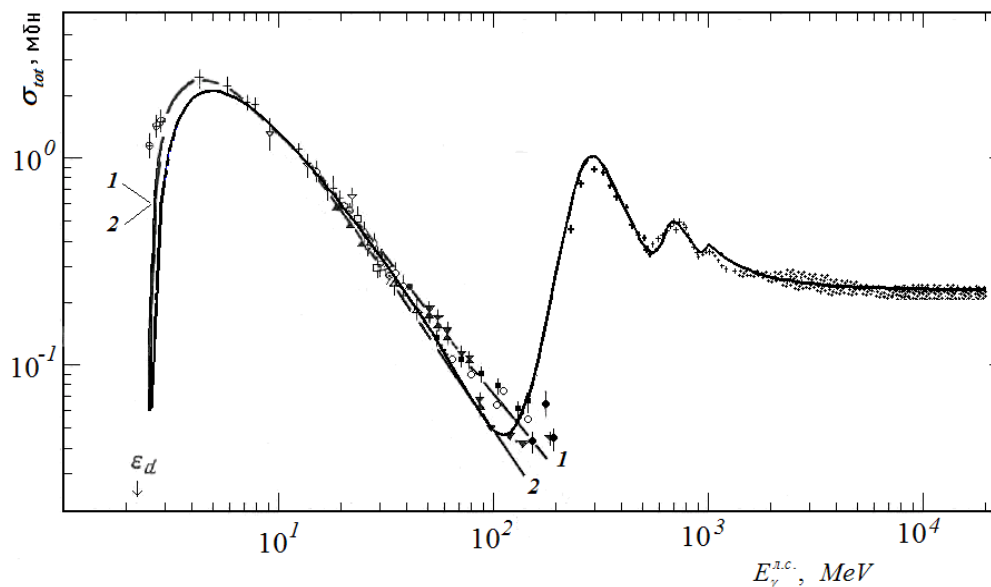


Рис. 7. Энергетическая зависимость полного фото сечения на ядре дейтерия от порога расщепления до 20 ГэВ для энергий фотона в лабораторной системе. Набор мировых данных по экспериментальным измерениям полного сечения при энергиях фотона меньших 200 МэВ [17]; высокоэнергетические данные эквивалентны данным на рис. 2. Теоретические расчеты



(кривые 1 и 2) выполнены в релятивистской калибровочно-инвариантной модели [5, 17] с волновыми функциями дейтрона парижской (кривая 1) и рейдовской (кривая 2) параметризацій. Оставшаяся кривая – модельный расчет на основе матричного элемента (1)-(2) и учета трех резонансов.

По мере продвижения в область конфайнмента начинает преобладать другая физика, в которой распределение нуклонов сменяется на распределение бесконечного числа связанных кварковых конфигураций в ограниченной области пространства, которое становится близким к равномерному распределению или же как в нашем случае к слабо растущему логарифмическому

$$\Psi(p^2) = \frac{G(p^2)}{p^2 + \alpha_0^2} \sim c_1 - \frac{\text{const}}{(z_t - z_u)} \ln \left(\frac{p^2}{\alpha_0^2} + 1 \right).$$

Обратное преобразование Фурье для логарифмической части указанной волновой функции приводит к выражению

$$\int e^{ipr} \ln \left(\frac{p^2}{\alpha_0^2} + 1 \right) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} = -\frac{(1 + \alpha_0 r)}{2\pi} \frac{e^{-\alpha_0 r}}{r^3},$$

а для соответствующей ей вершины получаем

$$\int e^{ipr} (p^2 + \alpha_0^2) \ln \left(\frac{p^2}{\alpha_0^2} + 1 \right) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{(3 + 3\alpha_0 r + \alpha_0^2 r^2)}{\pi} \frac{e^{-\alpha_0 r}}{r^5}.$$

Расчет полного сечения с учетом иерархии масштабов структурообразования приводит к результату, приведенному на рис. 5.

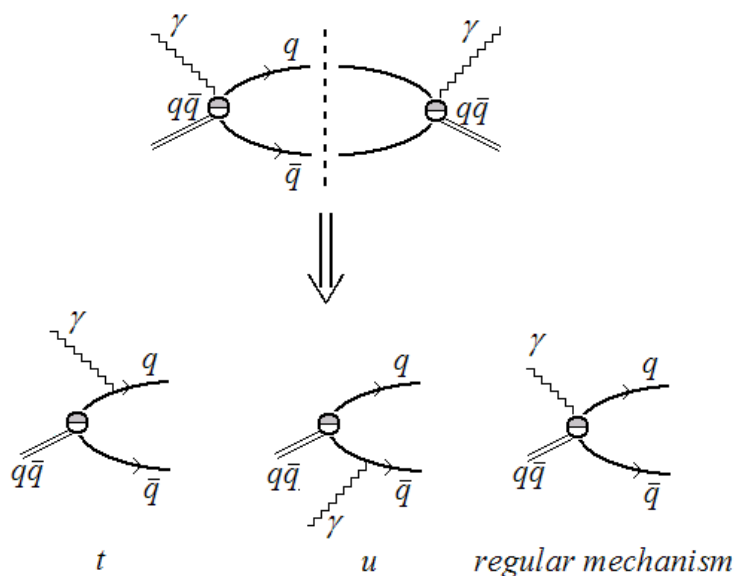


Рис. 8. Электромагнитное расщепление скалярного кварк-антикваркового диполя



Расчет полного сечения на основе амплитуды (9,10) с учетом иерархии масштабов структурообразования приводит к результату, приведенному на рис. 7.

Отметим общее свойство обобщенной калибровочно-инвариантной полюсной амплитуды (2), которое имеет место независимо от явного вида вершинной функции сильного взаимодействия, а определяется лишь характером ее убывания или возрастания. Относительный знак между полюсной и регулярной частями в обобщенной амплитуде фиксирован требованием сохранения полного электромагнитного тока.

Поэтому можно сделать вывод, что регулярная составляющая обобщенной полюсной амплитуды является динамической мерой нелокальности связанного состояния и показывает как «быстро» теряют свою индивидуальность структурные образования исходного уровня строения материи при переходе в иной масштаб пространственно-временной локализации.

Заключение. Показано, что дополнительный учет требований к набору аксиоматических положений локальной квантовой электродинамики, позволяет последовательно ввести в рассмотрение нелокальные поля материи, не привлекая методов построения лагранжиана взаимодействия. Объективные требования являются следствием адекватного описания картины взаимодействия электромагнитного поля с сильно связанным полем. На основе выбора структуры обобщенного конфигурационного пространства проведено согласование трансляций для корректного описания перераспределения заряда и массы нелокального поля между его фрагментами в области структурообразующего взаимодействия. Дополнительные ограничения при согласовании трансляций связаны с привлечением свойства неотделимости понятий заряда и массы и соответствия принципу индифферентности электромагнитных сил по отношению к другим типам взаимодействий. На основе использования нелокальных калибровочно-инвариантных двух- и трехточечных функций Грина, в которых структура гайзенберговских полевых операторов согласована со структурой обобщенного конфигурационного пространства и результата вычисления от них функциональных производных по вектору-потенциалу калибровочного поля приводит к определению электромагнитных вершин и обобщенной полюсной амплитуды, в которой динамически согласованы действия законов сохранения энергии-импульса и заряда.

В обобщенной амплитуде автоматически сохраняются изначально присутствующие свойства калибровочной симметрии независимо от вида структурообразующих сил нелокального поля. Этот факт позволяет рассматривать вершины сильного взаимодействия в процессах ЭМ расщепления как свободные функциональные параметры, зависящие от трансляционно-инвариантного аргумента, явный вид которых определяется в виде решений структуроформирующих уравнений на доступном для исследования масштабе строения материи. Полученная амплитуда обладает важным свойством инвариантности относительно иерархической эволюции структурообразующих сил нелокального поля и набора его составляющих при условии точного сохранения калибровочных свойств электромагнитного поля. В результате проведенных действий удается отделить электромагнитный аспект исследований от структурного, сохранив при этом в неизменном виде группу $U(1)$ -калибровочной симметрии и обеспечить тем самым выполнение свойства универсальности электромагнитных взаимодействий в минимальном формате так



же и для нелокальных полей.

Присутствие регулярной части в обобщенной полюсной амплитуде электромагнитного расщепления нелокального поля материи является следствием требования сохранения структурного тока и является динамической мерой нелокальности связанного состояния. К преимуществу развитого подхода можно отнести то, что он существенно расширяет возможности квантовой электродинамики для исследования нелокальных полей, но при этом не изменяет ни единого результата, полученного ранее в локальном квантово-полевом подходе.

Литература

1. Боголюбов Н.Н., Логунов А.А., Оксак А.И., Тодоров И.Т. Общие принципы квантовой теории поля / М.: Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. – 616 с.
2. Ефимов Г.В. Проблемы квантовой теории нелокальных взаимодействий. – М.: Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1985. – 216 с.
3. Terning J. Gauging nonlocal Lagrangians // *Phys. Rev. D.* – 1991. – 44. – P.887-897. Mandelstam S. Quantum electrodynamics without potentials // *Ann. Phys.* – 1962. – 19. – P.1-24.
4. Нагорный С.И., Касаткин Ю.А., Инопин Е.В., Кириченко И.К. Релятивистские связанные системы в квантовой электродинамике // *ЯФ.* – 1989. – 49;3. – С.749-763.
5. Нагорный С.И., Касаткин Ю.А., Золенко В.А. и др. Ковариантный подход в теории фотоядерных реакций $\gamma 0^+ \rightarrow 1/2^+ + 1/2^+$ и его реализация на ядре ${}^4\text{He}$ // *ЯФ.* – 1991. – 53;2. – С.365-390.
6. Заяц А.А., Золенко В.А., Касаткин Ю.А. и др. Электродезинтеграция ядра ${}^4\text{He}$: ${}^4\text{He}(e,e'N)T$ // *ЯФ.* – 1992. – 55;2. – С.325-344.
7. Заяц А.А., Золенко В.А., Касаткин Ю.А., Корж А.П. Процессы $\gamma + {}^4\text{He} \rightarrow d + d$ в релятивистской калибровочно-инвариантной модели // *ЯФ.* – 1994. – 57;5. – С.798-809.
8. Заяц А.А., Золенко В.А., Касаткин Ю.А. Электродезинтеграция ядра ${}^4\text{He}$: ${}^4\text{He}(e,e'd){}^2\text{H}$ // *ЯФ.* – 1995. – 58;3. – С.439-447.
9. Касаткин Ю.А. Геометрический аспект калибровочных полей и возможность единого описания локальных и нелокальных взаимодействий в КЭД // *Письма в ЭЧАЯ.* – 2009. – 6;1(150). – С.41-53.
10. Касаткин Ю. А. Локальная $U(1)$ -калибровочная инвариантность и фоторасщепление сильно связанных систем // *Письма в ЭЧАЯ.* – 2004. – 1;5(122). – С.30-49.
11. Касаткин Ю. А. Возможность единого описания локальных и нелокальных электромагнитных взаимодействий // *Вестник Харьковского национального университета, серия физическая «Ядра, частицы, поля».* – 2008. – 808;2/38/. – С.61-67.
12. Касаткин Ю.А., Кириченко И.К., Клепиков В.Ф., Корж А.П. Нелокальные взаимодействия в квантовой электродинамике // *Х.: Студцентр, 2009.* – 240 с.
13. Славнов А.А., Фаддеев Л.Д. Введение в квантовую теорию калибровочных полей / М.: Наука, 1988. – 272 с.
14. Lehmann H., Symanzik K., Zimmermann W. Zur Formulierung quantisierter Feldtheorien // *Nuovo Cim.* – 1955. – 1. – P.205-223; Zur Formulierung quantisierter Feldtheorien, II // *Nuovo Cim.* – 1957. – 6. – P.319-338.
15. Wightman A. S. Quantum field theory in terms of vacuum expectation values // *Phys. Rev.* – 1956. – 101. – P.860-879; Review of Particles Properties. Particles and Fields. Part II // *Phys. Rev. D.* – 1992. – 4. – P.III.86-III.89.
16. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Релятивистская квантовая теория. Ч.1 / М.: Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1968. – 480 с.
17. Нагорный С.И., Касаткин Ю.А., Инопин Е.В., Кириченко И.К. Фоторасщепление дейтрона в релятивистской калибровочно-инвариантной модели // *ЯФ.* – 1986. – 44;5(11). – С.1171-1186.



**GENERAL METHOD OF INTERACTION LAGRANGIAN CONSTRUCTING
FOR ELECTROMAGNETIC PROCESSES OF NONLOCAL FIELDS SPLITTING**

G.I. Kanyuk, Yu.A. Kasatkin, I.K. Kirichenko, O.D. Ptashny

Ukrainian engineering and pedagogical academy,
Universitetskaya St., 16, Kharkov, 61003, Ukraine,
e-mail: YuKasatkin2007@yandex.ru, ikir238@rambler.ru

Abstract. Additional involvement to theory the concept of inherence of electrical charge and mass for fundamental particles, and also the indifference property of electromagnetic forces relative to interactions generated of structures permits to conserve the structure of gauge symmetry group for nonlocal fields in changeless form and, due to this, to support the correct dissemination outside the local theory. The structure limit to the local theory is explored.

Key words: local lagrangian, nonlocal interactions, gauge invariance, Green's function, momentum distributions.



УДК 537.523

ВЛИЯНИЕ РАСХОДА ГАЗА И СИЛЫ ТОКА НА КОНФИГУРАЦИЮ ПЛАЗМЕННЫХ СТРУЙ В ДВУХСТРУЙНОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ДУГЕ

Э.Б. Кулумбаев, Т.Б. Никуличева

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308015, Россия, e-mail: kulumbaev@bsu.edu.ru,
nikulicheva@bsu.edu.ru

Аннотация: На основе численного анализа магнитогазодинамических уравнений в плоскопараллельном приближении движения равновесной плазмы установлено влияние расхода газа и силы тока на конфигурацию плазменных струй в двухструйной электрической дуге. Получено, что: 1) с ростом расхода эффект газодинамического соударения усиливается и картина течения приближается к взаимному растеканию струй; 2) влияние роста величины тока на конфигурацию струй неоднозначна из-за совместного увеличения импульсов вытекающих из сопел струй и повышения роли их электромагнитного отталкивания.

Ключевые слова: математическая модель, МГД уравнения, равновесная плазма, электрическая дуга.

1. Введение

Многодуговые генераторы плазмы [1 – 2] и, в частности, двухструйный плазмотрон [3], широко применяются в различных плазменных технологиях при сфероидизации частиц, нанесении покрытий [4], а также в геохимии при спектроскопическом анализе геологических проб [5 – 6].

Двухструйный плазмотрон [3] состоит из катодного и анодного сопел, оси которых располагаются в одной плоскости под некоторым углом (рис. 1). В каждое сопло подается с фиксированными расходами плазмообразующий газ, где он интенсивно нагревается и ускоряется. При вытекании из электродных насадков в атмосферный воздух плазменные струи взаимодействуют друг с другом, замыкают токопроводящий канал дуги и образуют общий поток плазмы. В отличие от столкновения холодных струй, для плазменных потоков, вследствие протекания по ним электрического тока, кроме газодинамического соударения имеет место электромагнитное отталкивание. Поэтому при фиксированном угле и расстоянии между осями электродных насадков конфигурация двух токоведущих струй зависит от расхода газа и силы тока в двухструйной электрической дуге.

Экспериментальные исследования двухструйного плазмотрона при фиксированной силе тока (~ 100 А) показывают [3], что при малых расходах (~ 0.1 г/с) плазменные струи значительно искривляются и в зоне слияния струй наблюдаются два расходящихся потока плазмы так, что при наблюдении через оптически плотный фильтр ярко светящиеся струи разделены темным промежутком и выглядят самостоятельными. Дальнейшее уменьшение расхода приводит к неустойчивому режиму работы плазмотрона,

разрыву струй и погасанию дуги. При расходах газа ~ 0.13 г/с в месте слияния струи имеют почти нулевой угол соударения и далее поток образован двумя близко идущими параллельными струями. С увеличением расхода газа (~ 0.24 г/с) струи практически не искривляются, соударяются под начальным углом, течение переходит в турбулентный режим, и горение дуги становится неустойчивым. Аналогичную зависимость конфигурации струй в двухструйной дуге можно ожидать с уменьшением силы тока при фиксированном расходе.

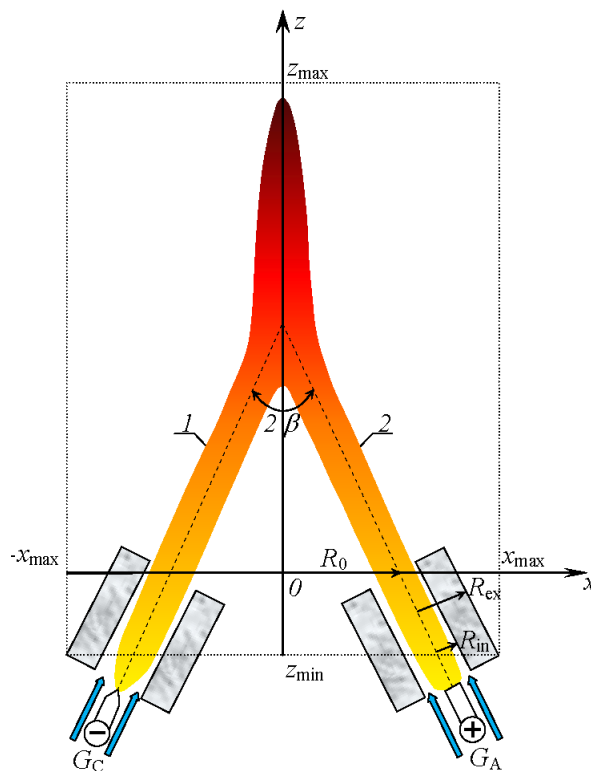


Рис. 1. Схема расчетной области плоскопараллельной двухструйной дуги:

- 1 — катодная и 2 — анодная токовые струи плазмы;
- 2β — угол и $2R_0$ — расстояние между осями электродных насадок с размерами R_{in} , R_{ex} ;
- G_C , G_A — расходы плазмообразующего газа

Теоретические исследования конфигурации плазменных струй в зависимости от расхода и силы тока ограничиваются анализом полуаналитических моделей. Так, в [3] система двумерных магнитогидродинамических (МГД) уравнений в частных производных на основе упрощающих модельных допущений сведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих траектории двух токонеzáвисимых плазменных струй в результате их газодинамического соударения и электромагнитного отталкивания, но без учета перетекания тока между ними. Сопоставление расчетных и экспериментально измеренных траекторий показало удовлетворительное согласование, что позволило сделать в [3] обоснованный вывод о роли магнитного взаимодействия



токовых струй в формировании потока плазмы в двухструйном плазмотроне. Расхождение расчетных и экспериментальных траекторий струй объясняется в [3] принятыми при построении модели допущениями, а также неучтенным магнитным действием протекающего между струями тока. В [7], в рамках развитого в [3] подхода, учтено действие архимедовых сил, которое не привело к заметному улучшению согласования расчета и эксперимента.

Цель данной работы: на основе численного анализа двумерной МГД модели двухструйного плазмотрона [8] в равновесном приближении плазмы установить влияние расхода газа и силы тока на конфигурацию плазменных струй в двухструйной электрической дуге.

2. Модель

Рассматривается двухструйная электрическая дуга, концы которой находятся в продуваемых плазмообразующим газом каналах катодного и анодного насадков, расположенных под углом 2β друг к другу (рис. 1). При вытекании из электродных насадков в атмосферу того же газа в результате взаимодействия плазменных струй друг с другом формируется структура общего потока плазмы и происходит замыкание токопроводящего канала двухструйной дуги.

При математическом описании двухструйной дуги при атмосферном давлении, в соответствии с полученными в [3] экспериментальными данными, полагается, что все протекающие при взаимодействии струй процессы стационарные, течение дозвуковое и ламинарное, плазма квазинейтральная и локально равновесная.

Уравнения. С учетом сделанных допущений газодинамические, тепловые и электрические характеристики двухструйной плоскопараллельной электрической дуги описываются системой стационарных двумерных уравнений непрерывности, Навье – Стокса, баланса энергии и непрерывности электрического тока [9] в виде:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z) = 0, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left[\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] - j_z B_y, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left[\eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] + j_x B_y, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\rho C_p \left(v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q_J - \psi, \quad (4)$$



$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\sigma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\sigma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = 0. \quad (5)$$

Здесь $v(v_x, 0, v_z)$ — скорость; p — давление; T — температура; ϕ — скалярный потенциал; $E(E_x, 0, E_z) = -\nabla\phi$ — напряженность электрического поля; $B(0, B_y, 0)$ — индукция магнитного поля; $j = \sigma E$ — плотность электрического тока; $Q_j = j \cdot E$ — удельная мощность джоулева тепловыделения; $\rho, \sigma, \lambda, \eta, \psi, C_p$ — плотность, электропроводность, теплопроводность, вязкость, излучательная способность и удельная теплоемкость плазмы при постоянном давлении соответственно; x, y, z — декартовы координаты (рис. 1).

Индукция магнитного поля вычисляется в соответствие с законом Био–Савара, который, после интегрирования по $y \in (-\infty, +\infty)$, записывается в виде:

$$B_y(x, z) = \frac{\mu_0}{2\pi} \iint_{xz} \frac{(z - z')j_x - (x - x')j_z}{(x - x')^2 + (z - z')^2} dx' dz', \quad (6)$$

где μ_0 — магнитная постоянная.

Граничные условия. Система МГД уравнений (1 – 5) дополняется зависимостями коэффициентов переноса и теплофизических свойств плазмы от температуры при атмосферном давлении [9], и замыкается граничными условиями для зависимых переменных на границах расчетной области (рис. 1):

$$x = -x_{\max} : \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \quad p = p_{\infty}, \quad v_x < 0 : \frac{\partial T}{\partial x} = 0;$$

$$v_x > 0 : T = T_{\infty};$$

$$x = +x_{\max} : \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \quad p = p_{\infty}, \quad v_x > 0 : \frac{\partial T}{\partial x} = 0;$$

$$v_x < 0 : T = T_{\infty};$$

$$z = z_{\min}(\text{в соплах}) : \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_C = +E_0, \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_A = -E_0, \quad v_z = v_0; \quad T = T_0;$$

$$z = z_{\min}(\text{вне сопел}) : \frac{\partial \phi}{\partial z} = 0, \quad p = p_{\infty}, \quad v_z < 0 : \frac{\partial T}{\partial z} = 0;$$

$$v_z > 0 : T = T_{\infty};$$

$$z = z_{\max} : \frac{\partial \phi}{\partial z} = 0; \quad p = p_{\infty}; \quad v_z > 0 : \frac{\partial T}{\partial z} = 0;$$

$$v_z < 0 : T = T_{\infty}.$$



Здесь величины на границах расчетной области внутри электродных насадков определяются по заданным значениям силы тока и расхода газа из условия однородности потока в поперечном к его оси направлении (обозначены нижним индексом 0); на стенках насадков для скорости используются условия прилипания и непроницаемости, а для температуры — условие сопряжения с заданной температурой стенок; на свободных границах используются условия нормального втекания холодного $T = T_\infty$ или вытекания нагретого газа при фиксированном атмосферном давлении $p = p_\infty$.

Метод решения. Система уравнений дискретизируется методом контрольного объема (КО) на прямоугольной сетке. Для этого расчетная область разбивается на непересекающиеся КО с гранями, лежащими на координатных поверхностях. В геометрическом центре КО выбирается узловая точка. Обобщенное дифференциальное уравнение интегрируется по КО. Для компонент скорости используются смещенные сетки, что обеспечивает исключение из численного решения физически нереальных «волнистых» полей скорости, давления и возможность вычисления потоков массы через грани КО без интерполяции соответствующих компонент скорости. При вычислении потоков через грани КО используется совместная экспоненциальная аппроксимация конвективных и диффузионных слагаемых в зависимости от сеточного числа Пекле (отношения конвективной и диффузионной плотностей потоков). Поле давления определяется методом коррекции SIMPLER [10]. Система уравнений для внутренних узловых точек расчетной области замыкается алгебраическими уравнениями (разностными аналогами краевых условий) для граничных точек. Производные, входящие в граничные условия, аппроксимируются разностями второго порядка точности. Для численного решения дискретных аналогов дифференциальных уравнений используется итеративный метод с нижней релаксацией.

3. Результаты расчета

Исходные данные. Проводится расчет характеристик плоскопараллельной двухструйной дуги с геометрией насадков из эксперимента [3]: $R_{in} = 2.5$ мм; $R_{ex} = 10$ мм; $R_0 = 15$ мм; $2\beta = 60^\circ$ при $T_\infty = 300$ К, $p_\infty = 1$ атм. Величины погонных расходов $G_C = G_A$ и силы тока I варьируются. Размеры расчетной области: $z_{min} = -4$ см; $z_{max} = 20$ см; $x_{max} = 5$ см (рис. 1) устанавливаются в результате апостериорной оценки малого влияния положения границ на численное решение в области взаимодействия струй.

Термодинамические свойства и коэффициенты переноса аргона в зависимости от температуры при атмосферном давлении берутся из тех же источников, что и в работе [9]. Поскольку учитывается зависимость коэффициентов плазмы только от температуры, под давлением p в дальнейшем понимается перепад давления относительно атмосферного.

Структура двухструйной электрической дуги. Дуга формируется в результате взаимодействия вытекающих из сопел плазменных струй друг с другом (рис. 2). Картина течения обусловлена, в основном, газодинамическим соударением и электромагнитным взаимодействием токовых струй. Без учета амперовых сил реализуется взаимное растекание одной струи на другой в неоднородном поле давления газодинамического соударе-

ния, аналогичное картине течения, возникающей при ударе плоскопараллельной струи о плоскую стенку [11]. Электромагнитное отталкивание токовых струй качественно изменяет картину течения. Из-за искривления струй эффект их газодинамического соударения ослабляется уменьшением угла соударения и, как следствие, величины максимума «горба» давления в области столкновения струй. В результате исчезает взаимное растекание одной струи на другой. Оба струйных потока движутся в положительном направлении оси z и оказываются разделенными сопутствующим потоком газа, подсасываемым с межсопловой границы $z = z_{\min}$ и огибающим сформировавшийся перед областью повышенного давления тороидальный вихрь. В окрестности нижней границы зоны перетекания электрического тока на оси $x = 0$ силы давления в «яме» притормаживают возвратное течение сопутствующего газа в тороидальном вихре. Движение и ускорение сопутствующего газа, обогнувшего вихрь и прогретого горячими струями, является практически квазиодномерным и определяется совместным действием электромагнитной силы и антиградиента давления. В окрестности верхней границы зоны перетекания тока электромагнитная сила становится притормаживающей за счет пинч-эффекта, который в слабой форме проявляется вдоль всего токового канала. Вытекающие из электродных сопел струи за счет вязкости вовлекают в сопутствующее течение окружающий газ (рис. 2). Вблизи торцов сопел давление понижено, поэтому реализуется подсос окружающего газа с обеих сторон от каждой вытекающей струи.

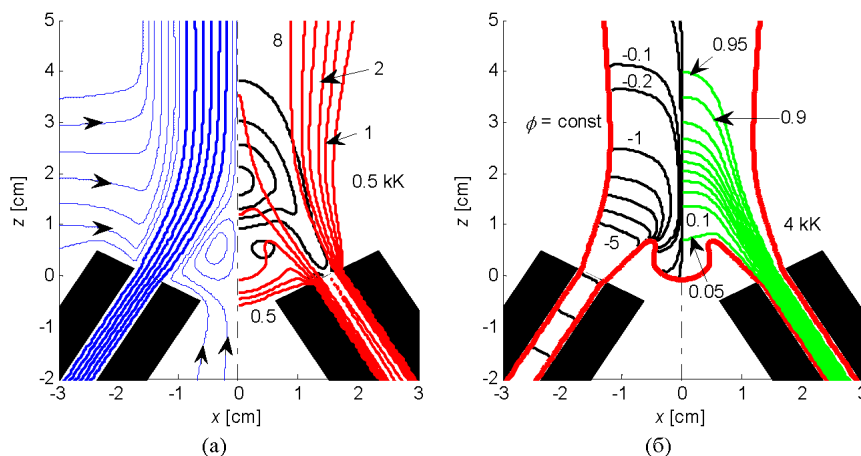


Рис. 2. Фрагменты полей: (а) линий тока газа (струйного — синие толстые и сопутствующего — синие тонкие линии слева), изотерм (красные 0.5; 1; 2 кК и далее с шагом 2 кК справа), изобар (черные справа); (б) эквипотенциалей (черные слева), линий электрического тока (зеленые 0.05; 0.1 далее с шагом 0.1 до 0.9, 0.95 справа) с границей области проводимости (красная) при $I = 4$ А/мм и $G = 0.12$ г/(с·мм).

Конвективно-кондуктивный теплоперенос и джоулево тепловыделение формируют соответствующее установившейся картине течения распределение температуры, пространственная неоднородность которого, в свою очередь, определяет картину непрерывных линий электрического тока (рис. 2).



Влияние расхода газа. Оно устанавливается по результатам расчета характеристик двухструйной электрической дуги при фиксированной силе тока $I = 4 \text{ А/мм}$ и расходах газа $G = G_C + G_A = 0.10$ (вариант 1); 0.12 (2); 0.14 (3) г/(с·мм).

Видно (рис. 3 – 4), что при фиксированной силе тока конфигурация двух токоведущих струй заметно зависит, как и в экспериментах [3], от расхода плазмообразующего газа.

При уменьшении расхода от 0.12 до 0.10 г/(с·мм) эффект газодинамического соударения струй ослабляется по сравнению с электромагнитным отталкиванием (рис. 3). В результате струи изгибаются сильнее и в области пересечения осей сопел имеют почти нулевой угол соударения. «Горб» давления на оси $x = 0$ уменьшается (рис. 4). Торoidalный вихрь заметно уменьшается и количество сопутствующего газа, подсасываемого с межсопловой границы $z = z_{\min}$ и прокачиваемого между струями, увеличивается. Поэтому осевые распределения температуры, удельной мощности джоулева тепловыделения, плотности электрического тока смещаются вверх (рис. 4). Температура заметно уменьшается, но удельная мощность джоулева тепловыделения, тем не менее, возрастает за счет роста напряженности электрического поля. Перемычка тока между струями перемещается (по максимуму плотности тока) на 1.5 см. В распределении давления появляется «яма», обеспечивающая непрерывность квазиодномерного течения сопутствующего газа между струями.

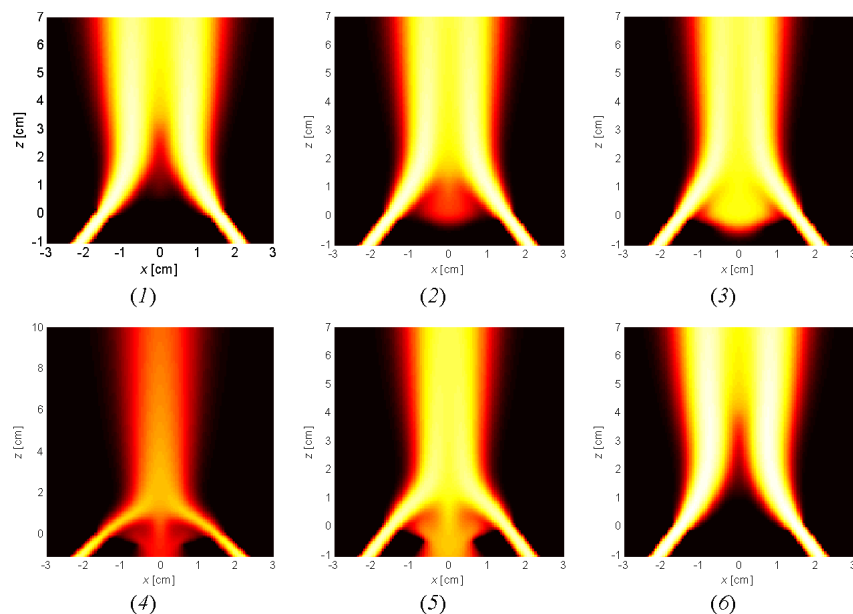


Рис. 3. Изменение конфигурации струй плазмы по «фотоизображениям» полей температуры при $I = 4 \text{ А/мм}$ и $G = 0.10$ (1); 0.12 (2); 0.14 (3) г/(с·мм); $G = 0.12 \text{ г/(с·мм)}$ и $I = 1$ (4); 3 (5); 5 (6) А/мм

Обратная описанной картина наблюдается при увеличении расхода, когда струи искривляются слабее, а доминирующий при значениях $G = 0.14 \text{ г/(с·мм)}$ и $I = 4 \text{ А/мм}$ эффект газодинамического соударения приближает картину течения к растеканию одной струи на другую (рис. 3 – 4).

Влияние силы тока. Такое влияние обнаруживается в результате расчета характеристик двухструйной электрической дуги (рис. 3 – 4) при фиксированном расходе газа $G = G_C + G_A = 0.12$ г/(с·мм) и силах тока $I = 1$ (вариант 4); 3 (5); 4 (2); 5 (6) А/мм.

Из рис. 3 – 4 можно заключить, что, при фиксированном расходе плазмообразующего газа, конфигурация двух токоведущих струй сильно зависит от величины силы тока.

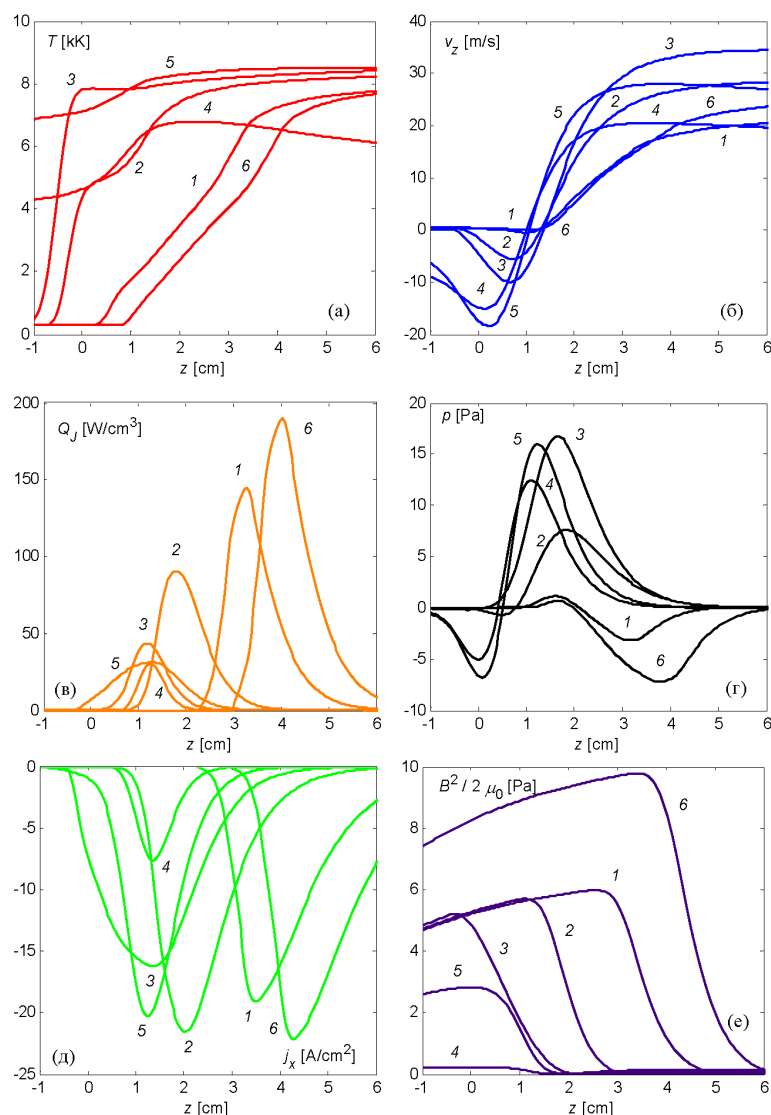


Рис. 4. Осевые ($x = 0$) распределения температуры (а); скорости (б); удельной мощности джоулева тепловыделения (в); давления (г); плотности электрического тока (д); магнитного давления (е) при $I = 4$ А/мм и $G = 0.10$ (1); 0.12 (2); 0.14 (3) г/(с·мм); $G = 0.12$ г/(с·мм) и $I = 1$ (4); 3 (5); 5 (6) А/мм

Результаты расчетов вариантов при $I = 1; 3; 4; 5$ А/мм показывают, что влияние силы тока на соотношение эффектов газодинамического соударения и электромагнитного



отталкивания неоднозначно. Вначале с ростом силы тока ($I = 1$ и 3 А/мм) эффект газодинамического соударения усиливается и реализуется картина взаимного растекания струй. Это происходит из-за увеличения импульсов катодной и анодной струй плазмы от электродов за счет взаимодействия тока струи с собственным магнитным полем. При дальнейшем увеличении силы тока ($I = 4$ и 5 А/мм) эффект газодинамического соударения ослабляется из-за все более возрастающего отталкивания струй, обусловленного взаимодействием тока одной струи с магнитным полем другой струи. Струи искривляются, и формируется общий поток плазмы. Эта особенность влияния силы тока на конфигурацию струй в двухструйном плазмотроне ранее не отмечалась.

Выводы

В результате численного анализа влияния расхода газа и силы тока на конфигурацию плазменных струй в двухструйной электрической дуге установлено, что

1. Конфигурация плазменных струй формируется, в основном, под действием антиградиента давления и электромагнитной силы и зависит от соотношения между эффектами газодинамического соударения и электромагнитного отталкивания.
2. Газодинамическое соударение приводит к образованию области повышенного давления и формирует картину взаимного растекания одной струи на другой.
3. Электромагнитное отталкивание ослабляет эффект газодинамического соударения искривлением струй и уменьшением угла их столкновения, в результате чего взаимное растекание одной струи на другой трансформируется в общий поток плазмы, в котором движущиеся в одном направлении струйные течения оказываются разделенными вовлеченным с внешней границы сопутствующим газом, формирующим тороидальный вихрь, а за ним квазиодномерный поток.
4. При фиксированной силе тока с ростом расхода плазмообразующего газа эффект газодинамического соударения усиливается и картина течения приближается к взаимному растеканию струй.
5. При фиксированном расходе влияние величины тока на конфигурацию струй неоднозначно: с ростом тока, с одной стороны, увеличиваются импульсы вытекающих из сопел струй, чем усиливается эффект газодинамического соударения, а, с другой стороны, повышается роль электромагнитного отталкивания струй.
6. Перемещение перемычки тока между струями по потоку происходит вслед за смещением электропроводящей области и обусловлено действием вовлеченного с межсопловой границы сопутствующего газа, а непрерывность тока обеспечивается за счет роста напряженности электрического поля.



Литература

1. Новиков О.Я., Тамкиви П.И., Тимошевский А.Н. и др. Многодуговые системы / Новосибирск: Наука СО РАН, 1988. – 133 с.
2. Жуков М.Ф., Засыпкин И.М., Тимошевский А.Н. и др. Электродуговые генераторы термической плазмы / Низкотемпературная плазма. т.17. – Новосибирск: Наука СО РАН, 1999. – 712 с.
3. Жеенбаев Ж., Энгельшт В.С. Двухструйный плазмотрон / Фрунзе: Ин-т физики и математики АН Кирг. ССР, 1983. – 199 с.
4. Солоненко О.П., Гуляев И.П., Смирнов А.В. Плазменная обработка и напыление порошков оксидов металлов, состоящих из полых сфер // Письма в ЖТФ. – 2008. – 34;24. – С.22.
5. Заякина С.Б., Аношин Г.Н. Сравнение распределений температуры возбуждения и интенсивностей аналитических линий благородных металлов в двухструйных дуговых плазмотронах, применяемых в атомно-эмиссионном анализе // Химия высоких энергий. – 2007. – 41;4. – С.319.
6. Таштанов Р.А., Урманбетов К.У., Жеенбаев Ж.Ж. Оптимизация параметров усовершенствованного двухструйного плазмотрона для анализа порошковых проб // Журнал аналитической химии. – 2006. – 61;61. – С. 625.
7. Кулумбаев Э.Б. Взаимодействие плазменных токоведущих струй / Источники и ускорители плазмы. – Харьков: ХАИ, 1986. – 4 с.
8. Кулумбаев Э.Б., Семенов В.Ф. Модель плоской двухструйной электрической дуги // Вестник КРСУ. – 2004. – 6. – С.14.
9. Энгельшт В.С., Гурович В.Ц., Десятков Г.А. и др. Теория столба электрической дуги / Низкотемпературная плазма. Т. 1. Новосибирск: Наука СО, 1990. – 376 с.
10. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / М.: Энергоатомиздат, 1984. – 152 с.
11. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.2 / М.: Наука, 1970. – 568 с.

INFLUENCE OF GAS FLOW RATE AND CURRENT EFFECTS ON CONFIGURATION OF PLASMA JETS IN TWO-JET ELECTRIC ARC

E.B. Kulumbaev, T.B. Nikulicheva

Belgorod State University,
Studencheskaya St., 14, Belgorod 308015, Russia,
e-mail: kulumbaev@bsu.edu.ru, nikulicheva@bsu.edu.ru

Abstract. On the basis of numerical analysis of magnetohydrodynamic equations in two-dimensional approximation for the problem of equilibrium plasma motion, it is studied the gas flow rate and current effects on configuration of plasma jets in two-jet electric arc. It is found that 1) the effect of gas dynamic impact is strengthened with growth of the gas flow rate and the picture of streamlines comes nearer to mutual spreading of jets, 2) the influence of the current growth on jet configuration is ambiguous due to mixed increase of jet pulses following from nozzles that leads to the increase of their electromagnetic repulsion.

Key words: mathematical model, MHD equations, equilibrium plasma, electric arc.



УДК 532.5.0727.12

ТЕОРИЯ ФИЛЬТРА ДАРСИ

В.П. Бушланов, И.В. Бушланов, Е.Н. Сентякова

Государственный морской университет имени адмирала Ф.Ф.Ушакова,
пр.Ленина, 93, Новороссийск, 353925, Россия, e-mail: bvp@ngs.ru

Аннотация. Из уравнения живых сил, полученного стандартным способом из уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости, с точностью до главных членов по числу Пуайзеля получена теоретическая формула для коэффициента проницаемости в классическом опыте Дарси. Из формулы следует, что величина коэффициента проницаемости обратно пропорциональна квадрату удельной поверхности и безразмерной средней скорости диссипации кинетической энергии жидкости в фильтре. Показано, что если силы инерции малы, то скорость диссипации кинетической энергии в опыте Дарси минимальна, а коэффициент проницаемости конкретного фильтра есть функция только геометрии фильтра.

Ключевые слова: закон Дарси, коэффициент проницаемости, удельная поверхность.

1. Введение. Классический закон фильтрации Дарси имеет следующий вид: $\mathbf{V} = (k/\mu)\nabla P$, где μ , \mathbf{V} , P – соответственно коэффициент динамической вязкости, средняя скорость и давление фильтруемой жидкости, k – коэффициент проницаемости. Схема классического опыта Дарси изображена на рис. 1 (из [1]). Коэффициент k определяется экспериментально с использованием представлений о модельной пористой среде и некоторых вспомогательных гипотез и считается, что k зависит от пористости и топологии открытых пор. Например, в [2] приведено выражение $k = d_M^2 \text{Sl}(\alpha_i, \varepsilon)$, где d_M – эффективный диаметр частиц, слагающих пористую среду; Sl – безразмерный коэффициент (число Слихтера), зависящий от пористости породы α_i и параметра структуры порового пространства ε (который в свою очередь зависит от формы слагающих породу частиц и от, так называемого, «коэффициента извилистости» ξ). Согласно же гипотезе Козени-Кармана [3], $k = \alpha_i^2 / [K(1 - \alpha_i^2) S_{12}]$, где S_{12} – удельная поверхность пор, K – коэффициент формы. Можно ли теоретически определить коэффициент проницаемости для классического опыта Дарси? В предлагаемой работе с точностью до главных членов по числу Пуайзеля $\text{Po} = (R/r)^2 \gg 1$, где $r = 2\alpha_i/S_{12}$ – средний поперечный размер пор, R – характерный гидравлический радиус, из уравнений Навье-Стокса получена теоретическая формула для коэффициента проницаемости вида $k = \tilde{k}/(S_{12})^2$, где \tilde{k} – безразмерный коэффициент обратно пропорциональный безразмерной средней скорости диссипации кинетической энергии жидкости.

2. Уравнение живых сил. Уравнение движения для скорости $v = \{v^1, v^2, v^3\}$ несжимаемой жидкости, содержащейся внутри пор, получим стандартным способом из уравнений Навье-Стокса:

$$\nabla^k v^k = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial v^m}{\partial t} + \nabla^k (v^m v^k) = \frac{1}{\rho^0} \nabla^k \sigma^{km} + g^m, \quad (2)$$



где $\sigma^{kq} = (-p\delta^{kq} + 2\mu\varepsilon^{kq})$, $\varepsilon^{kq} = (\nabla^k v^q + \nabla^q v^k) / 2$, ρ^0 – плотность несжимаемой жидкости, t – время, $\nabla^k = \partial/\partial x^k$ в декартовой системе координат $x = \{x^1, x^2, x^3\}$, σ^{kq} – тензор напряжений в жидкости, $g = \{g^1, g^2, g^3\}$ – вектор ускорения силы тяжести, p – давление жидкости. Все физические величины здесь относятся к жидкости внутри пор.

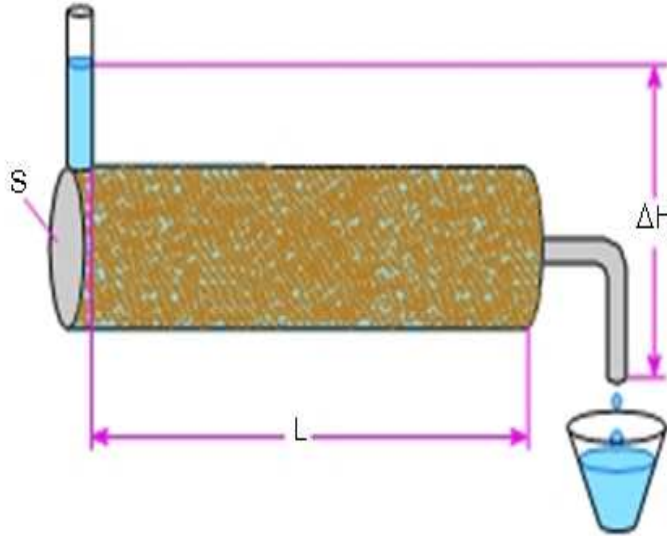


Рис. 1

Введем функцию напора $\Phi = -p/\rho^0 - v^2/2 + \mathbf{g}\mathbf{x}$ и, учитывая уравнение (1) запишем уравнение (2), в следующем эквивалентном виде:

$$\frac{\partial v^m}{\partial t} + (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v})^m = \nabla^m \Phi + 2\nu \nabla^q \varepsilon^{qm}, \quad (3)$$

где $\boldsymbol{\Omega} = \text{rot } \mathbf{v}$, $\nu = \mu/\rho^0$. Умножим скалярно уравнение (3) на вектор скорости \mathbf{v} и проинтегрируем по объему жидкости W содержащейся в порах и в подводящей и отводящей трубках рис. 1. С учетом уравнения неразрывности и тождества $\varepsilon^{pq} (\nabla^p v^q - \nabla^q v^p) = 0$, получим

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \langle v^2 \rangle}{\partial t} = (\nabla, (\Phi \mathbf{v})) + 2\nu \nabla^q (v^p \varepsilon^{pq}) - 2\nu (\varepsilon^{pq})^2. \quad (4)$$

Проинтегрируем (4) по объему W и в первых двух интегралах в правой части перейдем от объемных интегралов к поверхностным. С учетом равенства нулю скорости на твердых стенках трубок и на поверхности пор получим

$$\begin{aligned} \frac{W}{2} \frac{\partial \langle v^2 \rangle}{\partial t} + 2\nu W \langle (\varepsilon^{pq})^2 \rangle_W = \\ = \int_{S_1+S_2} [(\mathbf{v}, \mathbf{n}) \Phi + \nu (\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{v} \times \mathbf{n}) + \nu (\mathbf{n}, \nabla) v^2] ds, \end{aligned} \quad (5)$$



где S_1, S_2 – соответственно плоские торцевые поверхности подводящей и отводящей трубок, $\langle \cdot \rangle_W$ – знак осреднения по объему жидкости W .

3. Безразмерная форма уравнения живых сил. Введем безразмерные (с волной) параметры следующим образом: $\mathbf{x} = r\tilde{\mathbf{x}}$, r – средний радиус сечения каналов открытых пор, $\tilde{\mathbf{x}} = R\tilde{\mathbf{x}}$ – «средний» радиус-вектор для отдельно взятой открытой поры, R – размер порядка размера фильтра Дарси, $r \ll R$, $t = \tilde{t}R/V_0$, $\Phi = (\Phi_2 - \Phi_1)\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}$ – усредненная по отдельно взятой поре функция напора, $v = V_0\tilde{v}$, $\rho = \rho_0\tilde{\rho}$, где V_0 – размер скорости, $\Phi_2 - \Phi_1$ разность напоров на характерной длине гидравлического радиуса $R = L$, где L – длина фильтра, где $G\Phi_k/\rho_0 = \int_{\tilde{S}_k} (\mathbf{v}, \mathbf{n}) \Phi ds$, $k = 1, 2$ и G – массовый расход жидкости.

Покажем, что r порядка $2\alpha_i/S_{12}$.

1). Пусть пористая среда состоит из каналов, а N число каналов в единице объема, l – средняя длина каналов. Пористость и удельная поверхность соответственно равны $\alpha_i = \pi r^2 l N$, $S_{12} = 2\pi r l N$. Из последних соотношений имеем $r = 2\alpha_i/S_{12}$.

2) Пусть пористая среда составлена из отдельных частиц (например, песок, глина, волокна и т.п.). Искомая оценка получится из уравнения $\alpha_i = S_{12}r/2$, которое выражает тот факт, что величина порового пространства равна половине удельной поверхности умноженной на величину среднего расстояния между поверхностями частиц. Уравнение (5) в безразмерном виде запишется следующим образом (волну над безразмерными величинами для упрощения записи опустим):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial \langle \mathbf{v}^2 \rangle_W}{\partial t} + 2 \frac{R^2}{r^2} \frac{1}{\text{Re}} \langle (\mathcal{E}^{pq})^2 \rangle_W = \\ & = \frac{R^2}{\alpha S} \int_{S_1+S_2} \left[\text{Eu} \cdot \Phi \cdot (\mathbf{v}\mathbf{n}) + \frac{R}{r} \frac{1}{\text{Re}} (\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{v} \times \mathbf{n}) + \frac{R}{r} \frac{1}{\text{Re}} (\mathbf{n}, \nabla) \mathbf{v}^2 \right] ds, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\text{Eu} = (\Phi_2 - \Phi_1)/V_0^2$, $\text{Re} = R\rho_0 V_0/\mu$, соответственно, безразмерные числа Эйлера и Рейнольдса, где S – площадь сечения фильтра, α – средняя пористость по всему объему фильтра, $W = \alpha RS$ (для простоты пренебрегли объемом трубок по сравнению с объемом пор фильтра). Выберем $r = 1/S_{12}$, $V_0 = \rho_0 (\Phi_2 - \Phi_1) / (R\mu S_{12}^2)$. Заметим, что выбранный размер скорости имеет вид закона Дарси. Числа Рейнольдса и Пуайзеля соответственно равны $\text{Re} = \rho_0^2 (\Phi_2 - \Phi_1) / (\mu^2 S_{12}^2)$, $\text{Po} = \rho_0 (\Phi_2 - \Phi_1) R / (\mu_i V_0) = (RS_{12})^2 = (R/r)^2$, поэтому $\text{Eu} = (RS_{12})^2 / \text{Re} = \text{Po}/\text{Re}$. Так как $r \ll R$, то $\text{Po} = (RS_{12})^2 \gg 1$.

Покажем, что при фильтрации в опыте Дарси рис. 1 средняя безразмерная скорость диссипации кинетической энергии приближенно равна среднему безразмерному квадрату вихря скорости. Из векторного тождества $\nabla \text{div} \mathbf{v} = \nabla^2 \mathbf{v} + \text{rot rot} \mathbf{v}$, учитывая (1) имеем $2(\mathbf{e}^p, \nabla) \mathcal{E}^{pq} = \Delta \mathbf{v} = -\text{rot} \boldsymbol{\Omega}$. Умножая полученное равенство скалярно на вектор \mathbf{v} с учетом тождества $(\mathbf{v}, \text{rot} \boldsymbol{\Omega}) = (\boldsymbol{\Omega})^2 + (\nabla, (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}))$, получим уравнение $-2\nabla^q (v^p \mathcal{E}^{pq}) + 2(\mathcal{E}^{pq})^2 = (\boldsymbol{\Omega})^2 + (\nabla, (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}))$.

Проинтегрируем последнее уравнение по объему W , учитывая равенство нулю скоростей на поверхностях трубок и пор. Перейдем в первом слагаемом левой части равенства и втором слагаемом правой части к поверхностным интегралам, тогда получим



после обезразмеривания следующее уравнение:

$$\left\langle \left(\tilde{\mathcal{E}}^{pq} \right)^2 \right\rangle_W = \left\langle \left(\tilde{\Omega} \right)^2 \right\rangle_W + \text{Po}^{-1/2} \int_{S_1+S_2} \left[\left(\mathbf{n}, \tilde{\nabla} \right) \tilde{v}^2 + 2 \left(\tilde{\Omega}, \mathbf{n} \times \tilde{v} \right) \right] d\tilde{s}, \quad (7)$$

Так как на торцах трубок вектора скорости и нормали почти параллельны то второй член в правой части равен произведению $\text{Po}^{-1/2}$ на малую величину безразмерного поверхностного интеграла. Пренебрегая указанным членом в уравнении (7), приближенно получим

$$\left\langle \left(\tilde{\mathcal{E}}^{pq} \right)^2 \right\rangle_W = \left\langle \left(\tilde{\Omega} \right)^2 \right\rangle_W, \quad (8)$$

что и требовалось доказать.

4. Приближение при больших значениях числа Пуайзеля. Сохраняя в уравнении (6) только главные члены по числу Пуайзеля (отметим к тому же, что в торцевых сечениях трубок векторы скоростей и нормалей параллельны и производные квадратов скоростей вдоль оси трубок малы), выбирая размер производных скорости как V/r , где $V = G/(\rho_0 \alpha S)$ и $r = 2\alpha/S_{12}$, и возвращаясь к размерным переменным, получим уравнение Дарси:

$$V = \frac{k}{\nu_i} \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{R}, \text{ где } k = \frac{4\alpha^2}{S_{12}^2} \left/ \left\langle 2 \left(\tilde{\mathcal{E}}^{pq} \right)^2 \right\rangle_W \right. . \quad (9)$$

5. Выводы. Проанализируем формулу (9). Порядок величины безразмерного коэффициента проницаемости $\tilde{k} = kS_{12}^2$ определяется знаменателем дроби, который равен среднему по объему жидкости значению безразмерной скорости диссипации кинетической энергии. Если размер модуля производной скорости принятый нами равным $G/(r\rho_0\alpha S)$ «угадан» верно, то безразмерная скорость диссипации порядка единицы, а значит в указанном случае $\tilde{k} \sim 4\alpha^2$. Уравнение (9) показывает, что коэффициент проницаемости k определяется не только топологией пор фильтра, но и средней безразмерной скоростью диссипации кинетической энергии (или учитывая (8) средним безразмерным квадратом вихря скорости), и что есть принципиальная возможность определить указанный коэффициент путем прямых численных расчетов на основе решений уравнения Навье-Стокса.

Докажем следующее утверждение: для фильтра в опыте Дарси, изображенном на рис. 1, течение с малыми силами инерции обладает наименьшей общей скоростью диссипации из всех других течений несжимаемой жидкости в той же области, если расходы жидкости для всех течений равны, давления в течении с минимальной скоростью диссипации на торцах постоянны и скоростями \mathbf{v}_1 и \mathbf{v}_2 на торцах (соответственно для течений с минимальной скоростью диссипации энергии и указанного всякого другого течения) параллельны оси, а на поверхностях трубок и пор скорости равны нулю. Схема доказательства аналогичная [4] (стр. 290). Имеем

$$\int_W (\mathcal{E}_2^{pq} - \mathcal{E}_1^{pq}) \mathcal{E}_1^{pq} dw = \int_W (\mathcal{E}_2^{pq} - \mathcal{E}_1^{pq}) \nabla^p v_1^q dw =$$



$$\begin{aligned}
 &= 1/2 \int_{S_1+S_2} \left[\left((\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1), (\mathbf{n}, \nabla) \mathbf{v}_1 \right) + \left(\mathbf{n}, ((\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1), \nabla) \mathbf{v}_1 \right) \right] ds - \\
 &- 1/2 \int_W \left((\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1), \Delta \mathbf{v}_1 \right) dw = 1/ (2\mu) \int_W \left((\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1), (\nabla p - \rho^0 \mathbf{g}) \right) + \\
 &+ \int_{S_1+S_2} (\mathbf{n}, (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)) (\mathbf{n}, \nabla) (\mathbf{n}, \mathbf{v}_1) ds = 1/ (2\mu) \int_{S_1+S_2} p (\mathbf{n}, (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)) ds = 0
 \end{aligned}$$

, где было учтено постоянство давлений на торцах и равенство расходов на торцах, и что $(\mathbf{n}, \nabla) (\mathbf{n}, \mathbf{v}_1) = 0$ из уравнения неразрывности на плоских торцах трубок, в котором производные нулевых касательных компонент скоростей вдоль плоских торцов равны нулю. Отсюда следует доказываемое:

$$2\mu \int_W \varepsilon_2^{pq} \varepsilon_2^{pq} dw = 2\mu \int_W [\varepsilon_1^{pq} \varepsilon_1^{pq} + (\varepsilon_2^{pq} - \varepsilon_1^{pq}) (\varepsilon_2^{pq} - \varepsilon_1^{pq})] dw. \quad (10)$$

Таким образом, в классическом опыте Дарси для стационарных течений в пористой среде с малыми силами инерции реализуется течение с минимальной скоростью диссипации кинетической энергии и из (9) – при заданном перепаде напора с минимальным расходом жидкости (или другой вариант – с заданным расходом реализуется минимальный перепад напора).

Покажем, что в законе Дарси (в уравнении (9)) $k = \text{const}$ для течений несжимаемой жидкости с малыми силами инерции и данной топологией пор. Уравнения и граничные условия течения с малыми силами инерции имеют вид:

$$\nabla^k v^k = 0, \quad 0 = \frac{1}{\rho^0} \nabla^k \sigma^{km} + g^m = \nabla^m \Phi_\delta + \nu \Delta v^m, \quad (11)$$

где $\Phi_\delta = -p/\rho^0 + \mathbf{g}\mathbf{x}$.

Положим $v = 0$ на поверхности пор и боковой поверхности трубок; $v = V_p$ на торцах S_1, S_2 трубок, где $\mathbf{V}_p = \left\{ \frac{2G}{\rho_0 \pi Y^2} \left(1 - \frac{y^2}{Y^2} \right), 0, 0 \right\}$ – скорость течения Пуайзеля в соответствующей трубке, y – расстояние до оси, Y – радиус трубки (для простоты здесь трубки одного радиуса) и $G = \alpha \rho_0 S V$ – расход в трубке и фильтре. При этом $\Phi_\delta = \Phi_1$ на S_1 и $\Phi_\delta = \Phi_2$ на S_2 .

Введем новую функцию $\Phi_\Delta = \Phi_\delta - \Phi_1$ и проведем обезразмеривание уравнений (11) и граничных условий, выбирая размеры скоростей и расстояний такие же, как при получении уравнения Дарси (9), тогда получим следующие безразмерные (волну у безразмерных параметров опустим) уравнения и граничные условия:

$$\nabla^k v^k = 0, \quad 0 = \frac{4\alpha^2}{\tilde{k}} \left(\frac{R}{r} \right) \nabla \Phi_\Delta + \Delta \mathbf{v}, \quad (12)$$

где $\mathbf{v} = 0$ на поверхности пор и боковой поверхности трубок; $\mathbf{v} = \mathbf{V}_p$ на торцах S_1, S_2 трубок, где $\mathbf{V}_p = \left\{ \frac{2\alpha S}{\pi Y^2} \left(1 - \frac{y^2}{Y^2} \right), 0, 0 \right\}$, $\Phi_\Delta = 0$ на S_1 и $\Phi_\Delta = 1$ на S_2 .



Полученные безразмерные уравнения (12) и граничные условия зависят только от геометрических параметров фильтра и конкретной топологии пор (не зависят от расхода и перепада напора). Поэтому, решая полученную безразмерную задачу, находим безразмерную среднюю диссипацию кинетической энергии, а значит согласно (9) и коэффициент проницаемости k , зависящий только от геометрии фильтра и конфигурации пор, что и требовалось показать.

Введем для фильтра Дарси на рис. 1 понятие эквивалентного фильтра. Пусть имеем фильтр как в классическом опыте Дарси (фильтр Дарси). Поставим ему в соответствие фильтр, в котором поры образованы одинаковыми параллельными цилиндрами радиуса a (назовем его эквивалентный фильтр) и в котором точно такие же R, S, Y, α , расход жидкости G и коэффициент проницаемости $k = \nu V / \left[\frac{(\Phi_2 - \Phi_1)}{R} \right]$. В цилиндрических каналах имеем течение Пуайзеля, поэтому: $\alpha \rho_0 S V = G = \frac{\pi S N a^4 \rho_0 (\Phi_2 - \Phi_1)}{8 \nu R}$, где N – число окружностей (пересечений цилиндров с торцевыми сечениями фильтра) на единицу площади, $\alpha = \pi N a^2$. Отсюда находим

$$k = \nu V / \left[\frac{(\Phi_2 - \Phi_1)}{R} \right] = \frac{a^2}{8}. \quad (13)$$

Из (12) находится радиус цилиндрических каналов $a = 2\sqrt{2k}$ эквивалентного фильтра, или другими словами, параметром a можно выбрать параметр k такой же как в фильтре Дарси. В эквивалентном фильтре удельная поверхность равна

$$S_{12\exists} = 2\pi a N = \alpha / \sqrt{2k}, \quad (14)$$

а безразмерный коэффициент проницаемости и безразмерная средняя скорость диссипации кинетической энергии соответственно равны

$$\tilde{k}_{\exists} = S_{12\exists}^2 k = \alpha^2 / 2, \quad \left\langle 2 \left(\tilde{\mathcal{E}}^{pq} \right)^2 \right\rangle_{w\exists} = 8.$$

Таким образом, в эквивалентном фильтре и фильтре Дарси: совпадают коэффициенты проницаемости k , пористость α , средние скорости диссипации кинетической энергии

$$V^2 \left\langle 2 \left(\tilde{\mathcal{E}}^{pq} \right)^2 \right\rangle_w / \left(\frac{4\alpha^2}{S_{12}^2} \right) = \frac{1}{k} \left(\frac{G}{\alpha \rho_0 S} \right)^2; \quad (16)$$

совпадают все геометрические параметры, кроме удельной поверхности S_{12} , которая в эквивалентном фильтре определяется из (14), а в фильтре Дарси равна

$$S_{12} = S_{12\exists} 2\sqrt{2} / \sqrt{\left\langle 2 \left(\tilde{\mathcal{E}}^{pq} \right)^2 \right\rangle_w}.$$



Таким образом, в задачах фильтрации, где не используется параметр удельной поверхности, реальную пористую среду можно заменить эквивалентной, используя понятие эквивалентного фильтра. Отметим, что при малых силах инерции и в эквивалентном фильтре также реализуется течение с минимумом средней скорости диссипации кинетической энергии.

Удивительно то, что согласно (16) во всех реальных фильтрах Дарси с различными величинами удельной поверхности S_{12} (и с разной топологией пор!), но с одинаковыми коэффициентами проницаемости и средней скоростью течения V , в течениях с малыми силами инерции реализуется одна и та же величина средней скорости диссипации кинетической энергии.

Литература

1. Ентов В.М. Теория фильтрации // Соровский образовательный журнал. – 1998. – 2. – С.121-128.
2. Лейбензон Л.С. Движение природных жидкостей и газов в пористой среде / М-Л: ОГИЗ. Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1947. – 244 с.
3. Гольдберг В.М., Скворцов Н.П. Проницаемость и фильтрация в глинах / М.: Недра, 1986. – 160 с.
4. Бэтчелор Дж. Введение в динамику жидкости / М: Мир, 1973. – 758 с.

DARSI'S FILTER THEORY

V.P. Bushlanov, I.V. Bushlanov, E.N. Sentyakova

Sea State University of F.F. Ushakov,
Lenina Av., 93, Novorossiysk, 353925, Russia, e-mail: bvp@ngs.ru

Abstract. From equation of manpowers obtained by the standard way on the basis of Nave-Stokes' equation described incompressible liquid motion, to within the main term corresponding to the case of large Poiseuille's number, theoretical formula for permeability factor in classical Darsi experience is obtained. From the formula it follows that the value of permeability factor is inversely proportional to the squared specific surface and to dimensionless average dissipation velocity of liquid kinetic energy in the filter. It is shown that the velocity of kinetic energy dissipation in Darsi's experience is minimal if inertia force is small and also the permeability factor of the concrete filter only depends on the filter geometry.

Key words: Darsi's law, permeability factor, specific surface.



УДК 519.3

СЕРЕНДИПОВЫ АППРОКСИМАЦИИ. ПОУЧИТЕЛЬНЫЕ ОШИБКИ И КОНТРПРИМЕРЫ

И.А. Астионенко, Е.И. Литвиненко, А.Н. Хомченко

Херсонский национальный технический университет,
Бериславское шоссе, 24, Херсон, 73008, Украина, e-mail: mmkntu@gmail.com

Аннотация. В работе приведены контрпримеры, доказывающие ошибочность некоторых утверждений теории серендиповых аппроксимаций.

Ключевые слова: конечный элемент серендипова семейства, лагранжево семейство, многопараметрическая интерполяция, модифицированный базис, «скрытые» параметры.

1. Введение. Серендиповы аппроксимации — малоизученная составляющая теории приближения функций двух и трех аргументов. Возникли серендиповы аппроксимации в связи с появлением и развитием метода конечных элементов (МКЭ). История МКЭ началась с замечательной идеи выдающегося математика Р. Куранта, которую он опубликовал в 1943 г. Сначала идея Куранта не заинтересовала исследователей, поскольку ее реализация требовала небывалых объемов вычислительной работы. После появления ЭВМ метод стал активно разрабатываться преимущественно усилиями инженеров. Именно инженеры и ученые-прикладники, а не математики-теоретики сразу же оккупировали вычислительные машины с целью получить на них ответы на практические вопросы. Большинство из них были хорошо знакомы с методами сопротивления материалов и строительной механики, в том числе и с матричными методами. Поэтому МКЭ, возникший как переложение для ЭВМ матричных методов, использовавшихся при расчетах стержневых и балочных систем, органично, быстро и легко вошел в практику инженерных расчетов. По мнению А.Н. Линькова быстрое развитие и популярность МКЭ были предопределены профессиональной и психологической подготовкой потребителей. Многие считают (и не без оснований), что именно недостаток математических знаний у инженерно ориентированных специалистов стал главной причиной появления и распространения в МКЭ неверных гипотез, неадекватных моделей, сомнительных результатов и откровенных ошибок. Понадобилось более 20 лет, чтобы некоторые заинтересованные исследователи пришли к пониманию того, что разработчики основ МКЭ слишком переоценили возможности матричной алгебры. Оказалось, что далеко не все результаты теории приближения функций одного аргумента автоматически распространяются на функции двух и трех аргументов. Нам кажется, что наибольшее количество ошибок связано с конструированием функций формы (базисных функций) конечных элементов, в частности, элементов серендипова семейства. Эти элементы стали настоящим открытием в МКЭ. Серендиповы аппроксимации интересны и привлекательны как неиссякаемый источник оригинальных идей и новых результатов. Ниже рассматриваются лишь некоторые повторяющиеся в книгах ошибочные утверждения, для которых нам удалось подобрать надлежащие контрпримеры.



2. Анализ предшествующих публикаций. История серендиповых элементов началась с применения параметрического отображения порождающего стандартного элемента в элемент с криволинейными границами. Один из первых изопараметрических элементов был использован Тейгом в 1961 г. [1]. Эту идею затем обобщили и подробно разработали Эргатудис, Айронс, Зенкевич [2]. Изопараметрические элементы на основе квадрата (для двумерных задач) и куба (для трехмерных задач) по предложению Зенкевича стали называть элементами серендипова семейства. Происхождение термина «серендипов» объясняется в книге Зенкевича [3]. Построение изопараметрических (серендиповых) КЭ основано на порождающих элементах в форме квадрата и куба и осуществляется подбором [1,3,4] полиномиальных кривых и поверхностей, проходящих через заданные узлы на сторонах криволинейного четырехугольника или на ребрах искривленного гексаэдра. Подбор осуществляется так же, как и аппроксимация финитной функции на элементе. В этом отражена двойственная роль базиса изопараметрического элемента. В основной части статьи мы полемизируем с авторами книг [3,5-7].

Популярность МКЭ неуклонно растет, трудными проблемами метода уже давно интересуются профессиональные математики. Появились книги по МКЭ, написанные математиками, например, [4,6,8,9]. Однако в теории серендиповых аппроксимаций спорных вопросов и противоречивых утверждений не стало меньше. Не случайно многие авторы сходятся на том, что серендиповы элементы плохо поддаются какой-либо формализации. Нам кажется, что сегодня есть основания утверждать обратное. Цель статьи — показать на конкретных примерах, что привлечение новых идей и новых методов в теорию серендиповых аппроксимаций способно изменить (иногда радикально) некоторые привычные представления.

3. Основная часть. О серендиповых конечных элементах (СКЭ) пишут многие авторы, правда, не все применяют термин “серендипово семейство”. За последние 40 лет в многочисленных книгах по МКЭ не появилось ничего нового об СКЭ. Все авторы в точности повторяют результаты 1968 г. [2], полученные Зенкевичем и его коллегами. Как ни странно, ни в одном источнике нет четкого определения СКЭ. Поэтому мы приводим здесь наиболее простое определение из [4,10]: серендиповы конечные элементы — это прямоугольники и прямоугольные призмы, не имеющие внутренних узлов. Сразу вспоминается гранецентрированный куб, который не имеет внутренних узлов, однако в серендипово семейство не входит.

Наш краткий обзор мы начнем с замечательной книги Зенкевича [3] — самого авторитетного специалиста по МКЭ. Напомним, что в центре нашего внимания находится серендипово семейство конечных элементов. Для примера возьмем элемент бикубической интерполяции (3-го порядка). Стандартный квадрат имеет размеры 2×2 ($|\xi| \leq 1, |\eta| \leq 1$) и 12 равномерно расположенных узлов на границе (рис. 1).

Стандартный базис бикубической интерполяции первоначально был получен подбором благодаря удивительной изобретательности и фантастической интуиции авторов работы [2]. Функции этого базиса имеют вид:

для угловых узлов

$$N_i(\xi_i, \eta_i) = \frac{1}{32}(1 + \xi\xi_i)(1 + \eta_i\eta)[9(\xi^2 + \eta^2) - 10], \quad (1)$$



$$i = 1, 4, 7, 10; \quad \xi_i \eta_i = \pm 1.$$

для промежуточных узлов

$$N_i(\xi_i, \eta_i) = \frac{9}{32}(1 - \xi^2)(1 + \eta_i \eta)(1 + 9\xi_i \xi), \quad (2)$$

$$i = 2, 3, 8, 9; \quad \xi = \pm \frac{1}{3}; \eta_i = \pm 1.$$

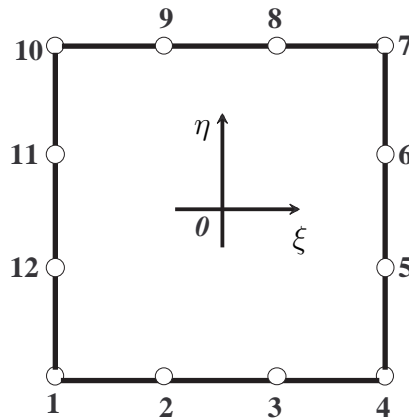


Рис. 1. СКЭ 3-го порядка

Остальные функции получаются из (2) перестановкой ξ и η .

Нагрузка, вызванная силой тяжести элемента, локализуется по узлам в соответствии с формулой:

$$p_i = \frac{1}{S} \iint_S N_i(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (3)$$

где D – область, занимаемая элементом; S – площадь элемента.

Парадокс всех стандартных СКЭ высших порядков в том, что в угловых точках всегда получается отрицательная нагрузка — противоестественный результат. Зенкевич [3, с. 183] соглашается с тем, что такое распределение противоречит здравому смыслу, однако советует смириться с этим, поскольку результат согласован с теорией. Ситуация напоминает гидродинамику 19 века, когда инженеры наблюдали то, чего не могли объяснить, а математики объясняли то, чего не могли наблюдать. И все же мы благодарны Зенкевичу за то, что он первый и единственный, кто указал на этот недостаток СКЭ высших порядков. Для многих последователей этот парадокс послужил стимулом к поиску альтернативных СКЭ. Ниже мы приводим один из первых альтернативных базисов, полученных в 1982 г. [11]. Эти базисы реабилитировали серендипово семейство и положили начало последовательному устранению других недостатков СКЭ.

$$N_i(\xi_i, \eta_i) = \frac{1}{32}(1 + \xi\xi_i)(1 + \eta_i\eta)[9(1 - \xi_i\xi - \eta_i\eta)^2 - 1], \quad (4)$$

$$i = 1, 4, 7, 10; \quad \xi_i \eta_i = \pm 1;$$



$$N_i(\xi_i, \eta_i) = \frac{9}{32}(1 - \xi^2)(1 + \eta_i\eta)(9\xi_i\xi + \eta_i\eta), \quad (5)$$

$$i = 2, 3, 8, 9; \quad \xi = \pm \frac{1}{3}; \eta_i = \pm 1.$$

Так было получено отвечающее здравому смыслу поузловое распределение равномерной массовой силы — физически правдоподобное и математически безупречное. Здесь трудно устоять перед соблазном привести слова известного ученого Е.С. Вентцель: «Из двух крайностей: «математика без здравого смысла» и «здравый смысл без математики» предпочтение, безусловно, надо отдать второй [12]».

Следующая книга [5] написана известными математиками МГУ им. М.В.Ломоносова. Она выдержала три издания с исправлениями и дополнениями. Найти ошибку в такой книге очень трудно. Остается надеяться на какую-либо неточность или устаревшее утверждение. Наше внимание, естественно, привлек материал, посвященный специфически трудным задачам интерполирования функций многих независимых переменных. На с. 133 авторы замечают, что задача интерполирования может иметь множество решений, если не требовать, чтобы степень интерполяционного многочлена была наименьшей. Возможно, авторы имели в виду лагранжево семейство элементов, однако они абсолютно точно предсказали неоднозначность интерполирования задолго до появления СКЭ. А вот ослаблять требования к степени интерполяционного полинома совсем не обязательно. Сравнение стандартного базиса (1), (2) и альтернативного (4), (5) показывает, что они имеют одну и ту же степень — четвертую. Появление «скрытого» параметра — результат применения нового вероятностно-геометрического метода конструирования базисов СКЭ. Этот параметр позволяет управлять рельефом поверхности, «нависающей» над СКЭ. Оказалось, что благодаря «скрытому» параметру можно изменить поузловое распределение нагрузки, матрицу Грама, след матрицы жесткости КЭ, конструировать базисы, гармонические по Привалову или Кёбе и т.п. Доказано, что на бикубическом элементе число «скрытых» параметров колеблется от 1 до 4. В этой связи мы должны вернуться к [3], чтобы процитировать ошибочное утверждение Зенкевича. На с. 127 автор пишет: «... каждому элементу можно поставить в соответствие несколько неузловых параметров. Этот прием обычно не имеет больших преимуществ, так как введение неузловых параметров не изменяет функцию формы на границах». Здесь Зенкевич явно недооценивает изменения функции формы, происходящие внутри КЭ. Теперь мы должны уточнить смысл терминов «интерполяция» и «аппроксимация». В случае СКЭ реализуются обе процедуры одновременно: на границах элемента — интерполяция, внутри — аппроксимация.

Обратимся к книге [6], написанной математиками из Великобритании. Книга написана не только специалистов, но также студентам математических и инженерных специальностей. Как и следовало ожидать, при описании изопараметрических аппроксимаций (глава 4) авторы даже не упоминают о возможности интуитивного подбора подходящих полиномов. Они рекомендуют достаточно общий, однако, весьма трудоёмкий алгоритм построения изопараметрических аппроксимаций. На первом шаге решается задача интерполирования по Лагранжу. Для этого КЭ должен иметь необходимое количество узлов, в том числе и внутренних, которые по известным причинам



нежелательны. На следующем шаге осуществляется исключение внутренних параметров (конденсация, сгущение). Кстати, правильно исключить внутренние параметры не так просто. Возможны варианты. Таков путь превращения элемента лагранжева семейства в элемент серендипова семейства. Непонятно, почему авторы предпочли этот (не самый лучший) метод. Тем более, что за 5 лет до выхода книги [6] Тейлор предложил свой простой, наглядный (элегантный, по мнению Галлагера) метод генерирования базиса СКЭ, исключающий необходимость составления и решения СЛАУ. Мы согласны с мнением Галлагера, однако и метод Тейлора сегодня не лучший, поскольку в традиционном виде он не приспособлен к генерированию многопараметрических полиномов. Для этого хорошо приспособлены вероятностно-геометрический, геометрический (модификации метода Уачспресса) и комбинированный алгебро-геометрический методы. Примеры стандартных базисов СКЭ можно найти в доступной литературе, например, в [3,4,7], многопараметрические (со «скрытыми» параметрами) базисы — в статье [13], которая содержит ссылки и на другие работы авторов по этой тематике.

Отдельного рассмотрения заслуживает СКЭ четвертого порядка (quartic). Некоторые, наиболее осведомленные в серендиповых аппроксимациях, авторы [7] убеждают в том, что при построении базисов СКЭ четвертого и более высоких порядков без внутренних узлов не обойтись. Это означает, что для плоского СКЭ четвертого порядка 16 узлов недостаточно, а для пространственного недостаточно 44 узлов. Выходит, что без дополнительных узлов не срабатывает ни один из проверенных подходов: ни метод обратной матрицы, ни метод Тейлора. Однако, по-видимому, нельзя считать задачу в принципе неразрешимой. Сошлемся на статью [14], в которой читатель найдет контр-примеры, опровергающие утверждение Зенкевича и Моргана.

4. Выводы. В стандартных моделях СКЭ а priori заложены избыточные немотивированные ограничения, регламентирующие поведение базисных функций внутри КЭ. Эти условия предельно (до одного элемента) сокращают множество подходящих СКЭ.

Литература

1. Оден Дж. Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред / М.: Мир, 1976. – 464 с.
2. Ergatoudis I., Irons B.M., Zienkiewicz O.C. Curved isoperimetric «quadrilateral» elements for finite element analysis // Internat. J. Solids Struct. – 1968. – 4. – P.31-42.
3. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике / М.: Мир, 1975. – 541 с.
4. Норри Д., де Фриз Ж. Введение в метод конечных элементов / М.: Мир, 1981. – 304 с.
5. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Т.1 / М.: Наука, 1966. – 632 с.
6. Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными / М.: Мир, 1981. – 216 с.
7. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация / М.: Мир, 1986. – 318 с.
8. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов / М.: Мир, 1977. – 350 с.
9. Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы / М.: Наука, 1981. – 416 с.
10. Немчинов Ю.И. Расчет пространственных конструкций (метод конечных элементов) / К.: Будівельник, 1980. – 232 с.
11. Хомченко А.Н. Некоторые вероятностные аспекты МКЭ / Ивано-Франк. ин-т нефти и газа. – Ивано-Франковск, 1982. – 9 с. – Деп. в ВИНТИ 18.03.82, № 1213.



12. Математики о математике: Сборник статей / М.: Знание, 1982. — 64 с.
13. Астионенко И.А., Литвиненко Е.И., Хомченко А.Н. Конструирование многопараметрических полиномов на бикубическом элементе серендипова семейства // Научные ведомости БелГУ. Серия: Математика, Физика. — 2009. — №5(60);16. — С. 15-31.
14. Хомченко А.Н., Камаева С.О. Чи потрібний 17 вузол серендиповому елементу 4-го порядку? / Вестник Херсонского нац. техн. ун-та. — 2009. — 2(35). — С.455-461.

**SERENDIPITY APPROXIMATIONS.
DIDACTIC MISTAKES AND COUNTEREXAMPLES**

I.A. Astionenko, Ye.I. Litvinenko, A.N. Khomchenko

Kherson National Technical University,
Berislavskoe Shosse, 24, Kherson, 73008, Ukraine, e-mail: mmkntu@gmail.com

Abstract. Counterexamples proving the falsity of some statements of serendipity approximation theory are given.

Key words: finite element of serendipity family, Lagrange's family, multiparameter interpolation, modified basis, "hidden" parameters.



УДК 517.987

О СВОЙСТВЕ ВНЕШНИХ ГРАНИЦ ПОЛНЫХ КЛАСТЕРОВ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Ю.П. Вирченко

НИУ Белгородский государственный университет,
Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Доказывается тождество, связывающее величины внешней и внутренней границ так называемых полных конечных кластеров на квадратной решетке.

Ключевые слова: квадратная решетка, полный конечный кластер, внешняя граница.

1. Введение. Решение одной из основных задач теории перколяции – вычисление порога перколяции, в настоящее время, понимается как получение возможно более точных нижних и верхних оценок этой характеристики. В дискретных двумерных задачах верхние оценки порога перколяции основаны на так называемом кластерном разложении, которое представляет собой сумму слагаемых, каждое из которых является вероятностью появления в случайной реализации конечного кластера, содержащего фиксированную вершину бесконечного графа, на котором ставится задача о появлении перколяции. В связи с этим, точность верхних оценок порога перколяции связана с точностью верхних оценок этих вероятностей. Обычно, такого рода верхние оценки получаются на основе понятия внешней границы конечного кластера и выражаются в терминах длины этой границы. Для возникновения данного конечного кластера необходимым условием является пустота пересечения внешней границы со случайной реализацией. Это условие сразу приводит к простым оценкам, которые оказываются, однако, довольно грубыми. Поэтому, для получения их уточнений, необходим учет внутренней структуры кластера, в простейшем случае, – учет состояния случайной реализации на множестве вершин кластера, непосредственно прилегающих к внешней границе, которые составляют его так называемую внутреннюю границу. При этом возникает потребность в выражении этого состояния в терминах длины внешней границы, чтобы связать единой числовой характеристикой оба множества – внешнюю и внутреннюю границы. В настоящем сообщении доказывается простое тождество, связывающее длины внешней и внутренней границ в случае так называемых полных кластеров на квадратной решетке, обладающих топологически простой границей.

2. Постановка задачи. Рассмотрим бесконечный граф с множеством вершин \mathbb{Z}^2 и отношением смежности φ вершин x и y , определяемым соотношениями $y = x \pm e_i$, $i = 1, 2$, где $e_1 = \langle 1, 0 \rangle$, $e_2 = \langle 0, 1 \rangle$. Такой граф называется квадратной решеткой. Мы будем далее его обозначать тем же символом \mathbb{Z}^2 . Связное множество узлов решетки называется кластером. Мы будем рассматривать конечные кластеры W на \mathbb{Z}^2 . Для таких кластеров вводится понятие их внешней границы $\partial_+ W$ (см. [1]). А именно, пусть W – фиксированный конечный кластер и $\partial W = \{x \in \mathbb{C}W : \exists(y \in W : x\varphi y)\}$. Внешней



границей кластера W называется такое максимальное подмножество $\partial_+ W$ из ∂W , для каждой вершины x которого существует такой бесконечный путь $\gamma(x)$ на графе \mathbb{Z}^2 с началом в x , что $\{\gamma(x)\} \cap [W \cup \partial W] = \{x\}$.

Сопряженным графом $\bar{\mathbb{Z}}^2$ к квадратной решетке называется бесконечный граф с тем же множеством вершин, у которого отношение смежности $\bar{\varphi}$ двух вершин x и y определяется соотношениями: либо $x\varphi y$, либо $y = x + \mathbf{e} + \mathbf{e}'$, где $\mathbf{e} = \pm \mathbf{e}_i$, $\mathbf{e}' = \pm \mathbf{e}_j$, $i, j = 1, 2$. Справедлива теорема (см. [1], [2]): Для того чтобы конечное непустое множество γ на \mathbb{Z}^2 представляло собой внешнюю границу какого-либо конечного кластера необходимо и достаточно, чтобы γ было простым *неспрямым* циклом (определение дано в [2]) на сопряженном графе. Каждый такой цикл однозначным образом определяет конечное множество на решетке \mathbb{Z}^2 , выделяемое условием того, что любой бесконечный несамопересекающийся путь с началом в вершине этого множества обязательно имеет непустое пересечение с γ . Это множество будем называть внутренностью цикла γ (так как цикл неспрямляем, то оно непусто) и обозначать посредством $\text{Int}[\gamma]$. Наряду с внешней границей, введем для конечного графа W понятие внутренней границы $\partial_- W$. Это множество определяется соотношением $\partial_- W = \{x \in W : \exists(y \in \partial W : x\varphi y)\}$.

Определение 1. Кластер W назовем полным, если для него имеет место

$$\text{Int}(\partial_+ W) = W.$$

Очевидно, что если кластер W не является полным, то ему всегда, однозначным образом, можно сопоставить такое его расширение \bar{W} , которое является полным кластером. Оно является наибольшим из всех расширений. Очевидно, что полный кластер W обладает тем свойством $\partial_+ W = \partial W$ и его внутренняя граница совпадает с множеством $\{x \in \text{Int}[\partial_+ W] : \exists(y \in \partial_+ W : x\varphi y)\}$.

Внутренняя граница может быть устроена довольно сложно. Однако, если граница кластера обладает формулируемым ниже свойством топологической простоты, то можно утверждать, что она, также как и внешняя граница, является циклом на сопряженном графе (возможно, спрямляемым).

Определение 2. Полный кластер W назовем кластером с простой границей, если для любой вершины $x \in \partial_- W$ множество $\partial_W x = \{y \in \partial_+ W : x\varphi y\}$ является $\bar{\varphi}$ -связным.

3. Свойство границ полного кластера. Теперь мы в состоянии сформулировать и доказать результат, которому посвящено настоящее сообщение. Нас будет интересовать наличие связи между длинами двух циклов – внешней и внутренней границами полного кластера с простой границей.

Теорема. Для любого полного кластера W на квадратной решетке с простой границей имеет место соотношение

$$|\partial_+ W| = |\partial_- W| + 4. \tag{1}$$



□ Доказательство состоит из нескольких пунктов.

1. На первом шаге осуществим следующее построение. Сопоставим каждой грани Γ бесконечного плоского графа \mathbb{Z}^2 вершину $x \leftrightarrow \Gamma$ и каждому ребру, разделяющему две грани Γ и Γ' , – ребро $\langle x, x' \rangle$, $x' \leftrightarrow \Gamma'$. В результате, получим новый бесконечный граф, который будем обозначать \mathbb{Z}_*^2 и который, как легко видеть, изоморфен решетке \mathbb{Z}^2 , то есть также является квадратной решеткой. При этом каждая грань Γ_* на \mathbb{Z}_*^2 соответствует определенной вершине x_* на \mathbb{Z}^2 . Полученную квадратную решетку будем называть *дуальной* по отношению к решетке \mathbb{Z}^2 . При этом решетка \mathbb{Z}^2 является дуальной по отношению к \mathbb{Z}_*^2 , то есть решетки \mathbb{Z}^2 и \mathbb{Z}_*^2 образуют пару взаимно дуальных бесконечных графов.

Каждому множеству вершин на \mathbb{Z}^2 , в частности циклу, однозначным образом, соответствует «многоугольник» (вообще говоря, несвязанный), составленный из граней на \mathbb{Z}_*^2 и наоборот. Поэтому кластеру W соответствует кластер W_* , в состав которого входят те и только те вершины, которые входят в состав границ граней решетки \mathbb{Z}_*^2 из множества $\{\Gamma : x \leftrightarrow \Gamma, x \in W\}$. Кроме того, ввиду указанного соответствия, для произвольного конечного кластера W на \mathbb{Z}^2 , величины $|\partial_+ W|$ и $|\partial_- W|$ равны числам граней в многоугольниках на \mathbb{Z}_*^2 , сопоставляемых множествам $\partial_+ W$ и $\partial_- W$.

2. Так как \mathbb{Z}_*^2 – бесконечный плоский граф, то рассмотрим его «стандартное» погружение в плоскость \mathbb{R}^2 и образ кластера W_* при этом погружении. Кластер W_* , как подграф плоского графа, также является плоским графом. Этот граф конечный. Поэтому он обладает бесконечной гранью. Эта грань получается удалением из \mathbb{Z}_*^2 всех ребер, которые не входят в подграф W_* . Граф W_* , заведомо, не имеет вершин сочленения, и поэтому каждое его ребро, если оно граничит с бесконечно гранью, отделяет эту грань от соответствующей ему конечной грани. В этих условиях, при стандартном погружении, граф W_* обладает ограничивающим его контуром γ_* , который составлен из тех только из тех ребер, которые отделяют бесконечную грань с одной из конечных граней. Контур γ_* , по построению, является несамопересекающимся циклом на \mathbb{Z}_*^2 . При выбранном стандартном погружении, каждая вершина, входящая в состав γ_* , либо является вершиной, в которой происходит поворот цикла (на угол $\pi/2$), либо таковой не является. Так как кластер W обладает простой границей, то противоположные ребра каждой из граней графа W_* не могут входить одновременно в состав цикла γ_* .

Так как кластер W полный, то каждое ребро из γ_* разделяет на \mathbb{Z}_*^2 грань $\Gamma \leftrightarrow x \in \partial_- W$ и какую-то грань $\Gamma' \leftrightarrow x' \in \partial_+ W$. При этом, ввиду простоты границы кластера W , только одно из двух противоположных ребер каждой грани Γ обладает этим свойством. Наоборот, все ребра, разделяющие грани Γ и Γ' указанного типа, входят в состав цикла γ_* . Поэтому цикл γ_* не спрямляем на \mathbb{Z}_*^2 .

3. Зафиксируем на γ_* определенную ориентацию, например, против часовой стрелки. Рассмотрим подпуть $\gamma_*^{(n)}$ длины n цикла γ_* , начинающийся в какой-то заранее выбранной вершине z на γ_* . Если n меньше длины цикла γ_* , то путь $\gamma_*^{(n)}$ не замкнут, так как цикл γ_* не самопересекается. Направление пути выбирается согласно ориентации цикла γ_* . Индукцией по n доказываются соотношения

$$l_{\pm}^{(n)} = n - m_{\mp}^{(n)}, \quad (2)$$



где $l_{\pm}^{(n)}$ – числа граней из $\partial_{\pm}W$, ребра которых входят в состав пути $\gamma_*^{(n)}$, $m_{\pm}^{(n)}$ – числа вершин из множества его внутренних вершин, которые являются вершинами поворота пути $\gamma_*^{(n)}$, соответственно, против (+) и по (-) часовой стрелки. При этом при построении индукционного шага очень важно, что цикл γ_* не спрямляем. Из (2) следует, что для любого n имеет место

$$l_+^{(n)} + m_-^{(n)} = l_-^{(n)} + m_+^{(n)}. \quad (3)$$

4. Пусть для рассматриваемого кластера W длина соответствующего ему цикла γ_* равна n . Тогда $l_{\pm}^{(n)} = |\partial_{\pm}W|$. С другой стороны, для замкнутого цикла $\gamma_*^{(n)}$, при выбранном нами стандартном погружении в \mathbb{R}^2 , имеет место $m_+^{(n)} - m_-^{(n)} = 4$, так как при замыкании цикла происходит поворот на 2π (цикл не самопересекается), а в каждой вершине поворота цикла $\gamma_*^{(n)}$ происходит поворот на $\pi/2$. Подстановка этих соотношений в (3) приводит к тождеству (1). ■

Литература

1. Kesten H. Percolation Theory for Mathematicians / H. Kesten. – Boston: Birkhauser, 1982.
2. Антонова Е.С., Вирченко Ю.П. Конечные кластеры на плоских мозаиках. Часть 3. Теорема о внешней границе // Научные ведомости БелГУ. Математика. Физика. – 2011. – 23(118);25. – С.112-126.

ON THE PROPERTY OF EXTERNAL BOUNDARIES OF ENTIRE CLUSTERS ON SQUARE LATTICE

Yu.P. Virchenko

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Abstract. The identity connecting external boundary value of each so-called entire finite cluster on square lattice and corresponding value of its internal boundary is proved.

Key words: square lattice, entire finite cluster, external boundary.



УДК 539.2

АППАРАТНО-ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ РЕГИСТРАЦИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОБЪЁМНЫХ И ПЛЁНОЧНЫХ ОБРАЗЦОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

А.Ю. Алейников, В.С. Захвалинский, И.В. Каменев

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308007, Россия e-mail: aleinikov@bsu.edu.ru

Аннотация. Разработан аппаратно-программный комплекс для автоматизированной регистрации электрических характеристик объемных и пленочных образцов полупроводников и диэлектриков. АПК создан на основе микроконтроллера atmega16 и аналогово-цифрового преобразователя AD7194. Его использование позволяет производить измерения температурной зависимости электрической проводимости и коэффициента Холла [1] полупроводников и диэлектриков. Измерения на компьютер передаются через USB порт.

Ключевые слова: коэффициент Холла, аналогово-цифровой преобразователь, схема электрическая принципиальная, микроконтроллер.

1. Введение. В настоящее время ведутся активные поиски новых материалов электроники и для создания устройств возобновляемой энергетики, в том числе создания ячеек солнечных элементов. Для отработки технологии синтеза, а также в процессе реализации приборных структур производятся экспериментальные исследования электрических характеристик и свойств полупроводниковых материалов, а также их зависимости от внешних факторов.

Одним из методов исследований температурных зависимостей электропроводности и коэффициента Холла является использование четырех-зондовой схемы и её расширенного варианта – шести-зондовой схемы. Через образец пропускается и поддерживается постоянный ток и регистрируются падения напряжений между двумя парами продольных и двумя парами поперечных зондов. Использование постоянного магнита 1Тл. позволяет, на основе этих данных определить, подвижность и концентрацию носителей заряда. Проведение измерений при изменении температуры в интервале 7.8 К и 300 К, с учётом напряженности магнитного поля и величины тока позволяет оценить механизмы электропроводности [1].

2. Структура аппаратно-программного комплекса. Структурная схема аппаратно-программного комплекса регистрации приведена на рис. 1.

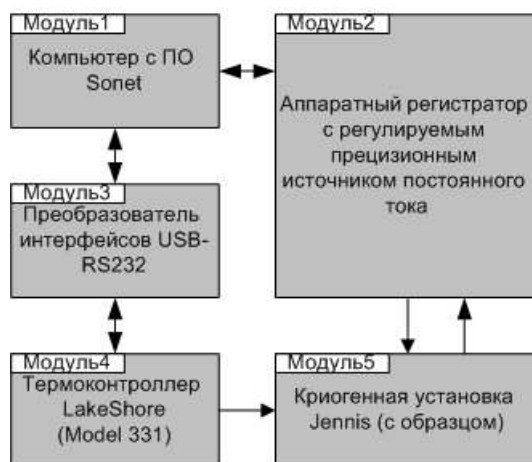


Рис. 1. Структурная схема аппаратно-программного комплекса

В состав аппаратно-программного комплекса входят 5 модулей. Основой является аппаратный регистратор (Модуль 2), который позволяет задавать ток через образец, и регистрировать напряжения в четырех точках (максимальное количество точек(каналов) у регистратора- 8) образца в разных комбинациях. Регистратором управляет программа, установленная на компьютере и работающая под управлением OS Windows XP, к которому он подключается посредством USB интерфейса. Программа принимает и обрабатывает полученные данные от регистратора. Также в функции программного обеспечения входит управление термоконтроллером (Модуль 4), подсоединенным к компьютеру посредством преобразователя интерфейсов. (Модуль 3). Термоконтроллер управляет температурой образца, помещенного в криогенную установку Jennis (Модуль 5).

3. Реализация аппаратной части комплекса (регистратора). Структурная схема аппаратной части комплекса приведена на рис. 2.

Основой схемы является 8-и битный микроконтроллер фирмы Atmel [3] (Модуль 1). Он работает под управлением зашитой в его flash памяти программы. Для обмена данными с компьютером посредством интерфейса UART контроллер соединяется с преобразователем интерфейса UART-USB (Модуль 3). Для задач отладки программного обеспечения контроллера предусмотрена клавиатура (Модуль 2) и жидкокристаллический дисплей (Модуль 5). Питание логической части схемы (мод.1,2,3,4,5) осуществляется напряжением 5В по интерфейсу USB. Питание остальной части схемы осуществляется от батареи типа «крона», преобразованном посредством модуля 9 в напряжение 5 В. Через модуль гальванической развязки (Модуль 4) посредством интерфейса SPI микроконтроллер соединяется с АЦП [4] (модуль 6). Для задач АЦП в схему введен источник опорного напряжения 2.048В.[5] (Модуль 7). Регулируемый источник стабильного тока представлен в схеме модулем 8.

Схема электрическая принципиальная логической части схемы приведена на рис. 3.

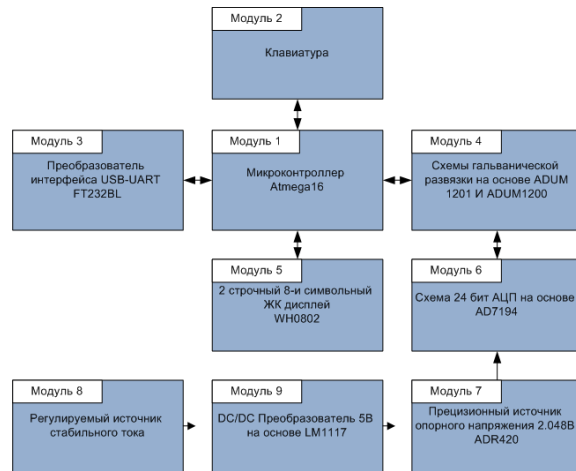


Рис. 2. Структурная схема аппаратно-программного комплекса

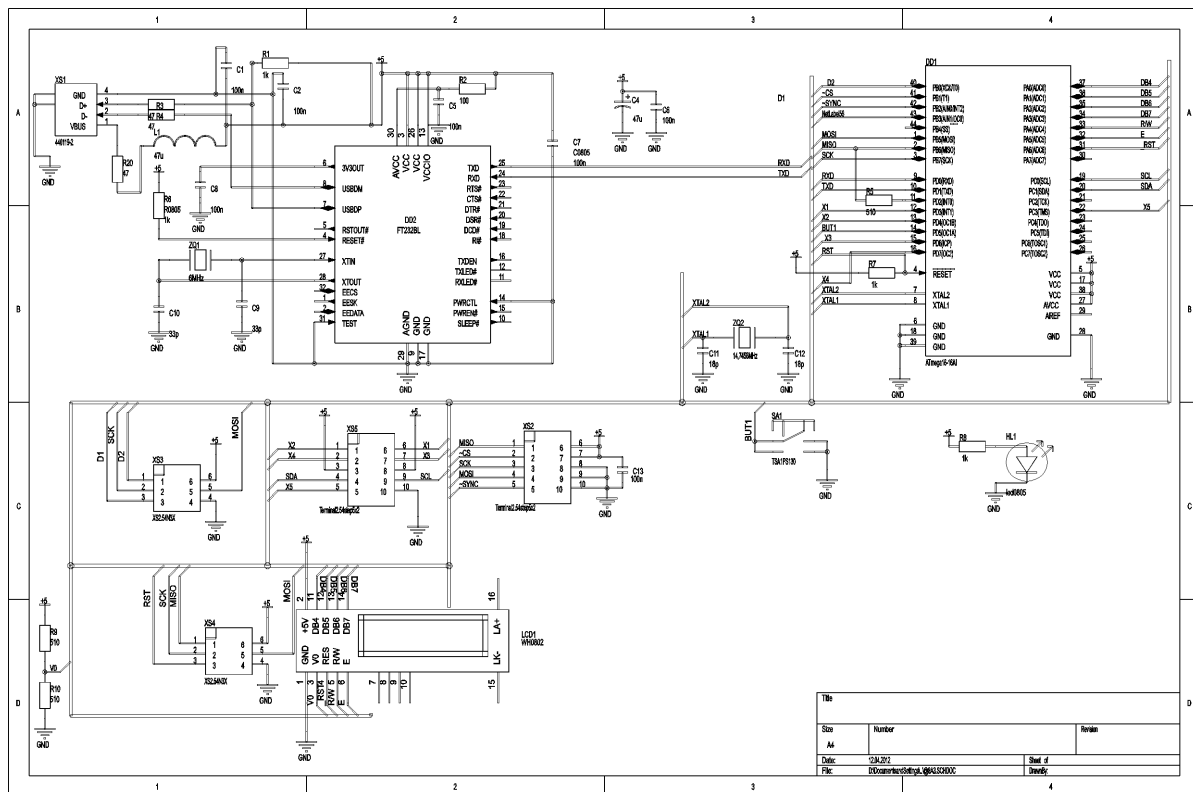


Рис. 3. Схема электрическая логической части схемы

Микроконтроллер работает на частоте 14,7456 МГц, стабилизированной кварцевым резонатором ZQ2. Программирование контроллера осуществляется посредством интерфейса ICSP через разъем XS4 посредством программатора AVRISP2. Соединение с пре-



образователем интерфейса DD2 осуществляется через цепи RXD и TXD. Частота работы DD2 стабилизируется кварцевым резонатором ZQ1 и составляет 6 МГц. Номиналы буферных емкостей C9, C10, C11, C12 выбираются исходя из рекомендаций, представленных в технических описаниях на соответствующие микросхемы. Посредством цепочки R9, R10 задается контрастность дисплея. Посредством разъема XS2 к устройству присоединяется АЦП.

Схема электрическая принципиальная модуля АЦП с сопутствующими модулями приведена на рис. 4.

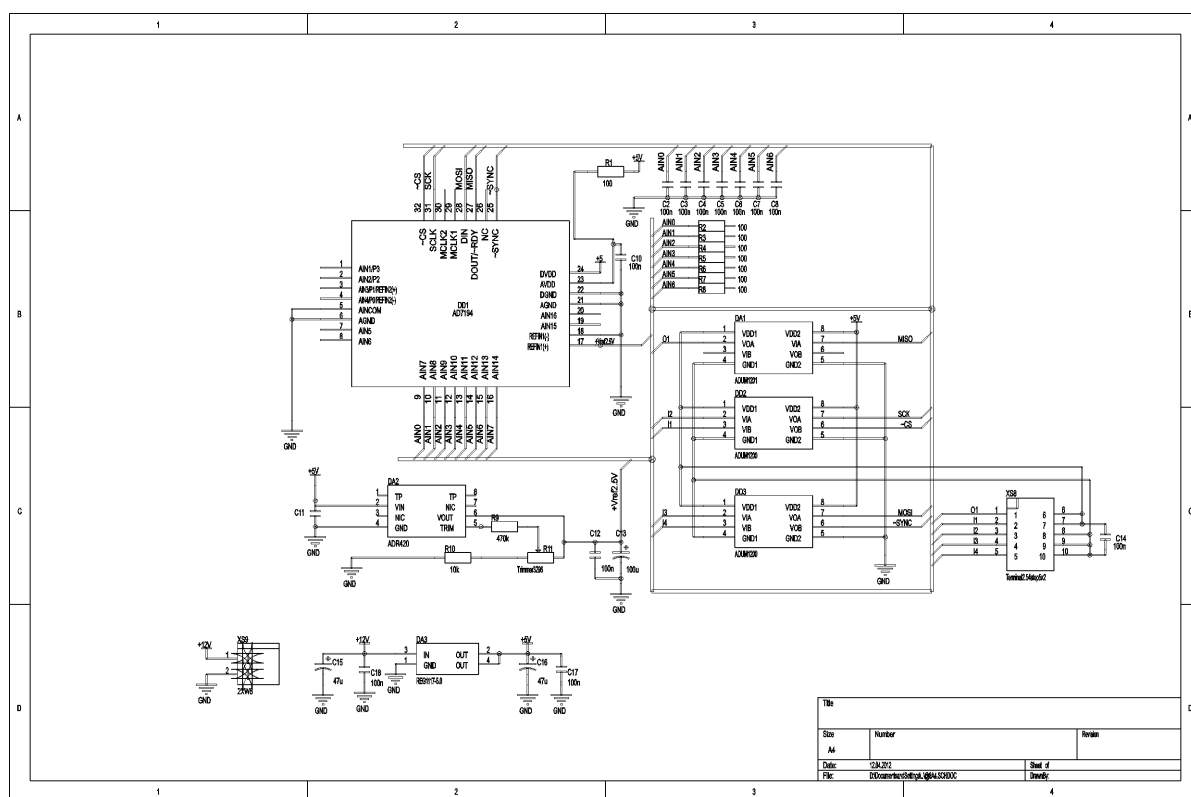


Рис. 4. Схема электрическая принципиальная модуля АЦП с сопутствующими узлами

В качестве АЦП использована микросхема AD7194 с разрядностью 24 бита и возможностью проведения преобразований напряжения в любой комбинации входов посредством встроенного аналогового мультиплексора. АЦП работает на частоте встроенного генератора 4.92 МГц. Питание аналоговой части АЦП осуществляется через фильтр низких частот R1, C10. Аналоговые сигналы, подлежащие измерению подаются также через RC фильтры низких частот, собранные на элементах C2-C8, R2-R8. Посредством резистора R11 осуществляется юстировка источника опорного напряжения DA2. Питание схемы стабилизируется посредством элемента DA3.

Зависимость между цифровым кодом с АЦП и напряжением при использовании источника опорного напряжения 2.048 В представлена формулой 1[4].



$$\text{КОД} = 2^{23} \left(U_{\text{вх}} \frac{K_{\text{ус}}}{2.048} + 1 \right), \quad (1)$$

где:

КОД – цифровой код с АЦП;

$U_{\text{вх}}$ – входное напряжение на соответствующем канале;

$K_{\text{ус}}$ – коэффициент усиления.

Схема электрическая принципиальная источника стабильного тока приведена на рис. 5 [2,6].

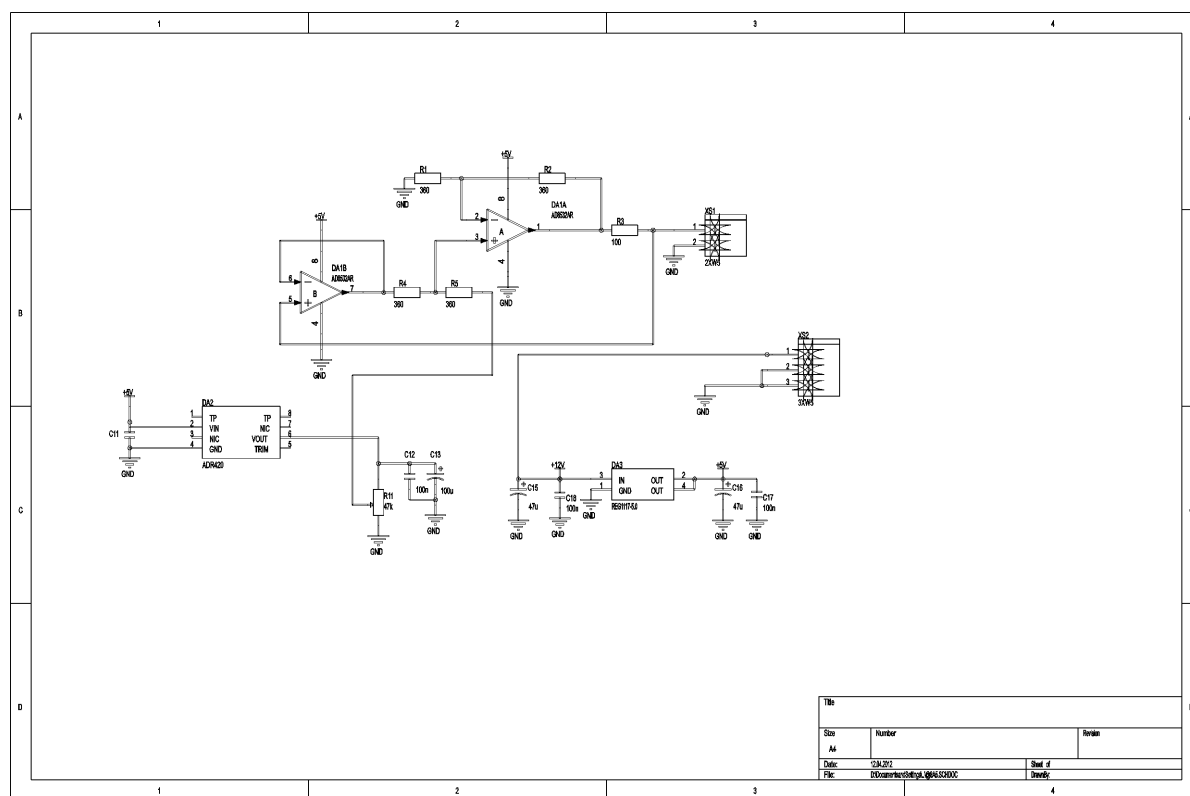


Рис. 5. Схема электрическая принципиальная источника стабильного тока

Источник стабильного тока собран на основе сдвоенного операционного усилителя DA1. Регулировка тока осуществляется посредством резистора R11. Питание схемы осуществляется через стабилизатор DA3. Ток на выходе схемы будет прямо пропорционален напряжению с источника опорного напряжения DA2 умноженному на коэффициент деления, создаваемый потенциометром R11 и обратно пропорционален сопротивлению резистора R3.

При проектировании аппаратной части было использовано следующее программное обеспечение:



- САПР Altium Designer (проектирование схем электрических принципиальных и печатных плат);
- Компилятор WinAVR и IDE AVRStudio (проектирование программного обеспечения для микроконтроллера);

4. Технические характеристики регистратора Разработанный регистратор имеет следующие технические, эксплуатационные и экономические характеристики (табл. 1)

Таблица 1

Характеристики регистратора

№	Характеристика (параметр)	Значение
1	Количество аппаратно реализованных каналов	8
2	Максимальное входное биполярное напряжение	2.048 В
3	Тип входных пар каналов	Дифференциальный
4	Разрядность АЦП	24 бит
5	Возможность внутреннего усиления входного сигнала	x1,x8,x16,x32,x64,x128
6	Диапазон рабочих температур	-40+105 градусов Цельсия
7	Тип аппаратного фильтра	RC
8	Напряжение питания	5 В от USB интерфейса (логическая часть +9 В от внешней батареи питания (измерительная часть)
9	Наличие гальванической развязки между логической и измерительной частью	Присутствует
10	Интерфейс для обмена данными с компьютером	USB
11	Максимальный ток на выходе источника тока (при данных номиналах элементов)	25 мА
12	Способ задания тока через образец	Ручная регулировка
13	Максимальное напряжение с источника тока через образец	2.048В
14	Потребляемый ток части схемы, отвечающей за задание тока через образец и аналогово-цифровое преобразование	Не более 30 мА
15	Максимальный входной аналоговый ток на каждом канале	2нА

5. Выводы. Таким образом технические характеристики созданного комплекса регистратора на базе 8-и битного микроконтроллера фирмы Atmel и микросхемы AD7194 используемой в качестве АЦП позволяют решить несколько задач связанных с измере-



ниями температурных зависимостей удельного сопротивления и коэффициента Холла в полупроводниках. Решается задача коммутации шестизондовой схемы образца, с одновременным аналогово цифровым преобразованием шести каналов, отображением и регистрации результатов измерений в компьютере. Кроме того с регистрацией и управлением текущей температуры и тока образца.

Фактически комплекс заменяет 4 измерителя высокого класса и устройство сопряжения с компьютером. При этом полученные входные характеристики сопоставимы с аналогичными современных измерительных приборов высокого класса.

Настоящая работа была поддержана Государственным Контрактом 2.3309.2011.

Литература

1. Шалимова К.В. Физика полупроводников / М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.
2. Хоровиц П., Хилл У. Искусство схемотехники. тт. 1-2 / М.: Мир, 1998. – 700 с.
3. 8-bit Microcontroller with 16K Bytes In-System Programmable Flash. Datasheet on Atmega16 chip by Atmel INC, 316 p.
4. 8-Channel, 4.8 kHz, Ultralow Noise, 24-Bit Sigma-Delta ADC with PGA. Datasheet on AD7194 chip by Analog Devices INC, 56 p.
5. Ultraprecision Low Noise, 2.048 V/2.500 V/3.00 V/5.00 V XFET® Voltage References. Datasheet on ADR420/ADR421/ADR423/ADR425 chips by Analog Devices INC, 17 p.
6. Zero-Drift, Single-Supply, Rail-to-Rail Input/Output Operational Amplifiers. Datasheet on AD8571/AD8572/AD8574 chips by Analog Devices INC, 20 p.

HARDWARE-SOFTWARE SYSTEM FOR AUTOMATED REGISTRATION OF THE ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF BULK SAMPLES AND THIN-FILM SEMICONDUCTORS AND DIELECTRICS

A.U. Aleynikov, V.S. Zakhvalinskii, I.V. Kamenev

Belgorod State University,
Belgorod State University, Pobeda 85, Belgorod, 308015, Russia e-mail: aleinikov@bsu.edu.ru

Abstract. Hardware-software system for automated registration of the electrical characteristics of bulk samples and thin-film semiconductors and dielectrics was designed. Hardware-software system constructed on the basis of atmega16 microcontroller and AD7194 analog to digital convertor. Using of the complex allows to carry out measurement of the temperature dependence of electrical conductivity and Hall's coefficient in semiconductors and insulators. The measurement results are transferred via the USB port on computer.

Key words: Hall's coefficient, analog to digital convertor, schematic diagram, microcontroller.



УДК 666.3-1

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ ПРЕССОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ $ZrO_2-8\%Y_2O_3$

В.В. Сирота, Е.В. Груздева, В.В. Иванисенко

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308034, Россия, e-mail: Ivanov.Oleg@bsu.edu.ru

Аннотация. Исследуется влияние давления прессования на структуру и механические свойства керамики $ZrO_2-8\%Y_2O_3$. В работе использованы методы просвечивающей и растровой электронной микроскопии. Проведены исследования пористости, микротвердости керамики, определен предел прочности.

Ключевые слова: керамика, холодное изостатическое прессование, растровая электронная микроскопия.

Введение

Разработка технологических процессов изготовления объемных материалов на основе нанопорошков интенсивно развиваются в ведущих материаловедческих центрах. Одной из ключевых задач при изготовлении изделий из нанопорошков является оптимизация методов компактирования порошков. Такие порошки характеризуются плохой формуемостью и прессуемостью, стандартными методами прессования для крупнокристаллических порошков, из-за специфики своих физико-химических свойств, обусловленных высокой удельной поверхностью, в частности, вследствие высокого межчастичного трения, агломерирования и значительного количества сорбированных газовых примесей [1-5]. Проблема состоит в том, чтобы обеспечить равномерное распределение плотности таких пылевидных нанопорошков в компактах, сохранить наноструктуру в прессовках для формирования наноразмерных зёрен в процессе спекания, т.е. создать условия для подавления роста зёрен и для спекания качественных нанокерамических изделий с заданными функциональными свойствами. Решить указанные задачи в определённой степени позволяет метод холодного изостатического прессования, обеспечивающий равномерную упаковку частиц в прессовках [6].

В настоящей статье исследована зависимость структуры и механические свойств керамики $ZrO_2-8\%Y_2O_3$, от давления изостатического прессования.

1. Условия эксперимента

В качестве объекта исследования использовали наноразмерный порошок $ZrO_2-8\%Y_2O_3$, полученный методом химического осаждения из раствора вода-изопропанол в соотношении 1:5 [7]. Из синтезированного порошка $ZrO_2-8\%Y_2O_3$ были компактированы плотные образцы методом холодного изостатического прессования. Порошок помещали в гибкую резиновую форму и предварительно уплотняли на вибростоле. Далее образцы



помещали в рабочую камеру пресса при температуре 18°C, давление нагнетали до необходимой величины, при этом давлении образец выдерживался в течение 30 с, после чего давление сбрасывали до атмосферного и компактированные образцы извлекали из резиновой формы. Были получены компакты при давлении изостатического прессования P : 100, 150, 200, 250, 300, 350 и 400 МПа. Полученные компакты спекались в воздушной печи при температуре 1500°C в течение 6 часов. Для образцов после спекания определяли объемную плотность методом гидростатического взвешивания, и рассчитывали относительно рентгеновской плотности тетрагонального оксида циркония. Морфологию частиц порошка изучали методами просвечивающей электронной микроскопии при помощи просвечивающего электронного микроскопа JEM-2100. Распределение зёрен и пор по размерам в образцах керамики исследовалась методами растровой электронной микроскопии (Quanta 200 3D) на нетравленных шлифах, а также оптической инвертированной микроскопии (OLYMPUS GX51). Микротвердость образцов определяли индентированием пирамидки Виккерса на приборе Instron 402 MVD. Предел прочности на разрушение измеряли при помощи универсальной напольной электромеханической испытательной машине INSTRON 5882.

2. Результаты эксперимента и обсуждение

Полученный гидрогель оксида $ZrO_2-8\%Y_2O_3$ был высушен на воздухе при 50°C в течении 48 часов. Высушенный гель отжигался при 700°C на воздухе в течении 4 часов. По данным просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) было установлено, что после высокотемпературной обработки порошок состоит из частиц сферической формы со средним размером 5-10 нм (рис. 1).

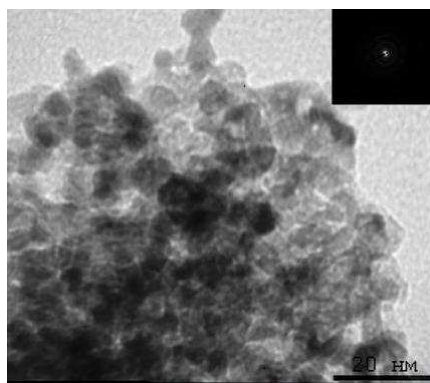


Рис. 1. ПЭМ – изображение частиц порошка $ZrO_2-8\%Y_2O_3$ после высокотемпературной обработки при температуре 700°C

Однако порошок $ZrO_2-8\%Y_2O_3$, полученный по данной технологической схеме, не смотря на наноразмерную составляющую, имеет высокую степень агломерации. Анализ гранулометрического состава методом лазерной дифракции показал, что размер агломератов изменяется в интервале 3 - 200 мкм. После помола в шаровой мельнице в течении часа был получен порошок, основная фракция которого 1,5 - 50 мкм. Следует

заметить, что, как правило, во всех известных способах компактирования порошковых материалов, процесс уплотнения порошка реализуется в несколько стадий. Например, при холодном прессовании в пресс-формах кривая уплотнения порошкового материала состоит из трех стадий [8], как это продемонстрировано на рис. 2.

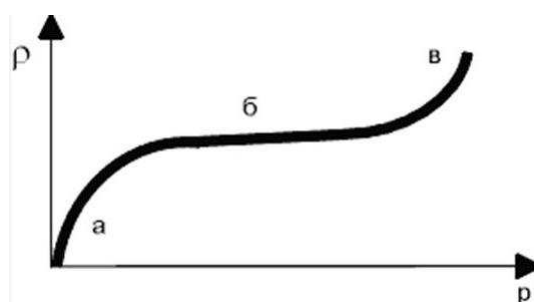


Рис. 2. Кривая уплотнения, при холодном прессовании в пресс-формах. На участке (а) происходит укладка частиц в основном за счет их скольжения и контактов без деформации с разрушением арок и мостиков, образуемых частицами. Участок (б), который не всегда ярко выражен на реальных кривых, характеризуется проявлением упругой деформации (отталкивания). На участке (в) наблюдается хрупкое разрушение или пластическая деформация.

Для порошка $ZrO_2-8\%Y_2O_3$, полученного методом химического осаждения с последующей высокотемпературной обработкой, установлена экспериментальная зависимость плотности спеченных образцов от давления прессования (рис. 3). Как видно из графика, плотность образцов нелинейно возрастает с повышением давления прессования. Начиная с 300 МПа наблюдается резкое увеличение плотности компакта за счет процесса хрупкого разрушения агломератов порошка, что определяется увеличением тангенса угла наклона кривой.

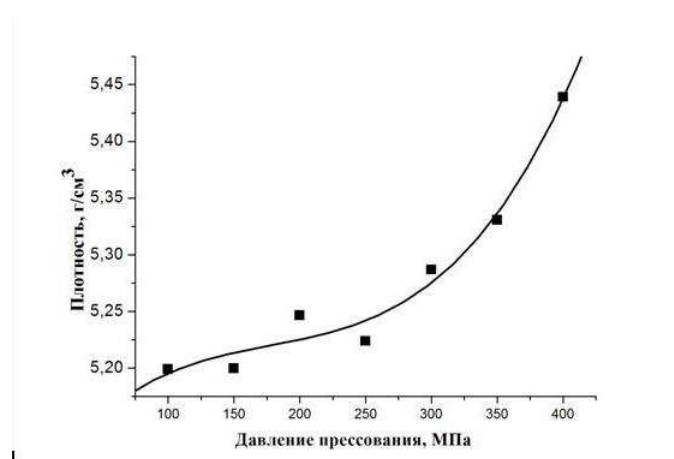


Рис. 3. Относительная плотность спеченных образцов в зависимости от давления прессования

Увеличение давления прессования осуществлялось до максимального рабочего давления изостатического прессы (СIP EPSI 400-200*1000Y) – 400 МПа. Очевидно, что при

дальнейшем увеличении давления кривая уплотнения должна выйти на насыщение, что будет свидетельствовать о максимально возможной плотности образцов.

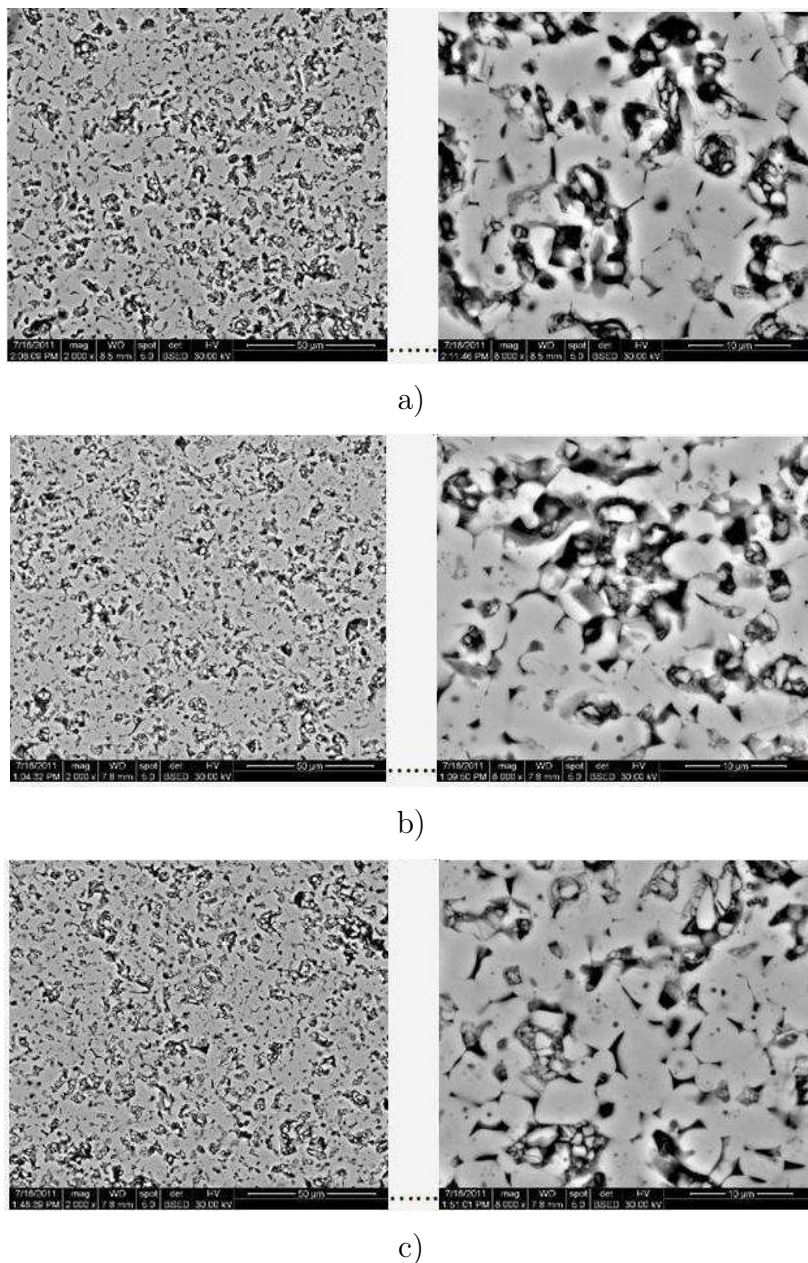


Рис. 4. РЭМ-изображение поверхности образцов $ZrO_2-8\%Y_2O_3$ после отжига при температуре $1500^\circ C$ полученных при давлении прессования: а) 100МПа, б) 250МПа, в) 350МПа соответственно

Микроструктурный анализ, проведенный с помощью растровой электронной микроскопии (РЭМ) позволил оценить средний размер зерна и пористость образцов после отжига. На основании данных РЭМ (рис. 4) можно утверждать, что все исследуемые образцы имеют сформировавшуюся зеренную структуру средний размер зерна которой



нелинейно уменьшается с увеличением давления прессования. Это связано с обособлением больших агломератов, при низком давлении прессования, и превращении их в большие зерна с образованием большого порового пространства вокруг них. С превышением давления прессования активизируется процесс хрупкого разрушения агломератов и осуществляется более плотная упаковка порошка, в результате в процессе спекания происходит конкурентный рост частиц, что приводит к уменьшению средней величины зерна. Методом оптической инвертированной микроскопии (OLYMPUS GX51) определили средний размер зерен и значение пористости. На рис. 5 показаны зависимости среднего размера зерна и пористости от давления прессования. Относительно среднего размера зерна в структуре керамики диоксида циркония присутствуют два вида пор – субмикropоры, размер которых на порядок меньше размера зерна, и микropоры – эвклистичные поры, размер которых соизмерим с размером зерна и размером частиц исходного порошка. Именно эти поры определяют характер пористой структуры в керамике и ее механические свойства.

Зависимость микротвердости образцов не изменяется с увеличением давления прессования, его среднее значение составляет 11,8 ГПа. Зависимость предела прочности образцов от давления прессования представлена на рис. 6. Резкое увеличение предела прочности экспериментальных образцов наблюдается после компактирования при давлении прессования 300 МПа и выше. Предел прочности достигает максимального значения 444,24 МПа при приложенном давлении прессования 400 МПа.

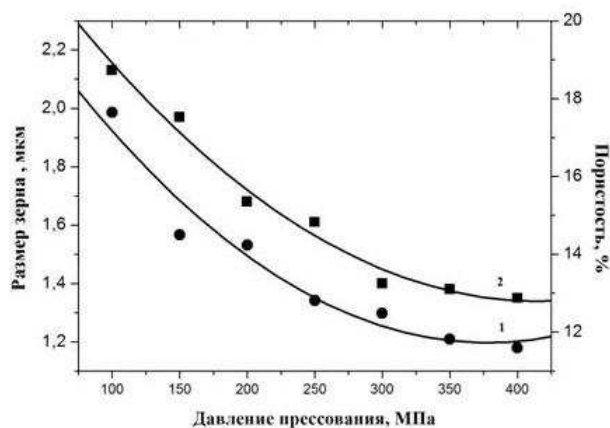


Рис. 5. Зависимость среднего размера зерна (1) и пористости (2) от давления прессования

Заклучение

Таким образом, было исследовано влияние давления изостатического прессования на структуру и механические свойства керамики $ZrO_2-8\%Y_2O_3$, полученного методом химического осаждения из раствора вода - изопропанол в соотношении 1:5. Полученные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что внутренняя структура и механические свойства полученной керамики существенно зависят от давления прессования. Получены экспериментальные зависимости размера зерна, пористости и предела прочности на разрушение от давления прессования в диапазоне от 100 до 400 МПа. Опре-



делено минимальное давление прессования (300 МПа), необходимое для разрушения агломератов порошка $ZrO_2-8\%Y_2O_3$.

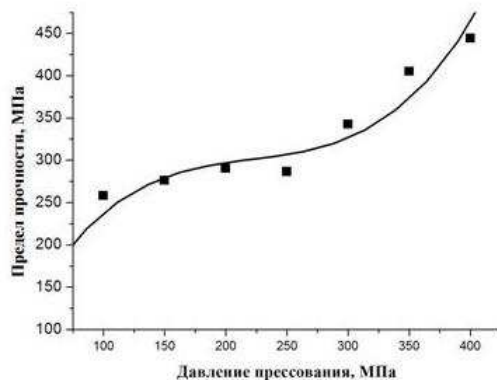


Рис. 6. Зависимость предела прочности от давления прессования

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования научным оборудованием БелГУ «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» в рамках госконтракта ФЦП №П-713 («Разработка технологических основ получения керамических композиционных материалов на основе синтетических наноразмерных порошков Al_2O_3 , ZrO_2 и минерального кремнийсодержащего сырья с оптимальным комплексом характеристик «состав-структура-свойства»).

Литература

1. Keiji H., Kotoji A., Koji T. Crack-healing behavior of ZrO_2/SiC composite ceramics // International Journal of Structural Integrity. – 2010. – 1;1. – P.73-84.
2. Кульков С.Н., Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Буюкова С.П. Механические свойства поликристаллических объёмных нанокристаллических керамических материалов на основе оксида алюминия и диоксида циркония / Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007. – 328 с.
3. Хасанов О.Л., Двилис Э.С., Бикбаева З.Г. Методы компактирования и консолидации наноструктурных материалов и изделий // Томск: Изд-во Том. политех. ун-та. – 212 с.
4. Акимов Г.Я., Маринин Г.А., Каменева В.Ю. Эволюция фазового состава и физико-механических свойств керамики $ZrO_2-8\%Y_2O_3$ // Физика твёрдого тела. – 46;2. – С.250-252.
5. Dercz G., Prusik K., Paj?k L. Structure investigations of commercial zirconia ceramic powder // Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering – 2006. – 2;9-10. – P.259-262.
6. Гидростатическое прессование огнеупорных изделий для МНЛЗ // Новые огнеупоры. – 2007. – 11. – С.31-38.
7. Sirota V., Lyubushkin R., Kovaleva M., Maradudina O. Synthesis and characterization of $Al_2O_3-30\%ZrO_2$ and $Al_2O_3-30\%Y_{0.1}Zr_{0.9}O_2$ nanocomposites // Advances in Science and Technology. – 2010. – 62/ – P.125-130.
8. Остроушко А.А., Могильников Ю.В. Физико-химические основы получения твердофазных материалов электронной техники // электронный ресурс http://chem.usu.ru/oxide_web/Book/index.htm - 1998.



**INFLUENCE OF COMPACTION PRESSURE
ON STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES
OF CERAMICS $ZrO_2-8\%Y_2O_3$**

V.V. Sirota, E.V. Gruzdeva, V.V. Ivanisenko

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308034, Russia, e-mail: IvanovOleg@bsu.edu.ru

Abstract. Influence of compaction pressure on structure and mechanical properties of the ceramics $ZrO_2-8\%Y_2O_3$ is investigated. Methods of transmission and scanning electron microscopy are used. Study of porosity, microhardness and tensile strength was carried out.

Keywords: ceramics, cold isostatic pressing, scanning electron microscopy.



УДК 539.23, 539.216.1

NANOSTRUCTURAL THERMOELECTRIC MATERIALS OBTAINED BY SOLVOTHERMAL SYNTHESIS AND HOT ISOSTATIC PRESSURE

*O.N. Ivanov, **W. Lojkowski, *R.A. Lyubushkin, *O.N. Maradudina

*Belgorod State University,

Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: maradudina@bsu.edu.ru

**Institute of High Pressure Physics, Polish Academy of Sciences,

Sokolowska St. 29/37, Warsaw, 01-142, Poland, e-mail: sylvek@unipress.waw.pl

Abstract. Nanostructured Bi_2Te_3 -based material was prepared by microwave assisted solvothermal method and hot isostatic pressing. Optimal synthesis conditions of the Bi_2Te_3 nanopowder were found. It was established that hot isostatic pressing of nanopowders at temperature of 400°C and pressures of 2, 4, 6 and 8 GPa allowed us to form homogeneous and dense Bi_2Te_3 -based material with average grain size from 60 to 100 nm.

Keywords: solvothermal synthesis, bismuth telluride, nanostructural thermoelectric materials.

1. Introduction

Thermoelectric materials are of interest for applications in electrical power generation devices and solid-state cooling due to many attractive properties (long life, no emissions of toxic gases, no moving parts, low maintenance, etc).

At present bismuth telluride based compounds are known to be the most excellent thermoelectric materials for around room temperature applications.

The Bi_2Te_3 -based alloys are acceptable for some specialized applications, but they are far less so for commercial refrigeration on a large scale. A number of investigations have focused on optimizing of the composition, tuning doping with other heavy metals, optimizing device design, etc in order to improve thermoelectric properties of the Bi_2Te_3 -based materials. However, the thermoelectric efficiency of these materials has not improved obviously and the dimensionless figure of merit (ZT) has been approximately 1 for many years.

According to theoretical and experimental investigations, the thermoelectric nanomaterials, such as quantum wells, superlattice, quantum wires, nanograined thin films, bulk nanocomposites demonstrate much higher thermoelectric coefficients than their traditional alternatives [1-4].

Bulk nanostructured materials are now considered as one of perspective thermoelectric materials. A specific technology should be developed to fabricate nanostructured thermoelectric materials with reproducible and advanced properties. One of technological approach is based on two principal stages as follows [5]:

- Synthesis of initial nanopowder with desired structure, phase and element compositions, size and shapes of particles, etc.



- Consolidation of synthesized nanopowder by using the pressing and high temperature treatment in order to retain a nanostructure and fabricate dense sample with high enough mechanical strength and thermoelectric parameters.

In present work such a kind of technology based on microwave-solvothermal synthesis and hot isostatic pressing was applied to prepare the bulk nanostructured Bi_2Te_3 -based material. As it is known, compared with the conventional methods, the microwave-assisted heating technique has the advantages of very short time, simplicity and energy efficiency, small particle size of products, narrow particle size distribution and high purity [6].

2. Experimental procedure

Bismuth telluride nanopowders have been prepared via microwave-solvothermal synthesis in closed reactor ERTEC (Model 02-02).

Analytical grade Bi_2O_3 , TeO_2 and ethylene glycol were used as starting components. The 110 mL teflon-lined stainless-steel autoclave was used and the temperature was regulated by the digital-type temperature-controlled oven. Microwave assisted reactions were conducted in a 300 W microwave oven with the 2450 kHz working frequency.

The ethylene glycol was used as both the solvent and the reducing agent at the reaction. A few routes of synthesis were applied to determine optimal reaction conditions (Table 1). After synthesis, the reaction product as a black precipitate was washed with alcohol and then centrifuged and dried.

Morphology and structure of synthesized powder were characterized by X-ray diffraction (XRD) using the Rigaku Ultima IV diffractometer with $\text{CuK}\alpha$ -radiation, transmission electron microscopy (TEM) using the JEM-2010 microscope and scanning electron microscope (SEM) using the Zeiss LEO 1530 microscope.

Table 1

Parameters and results of microwave-solvothermal synthesis of powders

Reagents	Parameters of synthesis	Phases
Ethylene glycol – 60 ml., m (Bi_2O_3) - 4.6 gr. m (TeO_2) – 2.3 gr.	Temperature – 280 °C, Pressure – 25 atm., Duration of reaction – 100 min.	Bi_2Te_3 , Bi, BiTe
Ethylene glycol– 60 ml., m (Bi_2O_3) - 4.6 gr. m (TeO_2) – 3 gr.	Temperature – 280 °C, Pressure – 37 atm., Duration of reaction – 45 min.	Bi_2Te_3 , Bi, Te
Ethylene glycol– 60 ml., m (Bi_2O_3) – 2.3 gr. m (TeO_2) – 1.5 gr.	Temperature – 250 °C, Pressure – 30 atm., Duration of reaction – 35 min.	Bi_2Te_3 , Bi, Bi_4Te_3
Ethylene glycol– 60 ml., m (Bi_2O_3) – 2.3 gr. m (TeO_2) – 2.3 gr.	Temperature – 250 °C, Pressure – 15 atm., Duration of reaction – 50 min.	Bi_2Te_3
Ethylene glycol– 60 ml., m (Bi_2O_3) – 2.3 gr. m (TeO_2) – 2.45 gr.	Temperature – 250 °C, Pressure – 20 atm., Duration of reaction – 35 min.	Bi_2Te_3 , Bi_4Te_3



Synthesized nanopowders were hot isostatically pressed (HIP) at temperature of 400 °C during 5 min by using a toroidal press. Powder for compaction was placed in graphite matrix with hexagonal BN powder as media to spread isostatic pressure to the object under pressing. Pressures equal to 2, 4, 6 and 8 GPa were used.

Microstructure of consolidated material was then investigated by XRD and SEM using the Zeiss LEO 1530 scanning electron microscope. EDAX (Energy Dispersive X-ray Microanalysis) method was used to study the element distribution within samples under consolidation.

Electrical conductivity, σ , of the consolidated samples was also measured by four-probed method at room temperature.

3. Results and discussion

It was established that phase composition of material after synthesis is strongly dependent on synthesis conditions and ratio of initial reagents. Phase compositions of powder samples synthesized at various conditions are collected in Table 1.

One can see that all of five technological routes allow us to prepare the desired Bi_2Te_3 phase, but for routes №1, 2, 3 and 5 the Bi_2Te_3 phase is coexisting with other parasite phases (BiTe , Bi_4Te_3 , Bi , Te). Single phase Bi_2Te_3 powder could be prepared via route №4. This powder synthesized at optimal conditions was used for further study.

Morphology of the Bi_2Te_3 powder has been investigated by SEM (Fig. 1). It is established that powder after synthesis consists of agglomerate of particles with average size of 200 nm. TEM-image in Fig. 2 shows typical morphology of microwave-solvothermally synthesized powder. It is seen that powder contains plate-like nanoparticles with average size about 30 nm.

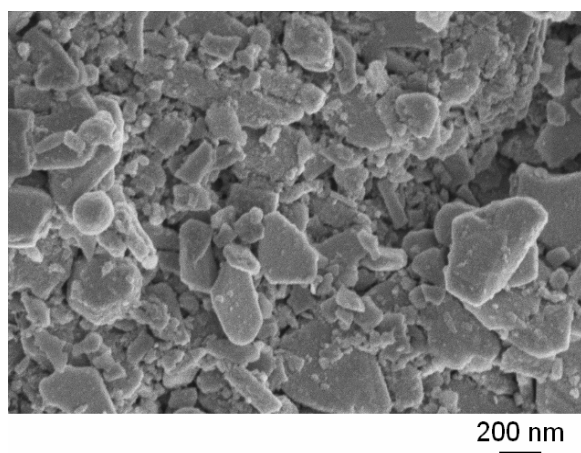


Fig 1. Morphology of the Bi_2Te_3 nanopowder by SEM.

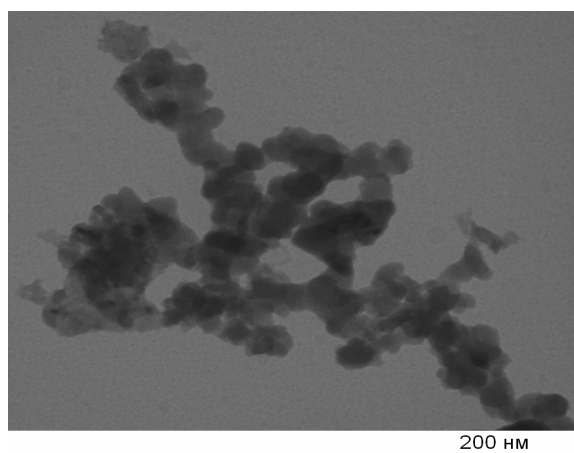


Fig. 2. Nanocrystals of the Bi_2Te_3 powder by TEM.

Bulk material cylindrical form with sizes of 5x5 mm was then prepared by HIP-consolidation. A few specific features were found at research of consolidated material:

- In contrast with initial powder, the phase composition extracted from XRD patterns showed presence of Bi_2Te_3 (space symmetry group $R-3m$) and BiTe ($P-3m1$). So, at



high temperature and under high pressure, some part of the Bi_2Te_3 phase transforms into the BiTe phase.

- Consolidated materials have dense, homogeneous and porousless nanocrystalline structures (Fig. 3). Grain size, d , of the material under study is the HIP-pressure-dependent one and the average grain size is changed from 60 to 100 nm (Fig. 4).
- EDAX experiments confirmed the homogeneous distribution of the Bi and Te elements within the material.

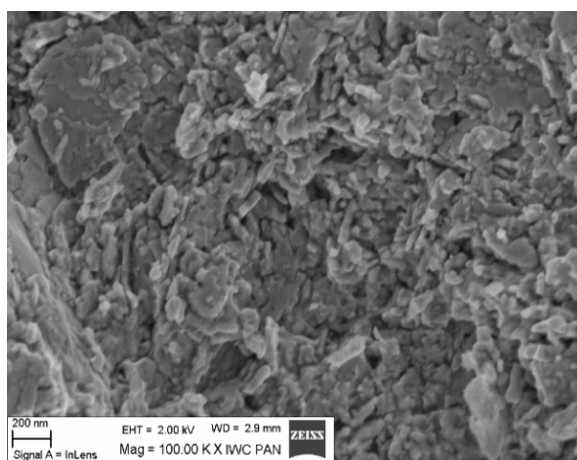


Fig. 3. Microstructure of the Bi_2Te_3 -based materials consolidated by the HIP method at temperature of 400°C and pressures of 8 GPa

According to the theoretical consideration [7], electrical conductivity of bulk thermoelectric Bi_2Te_3 material should be depressed when grain size is decreasing. This behavior is attributed to carriers mobility decrease owing the carriers scattering by grain boundaries. The $\sigma(d)$ dependence is shown in Fig. 5. For the grain sizes of 100, 85 and 60 nm (corresponding HIP-pressures are 2, 6 and 8 GPa) experimental points are in agreement with the theoretical prediction. But electrical conductivity is maximal the sample with $d=80$ nm ($P = 4$ GPa). It is obvious that to explain the change of electrical conductivity versus the HIP-pressure other physical mechanisms besides grain size change should be taken into account. In particular, carriers concentration and defect structure in volume materials can also change during the hot isostatic pressure.

Characterization of the thermoelectric properties of the Bi_2Te_3 -based nanostructured materials is in progress now.

4. Conclusion

Single-phases Bi_2Te_3 plate-like crystals with homogeneous hexagonal morphology were rapidly synthesized using by the microwave assisted solvothermal method in 50 min at 250°C and 30 atm. Synthesized nanopowder consists of particles agglomerate with average size of 200 nm which consists of crystals with size about 30 nm. HIP compaction of powders at



temperature of 400 °C and pressures of 2, 4, 6 and 8 GPa formed homogeneous Bi_2Te_3 -based material with average grain size is of 60-100 nm. Electrical conductivity of samples under study shows the complex dependence of the grain size (HIP-pressure).

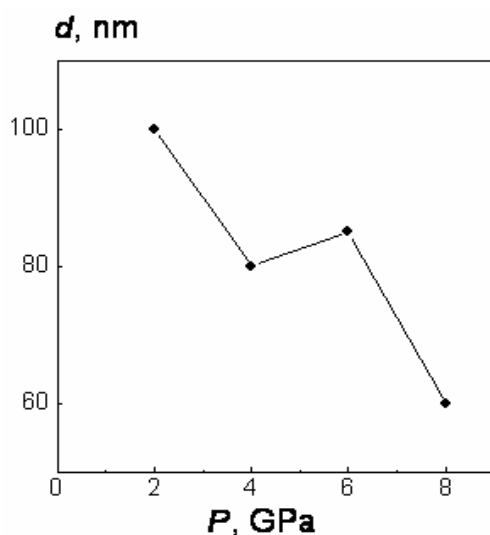


Fig. 4. The $d(P)$ dependence for the Bi_2Te_3 -based materials consolidated by the HIP method

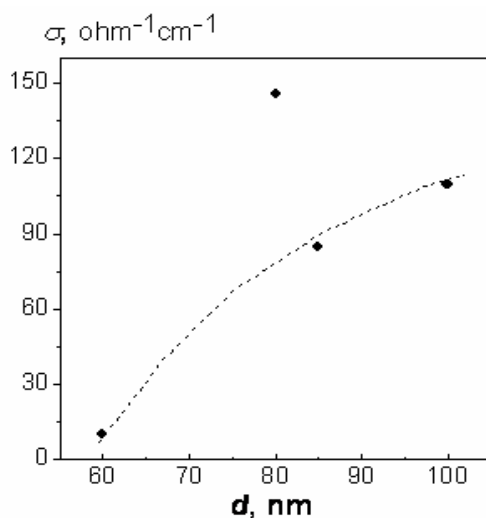


Fig. 5. The $\sigma(d)$ dependence for the Bi_2Te_3 -based materials consolidated by the HIP method

Acknowledgements

This work was performed in framework of the federal target program “Scientific and Pedagogical Staff for Innovative Russia” for 2009-2013 under Contract No 02.740.11.0825 with using scientific equipments of the Joint Research Centre “Diagnostics of structure and properties of nanomaterials”.



References

1. Cao Y.Q., Zhu T.J., Zhao X.B., Zhang X.B., Tu J.P. Nanostructuring and improved performance of ternary Bi-Sb-Te thermoelectric materials // Appl. Phys. – 2008. – A92. – P.321-324.
2. Liu K., Wang J., Liu H., Xiang D. Preparation and characterization of nanostructured Bi₂Te₃ and Sn_{0.5}-Bi₂Se₃ // Rare Metals. – 2009. – 28;2. – P.112-116.
3. Harman T.C., Walsh M.P., Laforge B.E., Turner G.W. Nanostructured thermoelectric materials // J. Electron. Materials. – 2005/ – 34;5. –P.L19-L22.
4. Minnich A.J., Dresselhaus M.S., Ren Z.F., Chen G. Bulk nanostructured thermoelectric materials: current research and future prospects // Energy Environ. Sci. – 2009. – 2. – P.466-479.
5. Lyubushkin R.A., Maradudina O.N., Ivanov O.N., Sirota V.V. Preparation of thermoelectric nanomaterials based on (Sb_i,Sb)₂Te₃ solid solutions // Physical surface engineering. – 2010. – 8;3. – P.271-275.
6. Zhou B., Zhao Y., Pu L., Zhu J.-J. Microwave-assisted synthesis of nanocrystalline Bi₂Te₃ // Materials Chemistry and Physics. – 2006. – 96. – P.192-196.
7. Bulat L.P., Drabkin I.A., Karataev V.V., Oscenskii V.B., Pschenai-Severin D.A. Scattering effect on thermal conductivity of nanostructured semiconductor material based on Bi_xSb_{2-x}Te₃ solid solution // Fizika Tverdogo Tela. – 2010. – 52;9. – P.1712-1716.

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРНЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ СОЛЬВОТЕРМАЛЬНОГО СИНТЕЗА И ГОРЯЧЕГО ИЗОСТАТИЧЕСКОГО ПРЕССОВАНИЯ

*О.Н. Иванов, **В. Лойковски, *Р.А. Любушкин, *О.Н. Марадудина

*Белгородский государственный университет,

ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: maradudina@bsu.edu.ru

**Институт физики высоких давлений Польской Академии Наук,

ул. Соколовска, 29/37, 01-142, Варшава, Польша, e-mail: sylvek@unipress.waw.pl

Аннотация. Сольвоотермально-микроволновым способом синтезирован наноразмерный порошок теллурида висмута, состоящий из пластинок неправильной формы со средним размером ~ 30 нм. Были установлены оптимальные условия получения однофазного порошка Bi₂Te₃. Наноразмерный порошок был консолидирован методом горячего изостатического прессования при температуре 400 °С и давлениях 2, 4, 6 и 8 ГПа. В результате были получены плотные химически однородные наноструктурные материалы со средним размером зерна 60-100 нм, зависящим от давления прессования. Удельная электрическая проводимость консолидированных материалов, измеренная при комнатной температуре, имеет экстремальную зависимость от среднего размера зерна.

Ключевые слова: сольвоотермальный синтез, теллурид висмута, наноструктурные термоэлектрические материалы.



УДК УДК 620.1.72:532.783

ЭФФЕКТ «ИОННОГО ВЕТРА» В НЕМАТИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ С КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКОЙ

С.И. Кучеев, Ю.С. Тучина

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: skucheev@yahoo.com

Аннотация. Сообщаются результаты экспериментального наблюдения нестационарного изменения ориентации нематика в жидкокристаллической ячейке с кремниевой подложкой при возбуждении её ступенькой напряжения. Изменение исходной ориентации нематика объясняется влиянием на директор отрицательно заряженных ионов, которые образуются и перемещаются в жидком кристалле в результате инжекции электронов из p^+ области обратносмещенного $p^+ - n$ перехода.

Ключевые слова: нематический жидкий кристалл, нематическая ячейка, отрицательно заряженные ионы, p-n переход.

1. Введение. Хорошо известно, что жидкие кристаллы (ЖК) относятся к средам с ионной проводимостью [1]. В ЖК достаточно легко реализуются электрооптические эффекты, индуцированные пространственным биполярным разделением ионов под действием внешнего электрического поля. В этом случае индуцируются характерные пространственно периодические деформации директора (домены), а также эффекты турбулентного движения жк при более высоких электрических полях. С другой стороны, в твердом теле, газах (воздух) хорошо известны эффекты, которые вызваны монополярными носителями тока, когда имеет место обмен импульсами между этими носителями заряда и атомами (молекулами) среды, что сопровождается перемещением атомов (молекул) среды. К таким эффектам, например, относится эффект электромиграции атомов в проводнике под действием потока электронов [2] или так называемый электрический ветер (ионный ветер) в воздухе, возникающий в окрестности металлического острия, которое находится под большим потенциалом (см., например, [3]). В жидкокристаллической среде, в случае реализации эффекта аналогичного эффекту ионного ветра, можно ожидать влияние движения монополярных ионов на ориентацию директора. Целью работы было экспериментальное обнаружение влияния монополярных ионов на ориентированный нематический ЖК.

2. Экспериментальные результаты. На рис. 1 схематически представлена конструкция ЖК ячейки для исследования влияния монополярного ионного тока на ориентацию нематического ЖК. В качестве подложки использовался образец монокристаллического кремния n -типа проводимости (4,5 Ом·см) с высоколегированными карманами p^+ -типа проводимости (0,1 Ом·см). Начальная гомеотропная ориентация нематического ЖК 5СВ достигалась обработкой поверхности кремния и поверхности покровного стекла (без токопроводящей пленки) раствором лецитина в толуоле.

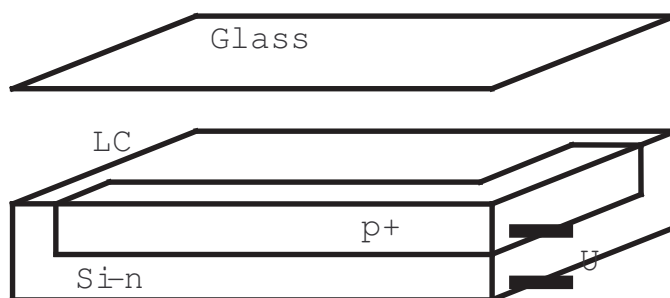


Рис. 1. Схематический вид ЖК ячейки на основе кремниевой подложки с p^+-n переходом. U — напряжение, приложенное к p^+-n переходу. LC — слой жидкого кристалла

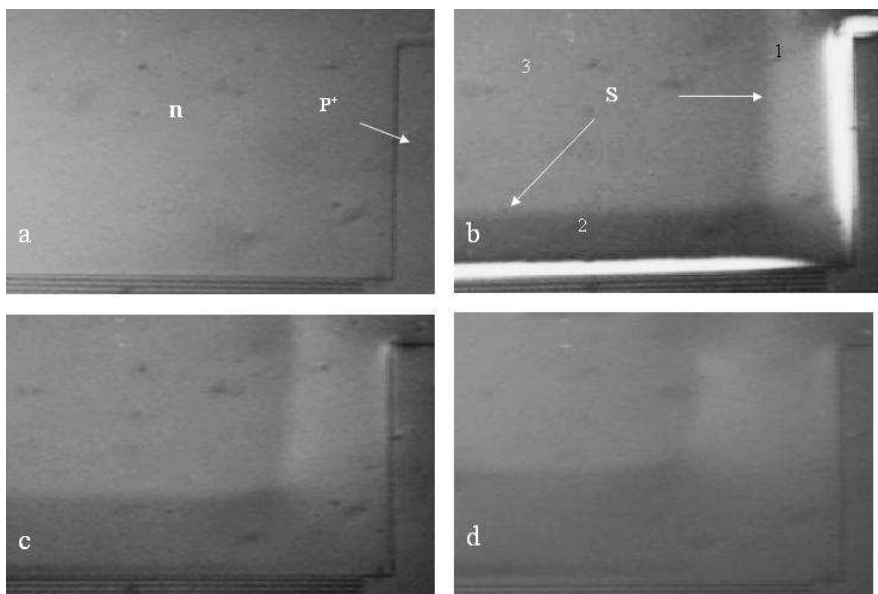


Рис. 2. Фрагмент ячейки с исходной гомеотропной ориентацией нематика при $U = 0$ (a). Расширение области измененной ориентации нематика (b-d). Время действия ступеньки напряжения ($U = 16$ V), секунды: (b) - 1, (c) - 3, (d) - 7. Толщина ЖК 10 микрон.

В момент прикладывания ступеньки напряжения U с обратной полярностью, в окрестности линии p^+-n перехода происходит хорошо наблюдаемая, в виде яркой светлой полосы, переориентация нематика (рис. 2b). Одновременно, от этой же полосы переориентированного нематика начинает расширяться область изменяющейся ориентации нематика, рис. 2 b-d. Граница S этой расширяющейся области перемещается над поверхностью кремния n -типа проводимости перпендикулярно линии p^+-n перехода (рис. 2b). В зависимости от расположения ячейки относительно скрещенных поляризаторов, расширяющаяся область измененной ориентации нематика имеет светлый (1) или темный



(2) однородный фон по сравнению с фоном исходной гомеотропной ориентации (3), и не имеет признаков доменного упорядочивания поля директора (рис. 2b-d). При повороте ячейки (в плоскости ячейки) на 90 градусов светлый фон меняется на темный и наоборот. Переориентация нематика, которая наблюдается в виде яркой полосы в окрестности линии p^+-n перехода сравнительно быстро исчезает, но граница S области измененной ориентации нематика продолжает двигаться, оставаясь параллельной линии p^+-n перехода, (рис. 2c, 2d). Контраст между областью измененной и исходной ориентацией нематика по мере удаления границы S от линии p^+-n перехода постепенно уменьшается. В конечном итоге, граница S пройдя некоторое расстояние L , становится неразличимой на фоне исходной ориентации нематика. На рис. 3 представлена зависимость дистанции L от величины U ступеньки напряжения приложенного к p^+-n переходу. Хорошо видно, что проявляется линейная зависимость между L и U .

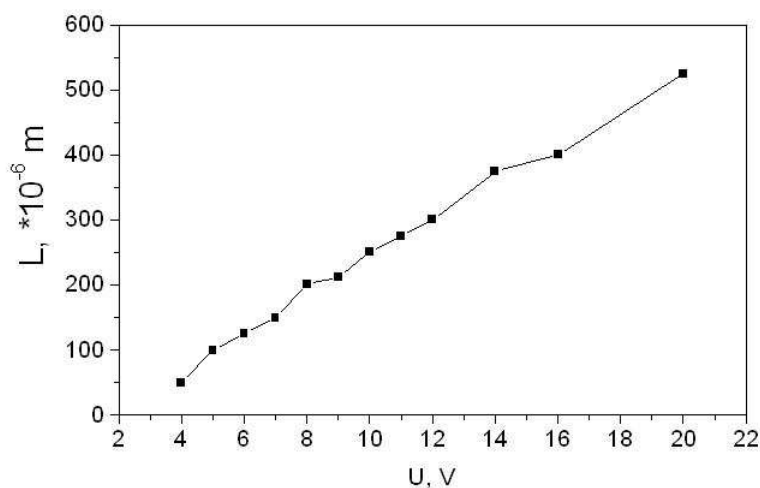


Рис. 3. Зависимость расстояния L от величины ступеньки напряжения U .
Толщина ЖК 10 микрон

Для вышеуказанного p^+-n перехода, ширина слоя обедненного основными носителями заряда, в котором формируется электрическое поле p^+-n перехода и которое принципиально может проникнуть в слой ЖК и вызвать соответствующее изменение ориентации директора, не превышает 1-2 микрона [2]. Поэтому появление области измененной ориентации нематика и тем более движение ее границы на столь значительное расстояние L не вызвано электрическим полем обедненного слоя p^+-n перехода.

При обратном смещении p^+-n перехода возможны два варианта токов не основных носителей заряда (электронов) из области p^+ кремния. Это электронный ток непосредственно через p^+-n переход (j_1), и утечка заряда в виде ионного тока (j) через слой ЖК, минуя p^+-n переход, вследствие инжекции электронов в ЖК [1]. Измерение тока через p^+-n переход подтверждает наличие тока через слой ЖК. Обратный ток p^+-n перехода без ЖК на порядок меньше тока в ячейке, которая содержит ЖК.

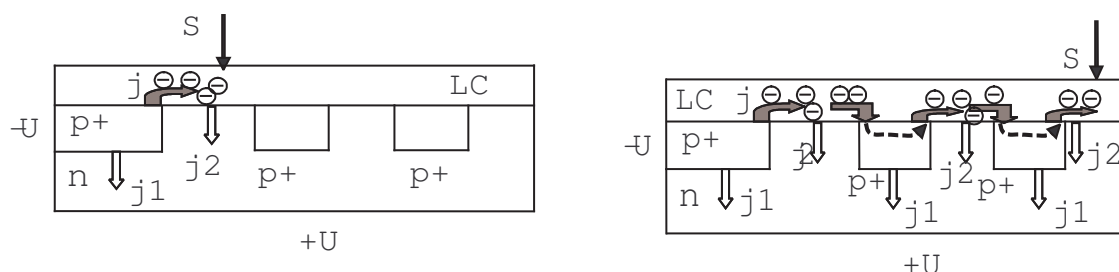


Рис. 4. Схематическое представление токов и движения границы S в ЖК ячейке с несколькими p^+ карманами. j_1 и j_2 токи утечки через p^+ - n переход и через контакт LC/Si соответственно. j — ток инжекции в ЖК.

Рассмотрим движение границы S , когда на поверхности кремния n -типа проводимости есть несколько изолированных друг от друга p^+ карманов, рис. 4. Прикладывая к p^+ - n переходу ступеньку напряжения соответствующей величины, граница S , покинув линию p^+ - n перехода может достигнуть границу ближайшего изолированного p^+ кармана. После соприкосновения границы S с p^+ карманом, новое положение границы S , почти мгновенно, появляется на противоположной стороне этого p^+ кармана и продолжает свое движение с прежней скоростью до другого p^+ кармана, при этом никаких изменений ориентации нематика над поверхностью этого p^+ кармана не происходит. Такая же картина повторяется при достижении границы S последующих изолированных p^+ карманов. Выше перечисленные экспериментальные результаты позволяют предположить, что появление расширяющейся области измененной ориентации нематика над поверхностью кремния n -типа проводимости связано с движением отрицательно заряженных ионов. В этом случае отсутствие изменения ориентации нематика над p^+ карманами объясняется сменой типа носителя заряда в момент соприкосновения границы S с p^+ карманом: от ионного тока в ЖК среде к электронному в самом p^+ кармане, рис. 4.

Анализ скорости движения границы S позволил оценить подвижность ионов, которая по порядку получается равной 10^{-9} м²/Вс. Полученное значение величины подвижности ионов находится в согласии с литературными данными [1, 5].

Из-за конечной величины электрического сопротивления образца кремния, падение напряжения на поверхности кремния n -типа проводимости равномерно распределено по мере удаления от линии p^+ - n перехода. Следовательно, тянущее электрическое поле также равномерно распределено в плоскости ячейки от линии p^+ - n перехода. Косвенно, это подтверждается линейной зависимостью L от величины ступеньки напряжения U , рис. 3.

Установлено, что на контраст движущейся границы S влияет длительность периода отдыха ячейки между последовательными включениями ступеньки напряжения. При уменьшении времени отдыха ячейки контраст визуализации движущейся границы S падает. Для полного восстановления первоначального проявления электрооптического эффекта необходимо время отдыха ячейки порядка 3-5 минут. Такое влияние предыстории ячейки указывает на накопление ионных зарядов в ЖК. Факт накопления ионного



заряда в процессе движения границы S проявляется например в темпе возрастания тока через p^+-n переход. Время выхода тока на насыщение при первом включении ступеньки в среднем соответствует времени прохождения границей S дистанции L . После кратковременного отключения напряжения, при новом включении ступеньки напряжения, ток p^+-n перехода нарастает значительно быстрее. Такой характер кривой подтверждает, что в слое ЖК после действия первой ступеньки напряжения накопился некоторый ионный заряд, который за период времени отдыха не успевает полностью нейтрализоваться, и сразу вовлекается в процесс переноса заряда в подложку при втором включении напряжения.

3. Заключение. Таким образом, несмотря на то, что детальный механизм описанного электрооптического эффекта остается не выясненным, приведенные в работе экспериментальные результаты свидетельствуют о ионном механизме описанного электрооптического эффекта. В данной геометрии ЖК ячейки, в которой ЖК граничит с кремниевой подложкой и p^+-n переходом на ее поверхности, при обратном смещении p^+-n перехода, область p^+ -типа проводимости кремния служит инжектором электронов в слой ЖК с образованием отрицательно заряженных ионов. В тянущем электрическом поле поток монополярных ионов вызывает однородное изменение исходной ориентации нематика.

Литература

1. Blinov L.M., Chigrinov V.G. Electrooptic Effects in Liquid Crystal Materials / New York: Springer, 1993
2. Muller R., Kamins T. Device electronics for integrated circuits / New York: Wiley, 1986.
3. Калашников С.Г. Общий курс физики. Электричество / М. Наука, 1977.
4. Zhang X.G. Electrochemistry of Silicon and Its Oxide / New York: Klumer Academic/Plenum Publishers, 2001.
5. deGennes P.G., Prost J. The Physics of Liquid Crystals / Oxford: Clarendon, 1995.

ION WIND EFFECT IN NEMATIC CELL WITH SILICON SUBSTRATE

S.I. Kucheev, Yu.S. Tuchina

Belgorod State University,
Pobedy Dt., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: skucheev@yahoo.com

Abstract. Some experimental results concerning observation not stationary change of nematic orientation in liquid crystal cell with silicon substrate at disturbance by voltage step. Changing of initial nematic orientation is explained by the influence of negative ions movement (so-called ion wind) on the director. Ions are created due to electron injection from p^+ region of back biased p^+-n junction.

Key words: nematic liquid crystal, nematic cell, negatively charged ions, p-n junction.



УДК 539.4.015.1; 548.24

ИЗМЕНЕНИЕ МАКРОСТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТЕХНИЧЕСКИ ЧИСТОГО НИКЕЛЯ В ПРОЦЕССЕ ОТЖИГА В ДИАПАЗОНЕ 20°C – 600°C

Н.В. Камышанченко, А.В. Гальцев, О.А. Печерина

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: kamysh@bsu.edu.ru

Аннотация. Повышение механических свойств и создание устойчивой структуры металлов, в процессе термо-механического воздействия была и остается актуальной задачей металлофизиков. На механические и физические свойства никеля существенное влияние оказывают химический состав, технология механико-термической и химической обработки. В настоящей работе рассматривается структурное состояние технически чистого никеля, подвергнутого температурному воздействию, и влияние его на электро-механические свойства.

Ключевые слова: никель, отжиг, закалка, изохронный отжиг.

1. Материалы, оборудование и методика исследования. На электроэрозионном станке «Sodick AQ300L» вырезались никелевые образцы в виде лопаток с шириной рабочей части 2 мм и длиной 12 мм, приспособленных для определения механических характеристик на универсальной испытательной машине «Instron 5882» в процессе статического растяжения со скоростью нагружения 1,5 мм/мин. Для снятия дефектного поверхностного слоя, образцы подвергались механической шлифовке и полировке.

Нагрев до 1200°C образцов под закалку в воду при 0°C осуществлялся в печи «Nabertherm P330» и в ней же производился отжиг образцов при температурах в диапазоне 20°C – 600°C в течение 10 минут.

Для выделения границ зерен никелевые образцы подвергали химическому травлению в концентрированной кислоте HNO₃. Морфология поверхности образцов исследовалась с помощью микроскопа «OLYMPUS G71». Определение средних размеров зерен было выполнено методом «случайных секущих».

Измерение микротвердости производили микротвердомером «DM-8B» с использованием пирамидки Виккерса с нагрузкой на индентор 50 г.

Определение удельного электрического сопротивления проводилось четырехзондовым методом в диапазоне температур 20°C – 600°C. Для этого образец устанавливался на измерительный столик термокамеры криогенной установки. Измерительная зондовая головка прижималась пружинным механизмом к плоской полированной поверхности образца. Измерения проводились при токе 10 мА. Данные о падении напряжения на измерительных зондах поступали на цифровой нановольтметр Agilent 34420A, с которого эти данные передавались на компьютер. Температура образца контролировалась с помощью термодпары.

Результаты измерений представлены в табл. 1.



Таблица 1

Результаты измерений

Температура отжига, °С	Размер зерна d, мкм	Микротвердость HV 0,05	Удельное электросопротивление ρ , мкОм·см	Предел прочности σ_B , МПа
20	95,08	118	73,47	292,66
50	115,59	123	77,58	294,47
100	118,47	127	92,25	296,81
150	122,49	129	99,60	300,36
200	124,08	135	105,31	303,64
250	125,15	128	113,47	305,48
300	125,64	126	72,65	293,46
350	125,09	128	76,94	293,14
400	125,4	124	63,47	292,94
450	125,98	123	58,78	290,63
500	125,92	124	55,19	290,50
550	125,71	124	53,47	290,08
600	125,42	123	50,85	289,79

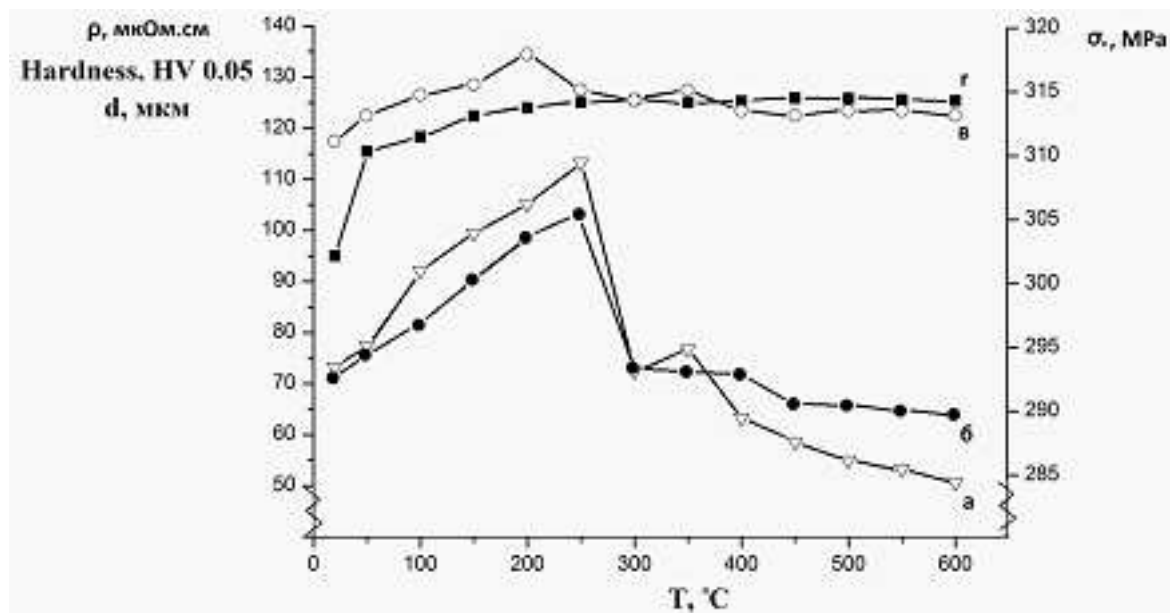


Рис. 1. График зависимости электрических (а), механических (б) свойств, микротвердости (в) и размера зерна (г) от температуры отжига

В связи с особенностью структурных превращений, протекающих при отжиге, изменение значений электро-механических свойств в широком температурном диапазоне



происходит неоднородно. Эти изменения определяются реализацией таких основных превращений при отжиге, как возврат, первичная, собирательная и вторичная рекристаллизация.

Закалка от высоких температур характеризуется влиянием избыточного количества вакансий на электро-механические свойства.

Полученные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что на стадии возврата основным структурным дефектом отжига является уменьшение концентрации точечных дефектов, наиболее сильно изменяющих величину удельного электрического сопротивления (рис. 1а) в диапазоне $50^{\circ}\text{C} - 250^{\circ}\text{C}$. В процессе активного перемещения вакансий и взаимодействие их с дислокациями происходит не только повышение электрического сопротивления, но и повышение механических характеристик (прочности, микротвердости) при переходе от стадии возврата в стадию первичной рекристаллизации (рис. 1б, 1в).

Собирательная рекристаллизация лишь несколько увеличивает размер рекристаллизационного зерна и обеспечивает снижение прочности, но в меньшей мере, чем при первичной рекристаллизации (диапазон $250^{\circ}\text{C} - 300^{\circ}\text{C}$). Отжиг в температурном диапазоне $250^{\circ}\text{C} - 300^{\circ}\text{C}$ приводит к резкому снижению микротвердости и удельного электрического сопротивления. Такое снижение микротвердости и удельного электрического сопротивления в процессе отжига связывается с активным объединением закалочных вакансий и образование крупных вакансионных комплексов.

Однако, дальнейшее повышение температуры в диапазоне $350^{\circ}\text{C} - 400^{\circ}\text{C}$ приводит к нарушению монотонного изменения микротвердости и увеличению ее значения.

Температура, при которой наблюдаются эффекты повышения твердости и удельного электрического сопротивления (диапазон $350^{\circ}\text{C} - 450^{\circ}\text{C}$), совпадает с температурным интервалом ферромагнитного превращения для поликристаллического никеля [1] и обусловлено процессом упрочнения за счет накопленных зернограничных дислокаций, образующихся при ферромагнитном превращении [2].

Повышение плотности зернограничных дислокаций ведет к возрастанию полей упругих напряжений на границе зерен, в результате чего происходит упрочнение никеля и увеличение удельного электрического сопротивления.

Отожженные образцы никеля в диапазоне $500^{\circ}\text{C} - 600^{\circ}\text{C}$ имеют более однородные по размерам зерна, а в теле зерен наблюдаются отдельные дислокации и в целом плотность дислокации снижается [3].

При этом изменение микротвердости в теле зерна, прочности и значение удельного электрического сопротивления коррелируют с эволюцией структуры.

Таким образом, в процессе проведенных исследований было установлено влияние закалочных дефектов, отжигаемых в диапазоне температур от $20^{\circ}\text{C} - 600^{\circ}\text{C}$ на структурные и электро-механические свойства технически чистого никеля.

Литература

1. Лифшиц Б.Г., Карпошин В.С, Линецкий Я.Л. Физические свойства металлов и сплавов / М.: Металлургия, 1980. – 320 с.
2. Исаев М.Ф. Структурные изменения на границах зерен никеля при нагревах вблизи точки Кюри // ФММ. – 1987. – 64;4. – С.823-826.



3. Камышанченко Н.В., Гальцев А.В., Печерина О.А. Соотношение Холла-Петча при описании предела текучести и микротвердости технически чистого никеля, подвергнутого отжигу в диапазоне 700-1000 // Научные ведомости БелГУ, Сер: Естественные науки. – 2011. – №23; 25.

**CHANGE OF MACROSTRUCTURE, PHYSICAL AND MECHANICAL
PROPERTIES OF PURE TECHNICAL NICKEL DURING THE PROCESS
OF ANNEALING IN THE RANGE 20°C-600°C**

N.V. Kamyshanchenko, A.V. Galtsev, O.A. Pecherina

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: kamysh@bsu.edu.ru

Abstract. Increase of mechanical properties and creation of stable structure of metals in the process of thermomechanical effect remains the urgent problem of metal physics. Mechanical and physical properties of nickel are strongly influenced by chemical composition and also by the technology of mechanical thermal and chemical processing. In this paper we study the structural state of commercially pure nickel that is exposed by thermal effect, and its influence on electro-mechanical properties.

Key words: nickel, annealing, tempering, isochronous annealing.



УДК 538.975

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ Zr-Ti-Si-N, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ДУГОВОГО ОСАЖДЕНИЯ

*В.М. Береснев, *В.В. Грудницкий, **Д.А. Колесников, **Е.В. Крыцына,
А.Д. Погребняк, **М.С. Прозорова, *О.В. Соболев

* Харьковский национальный университет, пл. Свободы, 4, Харьков, 61077, Украина,
e-mail: beresnev-scpt@yandex.ua

** Белгородский государственный университет, ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия

*** Сумской государственный педагогический университет им А.С. Макаренко, ул.Роменская, 87,
Сумы, 40002, Украина

**** Харьковский политехнический университет, ул. Фрунзе, 21, Харьков, 61002, Украина

Аннотация. С помощью вакуумно-дугового осаждения в ВЧ разряде были получены сверхтвердые наноструктурные комбинированные покрытия с твердостью $H_v \geq 40$ ГПа. Проведен анализ влияния высокотемпературного отжига в вакууме 1180 °С и воздушной среде 800 °С на фазовый состав, структуру и напряженное состояние ионно-плазменных покрытий Zr-Ti-Si-N. В работе рассмотрено два режима осаждения покрытий. Установлено, что определяющим субструктурные характеристики нанокристаллитов (Zr,Ti)N твердого раствора в температурном интервале 25÷1180 °С является процесс увеличения размера зерна с 12 до 25 нм, при незначительном понижении микродеформации решетки.

Ключевые слова: сверхтвердые покрытия, отжиг, ионно-плазменное осаждение, фазовый состав.

Введение. Нитриды переходных металлов, таких, как Ti, Zr, Cr и др. уже давно используются в качестве упрочняющих и износостойких покрытий благодаря их термической стабильности и высокой прочности [1,2]. Однако покрытия на основе нитрида одного из этих элементов проигрывают в своих свойствах многокомпонентным системам. В то же время известно, что гораздо легче управлять свойствами многокомпонентных покрытий, варьируя их структуру и фазовый состав. Поэтому в данной работе будут проведены исследования свойств сверхтвердых покрытий на основе системы Zr-Ti-Si-N, полученные методом вакуумно-дугового распыления. Основной задачей исследования являлось определение изменения механических характеристик покрытий, их фазового состава в зависимости от температуры отжига.

1. Образцы и методики эксперимента. Покрытия получали вакуумно-дуговым осаждением из цельнолитой мишени Zr-Ti-Si. Были приготовлены две серии образцов с покрытиями Zr-Si-Ti-N с разным содержанием Ti и Si. Покрытия толщиной 3÷3,8 мкм наносились на подложку из инструментальной стали P6M5 (HRC=58). Отжиг проводили как в воздушной среде, в печи при температурах $T=300\div 800$ °С, так и в вакуумной

печи при давлении $5 \cdot 10^{-4}$ Па и при $T = 300 \div 1180$ °С. Элементный состав определялся на растровом ионно-электронном микроскопе Quanta 200 3D. Исследования механических характеристик осуществлялось методом наноиндентирования при нагрузке 10 мН на наноинденторе NANO INDENTOR II (MTS System Inc. USA).

2. Результаты эксперимента. По данным элементного микроанализа покрытия для образцов 1-й серии в среднем содержат 32-35 ат.% атомов азота, 2,5...2,7 ат.% кремния, 4,5...4,8 ат.% титана и 55...58 ат.% атомов циркония. Образцы 2-й серии содержат 35...39 ат.% азота, 2,2...2,4 ат.% кремния 29...31 ат.% титана и 32...34 ат.% циркония. Особенностью данной серии является повышение содержания сильного нитридообразующего элемента – титана. На рис. 1 приведены участки рентгendifракционных спектров первой и второй серий образцов. По рентгendifрактометрическим спектрам явно определяются дифракционные пики, относящиеся к твердому раствору (Zr,Ti)N на основе ZrN с кубической решеткой типа NaCl.

Кристаллиты в пленке находятся под действием деформации сжатия в плоскости пленки, величиной -1,1%, что соответствует действию сжимающих напряжений в системе «пленка-подложка», величиной -3,5 GPa. Действием напряжений сжатия в плоскости роста пленки, объясняется увеличенный вдоль нормали к плоскости роста период ZrN и TiN, определенный при съемке по схеме θ - 2θ .

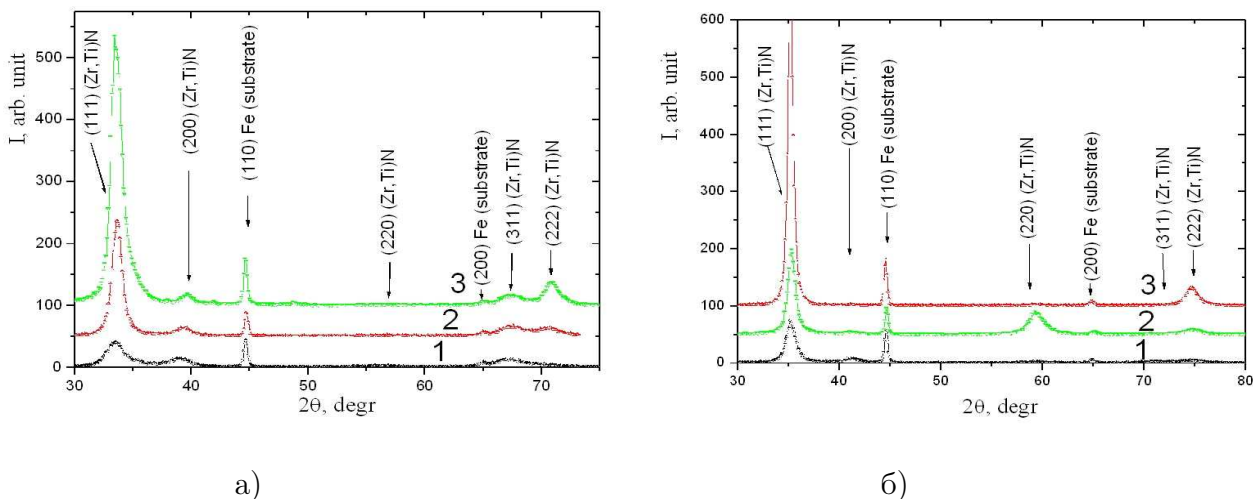


Рис. 1. Участки рентгendifракционных спектров покрытий Zr-Ti-Si-N, полученных при (1- $U = -100$ В, $P = 0,3$ Па; 2 - $U = -200$ В, $P = 0,6$ Па; 3 - $U = -200$ В, $P = 0,3$ Па): а) образцы 1-й серии; б) образцы 2-й серии

Результаты влияния отжига на параметры структуры покрытий Zr-Ti-Si-N приведены в табл. 1



Таблица 1

Изменение параметров структуры и субструктуры ионно-плазменных покрытий Zr-Ti-Si-N системы при высокотемпературном отжиге в вакууме и воздушной атмосфере

Параметры структуры	Не отожженный образец	T _{ан} =300°C вакуум	T _{ан} =500°C вакуум	T _{ан} =800°C вакуум	T _{ан} =1180°C вакуум	T _{ан} =300°C воздух	T _{ан} =500°C воздух
a0, nm	0,45520	0,45226	0,45149	0,45120	0,45064	0,45315	0,45195
ε, %	-2,93	-2,40	-1,82	-1,01	-1,09	-2,15	-1,55
<ε>, %	1,4	1,0	0,85	0,5	0,8	0,95	0,88

В результате исследования параметров решетки и внутренних напряжений в покрытиях было обнаружено, что величина внутренних напряжений падает при повышении температуры отжига до 800°C практически в три раза. Дальнейшее повышение температуры отжига в вакууме до 1180°C приводит к небольшому росту напряжений, связанных с изменением фазового состава пленок. Отжиг на воздухе в температурном интервале до 500°C также приводит к понижению внутренних напряжений в пленках.

Изменения механических характеристик 1 и 2-й серии в зависимости от температуры отжига на воздухе приведены в таблицах 2 и 3.

Таблица 2

Изменение микротвердости и модуля упругости в нанокompозитном покрытии до и после отжига (Первая серия)

Параметры	после напыления	T _{ан} =300°C воздух	T _{ан} =530°C воздух
H, GPa	32,4	38,7	40,8±7.5
E, GPa	333	373	400±83

Таблица 3

Изменение твердости и модуля упругости в нанокompозитном покрытии до и после отжига (Вторая серия)

Параметры	после напыления	T _{ан} =300°C вакуум	T _{ан} =53°C вакуум
H, GPa	40,8±2	43,7±4	48,6±6
E, GPa	392±26	424±56	456±78

В результате исследования фазового состава пленок 1-й серии после отжига в вакууме и на воздухе (Рис. 2) было обнаружено, что кроме нитридов (Zr, Ti)N и (Ti, Zr)N, присутствующих и в исходном состоянии при высокотемпературном отжиге появляются дифракционные пики от плоскостей кристаллитов окислов циркония (ZrO₂,

JCPDS Powder Diffraction Cards. International Center for Diffraction Data 42-1164, гексагональная решетка) и титана (TiO, JCPDS 43-1296, кубическая решетка), а также кристаллизовавшейся, по-видимому, из исходного аморфного состояния, фазы β -Si₃N₄ (JCPDS 33-1160, гексагональная решетка).

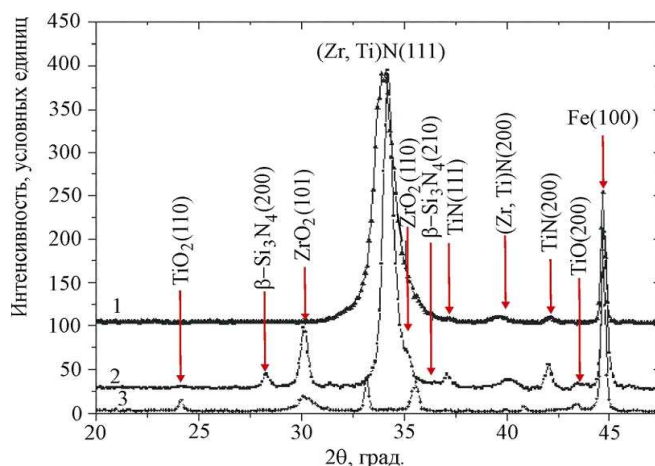


Рис. 2. Участки рентгенограмм покрытий на основе Zr, Ti, Si и N (1-я серия).

- 1) Исходное состояние; 2) После отжига в вакууме при 1180°C;
- 3) После отжига на воздухе при 800°C

3. Выводы. В результате исследований покрытий на основе Zr, Ti, Si и N было обнаружено, что отжиг в вакууме до температуры 1180°C а также на воздухе до температуры 800°C приводит к увеличению микротвердости и модуля упругости покрытий а также к уменьшению внутренних напряжений. Связано это, возможно, с появлением более твердой нанокристаллической фазы β -Si₃N₄, а также фазы ZrO₂, не присутствующих в исходных пленках. Проведенные исследования свидетельствуют о необходимости термической активации покрытий на основе Zr, Ti, Si.

Работа выполнена в рамках ГК №16.552.11.7004 с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» НИУ «БелГУ»

Литература

1. Pogrebnjak A.D., Sobol O.V., Beresnev V.M. Phase composition thermal stability, physical and mechanical properties of superhard on base Zr-Ti-Si-N nanocomposite coatings / Proceedings of Conference Nanostructured Materials and Nanotechnology IV: Ceramic Engineering and Science / 2010. – 31. – №7. – P.127-138.
2. Pogrebnjak A.D., Baidak V.S. Phase composition, thermal stability, physical and mechanical properties of superhard on base Zr-Ti-Si-N nanocomposite coatings / Proceedings of Conference 3rd International conference « Radiation interaction with material and its use in technologies 2010» Kaunas, Lithuania 20-23 September / 2010. – P.1-20.



**FEATURES OF THE STRUCTURALLY-PHASE STATE
OF NANOCOMPOSITION COATINGS ON BASIS OF ZR-TI-SI-N SYSTEM
FORMED BY THE METHOD OF THE VACUUM-ARC DEPOSITION**

***V.M. Beresnev, *V.V. Grudnitskiy, **D.A. Kolesnikov, **E.V Krytsyna,
A.D. Pogrebniak, **M.S. Prozorova, *O.V. Sobol**

*Kharkov State University, Liberty Pl., 4, Kharkov, 61077, Ukraine, e-mail: beresnev-scpt@yandex.ua

**Belgorod State University, Pobedy St. 85, Belgorod, 308015, Russia

***Sumy State Pedagogical University, Romenskaya St., 87, Sumy, 40002, Ukraine,

**** Kharkov University of Technology, Frunze St., 21, Kharkov, 61002, Ukraine

Abstract. Superhard nanostructured composite coatings with hardness of $H_v \geq 40$ GPa have been obtained by vacuum-arc deposition in high frequency discharge method. The influence analysis of high temperature annealing in vacuum (1180°C) and in air (800°C) on phase composition, structure and tension of ion-plasma coatings was carried out. Two modes of coating deposition were considered. The processes defining the substructural characteristics of nanocrystalline particles of (Zr,Ti)N solid solution in temperature region of $25 \div 1180^\circ\text{C}$ is grain growth from 12 to 25 nm with insignificant fall of crystal lattice microdeformation.

Keywords: solvothermal synthesis, bismuth telluride, nanostructural thermoelectric materials.



УДК 538.975

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ИМПУЛЬСНЫМ ВАКУУМНО-ДУГОВЫМ МЕТОДОМ

А.Я. Колпаков, А.И. Поплавский, И.В. Суджанская, М.Е. Галкина,
С.С. Манохин, И.Ю. Гончаров, А.Ю. Алейников, Е.Н. Бондарева

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: kolpakov@bsu.edu.ru

Аннотация. Приведены экспериментальные результаты исследований свойств углеродных покрытий, полученных импульсным вакуумно-дуговым распылением графитового катода. Используются методы просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, растровой электронной микроскопии и сканирующей зондовой микроскопии. Установлены корреляционные зависимости между спектрами потерь энергии электронов, энергией плазмона, величиной внутренних напряжений и морфологией поверхности покрытий, полученных в различных условиях.

Ключевые слова: углеродные покрытия, импульсный вакуумно-дуговой метод, энергия плазмона, внутренние напряжения, морфология поверхности.

1. Введение. Области применения аморфных углеродных покрытий определяются их высокой микротвердостью, низким коэффициентом трения, химической инертностью, прозрачностью в инфракрасном диапазоне излучения, биоинертностью, уникальными эмиссионными характеристиками и т.д. [1]. Уменьшение толщины этих покрытий до десятков, а зачастую единиц нанометров обусловлено эффективностью их применения на изделиях микромеханики, в частности, для защиты магнитного носителя жестких дисков компьютеров, а также повышения эксплуатационных характеристик микрозондов сканирующих зондовых микроскопов.

Термин «характеризация» используется в публикациях, посвященных исследованиям свойств различных материалов, при этом выбирается набор методик, позволяющих объективно оценивать свойства, присущие именно этому объекту. В работе [2] предпринята попытка критического анализа результатов исследований аморфных углеродных покрытий с учетом тех сложностей, которые связаны с их неупорядоченной структурой. Автор приходит к достаточно очевидному выводу о необходимости использования нескольких методов характеристики и корректной интерпретации полученных результатов с учетом ограничений, присущих каждой из применяемых методик.

Известно, что свойства аморфных углеродных покрытий существенно отличаются в зависимости от методов их получения, а также условий формирования [1,3]. Однако в обзорах [1,3] не рассмотрен импульсный вакуумно-дуговой метод [4], который имеет ряд преимуществ перед стационарным методом [5] получения сверхтвердых углеродных покрытий. Он позволяет получать существенно большие плотности плазмы и, кроме того, дозировать тепловую нагрузку на подложке. Особое значение эти преимущества имеют



в случае применения наноразмерных углеродных покрытий на изделиях микромеханики, а также в том случае, когда подложка изготовлена из диэлектрического материала или нетеплостойкого материала.

При рассмотрении параметров процесса, обеспечивающего формирование алмазоподобного углеродного (АПУ) покрытия, необходимо уточнить те критерии и методики, по которым производится оценка его свойств. Очевидно, что в качестве эталона необходимо рассматривать натуральный алмаз, который обладает наибольшей плотностью и твердостью по сравнению с другими аллотропными модификациями углерода.

Свойства углеродных покрытий зависят от метода и условий их формирования и определяются процентным соотношением фаз с различной гибридизацией валентных электронов: sp^2 , sp^3 [1,3]. Оценить соотношение этих фаз позволяет спектроскопия характеристических потерь энергии электронов [6]. Величина энергии плазмонов, определяемая с помощью этой методики, связана с локальной плотностью валентных электронов и коррелирует с плотностью углеродного покрытия:

$$E_p = \frac{h}{2\pi} * \left[\frac{ne^2}{\varepsilon_0 m} \right]^{1/2},$$

где n – число валентных электронов в единице объема, m – эффективная масса электрона, h , e , ε_0 – константы.

По данным работы [7] энергия плазмона для алмаза, АПУ покрытия и графита имеет значение 34 эВ, 30 эВ и 25 эВ, соответственно.

Согласно данным экспериментальных исследований, приведенным в обзорах [1,3], наибольшее влияние на свойства АПУ покрытия оказывает энергия ионов углерода. Диапазон энергии ионов углерода, при котором обеспечивается наибольшая плотность покрытия, составляет 50 – 100 эВ.

Известно, что результатом ионного облучения является не только формирование покрытия с преобладанием sp^3 -фазы, но также и высокие внутренние напряжения сжатия, которые, по мнению некоторых авторов, являются одним из условий получения покрытий с наибольшей плотностью и микротвердостью [1]. При этом величина внутренних напряжений может рассматриваться в качестве наиболее удобного параметра для сравнения в отличие от плотности и микротвердости, измерение которых в случае наноразмерных покрытий затруднительно.

Учитывая объект, выбранный нами для исследований, отдельной проблемой необходимо рассматривать определение толщины наноразмерного покрытия или отдельных слоев. Незначительные погрешности в определении толщины приводят к существенной ошибке в определении величины внутренних напряжений. Кроме того, как было показано в работе [8], свойства наноразмерных углеродных покрытий зависят от их толщины.

Целью данной работы является определение возможности характеристики, наноразмерных углеродных покрытий, получаемых импульсным вакуумно-дуговым методом при различных режимах формирования, путем анализа спектра потерь энергии электронов, энергии плазмона, величины внутренних напряжений и морфологии поверхности. В качестве изменяемых режимов формирования выбраны угол наклона плаз-



менного потока к подложке θ , давление азота P_N в вакуумной камере и потенциал смещения на подложке. Этот выбор обусловлен тем, что структура и свойства углеродных покрытий зависят не только от энергии ионов, но и от угла наклона плазменного потока к подложке, влияние которого недостаточно изучено. Напуск азота применяется для увеличения электропроводности АПУ покрытий [9], поэтому представляет интерес исследование влияния давления азота на процесс структурообразования углеродных покрытий. Потенциал смещения на подложке позволяет влиять на морфологию поверхности [10].

2. Методика эксперимента. Нанесение наноразмерных углеродных покрытий толщиной 70 – 100 нм проводили на установке УВНППА-1-001, оснащенной импульсным источником углеродной плазмы с расходуемым графитовым катодом, изготовленным из графита МПГ-6, для предварительной очистки подложки использовали ионный источник типа ИИ-4-0.15. В качестве подложек использовали полированные пластины монокристаллического кремния, а также свежие сколы монокристалла NaCl.

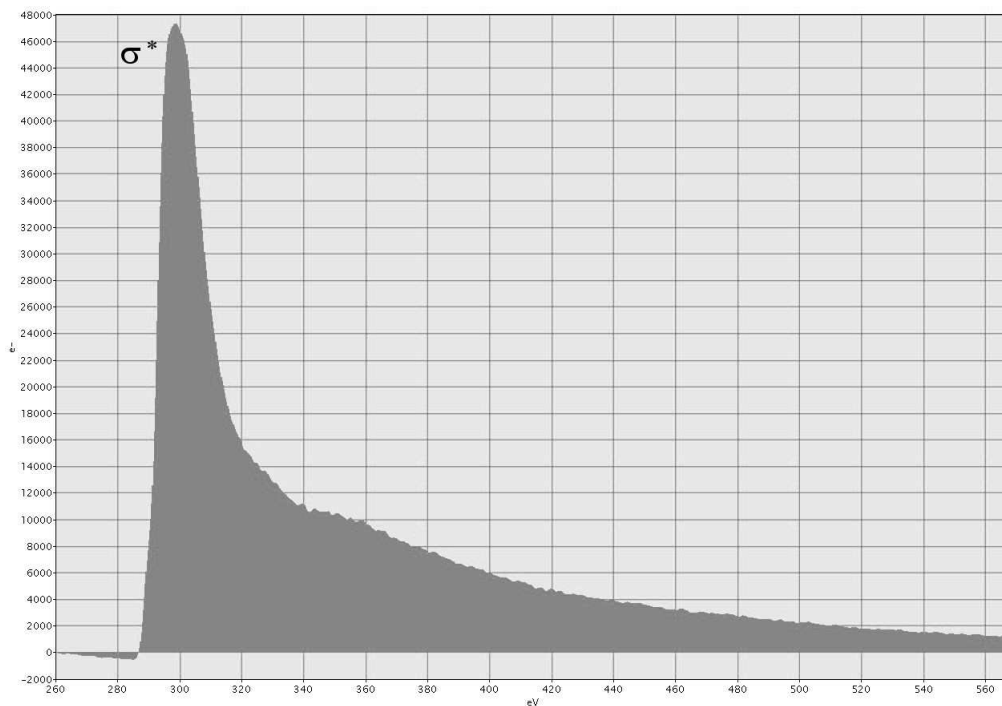
Определение толщины покрытий проводили с использованием сканирующего зондового микроскопа Ntegra Aura компании Нанотехнология-МДТ, создав предварительно ступень с помощью «маски». Кроме того, использовали растровый электронный микроскоп QUANTA 600 FEG компании FEI с катодом с полевой эмиссией, что позволило получить изображение покрытия на сколе подложки из кремния и определить его толщину.

Спектры потерь энергии электронов, а также величины энергии плазмонов были получены методом спектроскопии характеристических потерь энергии электронов с использованием просвечивающего электронного микроскопа высокого разрешения Tescan G2 F20 S-TWIN, оснащенного постколонным фильтром секторного типа Gatan 860 GIF 2001. Элементный состав наноразмерных углеродных покрытий определяли методом энергодисперсионного микроанализа. Методика подготовки тестовых образцов описана в работе [11].

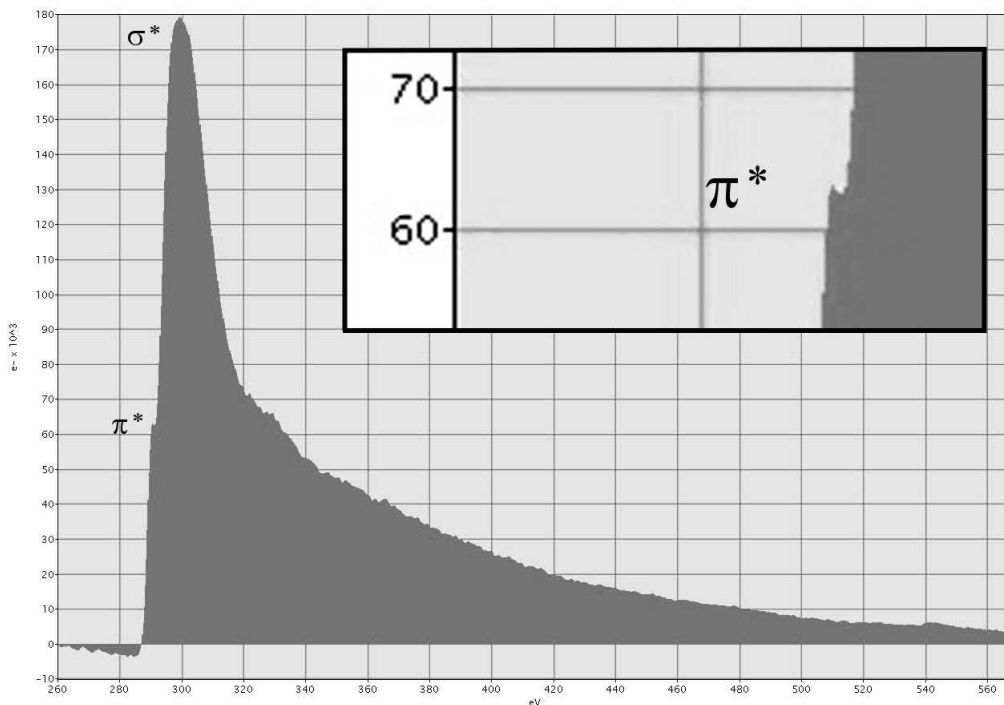
Зондовую лабораторию Ntegra Aura применяли для исследования морфологии поверхности покрытий в режиме полуконтактной атомно-силовой микроскопии.

Методика измерения величины внутренних напряжений наноразмерных углеродных покрытий подробно описана в работе [12].

3. Результаты и их обсуждение. На рис. 1 приведены спектры потерь энергии электронов, наноразмерных углеродных покрытий, которые были сформированы: из потока углеродной плазмы, нормального к подложке ($\theta=0^\circ$) (рис. 1а); при наклоне оси плазменного потока к подложке на угол $\theta=70^\circ$ (рис. 1б). Спектр потерь энергии электронов покрытия, осажденного в прямом потоке углеродной плазмы (рис. 1а), подобен спектру натурального алмаза и имеет один пик, указывающий на то, что матрица состоит из атомов углерода, связанных между собой σ -связью. Однако σ^* пик, присущий углеродному покрытию, более широкий, чем пик алмаза, это связано с тем, что межатомные расстояния σ -связи в покрытии непостоянны.



а)



б)

Рис. 1. Спектры потерь энергии электронов, наноразмерных углеродных покрытий, сформированных при $\theta=0^\circ$ (а) и $\theta=70^\circ$ (б)

В спектре потерь энергии электронов покрытия, осажденного при $\theta=70^\circ$, появляется небольшой π^* пик (рис. 1б), который свидетельствует о том, что между атомами углеродной матрицы существует небольшое количество связей, образованных за счет sp^2 -гибридизации электронных орбиталей, присущих графиту.

На рис. 2 приведен спектр потерь энергии электронов, наноразмерного углеродного покрытия, сформированного при $\theta=70^\circ$ с добавлением в вакуумную камеру азота. Добавление в вакуумную камеру азота приводит к увеличению доли графитовой фазы в матрице покрытия, о чем свидетельствует появление резкого π^* пика. Кроме того, в спектре присутствуют характерные ионизационные пики азота и кислорода. Этот результат чрезвычайно важен для объяснения характера изменения величины электропроводности углеродного покрытия при легировании его азотом.

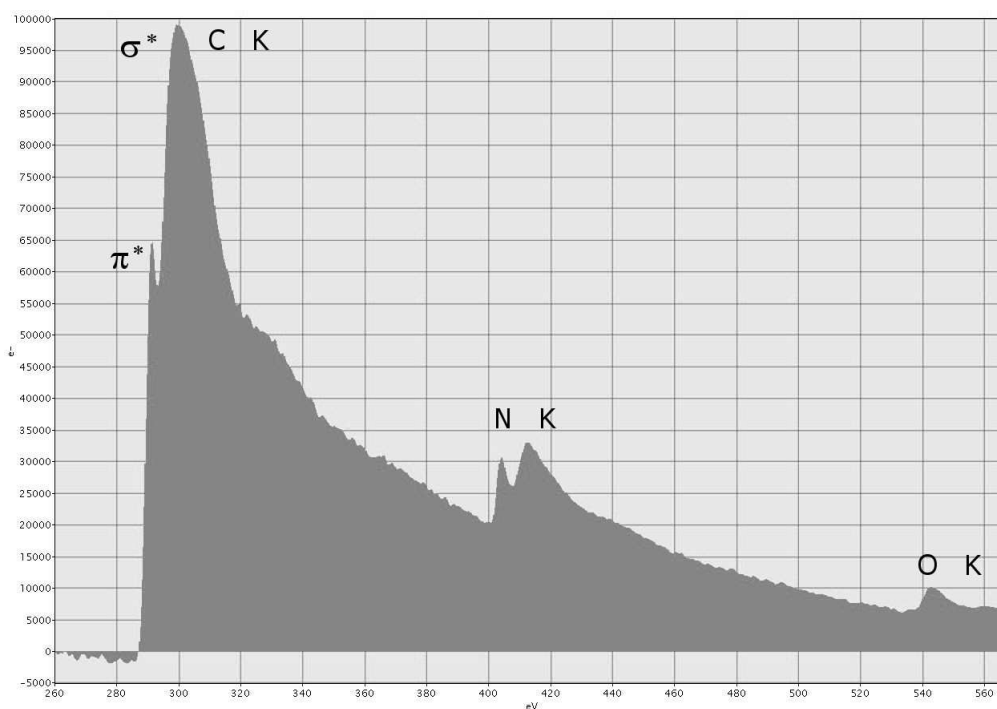


Рис. 2. Спектр потерь энергии электронов наноразмерного углеродного покрытия, сформированного при $\theta=70^\circ$ с добавлением в вакуумную камеру азота

На рис. 3 приведена низкоэнергетическая часть спектра потерь энергии электронов, используемая для определения энергии плазмона.

На рис. 4 и 5 представлены зависимости энергии плазмона E_p от угла наклона плазменного потока к подложке θ (рис. 4) и давления азота в вакуумной камере P_N (рис. 5). Максимальное значение энергии плазмона 31.4 эВ, полученное нами, хорошо согласуется с максимальным значением, полученным авторами работы [13], для покрытий, сформированных вакуумно-дуговым методом с использованием стационарного источника углеродной плазмы, оснащенного криволинейным фильтром, которое составляет 31.2 эВ.

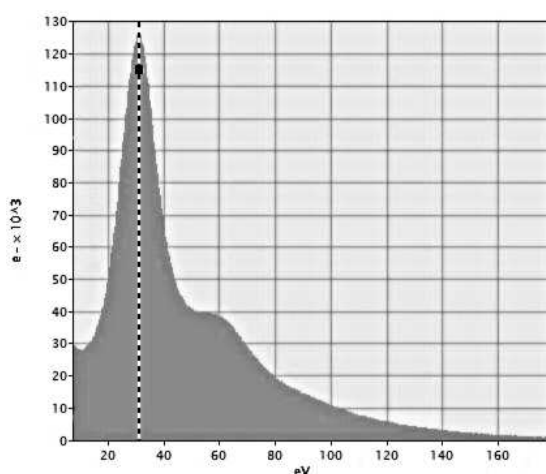


Рис. 3. Низкоэнергетическая часть спектра потерь энергии электронов, используемая для определения энергии плазмона

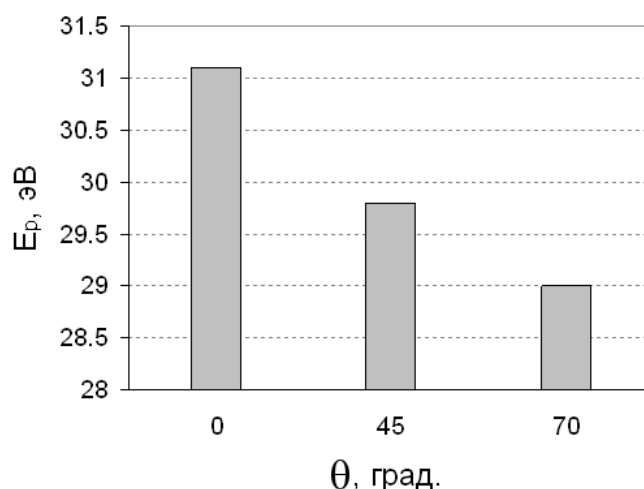


Рис. 4. Зависимость энергии плазмона E_p от угла наклона плазменного потока к поверхности подложки θ

Особый интерес представляет нелинейный характер зависимости энергии плазмона от давления азота в вакуумной камере. При низком давлении (0.003 Па) формируются покрытия, в которых преобладает sp^3 -связь. Подача в вакуумную камеру азота до давления 0.03 Па приводит к формированию углеродного азотсодержащего покрытия (содержание азота 12 ат. %) с низкой энергией плазмона $E_p=23$ эВ. При дальнейшем повышении давления азота в камере до 0.3 Па энергия плазмона увеличивается с 23 эВ до 25 эВ при увеличении содержания азота от 12 ат.% до 35 ат.%, что, скорее всего, связано с образованием фуллереноподобного нитрида углерода. Описание структуры и свойств фуллереноподобного нитрида углерода, осажденного на кремниевую подложку при температуре 300 °С путем лазерной абляции графита в среде азота, впервые приведено в работе [14].

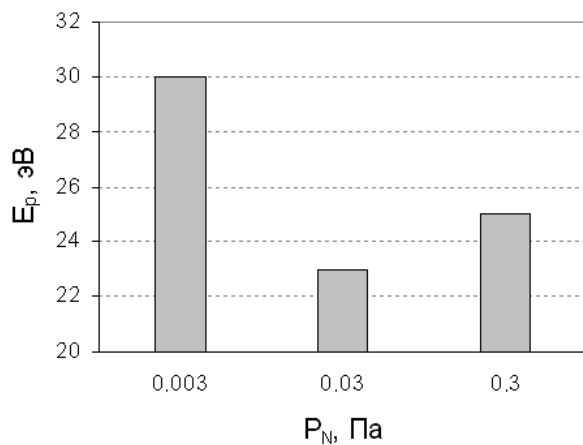


Рис. 5. Зависимость энергии плазмона E_p от давления азота в вакуумной камере P_N

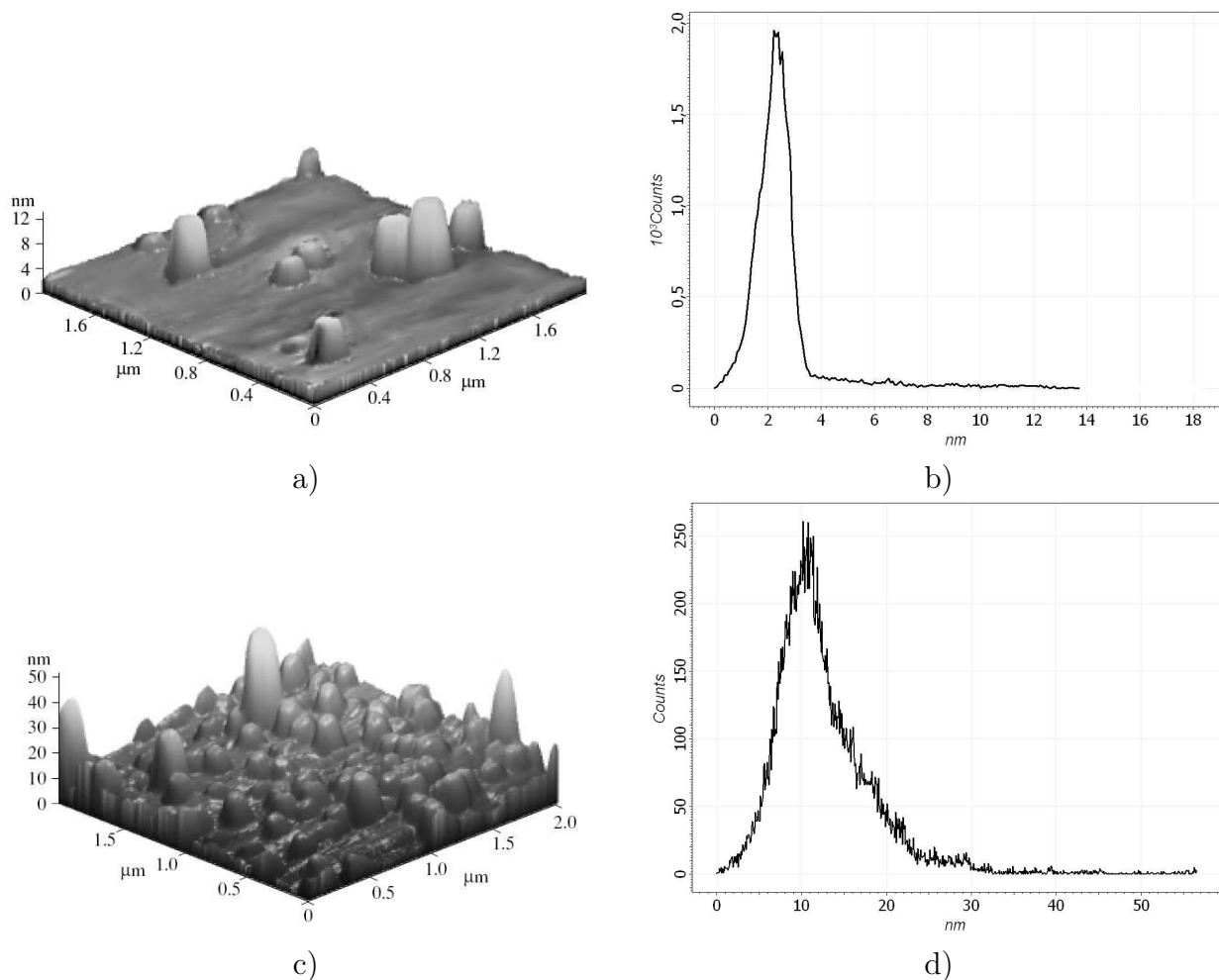


Рис. 6. Сканы поверхности углеродного покрытия, легированного азотом, полученного без приложения ускоряющего потенциала к подложке (а) с приложением ускоряющего потенциала 1200В (в), а также соответствующие им гистограммы распределения нановыступов по высоте (б и г).



На рис. 6 приведены сканы поверхности углеродного покрытия, легированного азотом, полученного без приложения ускоряющего потенциала к подложке (рис. 6а) и с приложением ускоряющего потенциала 1200 В (рис. 6в), а также соответствующие им гистограммы распределения нановыступов по высоте (рис. 6(б, г)).

Гистограммы распределения нановыступов по высоте позволяют получить количественную информацию об их размерах в зависимости от параметров формирования покрытия. В частности, анализируя гистограммы, приведенные на рис. 6(б, г), можно сделать вывод о том, что приложение ускоряющего потенциала позволяет увеличить высоту нановыступов в 5 раз.

На рис. 7 представлена зависимость величины внутренних напряжений в наноразмерных углеродных покрытиях от угла наклона оси плазменного потока к подложке θ . При изменении θ от 0° до 70° величина внутренних напряжений уменьшается от 13 ГПа до 6 ГПа. При этом в спектре потерь энергии появляется небольшой пик слабой π -связи, характерной для графита (рис. 1б), а энергия плазмона уменьшается с 31 до 29 эВ (рис. 4), что говорит об увеличении в матрице углеродного покрытия доли sp^2 фазы. Данный факт позволяет предположить, что величина внутренних напряжений коррелирует с энергией плазмона.

Моделирование процесса столкновений ионов с мишенью в среде программы SRIM-2010 [15] позволяет определить среднюю глубину залегания имплантированных ионов углерода в случае $\theta=0^\circ$ и при наклоне $\theta=70^\circ$. Имплантированные ионы определяют процесс уплотнения формируемого покрытия и возникновение в нем внутренних напряжений сжатия, вызванных «распуханием» (увеличением объема) покрытия, обусловленного различным дилатационным объемом вакансий и межузельных атомов.

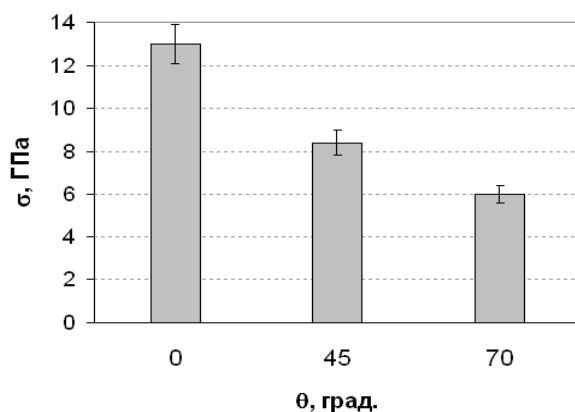


Рис. 7. Зависимость величины внутренних напряжений σ от угла наклона плазменного потока к поверхности подложки θ

Составляющая, перпендикулярная к поверхности подложки, обеспечивающая эффект уплотнения покрытия, может быть определена как $E \cos \theta$, где E – энергия ионов. Соответственно, составляющая, параллельная поверхности, которая расходуется на рас-



пыление и на интенсификацию поверхностной диффузии равна $E \sin \theta$. Меньшая глубина залегания радиационных дефектов в случае $\theta=70^\circ$ обуславливает большую вероятность релаксации внутренних напряжений в результате миграции дефектов к стокам (к поверхности формируемого алмазоподобного углеродного покрытия). Снижение эффекта уплотнения приводит к увеличению доли sp^2 -фазы в матрице покрытия, о чем свидетельствует появление в спектре потерь энергии электронов небольшого пика, характерного для слабой π -связи атомов углерода (рис. 1б), а также уменьшение энергии плазмона при увеличении угла наклона плазменного потока к подложке (рис. 4). При увеличении угла падения ионов с энергией 100 эВ средняя глубина залегания имплантированных ионов уменьшается с 0,8 нм до 0,4 нм, что увеличивает вероятность миграции дефектов к поверхности и релаксации напряжений.

На рис. 8 представлена зависимость внутренних напряжений σ от давления азота в вакуумной камере $P_N(\theta = 0^\circ)$. Изменение внутренних напряжений по мере повышения давления азота в камере объясняется, во-первых, изменением элементного и фазового состава матрицы углеродного покрытия (рис. 2). Во-вторых, наличием атомов газовой примеси, которая способствует превращению растущего скопления вакансий в поры [16] и формированию пористого покрытия. Величина внутренних напряжений практически не изменяется при изменении давления азота в диапазоне от 0.003 до 0.02 Па. Существенное изменение величины внутренних напряжений происходит при увеличении давления азота до 0.03 Па. С дальнейшим повышением давления азота в камере величина напряжений в формируемом покрытии продолжает снижаться и при $P_N = 0.5$ Па, $\sigma = 2$ ГПа.

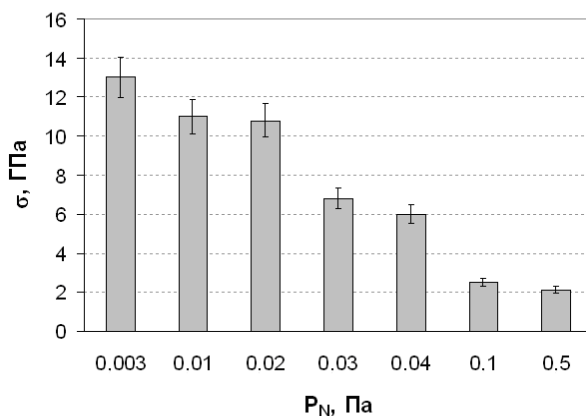


Рис. 8. Зависимость внутренних напряжений σ от давления азота в вакуумной камере P_N ($\theta=0^\circ$)

4. Выводы.

1. Использование просвечивающей и растровой электронной микроскопии высокого разрешения, а также сканирующей зондовой микроскопии позволяет характеризовать наноразмерные углеродные покрытия по следующим параметрам: толщина,



энергия плазмона, структура, особенности спектра потерь энергии электронов и морфология поверхности.

2. Добавление в вакуумную камеру азота приводит к увеличению доли графитовой фазы в матрице покрытия, о чем свидетельствует появление резкого π^* пика. Этот результат чрезвычайно важен для объяснения характера изменения величины электропроводности углеродного наноразмерного покрытия при легировании его азотом.
3. Гистограммы распределения нановыступов по высоте позволяют получить количественную информацию об их размерах в зависимости от параметров процесса формирования покрытия.
4. Получены зависимости внутренних напряжений σ и энергии плазмона E_p от угла наклона плазменного потока к поверхности подложки θ и давления азота P_N из которых следует, что наибольшая энергия плазмона и наибольший уровень внутренних напряжений соответствуют наноразмерным углеродным покрытиям, полученным при нормальном угле падения плазменного потока на подложку без напуска азота в вакуумную камеру.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки России подведомственным вузам на выполнение НИОКР, проект №2.3451.2011 «Влияние термической обработки на структуру и свойства алмазоподобных углеродных покрытий» с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» НИУ «БелГУ».

Литература

1. Robertson J. Diamond-like amorphous carbon // *Materials Science and Engineering*. – 2002. – 37. – P.129-281.
2. Lifshitz Y. Pitfalls in amorphous carbon studies // *Diamond and Related Materials*. – 2003. – 12. – P.130-140.
3. McKenzie D.R. Tetrahedral bonding in amorphous carbon // *Rep. Prog. Phys.* – 1996. – 59(12). – P.1611-1664..
4. Маслов А.И., Дмитриев Г.К., Чистяков Ю.Д. Импульсный источник углеродной плазмы для технологических целей // *Приборы и техника эксперимента*. – 1985. – 3. – С.146-149.
5. Стрельницкий В.Е. Вакуумно-дуговой синтез алмазоподобных пленок: история, последние разработки, применение, перспективы // *Вопросы атомной науки и техники*. – 2002. – 6. – С.125-133.
6. Egerton R.F. Electron Energy Loss Spectroscopy in the TEM // *Rep. Prog. Phys.* – 2009. – 72. – P.016502-016527.
7. Kulik J., Lifshitz Y., Lempert G.D., Grossman E., Rabalais J.W., Marton D. Electron-energy-loss spectroscopy of mass-selected ion-beam-deposited diamondlike carbon // *J. Appl. Phys.* – 1994. – 76(9). – P.5063-5069.
8. Kolpakov A.Ya., Sudzhanskaya I.V., Galkina M.E., Goncharov I.Yu., Poplavsky A.I., Manokhin S.S. Nanometer-Sized Carbon Coatings on Silicon Wafer: The Effect That Nitrogen Doping Level Has on Specific Conductivity and Morfology // *Nanotechnologies in Russia*. – 2011. – 6;3-4. – P.185-188.



9. Галкина М.Е., Колпаков А.Я., Сафронова О.В., Суджанская И.В. Способ формирования сверхтвердого легированного углеродного покрытия на кремнии в вакууме Патент РФ № 2342468. Бюл. №36.
10. Колпаков А.Я., Галкина М.Е., Суджанская И.В., Поплавский А.И. Влияние внутренних напряжений на морфологию поверхности твердых наноразмерных углеродных покрытий // Российские нанотехнологии. – 2008. – 3;9-10. – С.95-99.
11. Kolpakov A.Ya, Poplavsky A.I., Galkina M.E., Sudzhanskaya I.V., Goncharov I.Yu., Druchinina O.A., Strigunov N.V., Kharchenko V.A., Merchansky O.Yu. Properties of Nanosized Carbon Coatings Doped with Nitrogen, Tungsten, and Aluminium and Obtained by Pulse Vacuum Arc Method // Nanotechnologies in Russia. – 2010. – 5;3-4. – P.160-164.
12. Колпаков А.Я., Поплавский А.И., Галкина М.Е., Суджанская И.В., Мерчанский О.Ю. Влияние угла наклона плазменного потока углерода к подложке и последующего отжига на внутренние напряжения и структуру углеродных наноразмерных покрытий, полученных импульсным вакуумно-дуговым методом // Упрочняющие технологии и покрытия. – 2012. – 4(88). – С.40-45.
13. Shi Xu, Tay B.K., Tan H.S., Zhong Li, and Tu Y.Q., Silva S.R.P., Milne W.I. Properties of carbon ion deposited tetrahedral amorphous carbon films as a function of ion energy // J. Appl. Phys. – 1996. – 79(9). – P.7234-7240.
14. Voevodin A.A., Jones J.G., Zabinsky J.S., Czigony Zs., Hultman L. Growth and structure of fullerene-like CN_x thin films produced by pulsed laser ablation of graphite in nitrogen // Journal of Applied Physics. – 2002. – 92. – P.4980-4988.
15. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersak J.P. SRIM - the stopping and range of ions in matter // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2010. – 286;11-12. – P.1818-1823.
16. Ахизер И.А., Давыдов Л.Н. Введение в теоретическую радиационную физику металлов и сплавов / Киев.: Наукова Думка, 1985. – 144 с.

CHARACTERIZATION OF CARBON COATINGS OBTAINED BY PULSED VACUUM-ARC DEPOSITION

A.Ya. Kolpakov, A.I. Poplavsky, I.V. Sudzhanskaya, M.E. Galkina, S.S. Manokhin, I.Yu. Goncharov, A.Yu. Aleinikov, E.N. Bondareva

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: kolpakov@bsu.edu.ru

Abstract. Experimental results of investigations of the properties of carbon coatings obtained by pulsed vacuum-arc sputtering of graphite cathode. High-resolution transmission electron microscopy (HRTEM), scanning electron microscopy (SEM) and scanning probe microscopy (SPM) are used. There are established correlation relations between electron energy loss spectra, plasmon energy, internal stress value and surface morphology of coatings obtained by different conditions.

Key words: carbon coatings, pulsed vacuum-arc deposition, plasmon energy, internal stress, surface morphology.



УДК 620.1.72:532.783

ЭФФЕКТ ПОЛЯ, ИНДУЦИРОВАННЫЙ ПОДВИЖНЫМИ ИОНАМИ В ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ С КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКОЙ

С.И. Кучеев, В.Ю. Новиков, Ю.С. Тучина

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: skucheev@yahoo.com

Аннотация. Исследуются переходные токи в жидkokристаллической ячейке с кремниевой подложкой р-типа проводимости. Анализ реакции темновых и модулированных светом токов в ячейке в ответ на ступеньку напряжения позволяет предположить, что реализуется эффект поля в кремнии, который индуцируется полем подвижных ионов (анионов) в слое жидкого кристалла.

Ключевые слова: жидkokристаллическая ячейка, подвижные ионы, кремниевая подложка.

1. Введение. Эффект поля в полупроводнике является одним из основных эффектов, на котором функционирует большинство полупроводниковых приборов. Обычно эффект поля индуцируется электрическим полем металлического электрода, на который подается потенциал смещения, знак полярности которого совпадает с типом проводимости полупроводника. В этом случае достигается режим обеднения или инверсии поверхности основными носителями заряда, что необходимо для формирования соответствующего проводящего поверхностного канала [1].

Однако электрическое поле в полупроводнике может индуцироваться другим способом, позволяющим значительно расширить функциональные возможности приборов на эффекте поля, например, встроенным зарядом в диэлектрике (флеш-память), ионами водорода в жидкостях (сенсоры рН) и т.д. При этом основной задачей остается установление четкой взаимосвязи между характеристиками, которые описывают заряды и среду, в которой они находятся, с проявлением эффекта поля, который был индуцирован этими зарядами.

Жидкие кристаллы (ЖК) относятся к материалам со слабой ионной проводимостью [2]. В электрических полях возможны процессы пространственного разделения и накопления ионов за счет электромиграции, что, как известно, может оказывать как негативное влияние на используемые в ЖК приборах электрооптические эффекты, так и целенаправленно использоваться для модуляции света [3]. Поэтому изучение зарядовой подсистемы в ЖК остается актуальной задачей.

В работе экспериментально рассматривается возможность реализации эффекта поля в кремнии подвижными ионными зарядами (анионами) в ЖК. При этом, учитывая, что эффект поля в полупроводнике по своей природе селективный с точки зрения знака электрического заряда, описываемый метод позволяет изучать селективное поведение

ионной подсистемы в ЖК материалах. В качестве примера рассмотрена возможность приложения эффекта поля в изучении подвижности анионов в ЖК.

2. Эксперимент. Подложкой в ЖК ячейке служил образец монокристаллического кремния р-типа проводимости с удельным сопротивлением 4,5 Ом·см. Предварительно поверхность кремния протравливалась плавиковой кислотой для удаления защитного слоя окиси кремния. Толщина ЖК слоя задавалась фторопластовыми прокладками между поверхностью кремния и покровной стеклянной пластинкой с токопроводящей пленкой окиси индия (ITO). Омический контакт к образцу кремния обеспечивался In-Ga пастой. Начальная ориентация молекул ЖК на поверхностях Si и ITO подложек не задавалась. В работе использовались нематические жидкие кристаллы ЖК1282 (НИ-ИОПИК, Москва) и Д205(аналог 5СВ, НПО Монокристаллреактив, Харьков) без дополнительной очистки. Исследовались переходные токи в ячейке в ответ на изменение полярности ступеньки постоянного напряжения с +3В на $-U$ относительно кремния. Время действия ступеньки напряжения +3В в течение 3 сек.

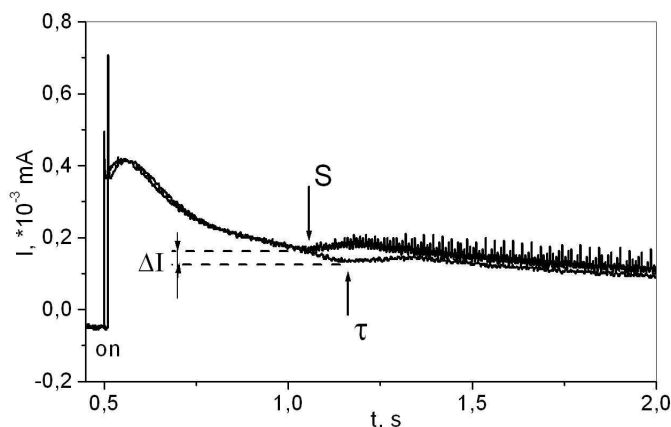


Рис. 1. Переходные темновой (1) и модулированный светом (2) токи в ячейке Si/Д205/ITO. Площадь ячейки 260 мм². Толщина ЖК слоя 20 мкм

На рис. 1 представлены типичные осциллограммы соответствующие темновому (1) и модулированному светом (2) токов после переключения (on) полярности ступеньки напряжения с +U(3В) на $-U(10В)$ относительно кремниевой подложки. Модуляция света осуществлялась механическим прерыванием луча He-Ne (0,63 мкм) лазера подающего на ячейку. Из приведённого рисунка видно, что до момента времени, отмеченного стрелкой S, темновой и модулированный светом токи практически идентичны. После этого момента времени ячейка становится светочувствительной, что видно по проявлению модуляции света на кривой 2, при этом на кривой темнового тока (1) наблюдается минимум отмеченный стрелкой τ и амплитудой ΔI .

Мы связываем появление минимума на кривой темнового тока с проявлением эффекта поля в кремнии, который индуцирован анионами в ЖК. До переключения полярности на ячейку действовало напряжение с полярность + U, при этом анионы аккумулируются у поверхности ITO. После изменения полярности напряжения анионы



дрейфуют к поверхности кремния и при достижении ее, своим электрическим полем вызывают дополнительное к действию электрического поля электрода ИТО, обеднение поверхности кремния основными носителями заряда. В этот момент времени поверхностный слой кремния становится высокоомным. В условиях освещения поверхности кремния, вследствие генерации электрон-дырочных пар, высокоомного состояния не формируется и минимум тока не проявляется.

С целью варьирования величины воздействия анионов на величину поверхностной проводимости кремния изменялась концентрация анионов (катионов) растворением в ЖК соли тетрабутил аммония бромида (ТВАВ), диссоциирующей на катионы Br^- и анионы TVA^+ [4].

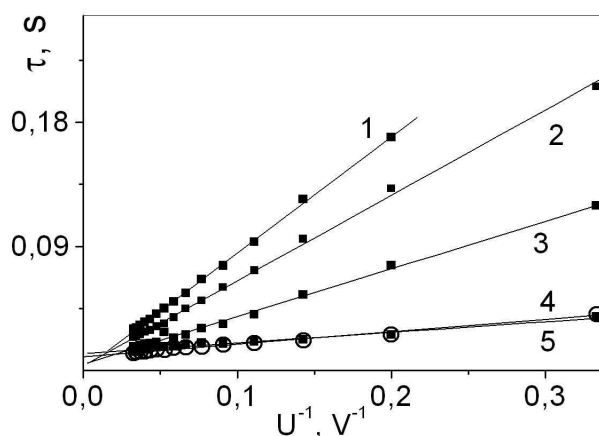


Рис. 2. Зависимость времени минимума переходного тока в ячейке Si/ЖК1282+ТВАВ/ИТО. Концентрация ТВАВ вес.; 2-0,74; 3- 1,37; 4-1,44; 5-2

На рис. 2 представлены зависимости времени τ появления минимума от обратной величины приложенного напряжения (U^{-1}) для разных концентраций соли ТВАВ. Хорошо видно, что экспериментальные точки ложатся на прямые, как для исходного ЖК, так и для ЖК с разной концентрацией соли. Такое поведение согласуется с моделью переноса анионов через слой ЖК, согласно которой подвижность (μ), время появления минимума (τ), приложенное напряжение (U) связаны простым соотношением $\mu = d^2/(\tau U)$ [5]. Из приведенного рисунка также следует, что подвижность носителей заряда, соответствующая наклону прямой, возрастает с увеличением концентрации анионов, что может быть обусловлено изменением вязкости ЖК материала и параметра порядка при введении в ЖК примеси. Оценка подвижности дает величину в диапазоне $10^{-9} - 10^{-10} \text{ м}^2/\text{Вс}$, что находится в согласии с литературными данными [2, 6].

На рис. 3 представлены зависимости амплитуды минимума ΔI от величины ступеньки приложенного напряжения U при разной концентрации диссоциирующей соли. Хорошо видно, что с увеличением концентрации соли и, следовательно, концентрации анионов амплитуда минимума увеличивается, что также не противоречит нашему предположению об эффекте поля в кремнии. Эффект обеднения поверхности тем больше,



чем большее количество анионов подходит к поверхности кремния, а в эксперименте мы увеличиваем концентрацию анионов за счет растворения в ЖК большего количества соли. Несоответствие поведения кривой 5 (конц. 2) по сравнению с другими кривыми (1,2,3,4) на рис. 2, 3 по всей видимости обусловлено тем, что концентрация (2) близка к насыщению, о чем говорит некоторое количество нерастворенных в образце ЖК кристалликов соли.

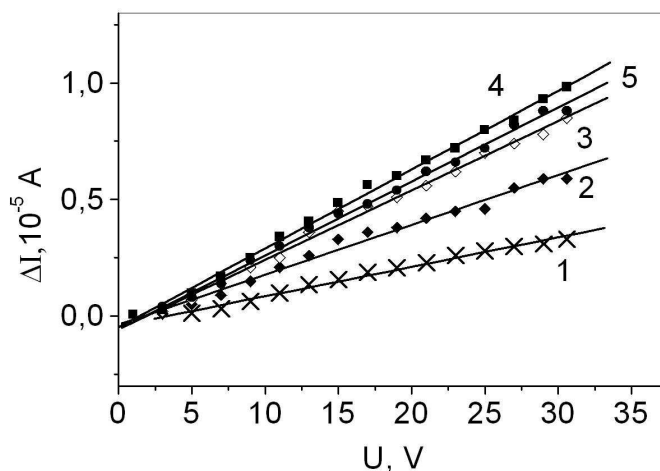


Рис. 3. Зависимость ампл. минимума переходного тока в ячейке Si/ЖК1282+ТВАВ/ИТО. Концентрация ТВАВ вес.: 1- исходный ЖК; 2-0,74; 3- 1,37; 4-1,44; 5-2

Таким образом экспериментально установлена реализация эффекта поля в кремнии р-типа проводимости в ЖК ячейке, который индуцируется подвижными ионами (анионами) в слое ЖК, образующимися в результате диссоциации растворимой соли и исходных примесей.

Литература

1. Muller R., Kamins T. Device electronics for integrated circuits / New York: Wiley, 1986.
2. Блинов Л.М. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов / М.:Наука,1978. – 384 с.
3. Slussarenko S.S. // Europhysics letters. – 2001. – 56;5. – P.672-675.
4. Koval'chuk A.V. // Functional Materials. – 2001. – 8;4. – P.690-693.
5. deGennes P.G., Prost J. The Physics of Liquid Crystals / Oxford: Clarendon, 1995.
6. Mada H., Osajima K. // J. Appl. Phys. – 1986. – 60;9. – P.3111-3113.

FIELD EFFECT INDUCED BY MOBILE IONS IN LIQUID CRYSTAL CELL WITH SILICON SUBSTRATE

S.I. Kucheev, V. Yu. Novikov, Yu.S. Tuchina

Belgorod State University,
Pobedy Dt., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: skucheev@yahoo.com

Abstract. Transient currents in liquid crystal cell with silicon substrate of p-type conductivity are investigated. Analysis of dark and light modulated currents in the cell shows that field effect in silicon is induced by electric field of mobile ions (anions) in liquid crystal layer.

Key words: nematic liquid crystal, nematic cell, negatively charged ions, p-n junction.



УДК 537.9 539.213

ОТРИЦАТЕЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ Cu/Nb ³⁾**А.Г. Липницкий, Д.Н. Марадудин, А.И. Картамышев, И.В. Неласов**Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: lipnitskii@bsu.edu.ru

Аннотация. Для определения энергии межфазных границ между кристаллическими материалами преимущественно используются методы компьютерного моделирования в силу ограничений современной экспериментальной базы. Вместе с тем достоверность результатов моделирования существенно зависит от используемых потенциалов взаимодействия между атомами. Для обоснования надежности используемых потенциалов в работе проведено сопоставление величин энергий модельных структур Cu/Nb, рассчитанных в рамках модельного подхода и методом функционала электронной плотности. Из результатов моделирования установлена отрицательная величина энергии межфазной границы Cu(111)/Nb(110) для ориентации Курдюмова-Загса, которая преимущественно реализуется в наноламинатах Cu/Nb. Исследована анизотропия энергии границы Cu/Nb при отклонении взаимной ориентации решеток от сопряжения по плотноупакованным плоскостям меди и ниобия.

Ключевые слова: медь-ниобий, энергия межфазной границы, функционал электронной плотности.

Введение. Энергия межфазной границы (избыток энергии Гиббса, отнесенный к единице площади границы) является основной термодинамической характеристикой материалов с большой плотностью внутренних границ раздела на единицу объема, определяющей направленность процессов формирования и стабильность структуры. Один из классов материалов, где энергия границ оказывает определяющее влияние на структуру, представляют многослойные композиты несмешиваемых или обладающих ограниченной взаимной растворимостью металлов с нанометровой 10 нм толщиной слоев каждого компонента (наноламинаты). Наноламинаты рассматриваются как перспективные материалы для различных технологических приложений благодаря их радиационной стойкости, термическим, механическим, электрическим и магнитным свойствам, обусловленным специфичной структурой с большой плотностью межфазных границ [1]. В последние годы интерес исследователей к наноламинатам из ГЦК и ОЦК металлов особенно увеличился в связи с перспективой их использования в качестве материалов нового поколения для ядерной энергетики (недавняя работа сотрудников Los Alamos National Laboratory [2] и ссылки в ней). Впервые такой композит был получен методом магнетронного напыления для системы Cu-Nb [3], которая в настоящее время является наиболее подробно изученным примером из всех искусственно созданных металлических многослойных структур и часто используется в качестве модельного объекта при изучении свойств наноламинатов. Данная работа посвящена определению энергии межфазной границы Cu/Nb и изучению ее анизотропии в рамках метода погруженного

³⁾Работа выполнена при поддержке ГК 14.740.11.1170 и гранта РФФИ 09-02-00857-а



атома (МПА) при задании потенциалов межатомных взаимодействий [4, 5] в сочетании с расчетами энергии модельных структур Cu-Nb «из первых принципов» (в этом случае описание взаимодействий не использует параметры, подгоняемые для воспроизведения экспериментальных данных) пакетом AVINIT [6] для обоснования достоверности используемых потенциалов в приложении к решаемым в работе задачам.

К настоящему времени возможности экспериментальных методик не позволяют определять энергии межфазных границ между различными кристаллическими фазами, поэтому данная информация устанавливается методами компьютерного моделирования. Общей проблемой опубликованных к настоящему времени результатов расчетов энергий некогерентных межфазных границ в гетеросистемах, включая рассчитанные значения энергии границы Cu(111)/Nb(110) с ориентацией Курдюмова-Загса [7], остается значительное влияние используемых модельных потенциалов на результаты расчетов. Для преодоления отмеченной проблемы в работе проводится сопоставление энергий модельных систем, содержащих когерентные границы раздела Cu/Nb, рассчитанных «из первых принципов» и с помощью специально построенных МПА потенциалов для изучения межфазных границ в системе Cu-Nb [5]. Хорошее согласие этих энергий является обоснованием достоверности результатов моделирования МПА более сложных систем, включающих некогерентные границы Cu/Nb, недоступных подходу «первых принципов» из-за высоких требований к вычислительным ресурсам, недостижимым в современных суперкомпьютерах.

1. Результаты расчетов энергий когерентных границ в модельных системах Cu/Nb. Для формирования когерентных границ Cu/Nb модельные системы строились из кристаллической решетки ГЦК меди с равновесной постоянной решетки $a=3.615 \text{ \AA}$, воспроизводимой МПА потенциалами в согласии с экспериментальным значением этой величины [5]. При этом n соседних плоскостей (111) заполнялись атомами меди, а последующие n плоскостей (111) заполнялись атомами ниобия. Далее такое чередование в заполнении узлов решетки распространялось на всю кристаллическую ГЦК решетку. В результате получалась сверхструктура Cu_nNb_n , в которой присутствуют идентичные межфазные границы Cu(111)/Nb(111) при числе плоскостей каждого металла n кратном трем (поскольку период ГЦК решетки в кристаллографическом направлении [111] содержит три плоскости (111), чередующиеся по типу ABCABC...). Пример такой сверхструктуры проиллюстрирован на рис. 1 для случая $n=6$, из которого видно, что каждая межфазная граница в модельной системе формируется на стыке плоскостей типа C/A. Набор сверхструктур выбирался так, чтобы достигнуть числа слоев металлов, при котором взаимодействие между межфазными границами Cu(111)/Nb(111) в сверхструктурах становилось достаточно малым для получения однозначной величины ее энергии из «первых принципов».

Здесь следует отметить, что макроскопические кристаллы ниобия обладают ОЦК решеткой при нормальных условиях. Авторам не известны примеры реализации ГЦК решетки ниобия в нанолaminaтах из доступной литературы, вместе с тем, экспериментально с использованием методов аннигиляции позитронов наблюдался фазовый переход ОЦК \Rightarrow ГЦК при уменьшении размеров нанокластеров ниобия в меди [8]. В данной работе мы оставляем вне рассмотрения вопрос о существовании реальных аналогов вы-



бранной модельной структуры Cu/Nb, в данном случае она используется только для теста потенциалов МПА при описании границы из сопоставления с результатами более точных расчетов «первопринципным» методом функционала электронной плотности (ФЭП).

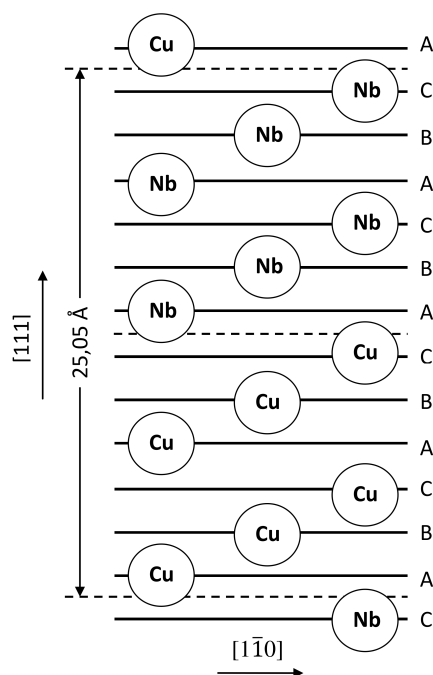


Рис. 1. Схематичное изображение сверхструктуры Cu_6Nb_6 , построенной в ГЦК решетке при постоянной решетки $3,615 \text{ \AA}$. Период сверхструктуры в кристаллографическом направлении $[111]$ составляет $25,05 \text{ \AA}$. Пунктирной линией показаны положения кристаллографически эквивалентных межфазных границ между плоскостями типа С и типа А.

«Первопринципные» расчеты выполнялись с помощью пакета ABINIT [6], реализующих метод ФЭП в базе плоских волн и подход спроецированных присоединенных волн (PAW) для эффективного описания движения валентных электронов в поле атомного остова. Обменно-корреляционный потенциал задавался в приближении GGA (обобщенное градиентное приближение). Кинетическая энергия плоских волн обрезалась при 750 эВ и сетка k точек ($12 \times 12 \times 12$) в зоне Бриллюэна выбиралась так, чтобы гарантировать точность расчета энергии модельных систем не хуже $0,2 \text{ мэВ/атом}$. При этом ошибка в рассчитанных энергиях межфазных границ не превышала $0,01 \text{ Дж/м}^2$ (6 мэВ/\AA^2).

Результаты расчетов энергий когерентных межфазных границ в модельных сверхструктурах Cu_nNb_n методами ФЭП и МПА представлены в табл. 1. Из таблицы видно, что ФЭП значение энергии границы $-1,32 \text{ Дж/м}^2$ не зависит от числа слоев металлов при $n \geq 9$ в пределах ошибки вычислений. Значение энергии той же границы $-2,29 \text{ Дж/м}$, полученное методом МПА, не зависит от n при $n \geq 6$, поскольку радиус обрезания 5.69 \AA



используемых потенциалов в системе Cu-Nb меньше толщины слоя из 6 плоскостей (111) в рассматриваемых сверхструктурах. При этом квантово-механический расчет также показывает незначительное взаимодействие границ в Cu_6Nb_6 , которое приводит к изменению эффективной энергии границы $\sim 1\%$.

Таблица 1

Энергия γ когерентных межфазных границ в сверхструктурах Cu_nNb_n , рассчитанная «из первых принципов» ФЭП и с использованием потенциалов МПА

Сверхструктура	γ , Дж/м ²	
	ФЭП	МПА
Cu_6Nb_6	-1,30	-2,29
Cu_9Nb_9	-1,32	-2,29
$\text{Cu}_{12}\text{Nb}_{12}$	-1,32	-2,29

Из проведенного сопоставления следует, что МПА потенциалы правильно описывают знак энергии модельной когерентной границы Cu/Nb и хорошо воспроизводят ее величину с учетом того, что использованные для сопоставления сверхструктуры не включались в оптимизацию параметров потенциалов Cu-Nb [5]. Такое согласие является хорошим для МПА потенциалов, которые при этом достаточно просты и эффективны в приложении к моделированию сложных гетеросистем, таких как наноламинаты с некогерентными границами раздела.

2. Энергии некогерентных границ Cu/Nb. В общем случае однозначное положение границы раздела между двумя кристаллическими решетками задается выбором пяти параметров. Два параметра определяют вектор единичной длины, нормальный к плоскости формирования границы в одной решетке. Два параметра аналогично определяют плоскость границы в другой решетке. После соединения двух кристаллов по сформированным границам остается неоднозначность поворота одного кристалла на некоторый угол вокруг оси, перпендикулярной плоскости границы. Задание этого угла определяет пятый параметр. Например, межфазная граница Cu(111)/Nb(110) с известной ориентацией Курдюмова-Закса (КЗ) формируется соединением двух кристаллов по наиболее плотноупакованным плоскостям (111) и (110), ГЦК решетки и ОЦК решетки, соответственно. При этом в плоскости границы одно из кристаллографических направлений ГЦК $\langle 110 \rangle$ параллельно направлению Gsiytrjю типа $\langle 111 \rangle$ в ОЦК решетке. Ориентация КЗ часто наблюдается в многослойных композитах ГЦК и ОЦК металлов, полученных магнетронным напылением [9]. Некогерентные межфазные границы, рассмотренные в данной работе, включали границу Cu(111)/Nb(110) в ориентации КЗ и границы, отличающиеся от данной ориентации симметричным поворотом кристаллов вокруг общей оси $x // [11-2]$ ГЦК $// [-112]$ ОЦК, как проиллюстрировано на рис. 2, для изучения анизотропии энергии границы Cu/Nb при нарушении сопряжения ОЦК и ГЦК кристаллов по наиболее плотноупакованным плоскостям.

Методы расчета энергии несоизмеримых межфазных границ из результатов компьютерного моделирования в подходе полуэмпирических потенциалов обычно используют



искусственное наложение периодических граничных условий в плоскости границы для устранения влияния свободных поверхностей на результаты расчетов [1]. В этом случае подбор достаточно больших периодов трансляций, минимизирующих возникающие деформации решеток для конкретной ориентации межфазной границы, гарантирует требуемую точность расчета энергии, однако данный метод не позволяет исследовать анизотропию этой энергии, которая требует рассмотрения большого набора ориентаций границы.

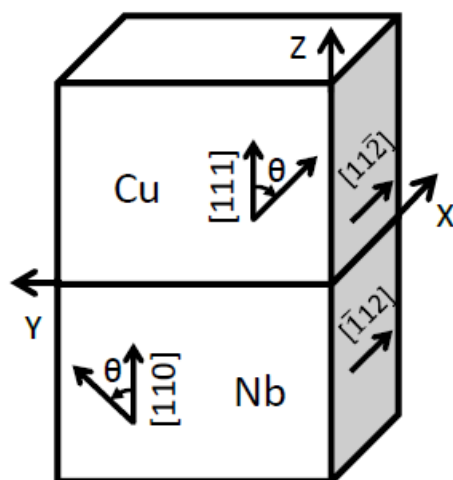


Рис. 2. Схематичное изображение кристаллов меди и ниобия, разделенных межфазной границей Cu(111)/Nb(110) с ориентацией Курдюмова-Закса: ось $z // \text{Cu}[111] // \text{Nb}[110]$, $y // \text{Cu}[-110] // \text{Nb}[1-11]$, $x // \text{Cu}[11-2] // \text{Nb}[-112]$. Поворот кристаллов на угол θ вокруг оси x формирует границу Cu/Nb, отклоненную от ориентации КЗ.

В данной работе использован разработанный нами ранее метод расчета энергии межфазной границы между несоизмеримыми решетками без привлечения искусственных периодических граничных условий и учитывающий влияние свободных поверхностей с требуемой точностью. Метод использует серии модельных образцов двухслойных пленок (бикристаллов) с различной площадью границы заданной ориентации, но с постоянными толщинами слоев металлов [10]. В этом методе энергия межфазной границы определяется благодаря линейной зависимости избыточной энергии двухслойной пленки от площади границы в модельных образцах. Рассчитанная данным методом с использованием протестированных выше МПА потенциалов энергия границы Cu(111)/Nb(110) с ориентацией КЗ составила $-0,17 \text{ Дж/м}^2$. Интересно отметить отрицательный знак этой величины. Для сравнения, авторы работы [1] получили положительное значение $0,54 \text{ Дж/м}^2$ для этой величины. Здесь следует отметить, что в работе [1] использовались МПА потенциалы, данные о тестировании которых в случае описания энергий межфазных границ Cu/Nb не известны. Поэтому отмеченное расхождение можно отнести на использование различных потенциалов для системы Cu-Nb. Недавно отрицательное поверхностное натяжение (равное поверхностной энергии в случае жидкостей) было установлено на межфазной границе Cu/Ta между жидкими металлами [11] с использованием потенциалов МПА. Отрицательное натяжения предсказывает существование



нового механизма формирования термодинамически стабильной коллоидной структуры на примере дисперсного распределения наноразмерных частиц тантала в жидкой меди [11]. Обнаруженная в нашей работе отрицательная величина энергии межфазной границы между кристаллическими решетками указывает на возможность аналогичного механизма формирования дисперсных распределений в кристаллических металлических материалах.

Отрицательная энергия границы $\text{Cu}(111)/\text{Nb}(110)$ с ориентацией КЗ объясняет физическую природу реализации структуры ламинатов Cu/Nb , получаемых методом магнетронного напыления. Однако низкое значение энергии межфазной границы недостаточно для обеспечения устойчивости определенной ориентации границы Cu/Nb , для понимания которого необходимо знать зависимость энергии границы от ее ориентации – анизотропию энергии межфазной границы. На рис. 3 представлены результаты наших расчетов энергии межфазной границы Cu/Nb как функции угла, характеризующего отклонение границы от ориентации КЗ.

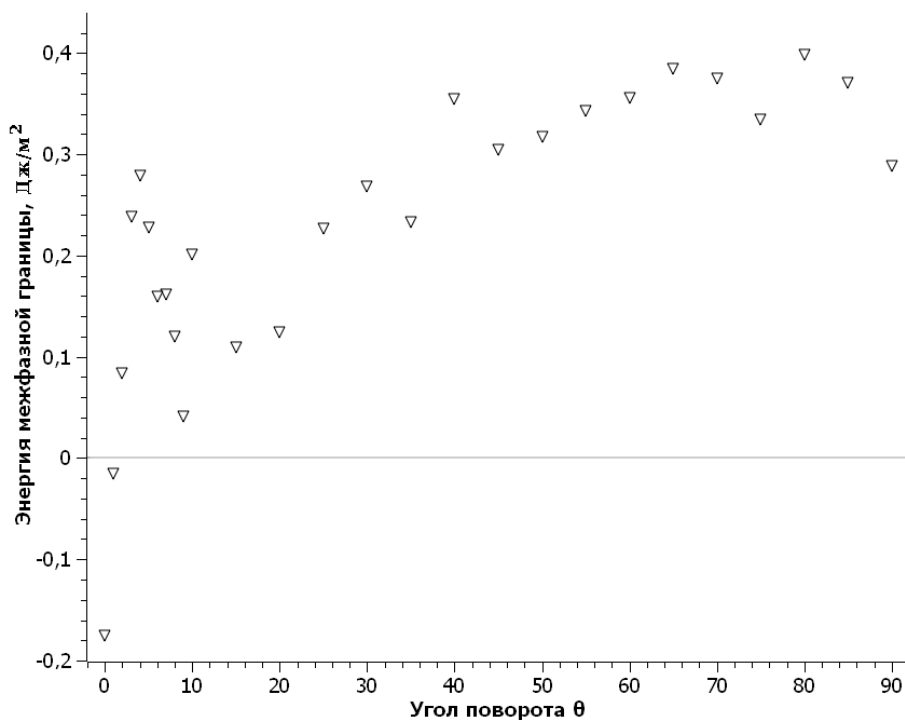


Рис. 3. Зависимость энергии межфазной границы $\gamma_{\text{Cu}/\text{Nb}}$ от угла θ , описывающего отклонение границы от ориентации Курдюмова-Закса посредством поворота кристаллов меди и ниобия как показано на рис. 2.

Из данных на рис. 3 видно, что отклонение взаимной ориентации решеток от сопряжения по плотноупакованным плоскостям ГЦК(111)//ОЦК(110) более чем на 2° приводит к быстрому увеличению энергии межфазной границы до положительных величин и далее до максимальных значений $0,4 \text{ Дж/м}^2$. Такая большая анизотропия энергии межфазной границы совместно с установленным нами ранее быстрым увеличением энер-



гии межфазной границы Cu/Nb при отклонении от ориентации КЗ, благодаря относительному повороту кристаллов меди и ниобия с сохранением сопряжения плоскостей Cu(111) и Nb(110) [10], объясняет термодинамическую устойчивость межфазной границы Cu/Nb с ориентацией КЗ. Ранее эта устойчивость обосновывалась только на основе геометрических соображений о схождении плотноупакованных плоскостей ГЦК и ОЦК металлов при ориентации Курдюмова-Закса.

Заключение. В работе проведены расчеты энергии некогерентной межфазной границы Cu/Nb методом погруженного атома. Для обоснования надежности используемых потенциалов Cu-Nb проведено сопоставление величин энергий модельных структур Cu/Nb с когерентными границами раздела, рассчитанных в рамках модельного подхода и методом функционала электронной плотности. Из результатов моделирования установлена отрицательная величина энергии межфазной границы Cu(111)/Nb(110) при ориентации Курдюмова-Закса в отличие от положительного значения этой величины по результатам работ авторов, использующих менее обоснованные полуэмпирические потенциалы для системы Cu-Nb. Поэтому достоверность результатов моделирования межфазных границ между ГЦК и ОЦК металлами требует целенаправленного тестирования используемых потенциалов межатомного взаимодействия. В работе показано, что энергия межфазной границы ГЦК Cu/ОЦК Nb обладает большой анизотропией с минимумом при сопряжении на границе плотноупакованных плоскостей решеток меди и ниобия, что объясняет устойчивость структуры наноламинатов Cu/Nb, получаемых методом магнетронного напыления. Обнаруженная в работе отрицательная величина энергии межфазной границы между кристаллическими решетками меди и ниобия указывает на возможность нового механизма формирования термодинамически равновесных дисперсных распределений в кристаллических материалах, образованных металлами с ограниченной взаимной растворимостью. Данный механизм требует дальнейших исследований.

Литература

1. Demkowicz M.J., Hoagland R.G., Hirth J.P. Interface structure and radiation damage resistance in Cu-Nb multilayer nanocomposites // *Physical review letters*. – 2008. – 100. – P.136102.
2. Kang K., Wang J., Beyerlein I.J. Atomic structure variations of mechanically stable fcc-bcc interfaces // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – 111;5. – P.053531(10)
3. Schuller I.K. New Class of Layered Materials // *Physical review letters*. – 1980. – 44;24. – P.1597–1600.
4. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // *Physical review letters*. – 1983. – 50;17. – P.1285-1288.
5. Неласов И.В., Липницкий А.Г., Колобов Ю.Р. Исследование эволюции межфазной границы Cu/Nb методом молекулярной динамики // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2009. – 52;11. – С.75-80.
6. Gonze X., Beuken J.M., Caracas R., et al. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project // *Computational Materials Science*. – 2002. – 25. – P.478-492.
7. Demkowicz M.J., Hoagland R.G. Structure of Kurdjumov–Sachs interfaces in simulations of a copper–niobium bilayer // *Journal of Nuclear Materials*. – 2008. – 372. – P.45–52.



8. Chattopadhyay P.P., Nambissan P.M.G., Pabi S.K. Polymorphic bcc to fcc transformation of nanocrystalline niobium studied by positron annihilation // *Physical review B*. – 2001. – 63;5. – P.054107(7).
9. Wang J., Hoagland R.G., Misra A. Phase transition and dislocation nucleation in Cu–Nb layered composites during physical vapor deposition // *Journal of Materials Research*. – 2008. – 23;4. – P.1009-1014.
10. Марадудин Д.Н., Клименко Д.Н., Липницкий А.Г., Колобов Ю.Р. Расчеты анизотропии энергии межфазной границы Cu(111)/Nb(110) методом погруженного атома // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2010. – 3-2. – С.162-166.
11. Frolov T., Mishin Y. Stable Nanocolloidal Structures in Metallic Systems // *Physical review letters*. – 2010. – 104. – P.055701.

NEGATIVE ENERGY OF Cu/Nb INTERFACE

A.G. Lipnitskii, D.N. Maradudin, A.I. Kartamishev, I.V. Nelasov

Belgorod State University, Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: lipnitskii@bsu.edu.ru

Abstract. Due to limitations of current experimental facilities, the computer modeling techniques are mainly used to determine the energy of interfaces between crystalline materials. However, used potentials of interatomic interactions significantly affect the reliability of the simulation results. To justify the reliability of those potentials in comparison with energy magnitudes of model structures of Cu/Nb calculated within the model approach and the method of density functional theory. From simulation results, the negative value of the interface Cu(111)/Nb(110) energy for the Kurdjumov-Sachs orientation is established which is primarily implemented in nanolaminates Cu/Nb. Energy boundaries anisotropy Cu/Nb of rejecting from the relative orientation of the lattice coupling to the close-packed planes of copper and niobium has been investigated.

Key words: copper–niobium, interface energy, density functional theory.



УДК 541.128

СИНТЕЗ, ХАРАКТЕРИСТИКИ И КИСЛОТНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ ЦИРКОНИЙ-ФОСФАТНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ С МЕДЬЮ, КОБАЛЬТОМ И НИКЕЛЕМ

И.И. Михаленко, Е.И. Поварова, А.И. Пылинина

Российский университет Дружбы народов,
ул. Миклухо-Маклая, 6, Москва, 117198, Россия, e-mail: ejpovarova@mail.ru

Аннотация. Синтезированы с помощью золь-гель метода и охарактеризованы с использованием рентгенографии, растрового ионно-электронного анализа цирконийсодержащие фосфаты общей формулы $\text{Na}_{(1-2x)}\text{Me}_x\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ ($x = 0,125$ и $0,25$, Me-Cu, Co, Ni) каркасного строения. Определено влияние металлов-модификаторов на кислотность поверхности $\text{Me}^{+2}/\text{NZP}$ по данным спектрокинетического метода образования красителя в индикаторных реакциях. Идентифицированы несколько типов кислотных центров Na-Zr-фосфата.

Ключевые слова: Na-Zr-фосфат, «золь-гель» метод, индикаторная реакция, металл-модификатор, кислотность поверхности.

Введение. Интерес к материалам со структурой NASICON (Na Super Ionic CONductor) $(\text{M}_x\text{A}_y(\text{PO}_4)_3$, где M – щелочной, A – поливалентный металл со степенью окисления 3-5) обусловлен возможностью их применения в качестве твердых электролитов в различных батареях, сенсорах и других электрохимических устройствах [1, 2]. Высокая ионная проводимость и термостабильность являются необходимыми условиями для эффективного применения. Структура данных фосфатов $\text{M}_x\text{A}_y(\text{PO}_4)_3$ построена из октаэдров AO_6 и тетраэдров PO_4 , соединенных через общие атомы кислорода. Катионы M могут занимать два положения M1 и M2 в пустотах структуры, образованных атомами кислорода. Чередование таких пустот образует трехмерную сетку проводящих каналов, по которой осуществляется ионный перенос [3, 4]. Природа и размер катионов A и M влияют на структуру соединения, а значит и на его свойства.

Состав таких фосфатов можно варьировать, замещая полностью или частично ионы M или ионы A, без существенного нарушения кристаллической структуры [5]. Целенаправленное введение в NASICON различных ионов открывает перспективы использования таких веществ в качестве активных и селективных катализаторов с микропористой структурой, которая образуется каналами ионной проводимости, для окисления и восстановления субстратов различной природы. В работе [6] изучалось каталитическое дегидрирование спирта на натрий-цирконий-фосфатах (NZP), в которых ионы Na^+ замещены ионами $\text{M} = \text{Co}^{+2}, \text{Ni}^{+2}, \text{Cu}^{+2}$. Было установлено, что в интервале температур $T^* = 310\text{-}340^\circ\text{C}$ изменяются электрофизические и кристаллографические свойства фосфата, связанные с обратимым переходом ионов Me^{+2} из позиции M1 в M2 в решетке NZP.

Каталитические свойства фосфатных катализаторов в превращениях различных органических веществ зависят от кислотности поверхности, для анализа которой используются методы адсорбции оснований и индикаторных реакций [7]. Для определения



содержания электроноакцепторных центров (льюисовских кислотных центров) катализаторов и адсорбентов можно использовать реакцию одноэлектронного окисления парафенилендиамина (ПФД) с образованием катион-радикала семихинона SH^+ , а также более сложный процесс – реакцию каталитического образования красителя (КОК), первой и лимитирующей стадией которого является образование SH^+ [8]. Семихинон затем окисляется до хинондиимина (ХДИ), который взаимодействует с нафтолом с образованием голубого красителя (Кр). Так авторам работы [9] удалось идентифицировать несколько типов кислотных центров Na-Zr-фосфата с нанесенной медью. И показано, что нанесение меди на поверхность NASICON-фазы, позволяет получать стабильные и селективные в реакции дегидрирования катализаторы.

Целью данной работы является получение и изучение фазообразования каркасных Na-Zr-фосфатов с замещением ионов Na^+ в катионной части ионами меди, кобальта и никеля. А также исследовать влияние ионов-модификаторов на кислотность поверхности $\text{Me}^{+2}/\text{NZP}$ по данным спектрокинетического метода образования красителей в индикаторных реакциях.

1. Экспериментальная часть. Две серии образцов составов $\text{Na}_{0,75}\text{M}_{0,125}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ и $\text{Na}_{0,5}\text{M}_{0,25}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$, где $\text{M} = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$ были синтезированы золь-гель методом по следующей схеме, представленной на рис. 1 [5].

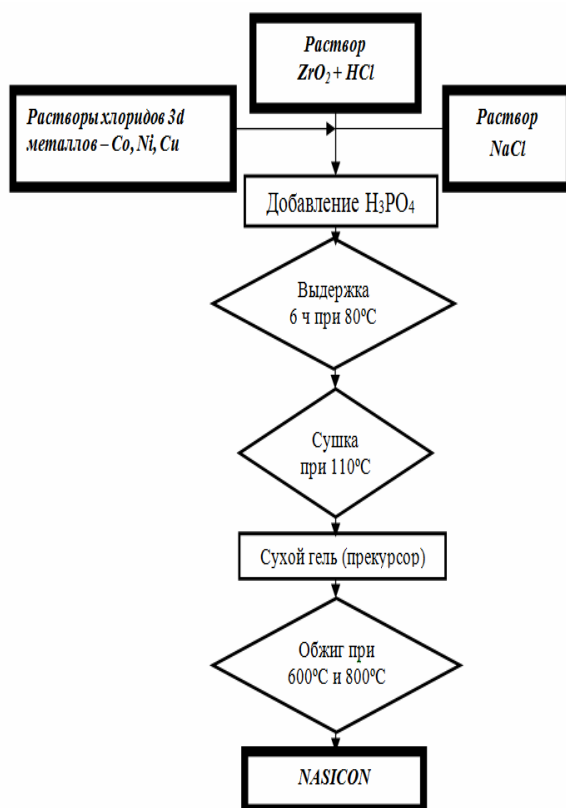


Рис. 1. Схема синтеза NASICON

В качестве исходных реагентов для синтеза $\text{Na}_{(1-2x)}\text{Me}_x\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ использовали реактивы марки х.ч.: оксид циркония ZrO_2 , фосфорная кислота H_3PO_4 , хлорид натрия и хлориды кобальта, никеля и меди (+2). Стехиометрические количества водных растворов NaCl и оксида циркония (предварительно растворенного в соляной кислоте) сливали при постоянном перемешивании при комнатной температуре, затем добавляли соль переходного металла и медленно по каплям приливали раствор фосфорной кислоты в соответствии со стехиометрией тройного фосфата. Образовавшийся при нагревании гель высушили при 80°C и подвергли термообработке сначала при 400° , а затем при 800°C в течении 8 часов с промежуточным растиранием на каждой стадии.

Образцы представляли собой поликристаллические порошки, окраска которых была характерна для соответствующего иона Me^{+2} : медь – голубого, никель – бледно-зеленого, кобальт – сиреневого цвета.

Химический состав и однородность образцов синтезированных фосфатов контролировали с помощью растрового ионно-электронного микроскопа Quanta 200 3D. Результаты микрозондового анализа фосфатов показали их гомогенность и соответствие теоретическому составу (рис. 2, табл. 1).

Фазовый состав синтезированных порошков определяли методом РФА на порошковом дифрактометре Rigaku Ultima IV ($\text{CuK}\alpha$, $\text{K}\beta$ фильтр - Ni), в диапазоне углов 2θ от 10 до 70 градусов. Скорость записи составляла 1 град./мин. Рентгенографические данные полученных фосфатов свидетельствуют о близости положений и интенсивности дифракционных максимумов с приведенными в литературе [10–13]. Рассчитанные параметры элементарных ячеек приведены в табл. 1.

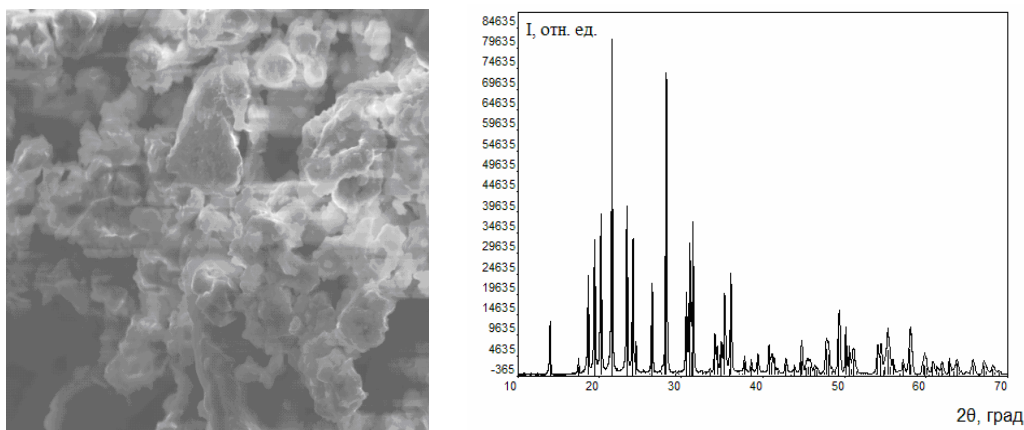


Рис. 2. Микрофотография и рентгенограмма фосфата $\text{Na}_{0,75}\text{Co}_{0,125}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$

Кислотность поверхности образцов тестировали спектрокинетическим методом (спектрофотометр УТП-103) по индикаторной реакции – окислению производного парафенилендиамина (ПФД) до красителя (Кр). Концентрацию тест-молекул определяли по аналитической полосе 520 нм (Кр). В реакции образования Кр к навеске катализатора (5 мг) добавляли реакционную смесь (раствор ПФД, α -нафтол с концентрацией 0,0093 моль/л и 0,1М раствор NaOH) объемом 3 мл. Молярный коэффициент поглощения составляет $0,67 \times 10^3$ для Кр.



Таблица 1

Результаты микронзондового анализа и параметры элементарных ячеек синтезированных фосфатов
 $\text{Na}_{(1-2x)}\text{Me}_x\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$

Me_x	Состав (по результатам микронзондового анализа)	Параметры элементарных ячеек			
		$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
0,125	$\text{Na}_{0,78}\text{Cu}_{0,131}\text{Zr}_{2,02}\text{P}_{2,98}\text{O}_{12}$	8,822(8)	8,822(8)	22,95(6)	328(4)
0,125	$\text{Na}_{0,76}\text{Co}_{0,127}\text{Zr}_{2,05}\text{P}_{2,95}\text{O}_{12}$	8,797(9)	8,797(9)	22,75(3)	476(15)
0,125	$\text{Na}_{0,76}\text{Ni}_{0,123}\text{Zr}_{2,01}\text{P}_{3,03}\text{O}_{12}$	8,801(4)	8,801(4)	22,791(13)	547,1(4)
0,25	$\text{Na}_{0,48}\text{Cu}_{0,254}\text{Zr}_{1,98}\text{P}_{3,01}\text{O}_{12}$	5,1467(4)	5,2142(4)	5,3136(4)	551(2)
0,25	$\text{Na}_{0,52}\text{Co}_{0,251}\text{Zr}_{2,03}\text{P}_{2,99}\text{O}_{12}$	8,788(4)	8,788(4)	22,82(2)	526(24)
0,25	$\text{Na}_{0,45}\text{Ni}_{0,261}\text{Zr}_{2,02}\text{P}_{2,95}\text{O}_{12}$	8,835(10)	8,835(10)	22,83(3)	393(16)

2. Обсуждение результатов.

Кислотные свойства поверхности $\text{Na}_{(1-2x)}\text{M}_x\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ характеризовали по скорости образования тест-красителя – анилинового синего. Кинетические зависимости оптической плотности раствора Кр на образцах показаны на рис. 3,4. Из рисунков видно, что выход красителя, образующегося в гетерогенной реакции, увеличивается с ростом содержания иона-модификатора, следовательно, электроноакцепторные свойства поверхности определяют ионы заместители.

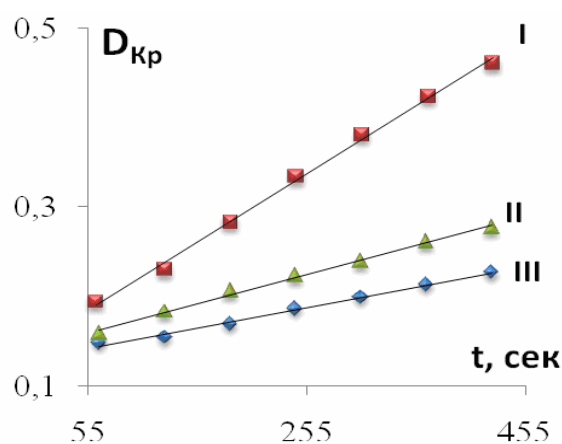


Рис. 3. Зависимость относительной оптической плотности раствора Кр на образцах I серии ($x=0,125$): (I)-Cu, (II)-Co, (III)-Ni.

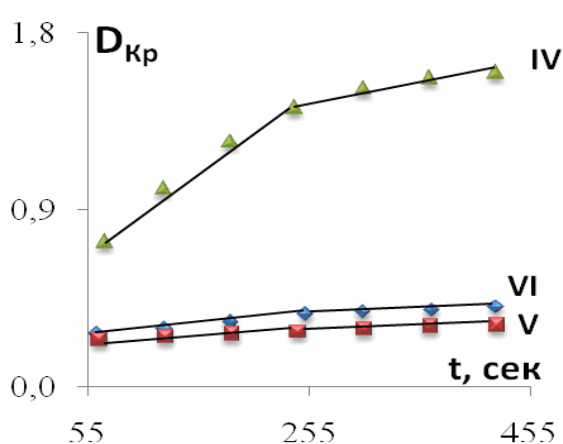


Рис. 4. Зависимость относительной оптической плотности раствора Кр на образцах II серии ($x=0,25$): (IV)-Cu, (V)-Co, (VI)-Ni.

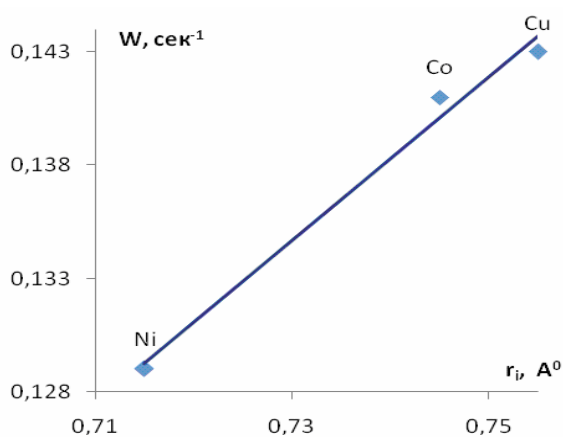


Рис. 5. Корреляция с радиусом иона скорости реакции на образцах I серии ($x = 0,125$).

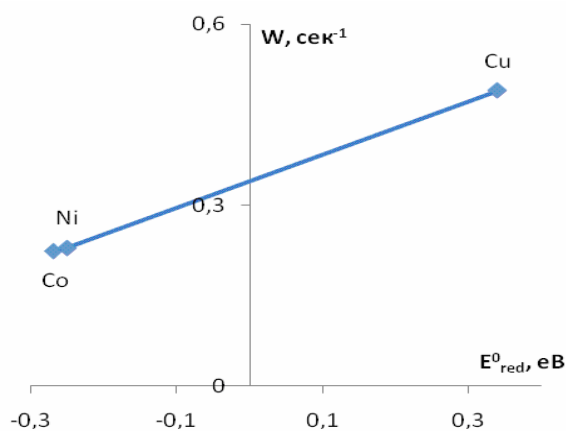


Рис. 6. Корреляция с потенциалом восстановления скорости реакции на образцах II серии ($x = 0,25$).

Кинетические зависимости образования красителя на образцах $\text{Na}_{0,5}\text{M}_{0,25}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ (рис. 4) имеют нелинейный вид, поэтому скорости реакции определяли на различных участках кинетических кривых. По отрезку, отсекаемому на оси ординат, рассчитывали начальную скорость W_0 , характеризующую быстрый период реакции. По линейному участку определяли скорость W_1 . Определяли также скорость W_2 на последнем временном отрезке при $t > 4$ мин. Следовательно, в реакции образования Кр на образцах $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ с содержанием ионов меди, кобальта и цинка 0,25, частично замещающие ионы натрия, входящие в катионную часть NZP, определяются три типа кислотных центров, в состав которых входит металл, отличающихся по скорости образования Кр. Значения скоростей и их соотношения представлены в табл. 2.

Таблица 2

Данные кинетики индикаторной реакции
для образцов $\text{Na}_{(1-2x)}\text{M}_x\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Co}, \text{Ni}$), $x = 0,125$ и $0,25$

Скорость образования красителей, W , сек ⁻¹	Серия I			Серия II		
	Cu (I)	Co (II)	Ni (III)	Cu (IV)	Co (V)	Ni (VI)
W_0	0,143	0,141	0,129	0,490	0,223	0,229
$W_1 \times 10^{-3}$	0,76	0,33	0,23	3,97	0,23	0,54
$W_2 \times 10^{-3}$	-	-	-	0,97	0,19	0,20
$W_0/W_1 \times 10^2$	1,88	4,27	5,61	1,23	9,70	4,24
W_1/W_2	-	-	-	4,1	1,2	2,7

Из данных табл. 2 видно, что скорости W_0 и W_1 для образцов первой серии с содержанием ионов-компенсаторов 0,125 увеличиваются в ряду $\text{Ni} \rightarrow \text{Co} \rightarrow \text{Cu}$. Из серии $x_{\text{Me}} =$



0,125 наиболее активен $\text{Cu}_{0,125}\text{-NZP}$ с наибольшим ионным радиусом из ряда $\text{Ni}^{+2}(0,71) < \text{Co}^{+2}(0,74) \sim \text{Cu}^{+2}(0,75)$ значения $r, \text{\AA}$ (цифры в скобках) по Белову-Бокию взяты из [14]. Соотношение скоростей реакции W_0/W_1 увеличивается с уменьшением ионного радиуса. Для образцов второй серии ($x = 0,25$) в реакции образования красителя значения начальной скорости W_0 и W_1 увеличиваются в ряду $\text{Co} \rightarrow \text{Ni} \rightarrow \text{Cu}$. В данной серии наиболее активным является также медный образец $\text{Cu}_{0,25}\text{-NZP}$ с положительным потенциалом восстановления (E_{red}^0 , эВ) в ряду $\text{Co}^{+2} (-0,27) \sim \text{Ni}^{+2} (-0,25) < \text{Cu}^{+2} (+0,34)$ [15]. Итак, рост активности катализаторов $\text{Na}_{0,75}\text{M}_{0,125}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ в ряду $\text{Ni} \rightarrow \text{Co} \rightarrow \text{Cu}$ коррелирует с увеличением ионного радиуса r_i , а для серии $\text{Na}_{0,5}\text{M}_{0,25}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ ряд роста активности $\text{Co} \rightarrow \text{Ni} \rightarrow \text{Cu}$ соответствует увеличению потенциала восстановления E_{red}^0 (рис. 5, 6).

Заключение. Были синтезированы золь-гель методом и охарактеризованы с использованием рентгенографии, растрового ионно-электронного анализа цирконийсодержащие фосфаты общей формулы $\text{Na}_{(1-2x)}\text{Me}_x\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ ($x = 0,125$ и $0,25$, $\text{Me} = \text{Cu}, \text{Co}, \text{Ni}$). По данным рентгенофазового и ионно-электронного анализа было установлено, что структуры фосфатов являются родственными друг другу и относятся к каркасному типу. Спектрокинетическим методом с использованием индикаторной реакции образования красителя, катализируемых электроноакцепторными центрами, идентифицированы несколько типов кислотных центров Na-Zr -фосфата с ионами-модификаторами, замещающими ионы натрия в катионной части фосфата. Два типа центров находятся на поверхности кристалла, а третий тип – в объеме, предположительно в микропорах решетки фосфата.

Работа выполнена в рамках ГК № 14.740.12.0855 «Изучение влияния особенностей структуры на физические свойства перспективных функциональных и конструкционных материалов (наноматериалов)» на оборудовании Центра коллективного пользования «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» БелГУ.

Литература

1. Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции / М.: Химия, 1978. – 360 с.
2. Бокштейн Б.С., Ярославцев А.Б. Диффузия атомов и ионов в твердых телах / М.: МИСИС, 2005. – 362 с.
3. Иванов-Шиц А.К., Мурин И.В. Ионика твердого тела / СПб.: изд-во С-Петербург Университет, 2000. – 616 с.
4. Степина И.А., Ярославцев А.Б. // Журн. неорган. химии. – 2006. – 51. – С.97.
5. Суханов М.В, Ермилова М.М., Орехова Н.В., Петьков В.И., Терещенко Г.Ф. // Журн. Прикл. Химии. – 2006. – 79;4. – С.622-626.
6. Поварова Е.И., Пылинина А.И., Михаленко И.И. // Журн. физ. химии (в печати).
7. Крылов О.В. Гетерогенный катализ / М.: Академкнига, 2004.
8. Krasnyi-Admoni L.V., Alfimov M. V. // Usp. Nauchn. Fotogr. – 1980. – 20. – P.114.
9. Koroleva O.V., Pylinina A.I., Mikhailenko I.I. // Russian Journal of Physical Chemistry. – 2006. – 80;Suppl.1. – P.S111–S115.
10. Hong H.Y.-P. // Mat. Res. Bull. – 1976. – 11; 2. – P.173-182.



11. Sljukic M., Matkovic B., Prodic B., Anderson D. // Z. Kristallogr. Kristallgeometrie. Kristallphysik. Kristallchemie. – 1969. – 130. – P.148-161.
12. Гобечия Е.Р., Кабалов Ю.К., Петьков В.И., Суханов М.В. // Кристаллография. – 2004. – 49. – 5. – С.829-834.
13. Alamo J., Rodrigo J.L. // Solid State Ionics. – 1993. – 63-65. – P.678-683.
14. Л.Т. Бугаенко, С.М. Рябых, А.Л. Бугаенко // Вест. Моск. Унив. Сер. Химия. – 2008. – 49;6.
15. Справочник химика. Том 1 / М.-Л.: Химия, 1966. – 1072 с.

**SYNTHESIS, CHARACTERISTICS AND ACID PROPERTIES
OF THE ZIRCONIUM-PHOSPHATE CATALYSTS SURFACE
WITH COPPER, COBALT AND NICKEL**

I.I. Mikhailenko, E.I. Povarova, A.I. Pylinina

Russian University of Peoples' Friendship,
Miklukho-Maklay St., 6, Moscow, 117198, Russia, e-mail: eipovarova@mail.ru

Abstract. Phosphates containing zirconium and having general formula $\text{Na}_{(1-2x)}\text{Me}_x\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ ($x = 0,125$ и $0,25$, Me-Cu, Co, Ni) are synthesized on the basis of the sol-gel method. They have been characterized using X-rays, scanning the ion-electron analysis. It is determined the effect of metal modifiers in the surface acidity $\text{Me}^{+2}/\text{NzP}$ by spectral data of kinetics and monitoring the formation of dye by indicator reactions. Several types of Na-Zr-phosphate containing acidic sites were identified.

Keywords: Na-Zr-phosphate, sol-gel method, indicator reaction, metal modifier, surface acidity.



УДК 532; 541.65

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ ФОРМУЛЫ ОНСАГЕРА-БЕТТХЕРА

*А.В. Полянский, **Ю.А. Неручев

*Юго-Западный государственный университет,

ул. 50 лет Октября, 94, Курск, 305040, Россия, e-mail: polyansky72@gmail.com

**Курский государственный университет,

ул. Радищева, 33, Курск, 305040, Россия, e-mail: yuan2003@mail.ru

Аннотация. Показана возможность прогнозирования температурной зависимости показателя преломления жидкости в рамках дырочной модели с помощью формулы Онсагера-Беттхера.

Ключевые слова: показатель преломления, формула Онсагера-Беттхера, онсагеровский радиус, первое координационное число, радиус первой координационной сферы.

1. Введение

В классической теории Лорентца молекулы среды, помещенные во внешнее электрическое поле, взаимодействуют посредством индуцированных дипольных моментов, в результате чего локальное поле, действующее на молекулу, оказывается отличным от внешнего и среднего максвелловского электрических полей. Эти представления для жидкости приводят к формуле Лоренц-Лорентца [1]

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4}{3}\pi N_0 \alpha_0, \quad (1)$$

здесь $N_0 = 1/\nu$ – число частиц в единице объема, α_0 – средняя поляризуемость молекулы, которая в общем случае является суммой электронной α_e , дипольной α_{dip} и ионной α_{ion} поляризуемостей.

Формулу (1) можно считать обоснованной лишь для идеальных сред [2].

В работе [3] Кирквуд учитывает флуктуации дипольных моментов индуцированных диполей, возникающие вследствие теплового движения молекул. С учетом поправки Кирквуда на флуктуационный эффект $S_2(\alpha_0, \rho, T)$, квантовой поправки $O(\alpha_0^3)$ и др. эффектов формула Лоренц-Лорентца принимает вид [4]:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4}{3}\pi N_0 \alpha_0 [1 + S_2(\alpha_0, \rho, T) + O(\alpha_0^3)]. \quad (2)$$

В рамках модели эффективного поля в жидкости Онсагер путем выделения в сплошной среде сферической полости радиуса a исключил поправку на флуктуацию индуцированных диполей [2]. Линдер и Хоншемейтер [5] показали, что радиус a этой полости



может быть рассчитан с помощью теории коррелятивных функций. Это делает рассматриваемую модель статистически обоснованной.

Эффективное поле Онсагера состоит из поля полости \vec{G} и реактивного поля \vec{R} :

$$\vec{E}_{\text{eff}}^{(\text{Ons})} = \vec{G} + \vec{R}, \quad (3)$$

$$\vec{G} = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon + 1} \vec{E}, \quad (4)$$

$$\vec{R} = \frac{2(\varepsilon - 1)}{(2\varepsilon + 1)a^3} \vec{\mu}_{\text{eff}}. \quad (5)$$

В выражении (5) a - радиус полости, в которой по представлениям модели Онсагера в виде точечного диполя находится исследуемая молекула, ε - диэлектрическая проницаемость среды. Эффективный дипольный момент молекулы жидкости: определяется соотношением:

$$\vec{\mu}_{\text{eff}} = \mu_0 + \alpha_0 + \vec{E}_{\text{eff}}^{(\text{Ons})}. \quad (6)$$

Модель Онсагера, по сравнению с моделью Лорентца, имеет ряд преимуществ: 1) соотношения (3)-(6) получены на основе строгого решения уравнений электростатики с заданными граничными условиями и 2) Онсагером введено представление о реактивном поле в диэлектрике, отражающее обратную связь между дипольной молекулой и поляризуемой средой.

Параметр модели Онсагера α тесно связан со средней поляризуемостью молекул a^3 . Эта связь определяется соотношением Онсагера-Беттхера [2, 6]:

$$\frac{12\pi N_0 n^2}{(n^2 - 1)(2n^2 + 1)} = \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{a^3} \frac{2(n^2 - 1)}{(2n^2 + 1)}. \quad (7)$$

Существенной особенностью соотношения (7) является возможность с его помощью по экспериментальным данным о температурной зависимости показателя преломления жидкости $n = n(T)$ одновременно определить обе величины α и a^3 . Величины $n = n(T)$ измерены нами для жидкостей с разной структурой молекул [7].

Беттхер, рассматривая формулу (7) как отображение линейной зависимости между величинами:

$$x = \frac{2(n^2 - 1)}{(2n^2 + 1)}, \quad y = \frac{12\pi N_0 n^2}{(n^2 - 1)(2n^2 + 1)}. \quad (8)$$

в которую параметры $1/\alpha$ и $1/a^3$ входят как константы, предложил метод одновременного определения α и a^3 .

$$y = \frac{1}{\alpha} - \frac{x}{a^3}. \quad (9)$$

Одновременное определение величин α и a^3 с помощью формулы (9) предполагает независимость этих величин от параметров состояния вещества. На самом деле величины α и a^3 являются функциями температуры и плотности, поэтому, определяя



их с помощью уравнения (9) для разных температурных интервалов, получают разные значения α и a^3 .

О.Г. Боковым [8 – 10] были проанализированы результаты исследований взаимосвязи средних поляризуемостей молекул газов α_0 и жидкостей α с онсагеровским радиусом a для веществ с разной структурой молекул, и сделан вывод о том, что онсагеровский радиус зависит от структуры среды. Для расчета онсагеровского радиуса им предложена формула:

$$a^3 = \frac{R^6}{1,15Z_1(\alpha_0 + a_0^3)}, \quad (10)$$

в которой α_0 – средняя поляризуемость молекул газа, Z_1 – число ближайших соседей, R_1 – радиус первой координационной сферы.

2. Расчет показателя преломления в рамках дырочной модели

Согласно представлениям дырочной модели разрушение кристаллической структуры вещества при плавлении происходит постепенно, приводя к появлению вакансий (дырок) в координационных сферах. В результате первое координационное число (число ближайших соседей) в жидкости становится меньше, чем в кристалле Z_0 и может быть рассчитано по формуле [11]:

$$Z_1 = Z_0 \left[1 + \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left(\frac{\vartheta}{\vartheta_f} - 1 \right) \right\} \right]^{-1}, \quad (11)$$

здесь Z_0 – первое координационное число в кристалле ($Z_0 = 12$ для благородных газов, простых жидкостей и циклических углеводородов), ϑ_f – свободный объем, ϑ – объем, приходящийся на одну частицу.

Величину свободного объема можно оценить по формуле:

$$\vartheta_f = \frac{k\beta_T}{\alpha_P}, \quad (12)$$

в которой β_T – изотермическая сжимаемость, α_P – коэффициент теплового расширения жидкости, k – постоянная Больцмана.

Изотермическая сжимаемость рассчитывается по известному термодинамическому соотношению:

$$\beta_T = \beta_S \left(1 + \frac{\alpha_P^2 u^2 T}{C_P} \right), \quad (13)$$

в котором $\beta_S = (\rho u^2)^{-1}$ – адиабатическая сжимаемость, u – скорость ультразвука в веществе, C_P – изобарная теплоемкость, T – температура жидкости.

Для расчета радиуса первой координационной сферы можно воспользоваться соотношением:

$$R_1 = \left[\frac{Z_1}{Z_0} + \chi \right]^{1/3} \vartheta^{1/3}, \quad (14)$$



в котором $\chi = 0.4144$ – структурный фактор, характерный для ГЦК решетки, которой моделируется структура исследованных жидкостей.

Значения Z_1 и R_1 , рассчитанные по формулам (11) и (14), удовлетворительно согласуются с результатами рентгенографических, оптических и спектроскопических измерений [12], что дает возможность использовать их для оценки различных свойств жидкостей.

3. Обсуждение результатов

Как показывают расчеты, зависимость куба онсагеровского радиуса a^3 от температуры для исследованных жидкостей вдоль линии равновесия жидкость - пар представляет собой монотонно возрастающую нелинейную функцию (рис. 1). Характер зависимости величины a^3 от свободного объема ϑ_f зависит от структуры жидкости. Для благородных газов зависимость $a^3(\vartheta_f)$ близка к линейной. Для циклических углеводородов (рис. 2) отклонение от линейной зависимости $a^3(\vartheta_f)$ наблюдается во всей исследованной области температур.

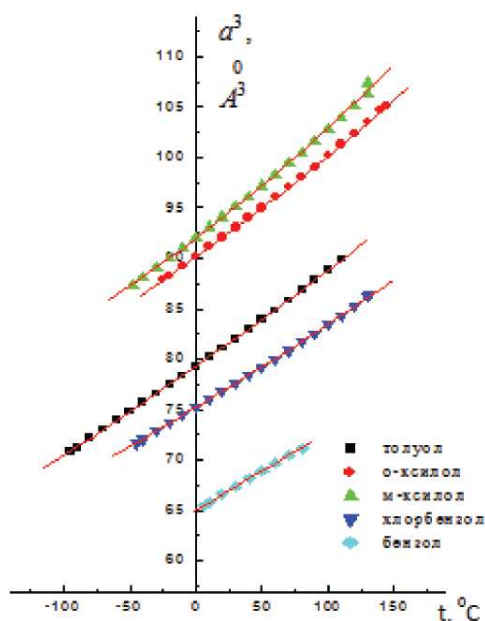


Рис. 1. Зависимость куба онсагеровского радиуса от температуры

Формулу Онсагера-Беттхера можно использовать для изучения особенностей характера зависимости показателя преломления жидкости от параметров состояния. Для этого по известным значениям показателя преломления n и куба онсагеровского радиуса a^3 с помощью (7) необходимо рассчитать поляризуемость молекулы α при фиксированной температуре. Затем, полагая поляризуемость молекулы α постоянной величиной, и рассчитывая a^3 по формуле (10), после решения нелинейного уравнения (7), можно определить значение показателя преломления n при других параметрах состояния.



Хорошее согласие рассчитанных значений n с экспериментом (табл. 1) свидетельствует о реалистичности используемой квазикристаллической модели жидкости. Наблюдаемое расхождение с экспериментом, по-видимому, связано с не учетом имеющей место зависимости поляризуемости молекул α от температуры.

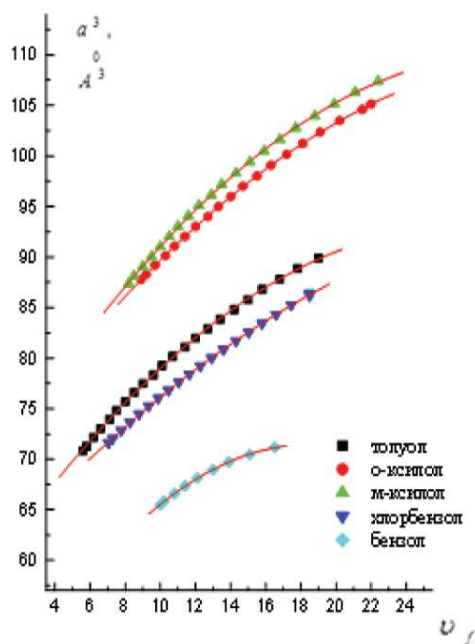


Рис. 2. Зависимость куба онсагеровского радиуса от свободного объема

Таблица 1

Микроструктурные и оптические свойства исследованных жидкостей

$t, ^\circ C$	v, A^3	v_f, A^3	Z_1	R_1, A	a^3, A^3	n_{exp} [7, 13, 14]	n_{calc}	$\delta, \%$
Аргон								
-189	46,6	6,2	10,04	3,87	46,6	1,23503	1,23287	0,175
-179	48,8	7,5	9,60	3,89	48,8	1,22224	1,22224	0,000
-169	51,4	9,2	9,10	3,91	51,4	1,21219	1,21100	0,098
-159	54,7	11,3	8,68	3,96	54,7	1,19891	1,19795	0,081
Метан								
-182	58,9	6,9	10,43	4,22	10,70	1,29367	1,29300	0,051
-173	60,5	7,7	10,17	4,24	11,20	1,28504	1,28504	0,000
-163	62,4	8,7	9,89	4,25	11,80	1,27583	1,27615	-0,025
-153	64,6	9,9	9,58	4,27	12,51	1,26586	1,26660	-0,059
-143	67,2	11,5	9,24	4,29	13,37	1,25499	1,25621	-0,097
-133	70,2	13,5	8,88	4,32	14,42	1,24334	1,24503	-0,136



Бензол								
20	146,1	10,8	11,50	5,84	66,60	1,50111	1,50071	0,026
30	147,8	11,4	11,42	5,86	67,37	1,49462	1,49465	-0,002
40	149,6	12,1	11,33	5,87	68,16	1,48812	1,48840	-0,018
50	151,5	13,0	11,22	5,88	68,94	1,48158	1,48206	-0,032
60	153,4	13,9	11,09	5,89	69,72	1,47497	1,47563	-0,045
70	155,5	15,1	10,94	5,90	70,48	1,46825	1,46913	-0,060
Толуол								
20	176,5	11,4	11,69	6,25	81,07	1,49660	1,49650	0,007
30	178,4	12,0	11,64	6,26	81,99	1,49089	1,49089	0,000
40	180,3	12,7	11,57	6,28	82,92	1,48517	1,48526	-0,006
50	182,3	13,4	11,51	6,29	83,86	1,47943	1,47960	-0,011
60	184,4	14,2	11,43	6,31	84,82	1,47365	1,47388	-0,016
70	186,6	15,0	11,35	6,32	85,79	1,46783	1,46812	-0,020
80	188,9	15,8	11,27	6,33	86,79	1,46194	1,46227	-0,023
О-КСИЛОЛ								
20	200,3	11,4	11,81	6,53	92,06	1,50531	1,50529	0,001
30	202,2	12,0	11,77	6,55	93,03	1,50018	1,50020	-0,001
40	204,2	12,7	11,73	6,56	94,00	1,49502	1,49511	-0,006
50	206,2	13,3	11,69	6,58	94,99	1,48984	1,48999	-0,010
60	208,2	14,0	11,64	6,59	95,99	1,48463	1,48485	-0,015
70	210,4	14,7	11,58	6,61	97,00	1,47940	1,47968	-0,019
П-КСИЛОЛ								
20	204,9	11,7	11,81	6,58	94,53	1,49585	1,49585	-0,001
30	207,0	12,4	11,77	6,60	95,58	1,49053	1,49056	-0,003
40	209,2	13,1	11,72	6,61	96,64	1,48518	1,48526	-0,006
50	211,4	13,8	11,67	6,63	97,71	1,47981	1,47993	-0,008
60	213,6	14,6	11,62	6,65	98,79	1,47442	1,47458	-0,012
70	216,0	15,4	11,55	6,66	99,89	1,46902	1,46920	-0,012
М-КСИЛОЛ								
20	204,0	11,6	11,81	6,57	94,06	1,49726	1,49724	0,001
30	206,0	12,2	11,78	6,59	95,10	1,49203	1,49202	0,001
40	208,1	12,9	11,74	6,61	96,15	1,48677	1,48678	-0,001
50	210,3	13,5	11,69	6,62	97,22	1,48149	1,48151	-0,001
60	212,5	14,3	11,64	6,64	98,30	1,47614	1,47620	-0,004
70	214,8	15,1	11,58	6,65	99,39	1,47080	1,47085	-0,004
Хлорбензол								
20	159,35	10,46	11,67	6,04	76,83	1,52480	1,52470	0,007
30	160,90	11,05	11,61	6,05	77,62	1,51932	1,51932	0,000
40	162,49	11,65	11,55	6,06	78,41	1,51384	1,51396	-0,008
50	164,11	12,28	11,48	6,07	79,21	1,50836	1,50859	-0,015
60	165,77	12,93	11,41	6,08	80,02	1,50287	1,50322	-0,023

4. Выводы

В рамках дырочной модели разработана методика расчета средней поляризуемости



молекул, куба онсагеровского радиуса и показателя преломления жидкости в зависимости от параметров состояния. Проведенное сравнение рассчитанных и экспериментальных значений, показало, что для исследованных жидкостей наблюдается хорошее согласие величины с экспериментальными данными для области температур, прилегающей к фиксированной точке. Расхождение с экспериментом, по-видимому, связано с недостаточной точностью данных о теплофизических свойствах и с имеющей место зависимостью поляризуемости молекулы жидкости от температуры.

Литература

1. Лоренц Г.А Теория электронов и ее изменения к явлениям света и теплового излучения / М.-Л., 1934.
2. Onsager L. Electric moments of molecules in liquids // J. Amer. Chem. Soc. – 1936. – 58;8. – P.1486-1493.
3. Kirkwood J.G. Of the theory of dielectric polarization // J. Chem. Phys. – 1936. – 4;9. – P.592-601.
4. Kirkwood J.G. Of the theory of dielectric polarization // J. Chem. Phys. – 1936. – 4;9. – P.592-601.
5. Linder B., Hoernschemeyer D. Cavity concept in dielectric theory // J. Chem. Phys. – 1967. – 46;2. – P.784-790.
6. Voëttcher C.J.F. Theory of Electric Polarisation. V.1 / Amsterdam: Elsevier, 1973. – 378 p.
7. Губарев Р.А., Гуламов А.А., Неручев Ю.А., Полянский А.В. Изучение температурной зависимости показателя преломления некоторых органических жидкостей // Ультразвук и термодинамические свойства вещества / Курск: Изд-во КГПУ, 1998. – С.67-71.
8. Боков О.Г. Методы теории универсальных межмолекулярных взаимодействий и их применение в физике диэлектриков, оптике и спектроскопии конденсированных молекулярных сред / Автореф. дис. докт. наук.: Новосибирск, 1978. – 29 с.
9. Bokon O.G., Naberukhin Yu.I. Application of the Onsager model to the theory of the dielectric constant of nonpolar liquids // J. Chem. Phys. – 1981. – 75;5. – P.2357-2365.
10. Боков О.Г., Сидоров Н.К. Структурные характеристики простых жидкостей и оптические свойства молекул // Физика жидкого состояния. – 1991. – 19. – С.98-108.
11. Боков О.Г., Мельников Г.А. Расчет координационных чисел и радиусов первой координационной сферы в простых жидкостях // Журн. структ. химии. – 1982. – 23;2. – С.51-57.
12. Скрышевский А.Ф. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел / М.: Высшая школа, 1980. – 328 с.
13. Abbis et al. Refractive index and Lorentz-Lorenz function for saturated argon, methane and carbon tetrafluoride // J. Chem. Phys. – 1965. – 42. – P.4145-4148.
14. Фронтасев В.П., Шрайбер Л.С. Исследование рефракции и электронной поляризуемости молекул некоторых органических жидкостей в широком интервале температур // Журнал физической химии. – 1969. – XLIII;2. – С.425-434.

PREDICTION OF TEMPERATURE DEPENDENCE OF REFRACTIVE INDEX WITH FORMULA ONSAGER-BOËTTCHER

*A.V. Polyansky, **Yu.A. Neruchev

* Southwest State University,
50 years of October St., 94, Kursk, 305040, Russia, e-mail: polyansky72@gmail.com

**Kursk State University,
Radishchev St., 33, Kursk, 305000, Russia, e-mail: yuan2003@mail.ru

Abstract. Possibility of temperature dependence prediction of liquid refractive index in framework of the hole model on the basis of Onsager-Boëttcher's formula is shown.

Key words: refractive index, Onsager-Boëttcher's formula, Onsager's radius, first coordination number, radius of first coordination sphere.



УДК 669.017.15

ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРИ РАСТЯЖЕНИИ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА AlCoCrCuFeNi

*А.В. Кузнецов, *Г.А. Салищев, **О.Н. Сеньков,
*Н.Д. Степанов, *Д.Г. Шайсултанов

*Белгородский государственный университет,
ул. Победы 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: kuznetsov@bsu.edu.ru, ak72@mail.ru
**ЮИС Инк.,

4401 Дэйтон - Ксения Рд., Дэйтон, Огайо, 45432, США, e-mail: oleg.senkov@wpafb.af.mil

Аннотация. В результате всестороннейковки при температуре 950°C структура литого высокоэнтропийного сплава AlCoCrCuFeNi трансформировалась из грубой дендритной в мелкую равноосную дуплексную структуру из смеси ОЦК и ГЦК фаз со средним размером зерен/частиц $\sim 1.5 \pm 0.9$ мкм. Механические свойства в литом и ковном состояниях определялись при испытаниях на растяжение в интервале температур 20°C-1000°C. Послековки сплав прочнее и пластичнее, чем в литом состоянии при комнатной температуре. Предел текучести, предел прочности и относительное удлинение в деформированном состоянии составляли соответственно 1040 МПа, 1170 МПа и 1%, по сравнению с 790, 790 и 0.2% в литом состоянии. В обоих состояниях обнаружен хрупко-вязкий переход (ХВП), приводящий к значительному повышению удлинения в узком температурном интервале. В литом состоянии этот переход происходит между 700 и 800°C, а в ковном состоянии между 600 и 700°C. В интервале температур 800-1000°C кованный сплав демонстрирует признаки сверхпластического течения – относительное удлинение превышает 400% и достигает 860% при температуре 1000°C.

Ключевые слова: электронная микроскопия, механические свойства, высокоэнтропийные сплавы, термомеханическая обработка, измельчение зерен, пластичность.

Введение

Разработка и применение новых конструкционных материалов со свойствами, превышающими свойства используемых в настоящее время аналогов, необходимы для дальнейшего прогресса в машиностроении, в частности, в аэрокосмической отрасли. В последнее десятилетие был разработан новый класс материалов, так называемых высокоэнтропийных сплавов (ВЭСов) [1-3]. Эти сплавы содержат от 5 до 13 основных элементов в примерно эквимольных концентрациях, поэтому содержание каждого отдельного элемента находится в пределах от 5 до 35 % [1]. Высокая энтропия смешения препятствует образованию интерметаллидных фаз, в результате этого сплавы состоят преимущественно из простых твердых растворов, что приводит к благоприятному сочетанию прочности при сжатии и пластичности [1, 4-13].

Многие ВЭСы обладают высокой твердостью, прочностью, износостойкостью, а их микроструктура очень стабильна при повышенных температурах [1,14,15]. Такая комбинация свойств делает их крайне привлекательными для широкого ряда применений,



однако, низкая пластичность и хрупкость, особенно при комнатной температуре, значительно ограничивают возможности использования данных материалов. Было показано, что отжиг может увеличить пластичность литых ВЭСов [9, 16]. Вследствие низкой пластичности большинство данных о механических свойствах были получены при испытаниях на сжатие или измерениях твердости. На данный момент известна лишь одна публикация, в которой представлены механические свойства ВЭСа $Al_{0.5}CrCuFeNiCo$ при испытаниях на растяжении [10]. Кроме того, нужно также отметить, что большинство описанных свойств ВЭСов были измерены в литом состоянии. Известно, что во многих случаях свойства литых сплавов уступают свойствам деформированных. Усадочная пористость, грубая дендритная структура, химическая неоднородность, метастабильные эвтектики по границам зерен, типичные для литой структуры, неблагоприятно отражаются на механических свойствах. Улучшить микроструктуру и механические свойства отливок может всесторонняя горячая деформация [17-21]. К сожалению, в открытых литературных источниках нет сведений о влиянии процесса горячей обработки на свойства ВЭСов.

В данной статье представлены данные о микроструктуре и механических свойствах интенсивно пластически деформированного высокоэнтропийного сплава $AlCoCrCuFeNi$ в сравнении с аналогичными данными для литого состояния. Данный сплав был выбран, поскольку он является наиболее изученным среди всех ВЭСов [1,9, 22-24]. Для него известна приблизительная фазовая диаграмма [23], что позволило выбрать температурный интервал для термомеханической обработки.

1. Материал и методики

Слиток высокоэнтропийного сплава $AlCoCrCuFeNi$ \emptyset 40 мм и высотой 90 мм был получен индукционной плавкой составляющих элементов с последующим электрошлаковым переплавом и литьем в охлаждаемую медную изложницу. Химический состав слитка представлен в табл. 1.

Таблица 1

Химический состав изучаемого сплава

	Al	Cr	Cu	Ni	Fe	Co
Атомные %	16.16±0.63	15.86±0.05	17.42±0.01	16.65±0.23	15.96±0.15	17.07±0.19
Весовые %	8.20±0.40	15.65±0.05	20.95±0.05	18.55±0.25	17.80±0.10	18.10±0.20

Две пластины, толщиной 10 мм каждая, были отрезаны от верхней и нижней части слитка. Из оставшейся части слитка была вырезана заготовка \emptyset 40 мм и длиной 35 мм, которая была подвергнута гомогенизационному отжигу при температуре 960°C в течение 50 часов. После гомогенизации, заготовка была подвергнута всесторонней горячей ковке при температуре 950°C в трех ортогональных направлениях (a-b-c ковка) [20-22]. Ковка осуществлялась с использованием гидравлического прессы DEVR 4000 с

максимальным усилием 0.4МН, оснащенного изотермическим штамповым блоком. Скорость перемещения траверсы - 1мм/с, достигнутая общая степень деформации составила ~1000%. Микроструктура образцов изучалась на полированных образцах с использованием сканирующих электронных микроскопов Quanta 200 3D и Quanta 600 оснащенных детекторами обратно рассеянных электронов, а также приставками для энергодисперсионного анализа (ЭДС) и анализа картин дифракции обратно-рассеянных электронов (ДОРЭ). Микротвердость по Виккерсу, HV, измерялась с нагрузкой 250 грамм и временем выдержки 15 с. Испытания на одноосное растяжение в интервале температур от 20 до 1000°C проводились на воздухе с использованием испытательной машины Instron 5882, оснащенной печью для нагрева до 1200°C. Скорость деформирования составляла 0.016 мм/с, что соответствует начальной скорости деформации 10^{-3} с^{-1} . Размер рабочей части образцов составлял $16 \times 3 \times 1,5 \text{ мм}^3$.

2. Результаты

Влияние всестороннейковки на микроструктуру.

Дендритная структура сплава в литом состоянии представлена на рис. 1а. Размер дендритов составляет около 50 мкм. По данным ДОРЭ анализа микроструктура состоит из матрицы с ОЦК решеткой (темные области, объемная доля около 53%) и частиц с ГЦК решеткой (светлые области, объемная доля около 47%). Частицы с ГЦК решеткой расположенные по границам зерен (т.е. в междендритных областях) больше и светлее чем серые частицы, расположенные в зернах с ОЦК решеткой (дендритах). ЭДС химический анализ показал, что междендритные ГЦК частицы содержат значительно больше Си, чем расположенные внутри дендритов. Рентгеноструктурный анализ выявил наличие ОЦК фазы и двух ГЦК фаз, с параметрами решеток $a = 2.88 \text{ \AA}$ (ОЦК), 3.60 \AA (ГЦК1) и 3.63 \AA (ГЦК2).

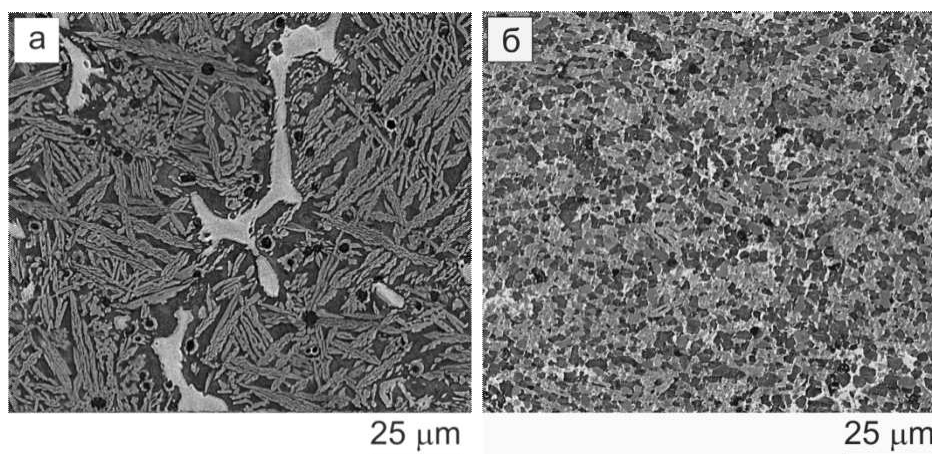


Рис. 1. Микроструктура сплава AlCoCrCuFeNi в (а) литом и (б) ковном состояниях

После всестороннейковки при 950°C происходит значительное измельчение структуры (рис. 1б). Дендритная литая структура трансформируется в рекристаллизованную duplexную структуру. ОЦК зерна измельчаются и приобретают равноосную форму,



ГЦК частицы, равномерно распределенные в матрице, также измельчаются и приобретают почти равноосную форму. Объемная доля ОЦК фазы возрастает до $\sim 60\%$, а доля ГЦК фазы уменьшается до $\sim 40\%$. Дифрактограмма кованого образца показывает, что, кроме одной ОЦК фазы и двух ГЦК фаз, с параметрами близкими к литому состоянию, также присутствует σ фаза (обогащенная Cr и Fe). Небольшие характеристические пики от σ фазы расположены между пиками (111) и (200) от ГЦК фаз. Для литой структуры эти пики не наблюдаются. Дуплексная структура сплава характеризуется логарифмическим нормальным распределением зерен/частиц по размеру. Средняя величина зерен/частиц составляет 1.5 ± 0.9 . Высокое значение стандартного отклонения ($s=0.9$ мкм) связано с большой разницей в размерах зерен/частиц (от 0.2 до 6.1 мкм), присутствующих в микроструктуре.

Механические свойства.

На рис. 2 показаны типичные кривые напряжение-деформация полученные в ходе испытаний на растяжение при $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ и различных температурах для изучаемого сплава в литом состоянии (а) и после горячейковки (б). Значения предела текучести, $\sigma_{0.2}$, предела прочности, σ_B , и относительного удлинения, δ , полученные в результате испытаний приведены в табл. 2.

Таблица 2

Механические свойства на растяжение AlCoCrCuFeNi

Температура Состояние		20°C	300°C	600°C	700°C	800°C	900°C	1000°C
Литое	$\sigma_{0.2}$, МПа	790	-	542	350	161	88	37
	σ_B , МПа	790	-	551	360	180	100	44
	δ , %	0.2	-	0.4	4.7	12.1	30	77
Кованное	$\sigma_{0.2}$, МПа	1040	810	300	63	22	14	9
	σ_B , МПа	1170	880	350	91	26	18	22
	δ , %	1.0	0.4	1.3	63	604	405	864

При комнатной температуре литой образец хрупко разрушается сразу по достижению предела текучести, так что он совпадает с пределом прочности и они равны 790 МПа, ($\delta=0.2\%$). Послековки сплав упрочняется и показывает некоторую пластичность при комнатной температуре: $\sigma_{0.2}=1040$ МПа, $\sigma_B=1170$ МПа, а $\delta=1.0\%$.

Значительное повышение δ литого сплава (с $\sim 4.7\%$ до 12.1%) происходит в интервале температур 700-800°C, что вероятно обусловлено происходящим хрупко-вязким переходом. При этом происходит заметное разупрочнение: $\sigma_{0.2}$ уменьшается с 350 МПа до 161 МПа, а σ_B – с 360 МПа до 180 МПа (см. рис. 2а и табл. 2). Дальнейшее повышение температуры испытаний до 1000°C приводит к монотонному падению прочности ($\sigma_{0.2}=37$ МПа, $\sigma_B=44$ МПа) и повышению пластичности литого сплава ($\delta=77\%$). Анализ кривых напряжение-деформация для литого сплава показывает, что в интервале температур 700-1000°C максимальное напряжение достигается практически сразу



после начала упругой стадии деформации, а затем происходит заметное снижение напряжения течения. Общее удлинение в основном зависит от длительности этой стадии разупрочнения. Так как уменьшение напряжения течения, скорее всего, связано с локализацией деформации и образованием шейки, увеличение продолжительности стадии разупрочнения может быть обусловлено замедлением развития шейки с увеличением температуры.

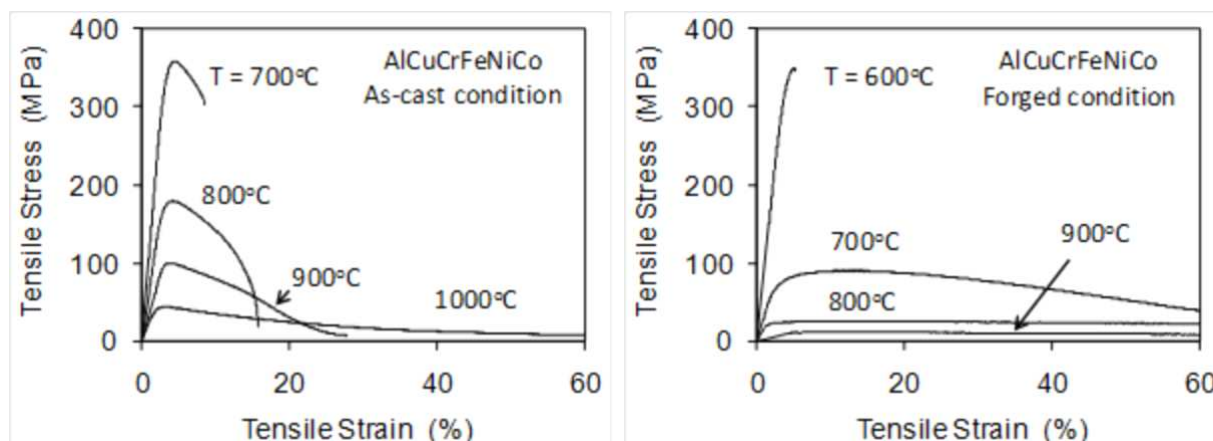


Рис. 2. Типичные кривые напряжение-деформация сплава в (а) литом и (б) ковном состояниях при испытаниях при различных температурах ($\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$)

Для ковального сплава характерен отчетливый ХВП, при котором происходит резкое повышение δ от 1.3% до 63%, в интервале 600-700°C (см. рис. 2б и табл. 2), т. е. при более низких температурах чем для литого сплава. Соответствующее падение предела текучести (от 300 МПа до 63 МПа) и предела прочности (от 350 МПа до 91 МПа) происходит значительно быстрее, чем в литом сплаве. Выше температуры ХВП, кованный сплав значительно более пластичен, чем литой. Так, при температуре 800°C предел прочности для литого сплава более чем в 6 раз выше чем для ковального сплава (соответственно 180 МПа и 26 МПа), и даже при температуре 1000°C литое состояние приблизительно в 3 раза прочнее ($\sigma_B=44$ МПа и 14МПа, соответственно). Интересен тот факт, что ХВП происходит при приблизительно одинаковых значениях предела прочности (~ 350 МПа) для обоих состояний. При испытании образцов сплава послековки выше температуры ХВП наблюдается стадия установившегося течения и очень высокие значения относительного удлинения, которое достигает 604% МПа при 800°C и 864% при 1000°C (см. рис. 2б и табл. 2). На рис. 3 представлены образцы в литом и ковном состоянияхковки после растяжения при 1000°C. В литом образце проявляется ярко выраженная локализация деформации (образование шейки), разрушение происходит за счет сдвига при относительном удлинении $\delta=77\%$. Образец послековки деформируется очень однородно, без образования шейки, и до очень высокого удлинения $\delta=864\%$. Скорее всего, крайне высокие значения относительного удлинения и низкие напряжения течения являются признаком сверхпластического поведения сплава послековки в интервале 800°C-1000°C.

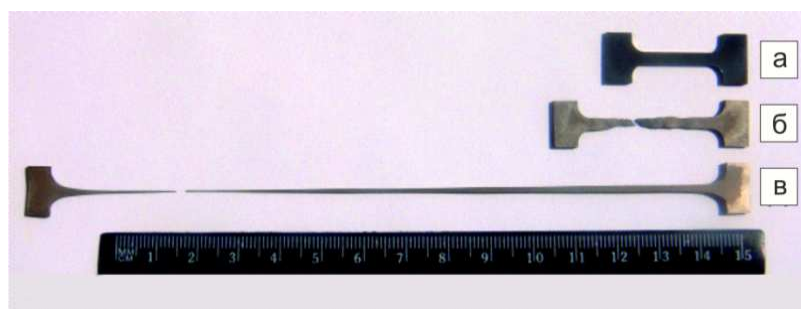


Рис. 3. Фотографии образцов деформированных при 1000°C : (а) недеформированный образец; (б) литой образец ($\delta=77\%$); и (в) кованый образец ($\delta=864\%$). $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ c}^{-1}$

Таблица 3

Микротвердость по Виккерсу сплава AlCoCrCuFeNi в литом и кованом состояниях после испытаний на растяжение при различных температурах

Температура($^{\circ}\text{C}$)		20	600	700	800	900	1000
Состояние							
Литое	Головка	463 ± 12	-	433 ± 18	472 ± 16	469 ± 15	405 ± 9
	Шейка	439 ± 14	-	449 ± 15	498 ± 21	445 ± 33	372 ± 27
Кованное	Головка	432 ± 3	432 ± 11	410 ± 2	419 ± 3	418 ± 3	392 ± 2
	Шейка	420 ± 3	435 ± 13	332 ± 6	349 ± 5	334 ± 5	388 ± 6

В табл. 3 представлена микротвердость по Виккерсу образцов после испытаний при различных температурах. Микротвердость у литого сплава выше, чем послековки. HV в слабо деформированной шейке (при температурах до 700°C) почти такая же, как и в недеформированной головке. С другой стороны, HV сильно деформированной шейки в образцах послековки ($700\text{-}1000^{\circ}\text{C}$) и образцах литого сплава (1000°C) заметно меньше чем в головке соответствующих образцов, что связано с появлением пористости в сильно деформированных участках образцов (см. ниже). Повышение HV образцов литого сплава после испытаний при 800°C может быть обусловлено фазовым превращением (выделением σ -фазы) в этом температурном интервале [10].

Эволюция микроструктуры в ходе испытаний на растяжение.

На рис. 4 представлены примеры микроструктур, полученных в режиме обратнорассеянных электронов, в недеформированной (головке) и деформированной (шейке) частях образцов литого сплава после растяжения при повышенных температурах. Разный вид ГЦК частиц внутри дендритов, скорее всего, обусловлен их пластинчатой морфологией и разной ориентацией дендритных зерен. Деформация при 700°C и 800°C не приводит к заметным изменениям в литой дендритной структуре: микроструктура остается подобной исходному состоянию и в головке, и в шейке. После деформации при 900°C в шейке происходит фрагментация и глобуляризация крупных ГЦК частиц, тогда как в головке не происходит видимых изменений (рис. 4а, б).

После деформации при 1000° микроструктура в шейке полностью трансформируется в рекристаллизованную дуплексную структуру с однородно распределенными ГЦК

частицами (рис. 4г). Средний размер частиц составляет $\sim 2.4 \pm 1.0$ мкм. Стоит отметить, что выдержка того же образца при температуре 1000°C не приводит к видимым изменениям в литой дендритной структуре (см. рис. 1а и рис. 4в).

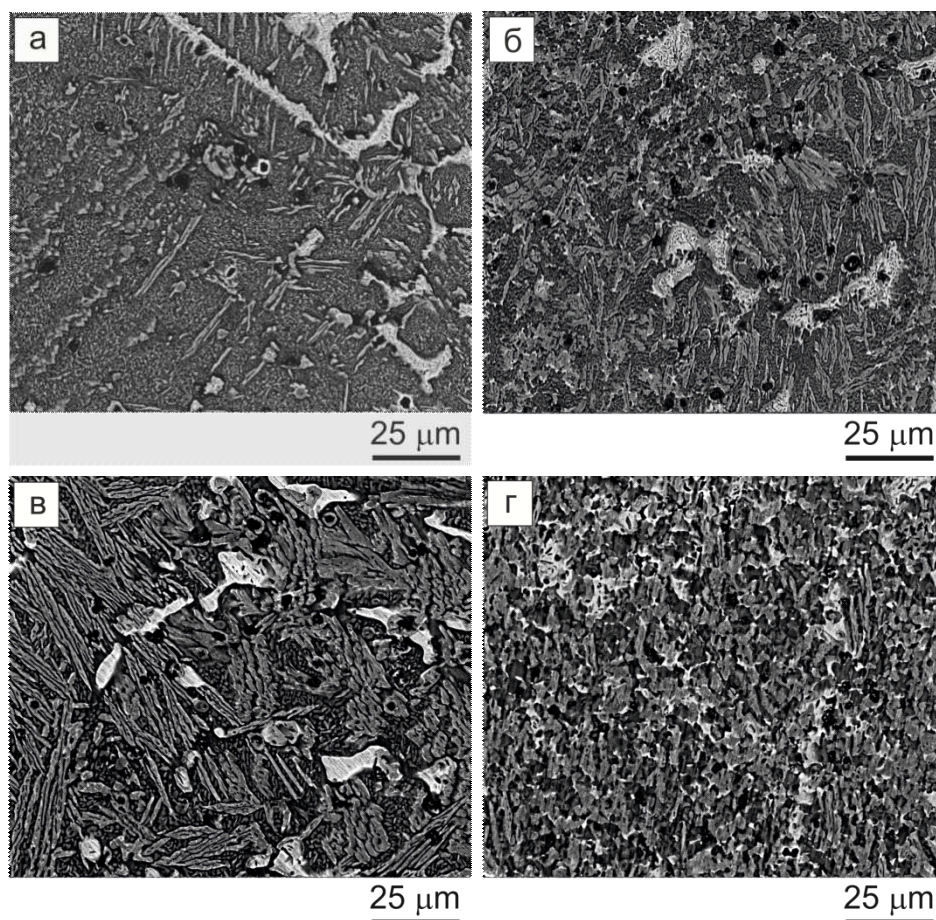


Рис. 4. Микроструктура литого сплава AlCoCrCuFeNi после растяжения при температуре: (а, б) – 900°C ; (в, г) – 1000°C ; (а, в) недеформированная (головка) и (б, г) деформированная (шейка) области

В ходе испытаний на растяжение в интервале температур 20°C - 1000°C образцов сплава послековки не происходит изменений в морфологии структуры (рис. 5).

Тем не менее, рост зерен/частиц был отмечен после испытаний при 900°C и 1000°C (табл. 4). Для примера, средний размер зерен/частиц в головке (недеформированной части) возрастает с 1.5 мкм (послековки) до 2.5 мкм после испытаний при 900°C и 2.8 мкм после 1000°C . Размер зерен/частиц в сильно деформированной шейке несколько меньше (2.2 мкм при 900°C и 2.6 мкм при 1000°C) чем в недеформированной области образцов, что может быть свидетельством деформационного измельчения частиц.

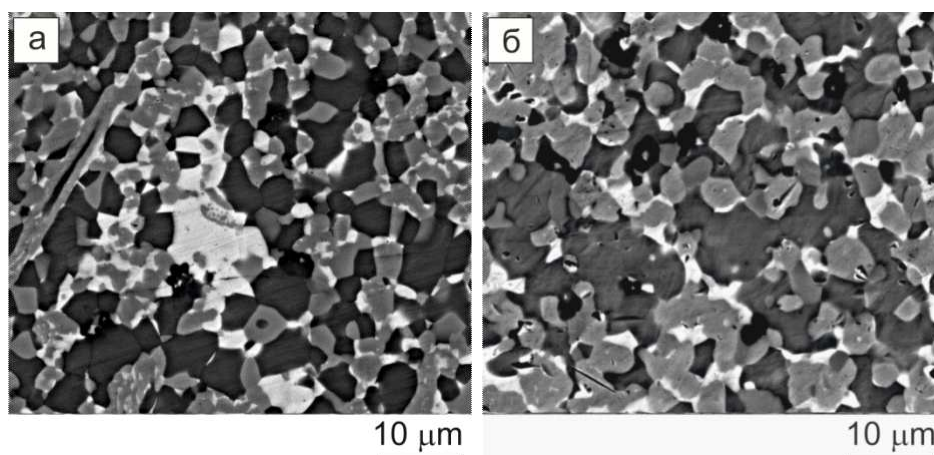


Рис. 5. Микроструктура ковального сплава AlCoCrCuFeNi после растяжения при температуре 1000°C: (а) недеформированная (головка образца) и (б) деформированная (шейка) области

Таблица 4

Средний размер зерен/частиц и стандартное отклонение (в мкм) дуэлексной структуры ковального AlCoCrCuFeNi сплава после испытаний на растяжение при различных температурах

Температура испытания (°C)	600	700	800	900	1000
Головка	1.5±0.8	1.6±0.9	1.9±1.0	2.5±1.3	2.8±1.3
Шейка	1.6±0.8	1.5±0.8	1.6±0.9	2.2±1.1	2.6±1.4

Пористость в образцах после испытаний на растяжение.

В образцах литого сплава после растяжения в интервале 20-700°C в деформированной области пор не наблюдается. Разрушение образцов происходит за счет распространения трещин, в основном в междендритной области. При повышении температуры, трещины, образовавшиеся на границах ГЦК частиц и ОЦК матрицы, округляются и превращаются в поры за счет пластической деформации окружающих областей (рис. 6а). Трещины, приводящие к разрушению, распространяются вдоль межфазных границ, образующих угол $\sim 45^\circ$ с направлением растяжения. Морфология пор в литом образце, деформированном при температуре 1000°C ($\delta = 77\%$), отличается от описанной выше. В этом случае поры удлинены в направлении растяжения из-за сильной деформации окружающей матрицы, а разрушение происходит в результате образования шейки и утонения областей, разделяющих поры (рис. 6в).

После растяжения при температурах выше 600°C ковального сплава наблюдается значительное число пор и трещин в обширной области рядом с поверхностью излома. При 700°C поры образуются и растут вдоль поверхностей ГЦК частиц, практически перпендикулярных направлению растяжения. При более высоких температурах поры удлинены в направлении растяжения (рис. 6 б,г). Подобное сверхпластическому поведение сплава в этом температурном интервале (800-1000°C) препятствует локализации

деформации и слиянию ближайших пор, в результате чего образуются очень длинные поры. Анализ микроструктуры этих образцов показал, что поры и трещины возникают на поверхностях раздела между ОЦК и ГЦК фазами.

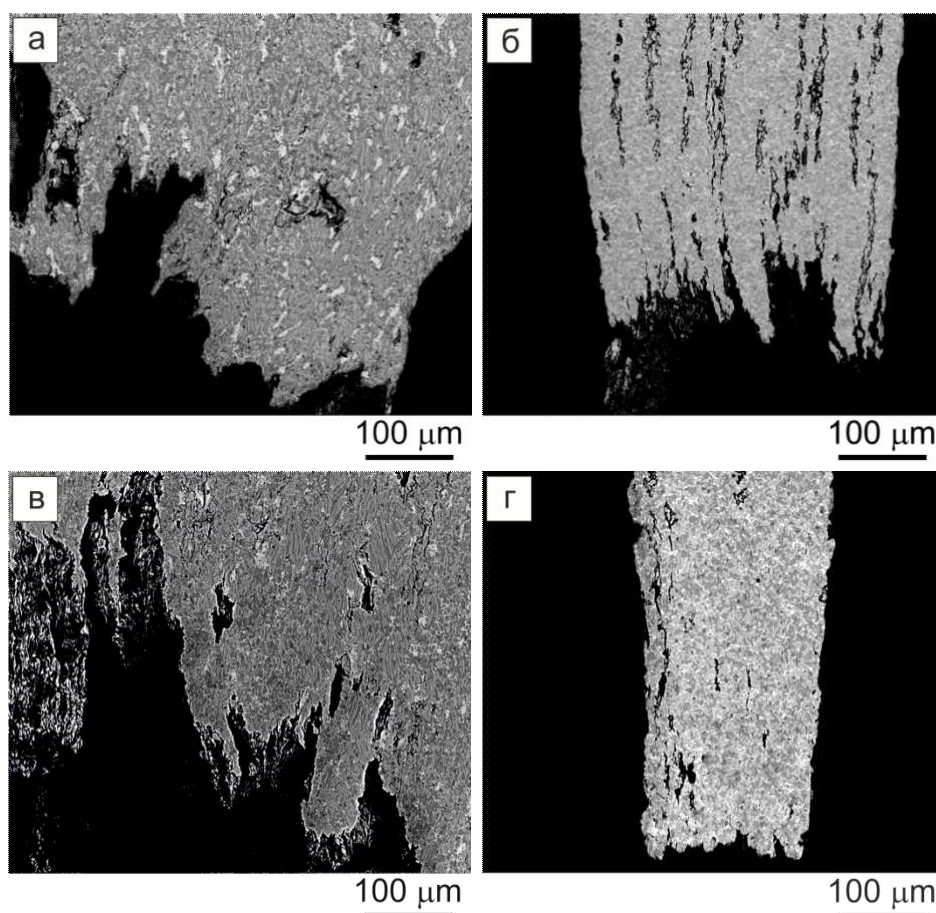


Рис. 6. Микроструктура шейки образцов сплава в литом (а, в) и кованом (б, г) состояниях после растяжения при температуре: (а, б) – 900°С; (в, г) – 1000°С

На рис. 7а представлена температурная зависимость объемной доли пор в шейке для литых и кованных образцов после растяжения. При увеличении температуры от 700°С до 1000°С в литых образцах доля пор возрастает от 0.1% до 1.0%. В кованных образцах пористость быстро возрастает от 0.2% при 600°С до 10.5% при 700°С, достигает значения 12.5% при 900°С, и затем снижается до 7.9% при 1000°С. Высокая пористость шейки кованных образцов в основном обусловлена большой степенью деформации этих образцов при 800-1000°С. Поэтому на рис. 7б представлена зависимость объемной доли пор нормированной на величину деформации. Объемная доля пор на 1% удлинения в литых образцах практически не зависит от температуры и составляет ~0.01-0.02%. Для кованных образцов максимальная доля пор на 1% удлинения составляет 0,17% при 700°С, быстро снижается до ~0.02-0.03% при 800°С, и дальше практически не зависит от температуры.

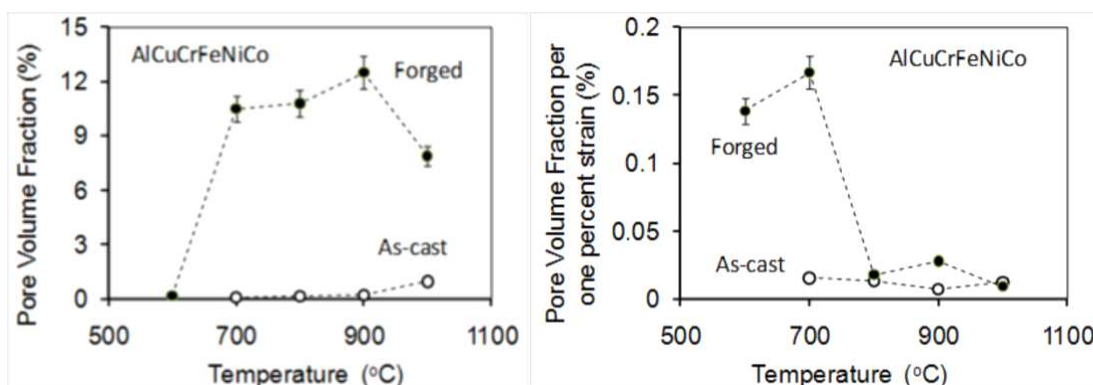


Рис. 7. (а) Объемная доля пор в шейке образцов после растяжения в зависимости от температуры; (б) те же данные нормированные на относительное удлинение (% пор на 1% удлинения). ($\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$).

Фрактография.

Изображения поверхностей излома образцов в литом и кованных состояниях после растяжения при температуре 20°C представлены на рис. 8. Поверхность излома литого образца имеет грубую фасетированную структуру, тогда как поверхность кованого образца имеет мелкую зернистую структуру, что хорошо согласуется с много меньшим размером зерен/частиц в кованом состоянии. Хрупкий характер разрушения литого сплава подтверждается наличием плоских фасеток скола, заостренных фасетированных выступов и ручьев (рис. 8а). Поверхность излома кованого образца демонстрирует смешанный, хрупко-вязкий, тип разрушения (рис. 8б). Присутствие плоских фасеток с характерными ручьями типично для хрупкого разрушения, тогда как наличие множества ямок разного диаметра вокруг плоских фасеток свидетельствует о вязком разрушении.

Вероятно, в кованом образце трещины образуются на межфазных границах ОЦК/ГЦК за счет хрупкого разрушения, а затем происходит раскрытие трещин за счет пластической деформации прилегающих более пластичных участков.

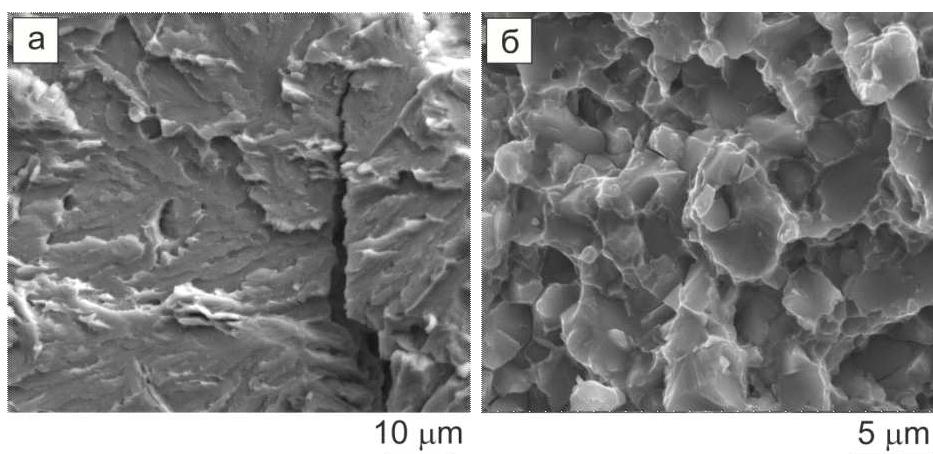


Рис. 8. Поверхности излома после растяжения при комнатной температуре: (а) литое и (б) кованое состояния (СЭМ)

На рис. 9 представлены поверхности излома образцов литого сплава после растяжения при температурах ХВП. Вид излома при 700°C сходен с изломом после испытаний при комнатной температуре наличием преимущественно квази-сдвиговых фасеток (см. рис. 9а и 8а). Однако, такие элементы структуры, как заостренные фасетированные выступы, русла и ручьи, заметно мельче, что косвенно свидетельствует о дислокационной активности в ОЦК фазе перед срезом. Заостренные фасетированные выступы обычно ассоциируют с пересечением дислокационных стенок, состоящих из винтовых дислокаций, поэтому большая плотность таких выступов свидетельствует о большей плотности дислокаций в образце при 700°C . Кроме того, наличие деформированных пластически холмов и ямок является показателем некоторой вязкости излома литого сплава после испытания при 700°C . Поверхность разрушения литого сплава при 800°C имеет значительные отличия (рис. 9б). Присутствуют крупные поры, появившиеся в процессе пластической деформации. Большая часть пор объединена вторичными трещинами в цепочки. Размер и доля квази-сдвиговых фасеток значительно уменьшается. На поверхности излома наблюдаются новые мелкие глобулярные образования, возникающие при локализации деформации и динамической рекристаллизации на границе излома. Кроме того, окисление при 800°C тонких краев ямок, типичных для вязкого разрушения, также может привести к фрагментации и образованию окисленных глобулярных частиц.

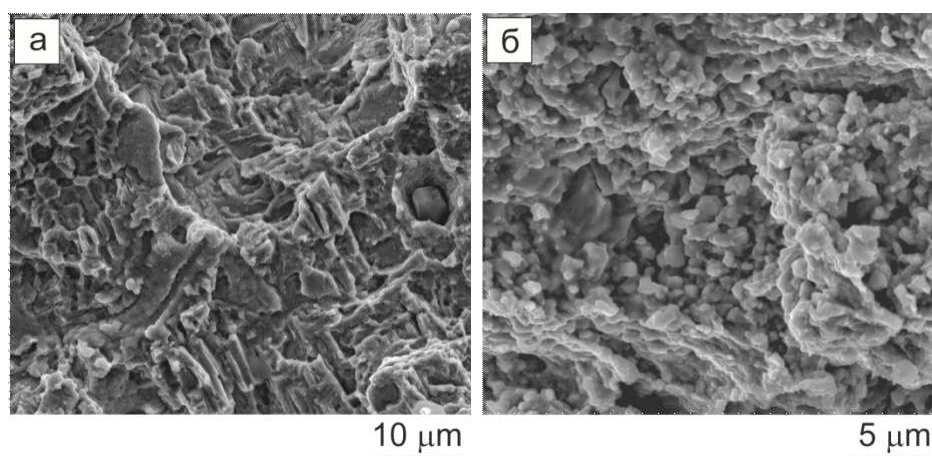


Рис. 9. Поверхности излома литого сплава после растяжения при (а) 700°C и (б) 800°C (СЭМ)

На рис. 10 представлены поверхности излома ковального сплава после растяжения в интервале ХВП. Морфология поверхности разрушения при температуре 600°C (ниже ХВП) ничем не отличается от разрушения при комнатной температуре – присутствуют черты как хрупкого, так и вязкого излома. Хрупкий характер излома отражается в наличие плоских фасеток и характерных узоров из русел внутри больших ямок, вязкое разрушение выражается в наличие многочисленных ямок разного размера по краям плоских фасеток. Разрушение при 700°C (выше ХВП) происходит с образование преимущественно вязкого излома с большими ямками диаметром от 2 до 5 мкм. Изменение характера излома соответствует росту относительного удлинения до 63%.

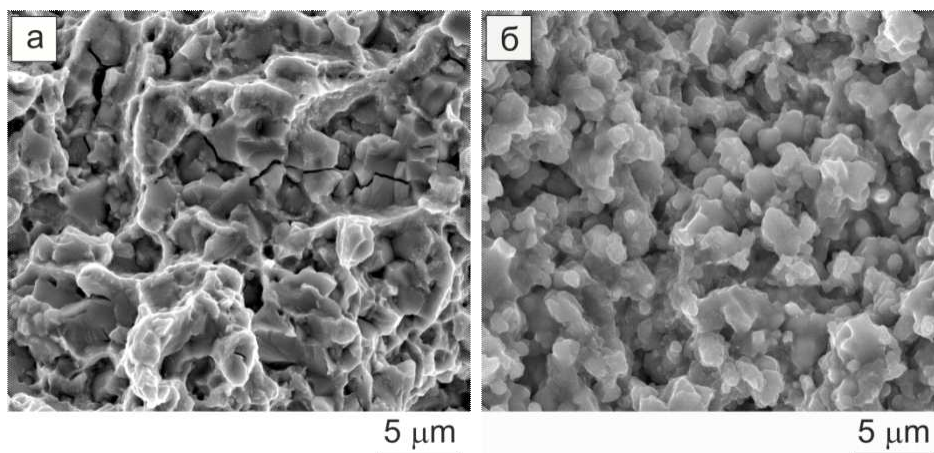


Рис. 10. Поверхности излома ковкого сплава после растяжения при (а) 600°C и (б) 700°C (СЭМ)

3. Обсуждение

Представленные выше результаты позволяют заключить, что горячая деформация всесторонней ковкой позволяет значительно трансформировать и измельчить структуру высокоэнтропийного сплава AlCoCrCuFeNi по сравнению с литым состоянием, повысить прочность и пластичность при комнатной температуре, понизить температуру ХВП приблизительно на 100°C. Также сплав деформируется сверхпластически при температурах от 800°C до 1000°C послековки.

Влияние горячей деформации на микроструктуру.

Известно, что термомеханическая обработка является эффективным способом для гомогенизации и измельчения грубой структуры литых материалов, что широко используется для повышения их механических свойств [19-22]. Наша работа продемонстрировала, что данный подход может быть с успехом применен для многокомпонентных ВЭСов. Литой слиток сплава AlCoCrCuFeNi был подвергнут всесторонней изотермической ковке при температуре 950°C. Грубая дендритная структура (размер дендритов около 50 мкм) после литья трансформировалась в мелкозернистую дуплексную структуру из ОЦК матрицы и ГЦК частиц с объемными долями соответственно 60 и 40 %. Средний размер зерен/частиц составил 1.5 мкм. Также была обнаружено наличие в ковном сплаве малой доли σ фазы.

Влияние микроструктуры на механические свойства.

Измельчение микроструктуры приводит к повышению прочности и пластичности. Известно, что уменьшение размера зерна препятствует локализации деформации и локальной концентрации напряжений на границах зерен [25]. Отдельные трещины, в результате роста которых происходит хрупкое разрушение, в ковном сплаве меньше и необходима большая нагрузка для их роста до критического размера. За счет этого происходит повышение прочности и пластичности. И в ковном, и в литом состоянии проявляется ярко выраженный хрупко-вязкий переход, который, скорее всего, связан



с высокой объемной долей ОЦК фазы. Тот факт, что при температурах ниже температуры ХВП на изломах присутствует не только основная хрупкая, но и вязкая составляющая, более заметная в кованом сплаве, показывает, что перед хрупким разрушением происходит локализованная пластическая деформация, возможно, в более пластичной ГЦК фазе. Измельчение структуры в ходе деформации приводит к снижению температуры ХВП приблизительно на 100°C по сравнению с литым состоянием. Также, ХВП происходит при приблизительно одинаковых значениях предела прочности, около 350 МПа. Это свидетельствует о том, что смещение ХВП перехода в сторону низких температур связано с более сильной зависимостью предела прочности и предела текучести от температуры, и, следовательно, более легкому движению дислокаций и релаксации напряжений в кованом сплаве по сравнению с литым. В кованом сплаве выше плотность границ зерен и межфазных границ, а они разупрочняются [26] быстрее при повышении температуры, чем внутризеренные области. Заметное повышение пластичности и уменьшение прочности при повышении температуры выше температуры ХВП, вероятно, связано с активацией зернограничного проскальзывания (ЗГП) за счет диффузионно-контролируемых процессов. Более осязаемое падение прочности и повышение пластичности также происходит в кованом сплаве. За счет более мелкой структуры ЗГП будет развиваться интенсивнее, также должен наблюдаться динамический возврат. Более того, пластическая деформация за счет ЗГП характеризуется высокой чувствительностью напряжения течения к скорости деформации, что препятствует образованию шейки и способствует сверхпластической деформации [21, 27, 28]. Результатом сверхпластического поведения являются протяженные стадии установившегося течения, наблюдаемые при испытаниях кованого сплава в интервале $800\text{-}1000^{\circ}\text{C}$. С другой стороны, в литом сплаве дендритная структура препятствует распространению пластической деформации, что приводит к динамической рекристаллизации при испытаниях при температуре $800\text{-}1000^{\circ}\text{C}$. За счет динамической рекристаллизации происходит измельчение структуры в деформированных областях.

4. Заключение

1. Горячая деформация всесторонней изотермической ковкой значительно измельчает дендритную структуру литого сплава AlCoCrCuFeNi и приводит к образованию мелкой дуплексной равноосной структуры со средним размером зерен/частиц ~ 1.5 мкм.

2. При комнатной температуре кованный сплав AlCoCrCuFeNi прочнее и пластичнее литого – в литом состоянии предел прочности составлял 790 МПа, разрушение произошло по достижению предела текучести ($\sim 0.2\%$ относительного удлинения), а послековки предел прочности составил 1170 МПа, относительное удлинение – 1% .

3. Хрупко-вязкий переход с резким повышением пластичности в узком интервале температур наблюдался в сплаве и в литом, и в кованом состояниях. Температура перехода составила $700\text{-}800^{\circ}\text{C}$ в литом состоянии, в кованом – $600\text{-}700^{\circ}\text{C}$. Уменьшение температуры ХВП в кованом состоянии связано с измельчением структуры.

4. При температурах выше ХВП происходит значительное падение напряжения течения. Предел прочности литого сплава уменьшается с 350 МПа при 700°C до 180 МПа



при 800°C и до 44 МПа при 1000°C. Уменьшение предела прочности ковального сплава происходит еще быстрее: предел прочности уменьшается с 350 МПа при 600°C до 91 МПа при 700°C и до 14 МПа при 1000°C. Уменьшение прочности сопровождается заметным увеличением пластичности.

5. В интервале температур 800-1000°C кованный сплав демонстрирует сверхпластическое поведение. Относительное удлинение превышает 400% и при температуре 1000°C составляет 860%.

Настоящая работа была выполнена в рамках государственного контракта Министерства Образования и Науки Российской Федерации № 02.740.11.5184.

Литература

1. Yeh J.-W., Chen S.-K., Lin S.-J., Gan J.-Y., Chin T.-S., Shun T.-T., Tsau C.-H., Chang S.-Y. // *Adv. Eng. Mater.* – 2004. – 6(5). – P.299-303.
2. Yeh J.-W. // *Ann. Chim: Sci. Mater.* – 2006. – 31. – P.633-648.
3. Yeh J.-W., Chen Y.-L., Lin S.-J., Chen S.-K. // *Mater. Sci. Forum.* – 2007. – 560. – P.1-9.
4. Zhou Y.J., Zhang Y., Wang Y.L., Chen G.L. // *Mater. Sci. Eng., A.* – 2007. – P.454-455. – P.260-265.
5. Zhou Y.J., Zhang Y., Wang Y.L., Chen G.L. // *Appl. Phys. Lett.* – 2007. – 90. – 181904/1-3.
6. Zhou Y.J., Zhang Y., Wang Y.L., Chen G.L. // *J. Alloys Compd.* – 2008. – 466. – P.201-204.
7. Wang Y.P., Li B.S., Ren M.X., Yang C., Fu H.Z. // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2008. – 491. – P.154-158.
8. Wang F.J., Zhang Y. // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2008. – 496. – P.214-216.
9. Wen L.H., Kou H.C., Li J.S., Chang H., Xue X.Y., Zhou L. // *Intermetallics.* – 2009. – 17. – P.266-269.
10. Tsai C.W., Tsai M.H., Yeh J.W., Yang C.C. // *J. Alloys Compd.* – 2010. – 490. – P.160-165.
11. Zhu J.M., Fu H.M., Zhang H.F., Wang A.M., Li H., Hu Z.Q. // *Mater. Sci. Eng., A.* – 2010. – 527. – P.6975-6979.
12. Senkov O.N., Wilks G.B., Scott J.M., Miracle D.B. // *Intermetallics.* – 2011. – 19. – P.698-706.
13. Senkov O.N., Scott J.M., Senkova S.V., Miracle D.B., Woodward C.F. // *J. Alloys Comp.* – 2011. – 509. – P.6043-6048.
14. Tsai C.-W., Chen Y.-L., Tsai M.-H., Yeh J.-W., Shun T.-T., Chen S.-K. // *J. Alloys Comp.* – 2009. – 486. – P.427-435.
15. Senkov O.N., Wilks G.B., Miracle D.B., Chuang C.P., Liaw P.K. // *Intermetallics.* – 2010. – 18. – P.1758-1765.
16. Zang K.B., Fu Z.Y., Zhang J.Y., Shi J., Wang W.M., Wang H., Wang Y.C., Zhang Q.J. // *J. Alloys Compd.* – 2010. – 502. – P.295-299.
17. Valiev R.Z., Alexandrov I.V. *Bulk Nanostructured Metallic Materials* / Moscow: Akademkniga, 2007. – 398 p.
18. Salishchev G.A., Imayev R.M., Senkov O.N., Imayev V.M., Gabdullin N.K., Shagiev M.R., Kuznetsov A.V. Froes F.H. (Sam) // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2000. – 286/2. – P.236-243.
19. Salishchev G.A., Imayev R.I., Senkov O.N., Froes F.H. // *JOM.* – 2000. – 52(12). – P.46-48.
20. Zherebtsov S.V., Salishchev G.A., Galeev R.M., Valiakhmetov O.R., Mironov S.Y., Semiatin S.L. // *Scripta Mater.* – 2004. – 51. – P.1147-1151.
21. Imayev R.M., Gabdullin N.K., Salishchev G.A., Senkov O.N., Imayev V.M., Froes F.H. // *Acta Mater.* – 1999. – 47. – P.1809-1821.
22. Tong C.J., Chen M.R., Chen S.K., Yeh J.W., Shun T.T., Lin S.J., Chang S.Y. // *Metall. Mater. Trans. A* 36A. – 2005. – P.1263-1271.



23. Tong C.J., Chen Y.L., Chen S.K., Yeh J.W., Shun T.T., Tsau C.H., Lin S.J., Chang S.Y. // Metall. Mater. Trans. A 36A. – 2005. – P.881–893.
24. Wang F.J., Zhang Y., Chen G.L., Davies H.A. // Int. J. Mod. Phys. B 6-7. – 2009. – P.1254–1259.
25. Haasen P. Physical Metallurgy, 3rd Edition / Cambridge, UK: University Press, 1996.
26. Imayev V.M., Imayev R.M., Salishchev G.A. // Intermetallics. – 2000. – 8. – P.1-6.
27. Nieh T.G., Wadsworth J., Sherby O.D. Superplasticity in Metals and Ceramics / Cambridge Solid State Science Series / Cambridge, UK: University Press, 1997.
28. Schwartz M.M. New Materials. Processes, and Methods Technology / Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2005.

MICROSTRUCTURE INFLUENCE ON TENSILE MECHANICAL PROPERTIES OF AN AlCoCrCuFeNi HIGH-ENTROPY ALLOY

*A.V. Kuznetsov, *G.A. Salishchev, **O.N. Senkov,
*N.D. Stepanov, *D.G. Shaysultanov

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: kuznetsov@bsu.edu.ru, ak72@mail.ru
UES, Inc.,
Dayton-Xenia Rd., 4401, Dayton, OH 45432, USA, e-mail: oleg.senkov@wpafb.af.mil

Abstract. Extensive multistep forging at 950°C was applied to the cast AlCuCrFeNiCo high-entropy alloy to transform the cast coarse dendritic structure into the fine equiaxed duplex structure consisting of the mixture of BCC and FCC phases with the average grain/particle size of $\sim 1.5 \pm 0.9$ μm . Tensile properties of the alloy in the as-cast and forged conditions were determined in the temperature range of 20°C to 1000°C. The hot forged alloy was stronger and more ductile during testing at room temperature than the as-cast alloy. The yield stress (YS), ultimate tensile strength (UTS), and tensile ductility (TD) of the forged condition were 1040 MPa, 1170 MPa and 1%, respectively, against 790 MPa, 790 MPa and 0.2% for the as-cast condition. In both conditions, the alloy showed brittle to ductile transition (BDT) with a noticeable increase in the tensile ductility within a narrow temperature range. In the as-cast condition, this transition occurred between 700 and 800°C, while in the forged condition, it was observed between 600 and 700°C. With an increase in the testing temperature above the BDT, the continuous decrease in tensile flow stress and the increase in tensile ductility were observed. In the temperature range of 800-1000°C, the forged alloy showed superplastic behavior. The tensile elongation was above 400% and reached 860% at 1000°C.

Keywords: electron microscopy, mechanical characterization, high entropy alloy, thermomechanical processing, grain refinement; plasticity.



УДК 543.423

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕЖИМА РАБОТЫ ДВУХСТРУЙНОГО ДУГОВОГО ПЛАЗМАТРОНА НА ТЕМПЕРАТУРУ И ЭЛЕКТРОННУЮ КОНЦЕНТРАЦИЮ ПЛАЗМЫ

Е.А. Тагильцева

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
ул. Косыгина, 19, Москва, 119991, Россия, e-mail: tagiltseva_helen@mail.ru

Аннотация. Экспериментально исследовано влияние всех комбинаций значений параметров, определяющих режим работы двухструйного дугового плазматрона (ДДП) на температуру и электронную концентрацию плазмы. Показано, что подставляя полученные значения T и n_e в формулу интенсивности спектральной линии можно определить оптимальный режим работы ДДП для возбуждения аналитической линии определяемого элемента. Показана слабая зависимость электронной концентрации от величины легкоионизируемой примеси в плазме двухструйного дугового плазматрона.

Ключевые слова: двухструйный дуговой плазматрон, температура плазмы, электронная концентрация плазмы, атомно-эмиссионный метод анализа.

Оптимальные условия возбуждения аналитических линий при анализе вещества на двухструйном дуговом плазматроне [1-4] неоднократно становились предметом исследования в работах [4, 10]. Исследовали влияние величины рабочего тока плазматрона, угла слияния плазменных струй, расходов плазмообразующего газа на интенсивность спектральных линий определяемых элементов. Неоднократно определяли и положение оптимальной области факела плазмы ДДП, проецируемой на щель спектрографа. В одних работах [4, 6, 7] утверждалось, что оптимальная аналитическая зона расположена после слияния струй плазмы, в других [8, 10] – до слияния. Во всех ранее выполненных работах при изменении параметров, определяющих условия возбуждения наблюдение велось за интенсивностью спектральной линии.

В монографии Зильберштейна Е.И. [11] приводятся формулы для расчета интенсивности атомной и ионной линий.

$$I_a = \frac{1}{4\pi} h\nu_{qp} \frac{A_{qp} g_q}{Z_a} \cdot \frac{n_e \cdot 10^{-\frac{5040}{T}} \varepsilon_q}{n_e + B \cdot 2 \frac{Z_i}{Z_a} \cdot (T^{3/2}) \cdot 10^{-\frac{5040 \varepsilon_i}{T}}} \cdot n, \quad (1)$$

$$I_i = \frac{1}{4\pi} h\nu_{qp}^{(i)} \frac{A_{qp}^{(i)} g_q^{(i)}}{Z_i} \cdot \frac{B \cdot 2 \frac{Z_i}{Z_a} \cdot (T^{3/2}) \cdot 10^{-\frac{5040}{T} (\varepsilon_i + \varepsilon_q^{(i)})}}{n_e + B \cdot 2 \frac{Z_i}{Z_a} \cdot (T^{3/2}) \cdot 10^{-\frac{5040}{T} \varepsilon_i}} n \quad (2)$$

где A_{qp} – вероятность перехода $q \rightarrow p$; g_q – статистический вес в состоянии q ; h – постоянная Планка; ν_{qp} – частота излучения света; Z – сумма по состояниям; n – концентрация частиц элемента в источнике света; T – температура; n_e – электронная



концентрация; I_i и I_a - интенсивности ионной и атомной спектральных линий соответственно; \mathcal{E}_i - потенциал ионизации в эВ; \mathcal{E}_q - энергия возбуждения в эВ; $B = 4,83 \cdot 10^{15}$.

Как видно из формул (1) и (2) интенсивность спектральной линии определяется температурой в источнике возбуждения спектров и электронной концентрацией. Поэтому целесообразно исследовать влияние условий возбуждения на температуру и электронную концентрацию.

Измерения температуры плазмы проводились практически для всех известных дуговых плазматронов, применяемых для аналитических целей. Многими авторами [12, 13] подчеркивался оценочный характер получаемых данных, так для одного и того же плазматрона величины температуры, публикуемые разными авторами, могут значительно отличаться. Эти различия объясняются разными процедурами измерения температуры, используемыми разными табличными данными вероятностей переходов и т. д. Остается пока открытым вопрос о выполнении локального термодинамического равновесия (ЛТР). Наиболее детально процедура измерения температуры для разных участков осесимметричной плазмы исследовалась Кранцем [14]. По интегральным интенсивностям линий с помощью преобразования Абеля вычислялись локальные значения коэффициентов эмиссии и затем локальных температур. Для неосесимметричных струй плазмы этот метод применять нельзя и многие авторы в этом случае ограничивались измерением эффективных температур [15-17]. В работе [16] приведено поле температур плазмы двухструйного плазматрона. В струях плазмы до места слияния температура в этой работе определялась по абсолютной интенсивности континуума аргона с применением интегрального преобразования Абеля. Температура же в аналитической зоне после слияния струй измерялась по абсолютной интенсивности линий олова без учета неоднородности по лучу наблюдения, т.е. измерялась эффективная температура.

Представляет теоретический и практический интерес измерение локальных температур в аналитической зоне двухструйного плазматрона. Эти измерения приведены в работах [18, 19]. Применялся метод определения температуры плазмы по относительной интенсивности двух атомных линий. Эксперимент сложный и очень трудоемкий. Каждое сечение плазмы фотографируется с шести направлений. Далее производится расчет локальных коэффициентов эмиссии и локальных температур с помощью преобразования Радона. Получена количественная оценка температуры плазмы в четырех сечениях факела плазмы и в аналитической зоне плазматрона температура составила 8100 К.

Мы поставили задачу оптимизации условий анализа, поэтому нам не столь важна абсолютная величина температуры плазмы, сколько ее поведение (увеличение – уменьшение) при изменении параметров работы плазматрона и устройства ввода порошка. Мы решили (как большинство исследователей) измерять эффективную температуру плазмы по относительной интенсивности спектральных линий согласно известной формуле (3), заранее полагая, что величина измеренной эффективной температуры плазмы может отличаться от истинной локальной, которая и определяет величину интенсивности спектральной линии, но изменение измеренной эффективной температуры адекватно изменению истинной локальной температуры и влияет на величину интенсивности спектральной линии так же (повышает или понижает), как и изменение локальной тем-



пературы.

$$T = \frac{5040 \cdot (E_1 - E_2)}{\lg \left[\frac{(gA)_1}{(gA)_2} \right] - \lg \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) - \lg \left(\frac{I_1}{I_2} \right)}, \quad (3)$$

где I_1 и I_2 – интенсивности спектральных атомных линий двух длин волн λ_1 и λ_2 ; E_1 , A_1 , g_1 и E_2 , A_2 , g_2 – энергии возбуждения в эВ, вероятности переходов и статистические веса верхних уровней соответствующих линий. Атомные константы взяты из [26].

В работах по измерению эффективной температуры неоднократно отмечалось, что результаты измерения тем точнее, чем больше разница между потенциалами возбуждения линий, выбранных в пару. С учетом этого и выбирались линии для данной работы, представленные в табл. 1.

Таблица 1

Пары линий для измерения эффективной температуры

№	Элемент	Длина вол-ны, нм	A·g	Потенциал возб., эВ
1	Mn I	327,035	31200	8,04
	Mn I	322,476	226,8	3,85
2	Fe I	341,018	23500,00	7,05
	Fe I	339,698	125,00	4,61
3	Fe I	341,018	23500,00	7,05
	Fe I	341,726	23,40	4,64

Экспериментальная установка состояла из двухструйного дугового плазматрона ДДП -У-100, [2-4] спектрографа ДФС-8-3 с решеткой 1800 штр/мм и регистрацией на фотоэлектронную кассету производства ООО МОРС (г. Троицк). Факел плазмы проектировался 1:1 на входную щель спектрографа ДФС-8-3 с помощью однолинзовой системы ($F=150$). Дифракционная решетка 1800 штр/мм, обратная линейная дисперсия 2 А/мм.

Измерения температуры проводили при всевозможных комбинациях рабочих параметров ДДП. Расстояние между основаниями струй и расстояние между торцом трубки подачи порошковой пробы (внешний диаметр 2 мм) и местом слияния струй плазмы оставляли минимально возможным для данной конструкции плазматрона 15 мм и 13 мм соответственно. Варьировали расходы транспортирующего и плазмообразующего газа, рабочий ток, угол слияния струй плазмы, угол слияния струй плазмы. При этом значения варьируемых параметров устанавливали следующие: плазмообразующий газ – 2 - 5,5 с шагом 0,5 л/мин, транспортирующий газ – 0,5-3 с шагом 0,25 л/мин, ток – 70-90 с шагом 5А, угол слияния – 50-80 с шагом 5°.

Ниже (рис. 1 и 2) приведены результаты измерений температуры плазмы в пяти точках вдоль факела при разных углах между струями плазмы и разных расходах плазмообразующего и транспортирующего газа (рабочий ток – 80А). По причине трудоемкости и больших временных затрат этой работы, вычисления проводились только для четырех-пяти точек факела плазмы.

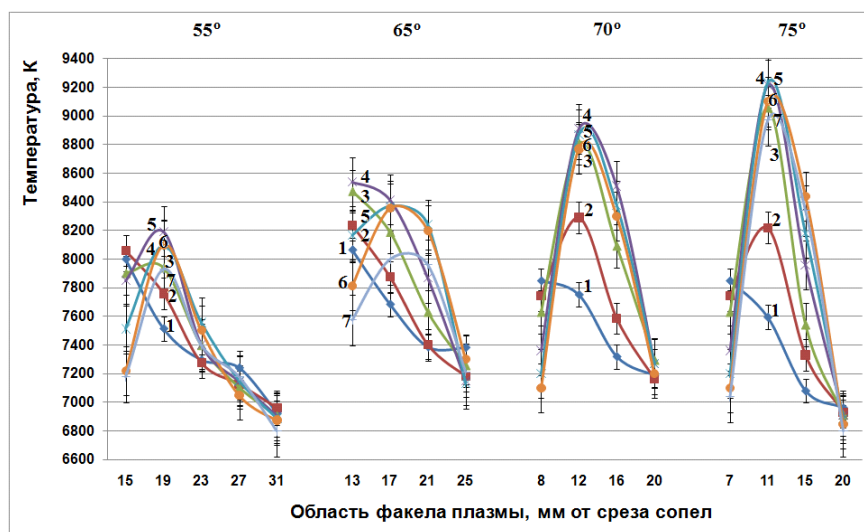


Рис. 1. Распределение эффективной температуры вдоль факела плазмы для разных углов слияния струй и при разных расходах транспортирующего газа (1 – 0,5 л/мин, 2 – 0,7 л/мин, 3 – 1 л/мин, 4 – 1,2 л/мин, 5 – 1,5 л/мин, 6 – 1,75 л/мин, 7 – 2 л/мин); расходе плазмообразующего газа – 5 л/мин; рабочий ток плазматрона – 80А.

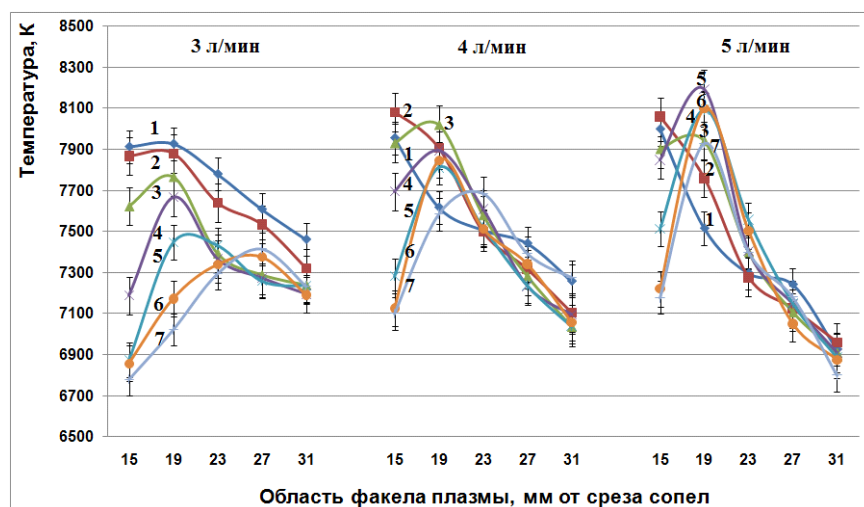


Рис. 2. Распределение эффективной температуры вдоль факела плазмы для разных расходов плазмообразующего газа (3 л/мин, 4 л/мин, 5 л/мин) и при разных расходах транспортирующего газа (1 – 0,5 л/мин, 2 – 0,7 л/мин, 3 – 1 л/мин, 4 – 1,2 л/мин, 5 – 1,5 л/мин, 6 – 1,75 л/мин, 7 – 2 л/мин); угол слияния струй – 75°; ток – 80А.

Из распределений видно, что положение максимума температур при повышении расхода транспортирующего газа перемещается вверх по факелу плазмы. При увеличении угла слияния струй величина температуры в максимуме распределения повышается (рис. 1). С увеличением расхода плазмообразующего газа (рис. 2) температура плазмы слабо зависит от расходов транспортирующего газа. При малых расходах плазмообразующего газа (2,5 – 3 л/мин) с увеличением расхода транспортирующего газа температура



снижается, но при увеличении расходов плазмообразующего и транспортирующего газа температура повышается.

Как видно из формул (1) и (2) наряду с температурой важным параметром источников света является концентрация электронов n_e . В первых работах по диагностике плазмы концентрация электронов была определена из уравнения Саха по измеренным значениям температуры (температуры возбуждения T_B) в предположении наличия в плазме локального термодинамического равновесия (ЛТР). Использование для определения концентрации электронов уравнения Саха и отношения интенсивностей ионных и атомных линий элементов анализируемой пробы дало результаты, значительно отличающиеся друг от друга ($2 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$ [20], $2 \cdot 10^{14} \text{см}^{-3}$ и $1 \cdot 10^{17} \text{см}^{-3}$ [21]) вследствие большой ошибки при переходе от измеренных отношений $I_{\text{ион}}/I_{\text{атом}}$ к вычисленным значениям n_i/n_a . Наиболее достоверными являются результаты работ [22-25], где n_e определялась по штарковскому уширению линий (как правило, H_β), которое не зависит от предположения о ЛТР в плазме. Пространственное распределение n_e изучалось в плазме ИСП [22-25]. Давая оценки условий возбуждения и влияния состава плазмы на интенсивность линий определяемых элементов, весьма существенен характер корреляции между изменениями температуры и электронной концентрации.

При проведении измерения электронной концентрации использовались разные пары линий, в результате чего замечена закономерность: для пар линий, у которых потенциал возбуждения атомной линии был меньше, чем ионной значения электронной концентрации получались ниже, чем для пар линий, у которых потенциал возбуждения атомной линии больше чем ионной (рис. 3).

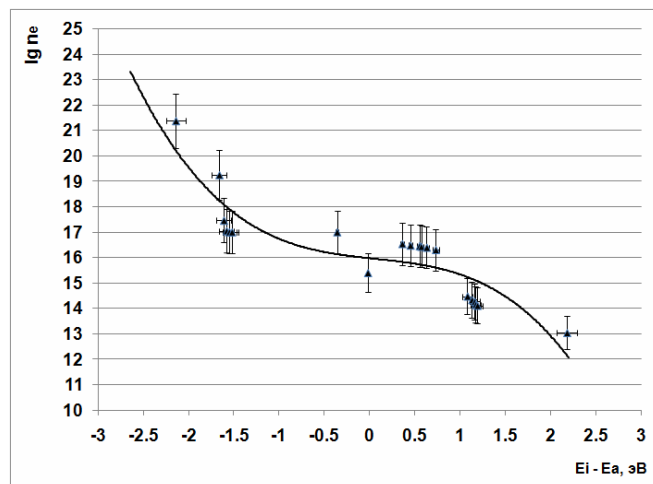


Рис. 3. Зависимость результата вычисления $\lg n_e$ от разности потенциалов возбуждения ионной и атомной линий

Исходя из выше изложенного, можно предположить, что чем ближе друг к другу значения потенциалов возбуждения атомной и ионной линий, тем меньше погрешность измерения электронной концентрации. Поэтому для измерения были выбраны соответствующие линии, представленные в табл. 2.



Таблица 2

Пары линий для измерения электронной концентрации

№	Элемент	Длина волны, нм	$A \cdot g$	Потенциал возбуждения, эВ	Потенциал ионизации, эВ
1	Fe II	330,347	122	4,85	7,87
	Fe I	341,726	23,4	4,64	
2	Fe II	349,347	2400	7,69	7,87
	Fe I	341,018	23500	7,05	
3	W II	333,903	11	5,76	7,98
	W I	331,138	28	6,12	
4	Mg II	279,079	16,04	8,86	7,64
	Mg I	278,142	200	7,78	

Вычисления проводились по формуле (4)

$$\lg n_e = -\lg \frac{I_i}{I_a} + \lg \frac{A_{qp}^{(i)} g_q^{(i)} \lambda_a}{A_{qp} g_q \lambda_i} - \frac{5040}{T} (U_i + \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_a) + 3/2 \lg T + 15,684, \quad (4)$$

где \mathcal{E}_i – потенциал возбуждения ионной линии, \mathcal{E}_a – потенциал возбуждения атомной линии, U_i – потенциал ионизации, T – температура, n_e – электронная концентрация, I_i и I_a – интенсивности ионной и атомной спектральных линий соответственно; λ , A_{qp} , g_q – длина волны, вероятность перехода, статистический вес верхних уровней соответствующих линий (1) и (2). Атомные константы взяты из [26]. Электронная концентрация измерялась при тех же рабочих режимах ДДП, что и температура, и в максимуме распределений по факелу составила $5 \cdot 10^{16}$ – $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ в зависимости от режима работы плазматрона. На рисунках 4 и 5 представлены распределения электронной концентрации вдоль факела плазмы при разных углах слияния струй, разных расходах плазмообразующего и транспортирующего газа, рабочий ток – 80 А. Из полученных распределений электронной концентрации вдоль факела плазмы можно отметить уменьшение ее максимума при увеличении угла слияния струй. При увеличении угла слияния струй и увеличении расхода плазмообразующего газа степень зависимости электронной концентрации от расхода транспортирующего газа ослабевает. При увеличении расхода транспортирующего газа максимум распределения электронной концентрации растет и при углах слияния струй 50° – 65° принимает наибольшее значение при расходах плазмообразующего газа 3,5 – 4 л/мин, при углах 65° – 80° убывает с увеличением плазмообразующего газа.

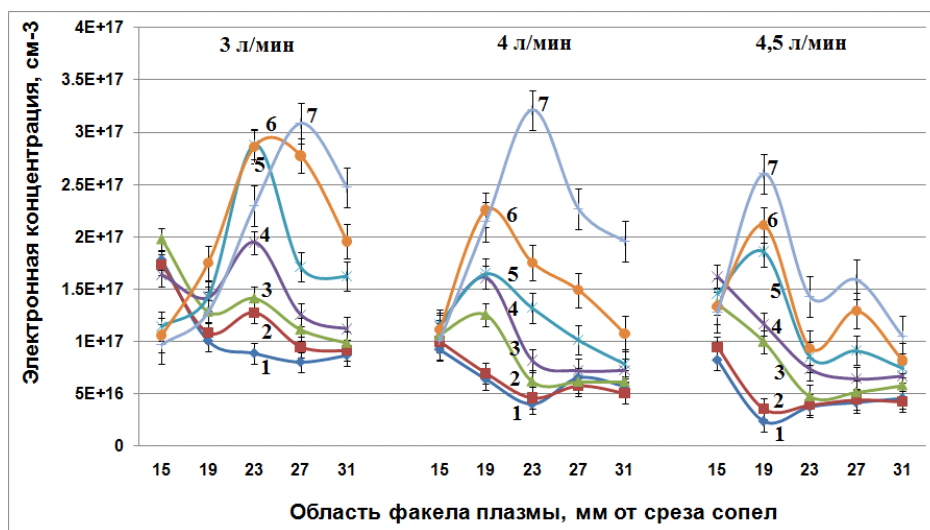


Рис. 4. Распределение электронной концентрации вдоль факела плазмы для разных расходов плазмообразующего газа и при разных расходах транспортирующего газа (1 – 0,5 л/мин, 2 – 0,7 л/мин, 3 – 1 л/мин, 4 – 1,2 л/мин, 5 – 1,5 л/мин, 6 – 1,75 л/мин, 7 – 2 л/мин); при угле слияния струй – 55° ; ток – 90А.

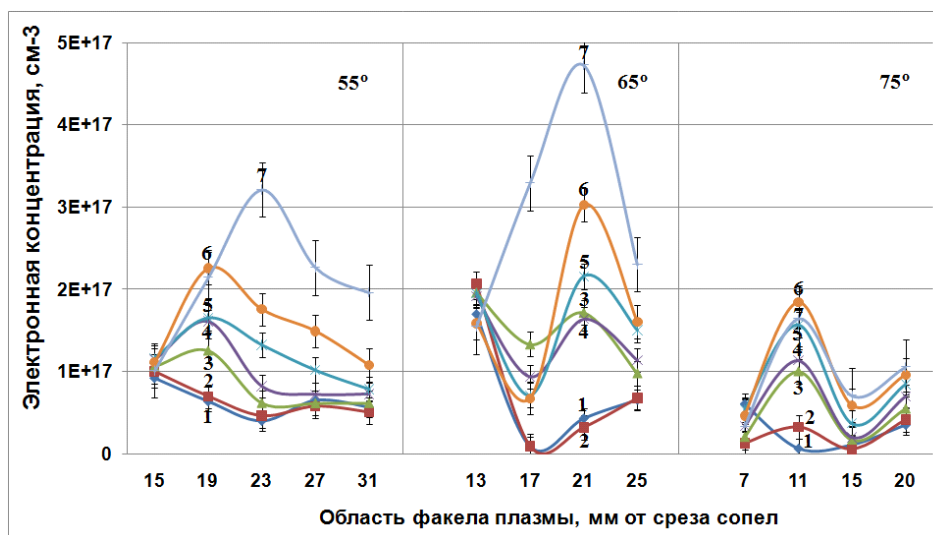


Рис. 5. Распределение электронной концентрации вдоль факела плазмы для разных углов слияния струй и при разных расходах транспортирующего газа (1 – 0,5 л/мин, 2 – 0,7 л/мин, 3 – 1 л/мин, 4 – 1,2 л/мин, 5 – 1,5 л/мин, 6 – 1,75 л/мин, 7 – 2 л/мин); при расходе плазмообразующего газа – 4 л/мин; ток – 90А.

Нами исследовано влияние присутствия легкоионизируемой примеси в плазме на концентрацию электронов. Измерения проводились в двух областях аналитической зоны плазмы – до слияния струй и после. На рис. 6 представлены результаты.

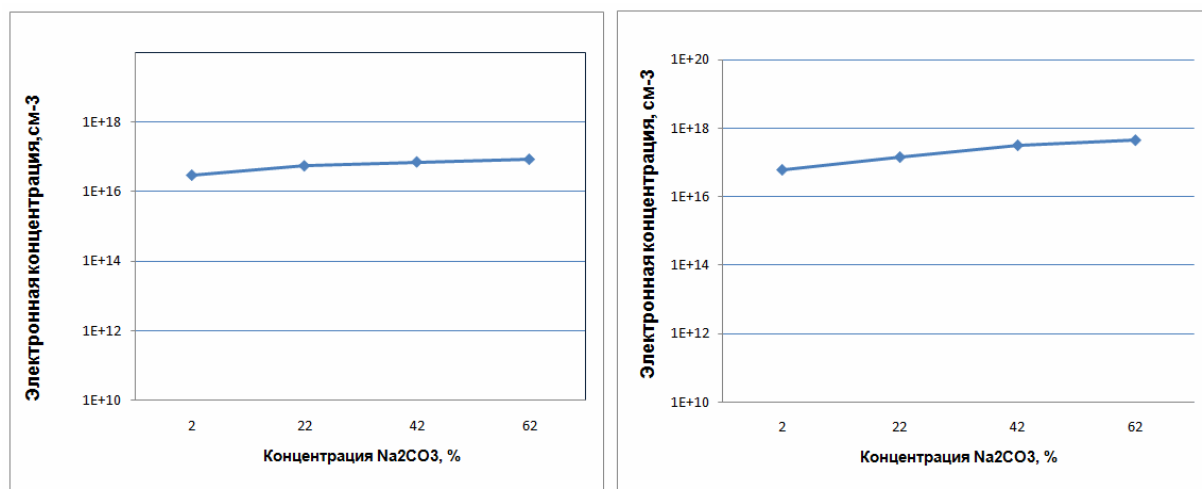


Рис. 6. Зависимость электронной концентрации от величины легкоионизируемой примеси в области факела – до слияния струй и после слияния струй соответственно

Из полученных экспериментально кривых (рис. 6) видна слабая зависимость электронной концентрации от величины легкоионизируемой примеси в плазме двухструйного дугового плазматрона.

Подставляя в формулу (1) значения температуры и электронной концентрации полученные экспериментально мы вычислили соответствующую этим значениям относительную интенсивность атомной линии в условных единицах (рис. 7 прав.) и сравнили с экспериментальными кривыми распределения линии вольфрама (рис. 7 лев.) при разных расходах транспортирующего газа – 0,7 и 1,75 л/мин.

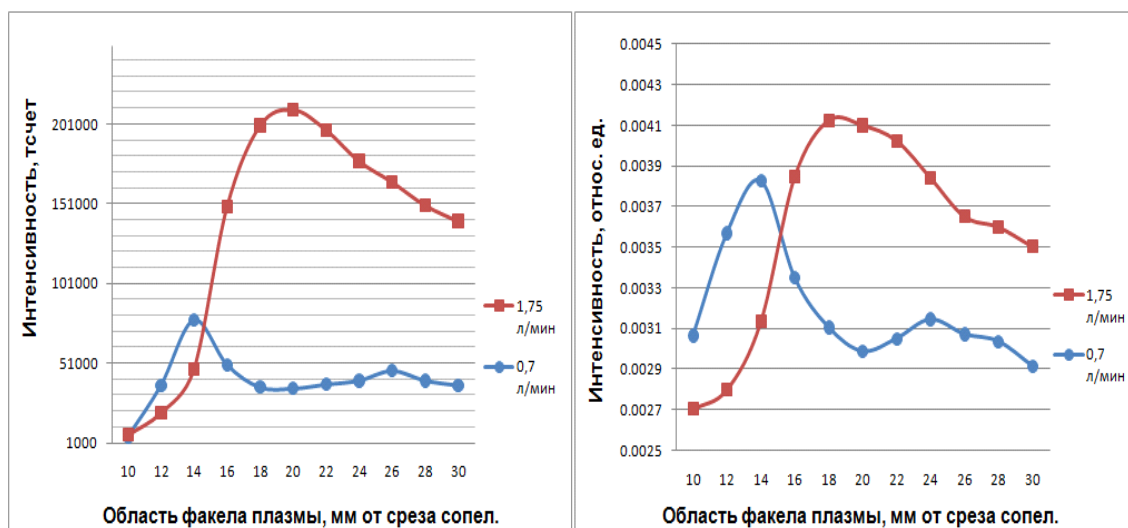


Рис. 7. Распределение экспериментальной (слева) и рассчитанной (справа) относительной интенсивности атомной линии вольфрама вдоль факела плазмы при разных расходах транспортирующего газа (расход плазмообразующего газа – 3 л/мин, угол слияния – 60 градусов, рабочий ток – 80А).



На рис. 7 видно, что распределения вдоль факела расчетной и экспериментальной интенсивности совпадают. Это говорит о разумности полученных оценок значений температуры и электронной концентрации в настоящей работе.

Литература

1. Жеенбаев Ж., Энгельшт В.С. Двухструйный плазматрон // Фрунзе: Илим, 1983. – 200 с.
2. Тагильцев А.П., Тагильцева Е.А. Автоматический запуск двухструйного дугового плазматрона // Заводская лаборатория. – 2009. – 3. – С.23-25.
3. Тагильцев А.П., Тагильцева Е.А. Устройство подачи порошковых проб при спектральном анализе на двухструйном дуговом плазматроне // Заводская лаборатория. – 2009. – 6. – С.22-26.
4. Тагильцев А.П. Спектральные и химико-спектральные методы анализа проб сложного состава с использованием двухструйного дугового плазматрона. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Новосибирск, 1986.
5. Заякина С.Б., Засыпкин И.М., Аношин Г.М. Параметры плазмы двухструйного дугового плазматрона, применяемого для прямого атомно-эмиссионного спектрального анализа твердых дисперсных геологических образцов // IV междунар. симп. по теоретической и прикладной плазмохимии, сб. трудов Т.2. / Иваново, 2005. – С.543-547.
6. Черевко А.С., Юделевич И.Г., Попова В.П., Тагильцев А.П. Атомно-эмиссионный спектральный анализ порошков с использованием дугового двухструйного плазматрона // ЖАХ. – 1988. – XLIV;3. – С.426-433.
7. Чылымов А. Некоторые аналитические характеристики двухструйного плазматрона и применение его для спектрального анализа порошков / Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Фрунзе, 1985.
8. Заксас Н.П. Новые аналитические возможности двухструйного дугового плазматрона / Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Новосибирск, 2002.
9. Таштанов Р.А., Урманбетов К., Жеенбаев Ж.Ж. Оптимизация параметров усовершенствованного двухструйного плазматрона для анализа порошковых проб // ЖАХ. – 2006. – 61;6. – С.625-631.
10. Заякина С.Б. Двухструйный дуговой плазматрон в атомно-эмиссионном анализе геологических проб и дисперсных технологических материалов / Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук / Москва, 2009.
11. Зильберштейн Х.И. Спектральный анализ чистых веществ / С.-Петербург: Химия, 1994.
12. Keirs C.D., Vickers T.J. d.c. Plasma Arcs for Elemental Analysis // Appl.Spectroscopy. – 1977. – 31;4. – P.273-283.
13. Merchant P., Veillon C. Characterization of a d.c. arc Plasma jet in argon as an atomization and excitation source for atomic spectroscopy // Analytica Chimica Acta. – 1974. – 70. – P.17-24.
14. Kranz E. Die anwendung eines Plasmastrahls fur spektroskopische Temperaturbestimmungen und zur Analyse von Losungen und Pulvern // XIV Colloquium Spectroscopicum Internationale, Debrecen, Hungary, 1967/ P.697-708.
15. Skogerboe R.U., Urasa I. I., Coleman G.N. Characterization of a dc Plasma as an Excitation Source for Multielement Analysis // Appl. Spectroscopy. – 1976. – 30;5. – P.500-504.
16. Конавко Р.И., Энгельшт В.С., Буранчиев Д., Жеенбаев Ж. и др. Двухструйный плазматрон // Всесоюзн. конф. по генераторам низкотемпературной плазмы / Фрунзе: ИЛИМ, 1974. – С.155-158.
17. Golightly D.W. and Harris J.L. Spectrographic Analysis of Geological Materials with an Argon Plasma Jet // Appl. Spectroscopy. – 1975. – 29. – P.233-240.
18. Черевко А.С., Пикалов В.В., Тагильцев А.П., Юделевич И.Г., Энгельшт В.С., Жеенбаев Ж. Изучение температурного поля плазменной струи двухструйного плазматрона // ЖПС. – 1983. – 36;3. – С.497-499.



19. Черевко А.С., Пикалов В.В., Тагильцев А.П., Юделевич И.Г., Энгельшт В.С., Жеенбаев Ж. Зависимость температуры плазменной струи двухструйного плазматрона от потенциала ионизации запыляющего плазму вещества // Изв. СО АН СССР, Серия хим. науки. – 1983. – 6. – С.80-85.
20. Mermet J. M. Comparaison des temperatures et des densites electroniques mesurees sur la gaz plasmagene et sur des elements excites dans un plasma n. f. // Spectrochim. Acta. – 1975. – 30 В;10/11. – P.383-396.
21. Galan L. de Some consideration on the excitation mechanism in the inductively coupled plasma // Spectrochim. Acta. – 1984. – 39 В;4. – P.537-550.
22. Kalnicky D.J., Fassel U.A., Knisely R.N. Excitation temperatures and electron number densities experienced by analyte species in inductively-coupled plasmas with presence of an easily ionized element // Appl. Spectroscopy. – 1977. – 31;2. – P.137-150.
23. Гольдфарб В.М., Дресвин С.В. Оптическое исследование распределения температуры и электронной концентрации в аргонной плазме // Теплофизика высоких температур. – 1965. – 3;3. – С.333-339.
24. Герасимов Г.Н., Карташева М.А., Петров С.Я. Спектроскопическое исследование индуктивно-связанной плазмы // XIX Всесоюзный съезд по спектроскопии: тез. Докладов, Томск, 1983 / 4.5. – С.125-127.
25. Герасимов Г.Н., Егорова Л.В., Карташева М.А., Петров С.Я. Спектроскопическая диагностика индуктивно-связанной плазмы // Теплофизика высоких температур. – 1986. – 24;4. – С.825-827.
26. <http://www.physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>

INFLUENCE OF TWO-JET ARC PLASMATRON MODE ON TEMPERATURE AND ELECTRON DENSITY OF PLASMA

E.A. Tagiltseva

V.I. Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry, Russian Academy of Sciences,
Kosygina St., 19, Moscow, 119991, Russia, e-mail: tagiltseva_helen@mail.ru

Abstract. The effect of various combinations of parameter values that determine two-jet arc plasmatron's mode on plasma temperature and its electron density was studied. It was shown that substituting obtained values T and n_e into the formula of spectral line intensity one can determine the optimal operation mode for analytic excitation of element under study. It is shown weak dependence of electron density on concentration of easy ionizing impurities in plasma.

Keywords: two-jet arc plasmatron, plasma temperature, electron density in plasma, atomic emission spectral analysis.



УДК 539.1.074.6, 539.1.074.3

ГОДОСКОП СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ СЧЕТЧИКОВ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА ВЫВЕДЕННОМ ПУЧКЕ НУКЛОТРОНА ОИЯИ

*,** А.А. Терехин, *В.П. Ладыгин, **И.Е. Внуков, **С.М. Пиядин,
**С.Г. Резников, **А.Н. Хренов

*Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: aterekhin@jinr.ru

**Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри, 6, Дубна, 141980, Россия

Аннотация. В статье представлено описание 8-канального годоскопа сцинтилляционных детекторов, предназначенного для эксперимента на выведенном пучке Нуклотрона ОИЯИ. Приведены результаты тестирования годоскопов на космических мюонах, радиоактивном источнике ^{106}Ru и на выведенных пучках ядер дейтерия и углерода Нуклотрона.

Ключевые слова: годоскоп, сцинтилляционный детектор, радиоактивный источник, дейтерий.

Введение

Создание годоскопов сцинтилляционных счетчиков является одним из этапов осуществления экспериментальной программы проекта Deuteron Spin Structure (DSS) [1], направленной на изучение поляризационных характеристик легких ядер. В частности, задачей этого проекта является проведение эксперимента по измерению дифференциального сечения, тензорной анализирующей способности T_{20} и коэффициента спиновой корреляции $C_{y,y}$ реакции $^3\text{He}(d,p)^4\text{He}$ с использованием поляризованного дейтронного пучка Нуклотрона и поляризованной ^3He мишени [2], разработанной в CNS (Япония). Результаты экспериментов, выполненных в RIKEN при энергиях 140, 200 и 270 МэВ показали, что измерение коэффициента корреляции $C_{//}$ в реакции $^3\text{He}(d,p)^4\text{He}$ является уникальным способом изучения поведения D-состояния в дейтроне [3]. Цель эксперимента на Нуклотроне состоит в том, чтобы получить данные по $C_{//}$ в области энергий дейтрона $T = 1,0\text{--}2,0$ ГэВ, где вклад от D-состояния дейтрона достигает максимума. Эти данные помогут понять спиновую структуру дейтрона на малых относительных расстояниях между составляющими его нуклонами, а также вклад ненуклонных степеней свободы.

Неотъемлемой частью в реализации данного эксперимента является надежная идентификация вторичных частиц, для чего будет использована техника измерения времени пролета. Процесс идентификации вторичных частиц заключается в восстановлении массы детектируемых частиц по известным значениям импульса и времени пролета. Импульс детектируемых частиц будет в диапазоне 1,5–2,5 ГэВ/с.



В рамках DSS-проекта для триггерной и время-пролетной систем изготовлены и протестированы два годоскопа, каждый из которых состоит из восьми сцинтилляционных счетчиков на базе ФЭУ-85. В качестве предварительного этапа были исследованы свойства прототипа элемента годоскопа [4,5], получены амплитудные и временные характеристики используемого сцинтиллятора.

1. Годоскоп сцинтилляционных детекторов

Детектирующая система установки по изучению структуры легких ядер на выведенном пучке ускорителя Нуклотрон (ОИЯИ) будет включать в себя отклоняющий магнит, дрейфовые камеры и время-пролетную систему, состоящую из триггерных счетчиков и годоскопов сцинтилляционных счетчиков. Идентификация частиц будет осуществляться путем измерения их времени пролета.

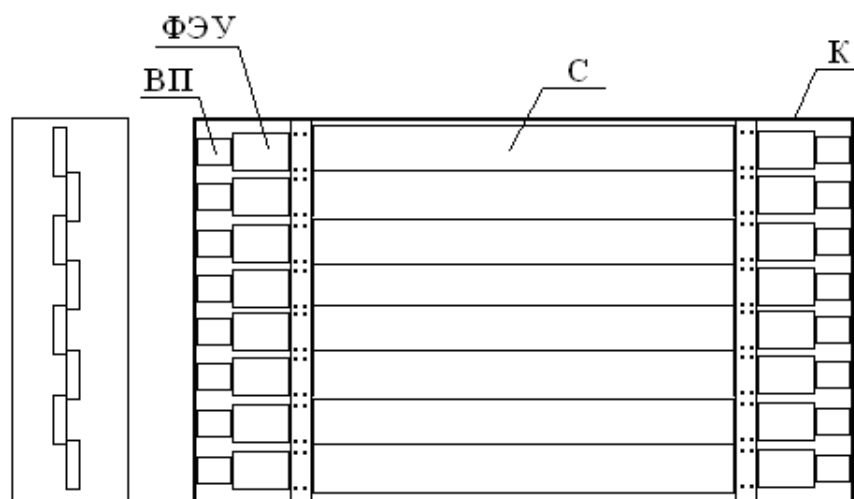


Рис. 1. Схематический вид сцинтилляционного годоскопа. Расположение сцинтилляционных пластин по пучку показано слева. Размещение элементов годоскопа в металлическом корпусе К показано справа. С – сцинтилляционная пластина, ФЭУ – фотоумножители, ВП – ячейки высоковольтного питания.

Каждый годоскоп (рис. 1) представляет собой набор из восьми отдельных счетчиков с размерами сцинтиллятора $400 \times 40 \times 4 \text{ мм}^3$, размещенных в металлическом корпусе. Сцинтиллятор плотно обернут слоем металлизированного майлара и черной светонепроницаемой бумагой для исключения попадания света, которое может привести к появлению фоновых событий. Каждый сцинтиллятор просматривается с обеих торцов фотоумножителями ФЭУ-85. Высоковольтное питание подается и управляется посредством системной шины через цифровые высоковольтные ячейки от источника HVS SM 512 (High Voltage System system module) [6]. Элементы годоскопа расположены с перекрытием в 1 мм для уменьшения геометрической неэффективности детектора. Сигнальные кабели от всех ФЭУ заведены на вход 16-ти канального модуля время-цифровых преобразователей с амплитудной коррекцией и триггерной логикой (TQDC-16) [7]. Для сбора данных будет использоваться VME (VersaModule Eurocard) система.



Изготовлению годоскопов предшествовало исследование свойств используемого сцинтиллятора с помощью прототипа одного из элементов [5,6], которое заключалось в получении временных и амплитудных характеристик с использованием радиоактивного источника ^{106}Ru и космических мюонов.

2. Результаты тестирования годоскопа на космических лучах и радиоактивном источнике ^{106}Ru

При тестировании на космических лучах и радиоактивном источнике годоскопы располагались один над другим горизонтально под углом 90° друг относительно друга. На рис. 2 представлено распределение событий по элементам одного из годоскопов, на поверхности которого находился радиоактивный источник. По доле событий, приходящейся на каждый элемент, можно определить координатное положение источника. Перекрестное расположение годоскопов позволяет определить координатное положение пучка.

На рис. 3 представлено распределение событий по всей площади, перекрываемой годоскопами при тестировании на космических лучах. По краям годоскопа заметно снижение эффективности регистрации частиц, связанное с поглощением слабого светового сигнала в сцинтилляторе. Такое снижение эффективности характерно только для слабого мюонного сигнала, а для высокоэнергетических частиц при данной длине сцинтиллятора им можно пренебречь.

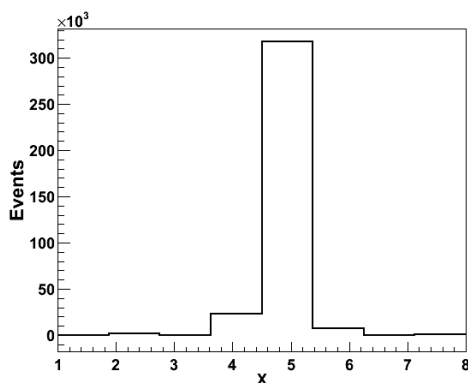


Рис. 2. Распределение числа событий в зависимости от номера элемента годоскопа при облучении радиоактивным источником ^{106}Ru .

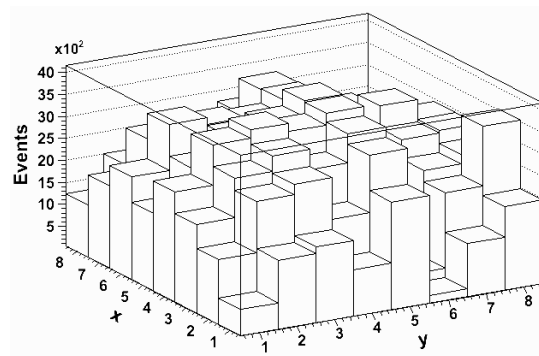


Рис. 3. Распределение событий в X-Y плоскостях при измерении на космическом излучении.

Из анализа временных распределений было получено значение эффективной скорости распространения света в сцинтилляторе. Зависимость разницы времен прихода сигнала от длины сцинтиллятора для одного счетчика в отдельности и для всей плоскости годоскопа показана на Рис. 4 и Рис.5 соответственно. Значение v_{eff} определялось из параметра наклона аппроксимирующей линии, как средне взвешенное по всем элементам для обоих годоскопов, и составило: $v_{eff} = 4.0 \pm 0.2$ см/нс.

Временное разрешение элемента годоскопа $\sigma \approx 1.7$ нс оценивалось с использованием стартового счетчика на базе ФЭУ XR2020.

4. Результаты тестирования на выведенном пучке нуклотрона

Тестовые измерения проводились на выведенных пучках ядер углерода ^{12}C с энергией 3.42 ГэВ/н и дейтерия с энергией 4 ГэВ/н. Ускоренные пучки выводились в зону 6В, расположенную на расстоянии 110 м от кольца Нуклотрона. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 6. Она включает дуплет квадрупольных линз QL, обеспечивающих фокусировку пучка, отклоняющие магниты М1-М3, ионизационную камеру IC, триггерные счетчики S1 и S2 на базе ФЭУ ХР 2020 и ФЭУ-87, два годоскопа сцинтилляционных детекторов Н, повернутых относительно друг друга на 90° .

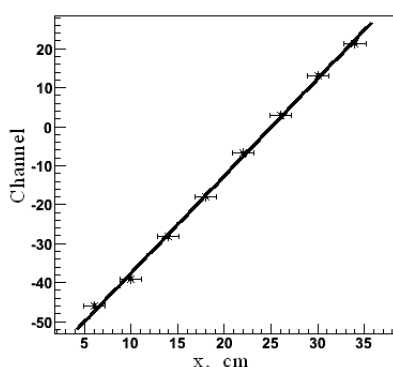


Рис. 4. Распределение разности времен прихода сигнала для отдельного элемента. Линия – результат аппроксимации данных функцией вида $f(x) = a * x + b$.

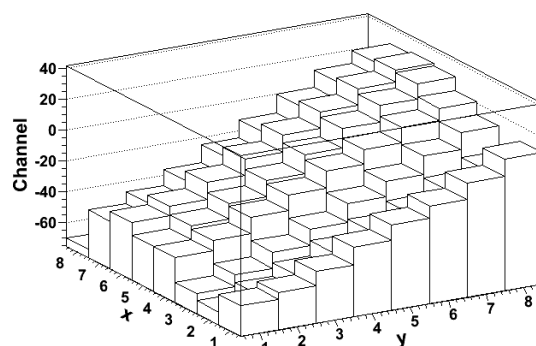


Рис. 5. Распределение разности времен прихода сигналов с обеих ФЭУ для каждого элемента одного из годоскопов.

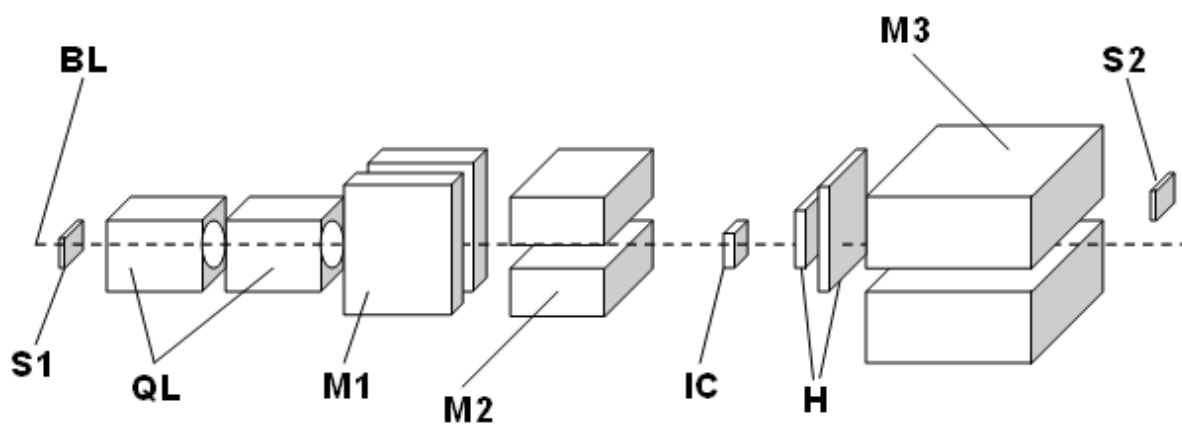


Рис. 6. BL – траектория пучка, S1-S2 – триггерные счетчики, QL – дуплет квадрупольных линз, М1-М3 – отклоняющие магниты, IC – ионизационная камера, Н – сцинтилляционные годоскопы.

По корреляции амплитуд сигналов с каждого ФЭУ для отдельного счетчика годоскопа (Рис. 7) можно различить пучок ядер углерода ^{12}C и фоновые однозарядные частицы. Фоновые события исключались путем наложения ограничительного условия

на величину восстановленной амплитуды. На Рис. 8 представлены координатные корреляции в горизонтальной (X) и вертикальной (Y) плоскостях для ядер углерода. Видно, что в Y-плоскости профиль пучка более широкий, чем в X-плоскости.

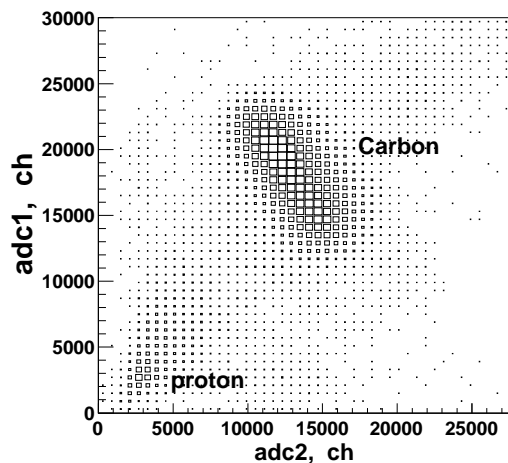


Рис. 7. Корреляция амплитуд для одного элемента сцинтилляционного годоскопа.

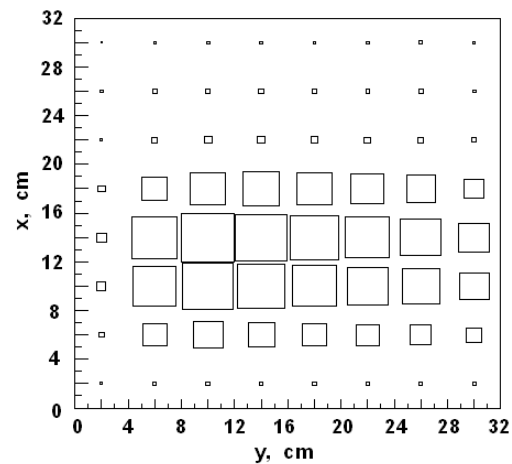


Рис. 8. Двумерный координатный профиль пучка ядер углерода ^{12}C .

В ходе эксперимента были получены профили пучка ^{12}C и однозарядных частиц в горизонтальной и вертикальной плоскостях (рис. 9). Открытые гистограммы соответствуют пучку ядер ^{12}C , заполненные – однозарядным частицам.

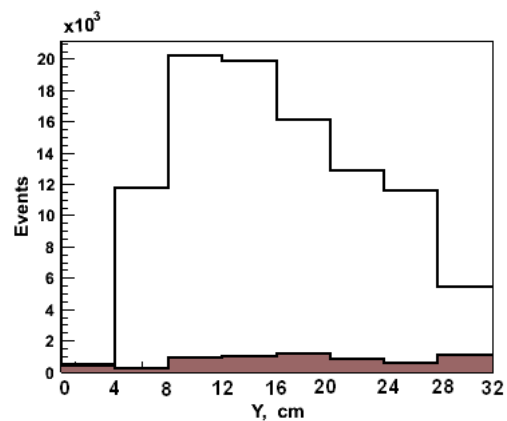
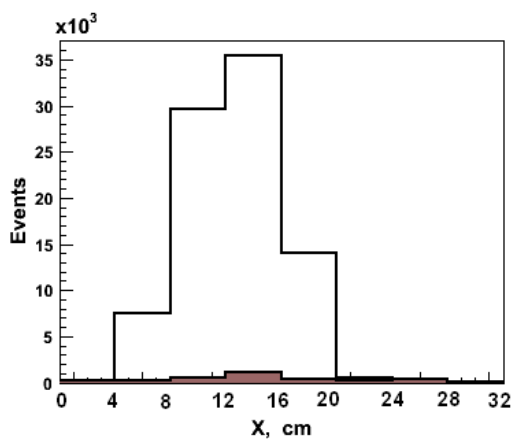


Рис. 9. Распределение углеродного пучка энергией 3.42 ГэВ/н в горизонтальной (слева) и вертикальной (справа) плоскостях. Открытые гистограммы соответствуют пучку ядер ^{12}C , заполненные – однозарядным частицам.

Из анализа временных распределений была определена скорость распространения светового сигнала в сцинтиляторе, которая составляет $v_{eff} = 4.1 \pm 0.3$ см/нс, что хорошо совпадает с результатами, полученными на космических лучах. Для определения величины v_{eff} использовались счетчики, на которые приходилась основная часть пучка.



Включение квадрупольных линз при тестировании годоскопов на пучке дейтронов позволило существенно улучшить поперечные размеры пучка (рис. 10). На рис. 11 представлена корреляция амплитуд для одного из детекторов годоскопа. Положение корреляционного пятна соответствует положению пучка однозарядных частиц в случае измерений на пучке углерода ^{12}C . Пространственное распределение пучка в горизонтальном и вертикальном направлениях показано на рис. 12.

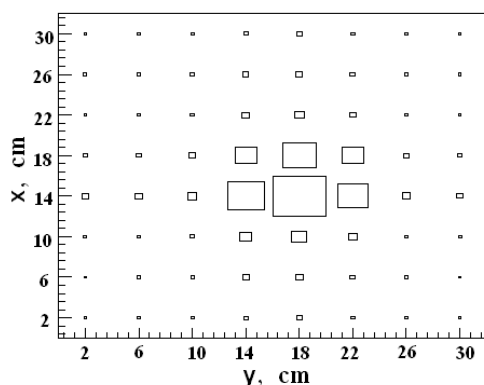


Рис. 10. Двумерный координатный профиль пучка дейтронов.

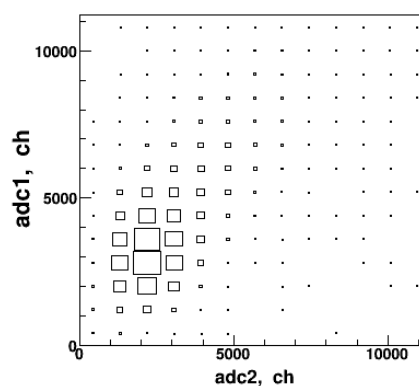


Рис. 11. Корреляция амплитуд для одного элемента сцинтилляционного годоскопа для пучка дейтронов.

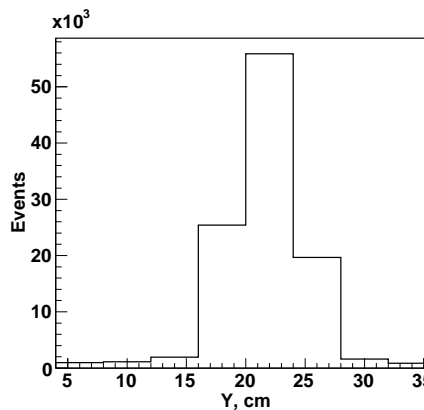
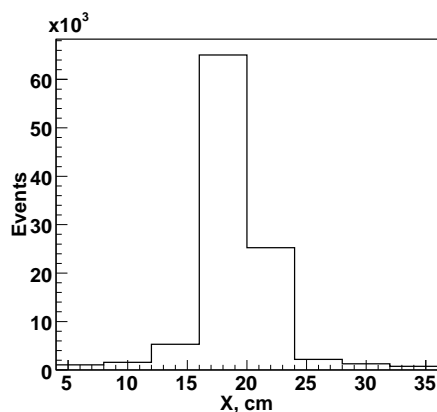


Рис. 12. Распределение дейтронного пучка энергией 1 ГэВ/н в горизонтальной (слева) и вертикальной (справа) плоскостях.

5. Заключение

Изготовлены два 8-ми канальных годоскопа сцинтилляционных счетчиков для эксперимента по исследованию структуры легких ядер на выведенном пучке Нуклотрона.

Получены результаты тестирования годоскопов с помощью радиоактивного источника, космических мюонов. Проведены измерения на экспериментальной установке в зоне 6В корпуса 205 ЛФВЭ ОИЯИ по настройке канала вывода пучков ядер углерода и дейтронов с включением годоскопов в триггерную систему.



Авторы выражают благодарность Рукояткину П.А., Исупову А.Ю., Курилкину П.К., Курилкину А.К, Гурчину Ю.В., Васильеву Т.А. за совместную работу по подготовке и проведению эксперимента.

Работа поддержана грантом для молодых ученых БелГУ и грантом РФФИ №10-02-00087а

Литература

1. Ladygin V.P. et al. Short-range correlation studies in collisions of polarized nuclei at Nuclotron-M / EPJ Web of Conferences. 2010. Vol. 3. 04004.
2. Uesaka T. et al. // Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res. A. – 1998. – 402. – P.212.
3. Uesaka T. et al. // Phys.Lett.B. – 2002. – 533. – P.1.
4. Терехин А.А., Внуков И.Е. и др. Развитие время-пролетной системы для экспериментов по исследованию структуры легких ядер на Нуклотроне-М // Научные ведомости БелГУ, Сер. Математика. Физика. – 2009. – 1. – С.124-131.
5. Терехин А.А. и др. Время-пролетная система для экспериментов по исследованию структуры легких ядер на Нуклотроне-М / XIV конференция молодых ученых и специалистов, Дубна, ОИЯИ, (Февраль, 1-6, 2010) / С.159-162.
6. <http://sunhe.jinr.ru/struct/trd/hv.html> // <http://www.hvsys.dubna.ru>
7. <http://ccpc4.jinr.ru/tqdc-16/>, <http://afi.jinr.ru/TQDC-16>

HODOSCOPE OF SCINTILLATOR COUNTERS FOR EXPERIMENTS WITH EXTRACTED BEAM OF NUCLOTRON JINR

***A.A. Terekhin, *V.P. Ladygin, **I.E. Vnukov, **S.M. Piyadin,
**S.G. Reznikov, **A.N. Hrenov

*Belgorod State University,
Studencheskaya St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail: aterekhin@jinr.ru

**Joint Institute of Nuclear Researches,
Zholtov-Khuri St., 6, Dubna, 141980, Russia

Abstract. The 8-channel hodoscope for experiments at the extracted beam at Nuclotron JINR is presented. Testing results using cosmic muons, ^{106}Ru radioactive source and extracted deuteron and carbon beams at Nuclotron are given.

Key words: hodoscope, scintillator counter, radioactive source, deuteron.



ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ

Журнал «Научные ведомости БелГУ. Серия: Математика, Физика» выходит четыре раза в год. Два выпуска журнала посвящены чисто математическим работам и два – работам по физике и прикладной математике.

Редколлегия журнала принимает от авторов рукописи статей, написанные на русском или на английском языках, по различным разделам математики и физики. Содержание статей может содержать как результаты оригинальных исследований автора(ов), так и представлять собой обзор по выбранной автором(ами) теме.

Статья должна быть написана с достаточной степенью подробности и с таким расчетом, чтобы быть понятной не только узким специалистам по выбранному автором(ами) направлению исследований, но более широкому кругу математиков и(или) физиков. Ни в коем случае рукопись не должна представлять собой краткий отчет о проведенных исследованиях, написанный в виде краткого сообщения, не содержащий описания постановки задачи (условий проведения эксперимента, если это экспериментальная работа по физике). В связи с этим, рукопись должна быть структурирована — разделена на разделы, представляющие отдельные смысловые единицы текста. В любом случае, рукопись должна содержать введение и заключение. Разделы должны быть пронумерованы и иметь заголовки.

Во введении должны быть описаны: проблема, которой посвящена рукопись, определено место этой проблемы в общем объёме физико-математического знания, представлены краткая история вопроса и полученный автором(ами) результат. В заключении работы должна быть дана характеристика полученного результата с указанием его значения для дальнейшего развития темы исследования.

Те же самые требования к введению и заключению предъявляются и для обзорной статьи, с той лишь разницей, что их содержание должно быть посвящено описанию всей совокупности результатов, отражающих состояние выбранной автором области исследований, и сам текст должен быть написан с большей степенью подробности.

Возможна также публикация статьи, носящей методический характер. Но в этом случае решение о возможности публикации такой рукописи принимается редколлегией отдельно.

Рукопись должна быть оформлена в соответствии с традициями написания, соответственно, математических и физических текстов. В частности, в математических текстах должны быть четко выделены такие структурные единицы, как формулировки определений, теорем и лемм, следствий и замечаний, отмечены начала и окончания доказательств.

Полный объём рукописи, которая представляет собой оригинальное исследование, не должен превышать 20 страниц формата А4. Она должна быть написана шрифтом 12pt через два интервала. Объём обзорной статьи необходимо заранее оговорить с редколлегией журнала.

После подготовки одним из членов редколлегии заключения о соответствии рукописи нормам журнала «Научные ведомости» она рассматривается на общем собрании редколлегии. В отдельных случаях редколлегией может быть принято решение о более тщательном изучении рукописи внешним (не входящим в состав редколлегии журнала) рецензентом. Редколлегия оставляет за собой право на мелкие стилистические исправления текста рукописи после принятия решения о её публикации.

В редакцию присылается следующая информация:

1) основная содержательная часть статьи, представляемая на русском или английском языках. При этом название статьи должно состоять не более чем из 20 слов.



- 2) номер УДК того научного направления, которому посвящена статья;
- 3) список авторов с указанием порядка их размещения при публикации статьи;
- 4) аннотация на русском языке; её объём не должен превышать 10-12 строк, написанных шрифтом 12pt;
- 5) список ключевых слов (не более 10-12);
- 6) текст перевода заголовка статьи, аннотации и ключевых слов на английском языке;
- 7) список литературных источников, на которые имеются ссылки в тексте рукописи;
- 8) данные об авторах статьи с указанием места их работы, точного почтового адреса предприятия и занимаемой должности. Должны быть указаны адреса электронной почты. Эти данные необходимо представить также на английском языке. Кроме того, должна быть дана латинская транскрипция фамилий авторов. Соответственно, для статей на английском языке должна быть дана транскрипция фамилий авторов кириллицей;
- 9) списка подписей к рисункам, если они имеются в рукописи.

Порядок оформления этой информации в электронном файле указан в приложении в конце настоящих правил (см. п.5) требований к электронному набору).

В редакцию присылается электронный файл работы. Он должен быть подготовлен в редакторе LaTeX (LaTeX2e, AMSLaTeX). **Файлы, приготовленные в другом редакторе, рассматриваться редколлегией не будут.** При этом нужно присылать файл работы с расширением «tex» и pdf-копию файла с расширением «dvi» работы, для того, чтобы редакция имела возможность сравнения его с авторским оригиналом при редактировании и верстке журнала. Присылать сам dvi-файл при этом не нужно.

Особые требования к электронному набору в редакторе LaTeX (LaTeX, AMS LaTeX) следующие.

- 1) Нельзя использовать вводимые авторами новые нестандартные команды.
- 2) «Выключные» формулы должны быть пронумерованы в порядке их появления в рукописи в том случае, если на них есть ссылки в тексте. При использовании режима equation для набора выключных формул обязательно употребление для их нумерации соответствующих номеров формул в тексте. Допускается применение для меток формул цифр, снабженных штрихами (или цифр совместно с буквами латинского алфавита). Однако этим нужно пользоваться только в случае крайней необходимости с целью более точной передачи смысла текста.
- 3) В случае, если в статье имеются разделы в виде *приложений* в конце основного текста работы, нумерация содержащихся в них выключных формул может быть независимой от нумерации основного текста. При этом в приложениях рекомендуется употребление двойной нумерации, в которой первый символ может быть прописной буквой или номером приложения. Каждый из разделов-приложений начинается словом ПРИЛОЖЕНИЕ с порядковым номером этого приложения. Это слово должно быть выровнено по правому полю страницы. Затем следует заголовок этого приложения.
- 4) Литературные источники в ссылках на основе команд cite (или непосредственно) в электронном тексте рукописи нужно обозначать цифрами, соответствующими их порядковому номеру появления в тексте, и ни в коем случае не использовать метки другого типа.
- 5) Ниже прилагается шаблон, согласно которому должен оформляться файл статьи. Для авторов **следование этому шаблону обязательно.**



Шаблон для приготовления файла с рукописью

```

\setcounter{figure}{0}
\setcounter{equation}{0}
УДК XXX
\vskip 0.3cm

\begin{center}
{\bf НАЗВАНИЕ СТАТЬИ}
\medskip
{\bf И.О. Автор1, И.О. Автор2, ... }
\medskip
{\small {\sf Учреждение, \\
ул. Название улицы (пр. Название проспекта, пл. Название площади и т.д.),
Номер дома, Город, Индекс, Страна, e-mail: $\underline{\mbox{имя@адрес}}$}}
\end{center}

{\small {\bf Аннотация.} Текст аннотации.}
\medskip
{\bf Ключевые слова:} слово1, слово2, ... \ .}
\vskip 1 cm

Текст статьи
\vskip 1 cm

\renewcommand\baselinestretch{0.6}

{\small
\centerline{{\bf Литература}}}

\begin{enumerate}
\bibitem{1} Источник 1
\bibitem{2} Источник 2
...
\end{enumerate}
\vskip 0.5cm

\begin{center}
{\bf TITLE 1st line\vskip 0.1cm

2d line \vskip 0.1cm and so on }
\medskip

```



```

{\bf N.N. Author1, N.N. Author2, ...}
\medskip
{\small {\sf Enterprize,\\
Street St. (Avenue Av., Square Sq. and so on), Number, City, Index, Country,
e-mail: $\underline{\mbox{name@address}}$}}
\end{center}

{\small {\bf Abstract.} Text of abstract. {\bf Key words:} word1, word2, ...\
.}}
\newpage

\renewcommand\baselinestretch{1.0}

```

Автор1 -- учёная степень, должность на предприятии, страна
 Автор2 -- учёная степень, должность на предприятии, страна
 ...

Рисунки

Особое внимание при подготовке рукописи к печати должно быть уделено рисункам, если они имеются в тексте работы. Они должны быть качественно выполнены и представлены в редакцию в электронной форме в виде отдельных файлов в формате «ps». Файлы рисунков необходимо пронумеровать в соответствии со списком подписей к рисункам.

На представляемых в электронном формате рисунках **не следует** наносить те комментирующие их подписи, которые присылаются в редколлегию отдельным списком.

Внимание! В случае присылки в редакцию работы с некачественно выполненными рисунками, она **будет возвращена автору(ам) на доработку**.

Таблицы

Если в тексте работы есть таблицы, то их следует формировать на основе программы LaTeX и ни в коем случае не оформлять в виде рисунков.



Список литературных источников

Обращаем внимание авторов на требование к качественному оформлению списка используемых в работе литературных источников. В связи с тем, что требования, предъявляемые ГОСТом, при оформлении такого списка весьма сложны и ориентированы на решение задач, связанных с централизованным поиском и хранением научной информации, которые не специфичны для научно-исследовательской практики, в журнале используется собственная система его оформления. Типы литературных источников качественно довольно разнообразны. Поэтому редакция не предлагает универсальный рецепт их оформления. Единственным общим принципом, которым должен руководствоваться автор, состоит в том, литературная ссылка должна оформляться так, чтобы читатель имел максимально точную информацию о том, как найти и ознакомиться с научным результатом, на который опирается его работа.

Несмотря на отсутствие общего рецепта оформления списка, редакция требует соблюдение строгих правил оформления ссылок на литературные источники двух типов, которые являются наиболее распространенными. Это касается статей в регулярных периодических изданиях (в журналах) и книг (монографий и учебников). Принятые в журнале правила оформления литературных источников указанных двух типов демонстрируются следующими примерами:

Журнальные статьи –

Цегельник В.В. Гамильтонианы, ассоциированные с третьим и пятым уравнениями Пенлеве // Теоретическая и математическая физика. -- 2010. -- 162;1. -- С.69-74.

Demidov A.S., Kochurov A.S., Popov A.Yu. To the problem of the recovery of non-linearities in equations of mathematical physics // Journal of Mathematical Sciences. -- 2009. -- 163;1. -- P.46-77.

Книги (в частности, многотомные издания) –

Рытов С.М., Кляцкин Ю.А., Татарский В.И. Введение в статистическую радиофизику / Случайные поля, т.2 / М.: Наука, 1978. -- 464 с.

(если издание однотомное, то позиция между двумя слэш-черточками становится ненужной и, поэтому исчезает).

Обращаем внимание на то, что:

1) должны быть указаны полные названия журнальных статей, а также указаны не только начальные страницы этих статей, но обязательно также и конечные;

2) при указании журнальных статей после года издания стоит номер (обязательно арабскими цифрами) тома журнала (если он имеется) и через точку с запятой стоит дополнительная информация (номер внутри тома, в частности, номер выпуска и т.д.); при этом номер тома может иметь сложное начертание и не выражаться только одним числом;

3) название журнала нужно давать полностью без сокращений;

4) каждая из книг в списке цитируемой литературы обязательно должна быть дана с указанием полного числа страниц.

При несоблюдении описанных правил оформления литературных источников **работа будет возвращена автору(ам) на доработку.**